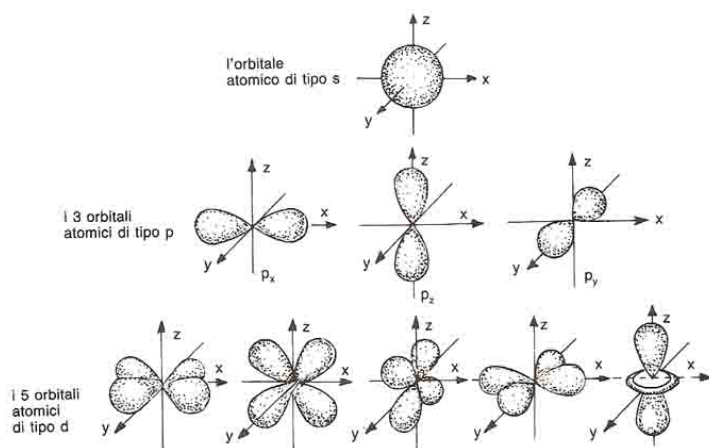


Appunti del corso di:
Meccanica Quantistica I

Gabriele Cembalo

A.A. 2023-2024



Forma di alcuni orbitali atomici.

Università degli Studi di Torino
Dipartimento di Fisica
Via Giuria, 1, Torino (TO)

Raccogli un fiore sulla Terra e
muoverai la stella più distante.

Paul Adrien Maurice Dirac

Prefazione

In questo documento intendo raccogliere i miei appunti basati sul materiale del corso “**Meccanica Quantistica I**”, tenuto dal Prof. L. Magnea e S. D. Badger e seguito presso *Università degli Studi di Torino* nell’anno accademico 2023-2024. Durante il corso sono stati consigliati diversi libri (elencati in Bibliografia), e cercherò di indicare i riferimenti corrispondenti all’inizio di ogni capitolo.

Questi appunti sono una versione riscritta delle note prese durante le lezioni, quindi la fonte principale è il materiale presentato dal professore. Declino ogni responsabilità e rimando alla mia pagina personale per saperne di più su questi appunti e sul fatto che non hanno natura né accademica né didattica.

Questi appunti vanno chiaramente intesi come note personali, riscritte in maniera ordinata a partire dalle lezioni. Eventuali sviste, errori o imprecisioni sono dovuti ai miei limiti. Inoltre, ho scritto questi appunti principalmente per “spiegare” a me stesso l’argomento, quindi alcune sezioni potrebbero risultare eccessivamente dettagliate o, al contrario, troppo superficiali a seconda del lettore. In ogni caso, spero possano comunque essere utili a qualcuno. Spero anche di essere riuscito a produrre un documento chiaro e ben strutturato.

Una raccolta dei miei appunti è disponibile sulla mia pagina GitHub personale: gCembalo.github.io.

Eventuali errori o refusi possono essere segnalati alla mia email personale: g70362643@gmail.com.

Last update: 08/06/2025

Indice

1	Crisi della Fisica classica	1
1.1	Lo spettro del corpo nero	3
1.1.1	Legge di Rayleigh-Jeans	6
1.1.2	Ipotesi di Planck	9
1.2	Evidenze sperimentali per i fotoni	11
1.2.1	L'effetto fotoelettrico	11
1.2.2	Effetto compton	11
1.3	Spettroscopia e modelli atomici	13
1.3.1	Modelli atomici	14
1.3.2	Modello di Bohr	15
1.4	Esperimento di Stern-Gerlach	18
1.5	Ipotesi di De Broglie	19
1.6	L'esperimento delle due fenditure	21
2	Equazione di Schrodinger	27
2.1	Interpretazione di Copenhagen e particella libera	28
2.1.1	Equazione di Schrodinger per la particella libera uni- dimensionale	29
2.1.2	Soluzione generale per la particella libera e pacchetti d'onda	33
2.1.3	Valori medi in termini di Ψ ed $\mathbf{A}$	34
2.2	L'equazione di Schrodinger	38
2.2.1	Derivazione dell'equazione di Schrodinger in modo al- ternativo	39
2.2.2	Interpretazione probabilistica	40
2.2.3	Conservazione della probabilità	41
2.2.4	Linearità e sue conseguenze	42
2.2.5	Valori medi e loro evoluzione temporale	44
2.3	Sistemi conservativi e separazioni delle variabili	48
2.3.1	Problemi unidimensionali stazionari	53
2.3.2	Buca di potenziale infinita	57

3	Una nuova notazione	63
3.1	Bra e Ket	64
3.2	Operatori Lineari	66
3.3	In dimensione infinita	69
3.4	Operatori con spettro continuo	72
3.4.1	Operatore impulso	73
3.4.2	Operatore posizione	73
3.4.3	Nel linguaggio dei Bra e Ket	74
3.5	Vantaggi dei Bra e Ket	76
4	Principi fondativi della Meccanica Quantistica	79
4.1	Spazio degli stati fisici	79
4.2	Corrispondenza tra osservabili fisiche e operatori su $\mathcal{H}$	80
4.3	Interpretazione statistica generalizzata	81
4.4	Processo di misura	82
4.5	Relazioni di indeterminazione	83
4.5.1	Relazione di indeterminazione Energia-Tempo	90
4.6	Insieme completo di osservabili compatibili	92
5	Oscillatore armonico quantistico	95
5.1	Procedimento analitico	97
5.2	Procedimento algebrico	107
5.2.1	Operatori di creazione e distruzione	111
6	Momento angolare in Meccanica Quantistica	115
6.1	Quantizzazione del momento angolare	117
6.2	Il momento angolare in coordinate sferiche	120
6.3	Le autofunzioni del momento angolare: le armoniche sferiche	122
6.3.1	Realizzazione dell'algebra del momento angolare per valori semi-interi	123
6.4	Le armoniche sferiche dell'algebra lineare	125
7	Composizione di momenti angolari	129
7.1	Sistema di due particelle	129
8	Equazione di Schrodinger radiale	139
8.1	Problema dei due corpi	139
8.2	Stati stazionari in potenziali centrali ed equazione radiale	141
8.3	Atomi idrogenoidi	146
8.3.1	Spettro degli atomi idrogenoidi	148
8.3.2	Funzioni d'onda degli atomi idrogenoidi	148

9	Trasformazioni, simmetrie e leggi di conservazione	151
9.1	Proprietà di trasformazione dei campi classici	151
9.1.1	Traslazioni in $d=1$	152
9.1.2	Rotazioni in 3 dimensioni	153
9.1.3	Rotazione di un campo vettoriale	155
9.2	Il caso quantistico: trasformazione delle funzioni d'onda . . .	157
9.3	Trasformazione degli operatori	159
9.4	Simmetrie e leggi di conservazione in Meccanica Quantistica	162
9.4.1	Esempi ed applicazioni	164
9.5	Traslazioni nel tempo	170
9.6	Descrizioni di Schrodinger, Heisenberg e di interazione	172
10	Matrice densità	175
10.1	Matrice densità ed entropia	181
10.1.1	Esercizio	183
11	Particelle identiche	185
11.1	Degenerazione di scambio	186
11.2	Bosoni e Fermioni	188
11.3	Esempi ed applicazioni	188
11.3.1	Bosoni e Fermioni non interagenti in una buca di po- tenziale	190
11.3.2	Forze di scambio	190
11.4	Trattazione esplicita con spin	192
11.5	Atomo di He e oltre	194
11.5.1	Alcune importanti conseguenze del principio di Pauli .	194
12	Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo	197
12.1	Teoria delle perturbazioni, caso non degenerare	197
12.2	Teoria delle perturbazioni caso degenerare	200
12.3	Carrellata sulle perturbazioni degli atomi idrogenoidi	204
13	Paradosso EPR, entanglement e disuguaglianza di Bell	207
14	Esercitazioni	209
14.1	Potenziali unidimensionali	209
14.1.1	Gradino di potenziale	209
14.1.2	Barriera di potenziale	209
14.1.3	Buca di potenziale e stati legati	209
14.1.4	Potenziale deltiforme	209
14.1.5	Potenziali periodici, Teorema di Bloch e pettine di Dirac	216
14.1.6	Buca di potenziale con fondo inclinato	222
14.2	Stati coerenti dell'oscillatore armonico	223
14.3	Potenziali tridimensionali	223

14.3.1	Buca cubica	224
14.3.2	Buca a parallelepipedo	225
14.3.3	Oscillatore cubico	225
14.3.4	Potenziale radiale	226
14.3.5	particella libera	226
14.4	Revision	227
Appendici		228
A	Proprietà dei polinomi di Hermite	231
A.1	Verifica ortogonalità	232
B	Proprietà armoniche sferiche	235
C	Formule utili	237
D	Esercizi consigliati	243
	Bibliografia	244

Capitolo 1

Crisi della Fisica classica

Einstein nel 1940 parlando del rapporto tra Fisica sperimentale e teorica disse:

La scienza rappresenta il tentativo di far corrispondere la varietà caotica della nostra esperienza sensibile a un sistema di pensiero logicamente uniforme. In questo sistema le singole esperienze vanno correlate alla struttura teorica in maniera tale che la coordinazione risultante sia unica e convincente.

...

Ciò che noi chiamiamo fisica comprende quel gruppo di scienze naturali che fondano i loro concetti nelle misure e i cui concetti e proposizioni si prestano a una formulazione matematica. Il suo dominio è di conseguenza definito come quella parte del complesso delle nostre conoscenze che è suscettibile di venire espressa in termini matematici.

Einstein prosegue identificando lo scopo della fisica teorica nella ricerca di basi comuni e nella unificazione delle leggi dei vari fenomeni naturali: si pensi alla conquista di Newton – le leggi della meccanica celeste sono le stesse leggi della meccanica dei gravi – oppure all’unificazione tra elettrologia e magnetismo, ora proseguita nell’unificazione con le interazioni deboli.

Si può allora dire che obiettivo della fisica teorica è quello di realizzare la massima economia di pensiero nel descrivere il più vasto campo disponibile di fenomeni naturali.

Nel 900’ ci sono state due rivoluzioni scientifiche nel primo quarto di secolo: la Relatività Ristretta e la Meccanica Quantistica (in seguito poi incorporate). Molte volte si tende a ridurre la Meccanica Quantistica a contesti in cui si parla di cose piccolissime, ma è riduttivo. La sua importanza

si vede soprattutto in:

- la stabilità della materia (se utilizzassi un modello classico per un e^- che orbita attorno al nucleo, questo decarrebbe quasi istantaneamente)
- l'indistinguibilità degli atomi (se utilizzassi un modello classico sarebbero tutti diversi)
- la tavola periodica (la chimica)
- la fisica dello stato solido (microchip, transistor, AI, telefoni)
- fisica atomica
- superconduttività e superfluidità

Cominciamo con una collocazione storica della nascita della Meccanica Quantistica. Entriamo nel 900' con due grandi teorie a nostra disposizione, la meccanica dei corpi materiali e l'elettromagnetismo classico. La fisica corpuscolare (quella di Newton, Lagrange, Hamilton ...) ha portato a grandi successi, quali, moti planetari, teoria cinetica dei gas, scoperta dell'elettrone (Thomson 1897) visto come particella newtoniana. L'elettromagnetismo classico non è da meno in quanto a successi visto che ha portato all'unificazione dell'ottica, la comprensione dell'elettricità e del magnetismo, ma soprattutto delle proprietà ondulatorie della luce. Opinione diffusa però alla fine del XIX secolo era che i principi fondamentali della fisica fossero già stati scoperti.

Dopotutto si aveva una teoria che descriveva bene la materia, composta da elementi microscopici dotati di massa e un'altra teoria che descriveva i mezzi continui (che non possiamo approssimare come un sistema composto da moltissime particelle, dato che esistono mezzi senza alcun substrato materiale). In ogni caso, secondo la fisica classica, sia le particelle che i campi ubbidiscono a leggi deterministiche del moto, siano esse in forma di equazioni differenziali ordinarie o alle derivate parziali, che coinvolgono variabili dinamiche misurabili, in linea di principio, con precisione grande a piacere.

Tutto ciò però comincia a venir messo in discussione a seguito di alcuni esperimenti che hanno evidenziato la non completezza della teoria classica, la cui contraddizione fondamentale risiede proprio nella separazione concettuale tra particelle, dotate di un numero finito di gradi di libertà, e campi, dotati di un numero infinito di gradi di libertà. Questa profonda disparità della descrizione classica rende problematica, se non del tutto impossibile, la stabilità della materia di fronte alla radiazione. Infatti l'esperimento che si studia per introdurre la Meccanica Quantistica è proprio lo studio dell'assorbimento della radiazione da parte di un corpo (nero).

1.1 Lo spettro del corpo nero

Come già detto uno dei primi esperimenti in cui si è evidenziata la crisi della fisica classica è stato lo studio della radiazione elettromagnetica assorbita e riemessa da un corpo.

Si parte dal fatto empirico: i corpi riscaldati emettono luce, con frequenze tipiche (emettono su tutto lo spettro, ma con dei picchi su determinati colori) crescenti con la temperatura.

Possiamo definire due parametri

- sia $\varepsilon(\nu, T)$ l'**emissività** e rappresenta l'intensità (quantità di energia) della radiazione emessa dal corpo alla frequenza ν e alla temperatura T per unità di superficie e tempo.

$$[\varepsilon(\nu, T) d\nu] = \frac{E}{L^2 t}$$

- sia $\alpha(\nu, T)$ la **frazione** dell'energia della radiazione incidente sul corpo che viene assorbita

$$[\alpha d\nu] = \text{numero puro}$$

Per capire meglio posso pensare ε circa come il vettore di Pointing e α come un oggetto che mi dice quanta energia assorbe il corpo al fronte dell'energia fornita. In più c'è un teorema di Kirchhoff (1859) il cui enunciato è che la quantità

$$I(\nu, T) = \frac{\varepsilon(\nu, T)}{\alpha(\nu, T)}$$

è universale (e quindi non dipende più dalla sostanza). Quindi I è di grande interesse poiché se nota io posso caratterizzare come un corpo scambia calore, ma ovviamente c'è un problema. Per conoscere esattamente I dovrei misurare sia ε che α , cose in genere difficili.

Ci viene incontro un particolare corpo che assorbe tutta la radiazione incidente (chiamato **corpo nero** in ricordo a quello imparato dallo studio della luce nella fisica classica) e che ha $\alpha(\nu, T) = 1$ e di conseguenza mi permette, misurando $\varepsilon(\nu, T)$, di caratterizzare bene il suo comportamento.

Realizzazione pratica: abbiamo un corpo con un piccolo foro, in modo da sfruttare le riflessioni della luce senza che fuoriesca.

- Tutta la radiazione in ingresso viene assorbita dopo molte riflessioni parziali
- La radiazione in uscita ha una distribuzione data da $I(\nu, T)$.

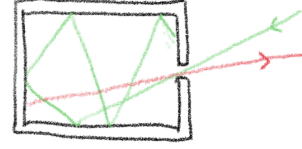


Figura 1.1: Corpo nero

Osservazioni

Nonostante tutto le pareti rimettono e assorbono, però in realtà tutto viene assorbito perché il raggio riflesso non esce quasi mai, mentre quello emesso (rosso) sì.

Il teorema di Kirchhoff ha basi termodinamiche, quindi universali. Se I dipendesse dal corpo in esame diventerebbe possibile trasferire energia tra due corpi neri alla stessa temperatura (si rompe il II principio della TD).

Com'è noto la teoria completa per lo studio del corpo nero è stata formulata da Planck, ma prima di arivarci è doveroso parlare delle teorie precedenti.

Di solito al posto di utilizzare $\varepsilon(\nu, T)$ ($= I(\nu, T)$ se $\alpha(\nu, T) = 1$) si considera la **densità di energia nella cavità** $\rho(\nu, T)$ di cui si trova facilmente il legame con $I(\nu, T)$.

Dimensionalmente

$$[I(\nu, T)] = \frac{E}{L^2 t} \quad , \quad [\rho(\nu, T)] = \frac{E}{L^3} \implies [I] = \frac{L}{t} [\rho] \\ \implies I(\nu, T) \propto c \rho(\nu, T)$$

abbiamo messo c visto che è l'unica velocità in gioco. Posso trovare il legame preciso per una radiazione isotropa chiedendomi quanta energia esce dalla piastrina per l'esistenza di ρ

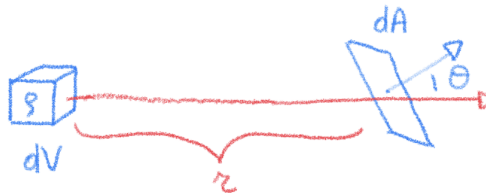


Figura 1.2: radiazione isotropa

All'energia che passa attraverso la superficie dA nel tempo t contribuiscono tutti i dV a distanza $r < ct$ (se $r > ct$ la luce non esce), allora se

considero la radiazione isotropa e in equilibrio e se faccio un integrale angolare normalizzato (divido il 4π) in avanti (quindi non integro su un angolo solido, ma su un emisfero)

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{dA}(t) &= \int_0^{ct} dr \int \frac{d\Omega}{4\pi} \rho(\nu, T) dA \cos \theta \\
 &= ct \rho(\nu, T) dA \int_0^1 d \cos \theta \cos \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{4\pi} \\
 &= \frac{c}{4} \rho(\nu, T) dA \cdot t \\
 &\equiv I(\nu, T) dA \cdot t \\
 &\implies \boxed{I(\nu, T) = \frac{c}{4} \rho(\nu, T)} \tag{1.1.1}
 \end{aligned}$$

Ora passiamo a parlare delle leggi (empiriche) già note prima della teoria di Planck.

Legge di Stefan-Boltzmann (1879) mette in gioco il potere emissivo del corpo nero

$$\xi(T) = \int_0^\infty I(\nu, T) d\nu = \sigma T^4 \quad , \quad \sigma \sim 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ }^\circ\text{K}^{-4} \tag{1.1.2}$$

Legge di Wienn (1893)

$$I(\nu, T) = c\nu^3 f\left(\frac{\nu}{T}\right) \xrightarrow{\text{fit dei dati a grande } \nu} c\nu^3 \exp\left\{-b\frac{\nu}{T}\right\} \tag{1.1.3}$$

Sulla legge di Wienn si possono fare alcune osservazioni importanti:

- Wienn $\implies$ Stefan-Boltzmann (se si integra I ponendo $\nu = xT$)
- Se $I(\nu, T)$ ha un massimo per $\nu = \nu_{\max}$, siccome il fattore ν^3 è sempre crescente, la coordinata è determinata da f e vedo che dipende da $\frac{\nu}{T}$ (vedendo $\frac{dI}{d\nu} = c\nu^2 e^{-b\nu/T} (3 - b\nu/T)$). Dunque

$$\frac{\nu_{\max}}{T} = \text{costante} (\sim 5.9 \cdot 10^{10} \text{ Hz}/^\circ\text{K})$$

e vedo che la frequenza di massima emissione è $\propto T$

- Nella forma con $\exp\left\{-b\frac{\nu}{T}\right\}$, la legge di Wienn implica l'esistenza di una nuova costante universale con le dimensioni $\frac{T}{\nu}$, che ipotizzando $T \rightarrow k_b T$ sono le dimensioni di un ENERGIA $\times$ TEMPO = AZIONE

1.1.1 Legge di Rayleigh-Jeans

Il pezzo subito precedente alla teoria completa di Planck è la **legge classica di Rayleigh-Jeans** (~ 1900), che porterà sulla strada giusta per una teoria soprattutto grazie ai suoi aspetti critici (catastrofe ultravioletta).

È una legge che prende in considerazione il modello classico per la densità di energia ρ della radiazione elettromagnetica di frequenza ν , nella cavità, che è un sistema di onde stazionarie (siamo in equilibrio termico).

Scriviamo in generale

$$\rho(\nu) d\nu = \bar{E}(\nu, T) \cdot n(\nu) d\nu \quad (1.1.4)$$

dove:

- $\bar{E}(\nu, T)$ è l'energia media di un'onda stazionaria di frequenza ν alla temperatura T
- $n(\nu) d\nu$ è il numero di onde stazionarie nella cavità per unità di volume, con frequenza tra ν e $\nu + d\nu$

Calcolando $\bar{E}(\nu, T)$ ed $n(\nu)d\nu$ riesco a trovare la legge. Il calcolo di $n(\nu)$ è puramente geometrico.

Posso fare prima un piccolo controllo dimensionale: se considero $N(\nu)d\nu$ il numero di onde stazionarie di frequenza ν nel volume $V = L^3$ (un cubo), è chiaramente un numero puro, ma proporzionale ad L^3 e l'unica possibilità che ho è

$$N(\nu) d\nu \propto L^3 \frac{\nu^2 d\nu}{c^3} \implies [N(\nu) d\nu] = L^3 \frac{T^{-3}}{L^3 T^{-3}} = 1$$

dunque vedo che dovrò ottenere un risultato del tipo

$$n(\nu) d\nu = \frac{1}{V} N(\nu) d\nu \propto \frac{\nu^2}{c^3} d\nu$$

Si può chiaramente fare un calcolo esatto banalmente imponendo le condizioni di stazionarietà nello spazio.

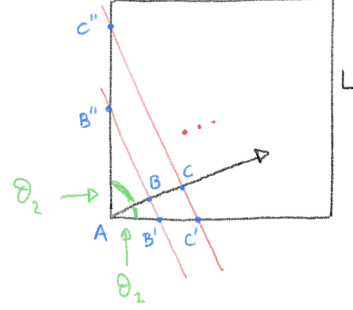
caso d=1 la condizione di stazionarietà su un tratto lungo L è

$$L = n_1 \frac{\lambda}{2} = n_1 \frac{c}{2\nu} \implies n_1(\nu) = \frac{2\nu}{c} L \longrightarrow \boxed{n(\nu) = \frac{2\nu}{c}}$$

caso d=2

So che se voglio un'onda stazionaria devo avere un numero intero di proiezioni di nodi su ogni lato (cioè multipli di $\lambda/2$). Vedo

$$\begin{aligned}\theta_1 + \theta_2 &= \frac{\pi}{2} \\ AB &= \frac{\lambda}{2} = AB' \cos \theta_1 = AB'' \cos \theta_2 \\ \Rightarrow AB' &= \frac{\lambda}{2 \cos \theta_1} \quad ; \quad AB'' = \frac{\lambda}{2 \cos \theta_2} \\ \cos^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_2 &= \cos^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_1 = 1\end{aligned}$$



e quindi imponendo le condizioni di stazionarietà per n_1 ed n_2 trovo

$$\begin{aligned}L &= n_1 AB' = n_2 AB'' \Rightarrow L = n_1 \frac{\lambda}{2 \cos \theta_1} = n_2 \frac{\lambda}{2 \cos \theta_2} \\ \Rightarrow n_1 &= \frac{2L}{\lambda} \cos \theta_1 \quad ; \quad n_2 = \frac{2L}{\lambda} \cos \theta_2 \\ \Rightarrow n_1^2 + n_2^2 &= \frac{4L^2}{\lambda^2} = \frac{4\nu^2 L^2}{c^2}\end{aligned}$$

che è la somma dei quadrati di ciò che ho trovato in una dimensione.

La somma dei coseni direttori fa sempre 1 e si trova nel caso di d generica

$$\sum_{i=1}^d n_i^2 = \frac{4\nu^2}{c^2} L^2$$

caso d=3

$$\boxed{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \frac{4\nu^2 L^2}{c^2}} \quad (1.1.5)$$

posso vedere che è un'equazione di una sfera nello spazio di n (n interi) e rappresenta il numero di onde stazionarie tra ν e $\nu + d\nu$ che è uguale al numero di punti a coordinate intere nell'ottante positivo di una corona sferica di raggio $r = \frac{2\nu L}{c}$ e di spessore $dr = \frac{2L}{c} d\nu$, il quale se $L \gg \lambda$ è proprio il volume dell'ottante (a parte effetti di bordo) e posso usare la sua espressione per trovare $n(\nu)d\nu$.

Integro solo un'ottante (fattore 1/8) per la superficie della sfera ($4\pi r^2$) per lo spessore. Trovo

$$\begin{aligned}N(\nu) d\nu &= \frac{1}{8} \cdot 4\pi \left(\frac{2\nu L}{c} \right)^2 \cdot \frac{2L}{c} d\nu \\ &= \frac{4\pi \nu^2}{c^3} L^3 d\nu\end{aligned}$$

considerando le due polarizzazioni possibili e indipendenti trovo:

$$\boxed{n(\nu) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu} \quad (1.1.6)$$

A questo punto manca solo da determinare l'espressione del valor medio dell'energia associata ad un'onda stazionaria di frequenza ν alla temperatura T . Classicamente questo valor medio è vincolato da due teoremi:

- Il Teorema di equipartizione in meccanica statistica che mi dice il valor medio dell'energia cinetica ($\langle K \rangle = \frac{1}{2}k_bT$)
- Il Teorema del viriale che eguaglia i valori medi di energia cinetica e potenziale ($\langle K \rangle = \langle V \rangle$)

(per vederli bene ci sono le dispense del corso di MAS Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.BILLò oppure di M3C Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.M3C). Nota che è lecito utilizzarli poiché l'energia di un campo EM è $E \propto \int dV (|\vec{E}|^2 + |\vec{B}|^2)$ e può essere riscritta come una somma ∞ di oscillatori armonici e quindi ogni "modo normale" (frequenza) porta un "energia cinetica" media pari a $\frac{1}{2}k_bT$ e altrettanta energia potenziale.

Il punto cruciale del modello è che classicamente l'energia è proporzionale al quadrato dell'ampiezza dell'onda e per qualunque ν sono possibili TUTTE le energie, quindi lo spettro dell'energia è $0 < E < \infty \quad \forall \nu$. Il valor medio lo calcolo usando la distribuzione canonica di Maxwell-Boltzmann meccanica statistica:

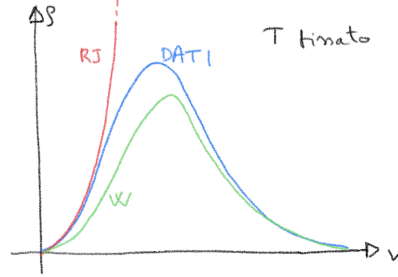
$$\begin{aligned} \bar{E}(T) &= \frac{\int_0^\infty dE E e^{-\beta E}}{\int_0^\infty dE e^{-\beta E}} \quad ; \quad \beta = \frac{1}{k_bT} \\ &= -\frac{d}{d\beta} \left[\ln \int_0^\infty dE e^{-\beta E} \right] \\ &= -\frac{d}{d\beta} \left[\ln \frac{1}{\beta} \right] \\ &= \frac{1}{\beta} \\ &= \boxed{k_bT} \end{aligned}$$

Nota che il valore trovato è indipendente da ν . Arriviamo così alla legge di Rayleigh-Jeans:

$$\boxed{\rho(\nu) d\nu = 8\pi k_bT \frac{\nu^2}{c^3} d\nu} \quad (1.1.7)$$

Il problema qui è che la densità di energia nella cavità diverge (così come il potere emissivo) poiché dipende da ν^2 e quando la integro tra $0 < \nu < \infty$ mi aspetto di essere investito da una fortissima emissione di raggi γ .

A questo punto (storicamente parlando) siamo arrivati a tre leggi classiche che descrivono lo stesso fenomeno, ma ciascuna con i propri problemi. Però abbiamo una descrizione buona a grandi ν con la legge di Wienn e a piccoli ν con Rayleigh-Jeans (quindi risulta chiaro che una corretta teoria starà in mezzo alle due).



1.1.2 Ipotesi di Planck

Finalmente giungiamo alla teoria di Planck che propose la sua espressione per $\rho(\nu, T)d\nu$, dapprima come semplice interpolazione tra legge di Rayleigh-Jeans e poi fornendone una nuova derivazione mimando quella passata e sulla base di un'ipotesi per l'epoca paradossale per due motivi. Il primo è che introduce una nuova costante fondamentale di natura chiamata **costante di Planck**

$$h \sim 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

e il secondo motivo è che fa dipendere il valor dell'energia dalla frequenza e di conseguenza rompe il teorema di equipartizione.

Ipotesi: Non tutte le energie sono possibili per le onde EM alla frequenza ν , ma solo multipli interi di un'energia fondamentale proporzionale a ν

$$E \longrightarrow E_n = nE_1 = nh\nu$$

Nota che anche con quest'ipotesi il conteggio delle onde stazionarie non cambia essendo solo un conto geometrico.

Quindi ora per l'energia media si ha

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\beta E_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}} \\ &= -\frac{d}{d\beta} \ln \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \right] = -\frac{d}{d\beta} \ln \left[\sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta h\nu} \right)^n \right] \\ &= -\frac{d}{d\beta} \ln \left[\frac{1}{1 - e^{-\beta h\nu}} \right] = \frac{d}{d\beta} \ln [1 - e^{-\beta h\nu}] \\ &= \frac{h\nu e^{-\beta h\nu}}{1 - e^{-\beta h\nu}} = \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \end{aligned}$$

Dunque la **formula di Planck** risulta

$$\boxed{\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/(k_b T)} - 1} d\nu} \quad (1.1.8)$$

Osservazioni

- Si può scrivere in termini di lunghezza d'onda ($\lambda = \frac{c}{\nu}$)

$$\rho(\lambda, T) d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/(k_b T \lambda)} - 1} d\lambda$$

- Riproduce la legge di Rayleigh-Jeans per piccoli ν (basta ricordare $e^{h\nu/(k_b T)} \sim 1 + \frac{h\nu}{k_b T}$)
- Riproduce la legge di Wienn per grandi ν .
- Si può ricavare la legge di Stefan-Boltzmann

$$\begin{aligned} \xi(T) &= \int_0^\infty d\nu I(\nu, T) = \frac{c}{4} \int_0^\infty d\nu \rho(\nu, T) \\ &= \frac{c}{4} \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty d\nu \frac{\nu^3}{e^{h\nu/(k_b T)} - 1} && \text{definisco } \left(A = \frac{2\pi h}{c^2}, \quad B = \frac{h}{k_b T} \right) \\ &= A \int_0^\infty d\nu \frac{\nu^3 e^{-B\nu}}{1 - e^{-B\nu}} && \text{riesco a vedere una serie geometrica} \\ &= A \int_0^\infty d\nu \nu^3 e^{-B\nu} \sum_{n=0}^\infty (e^{-B\nu})^n \\ &= A \int_0^\infty d\nu \nu^3 \sum_{n=0}^\infty (e^{-B\nu})^{n+1} \\ &= A \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty d\nu \nu^3 e^{-Bn\nu} && \text{faccio il cambio } x = nB\nu \\ &= A \frac{1}{B^4} \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} \int_0^\infty dx x^3 e^{-x} && \left(\Gamma(z) = \int_0^\infty dt e^{-t} t^{z-1}; \quad \zeta(s) = \sum_{s=1}^\infty \frac{1}{n^s} \right) \\ &= \frac{A\Gamma(4)}{B^4} \zeta(4) = \frac{6A}{B^4} \frac{\pi^4}{90} \\ &= \sigma T^4 \implies \boxed{\sigma = \frac{2}{15} \pi^5 \frac{k_b^4}{h^3 c^2}} \end{aligned}$$

- Interpretazione (tardiva): la radiazione EM si presenta sotto forma di QUANTI INDIVISIBILI DI ENERGIA (i fotoni). Solo dopo parecchi anni e altri esperimenti la realtà dei fotoni come "particelle", o meglio come quanti del campo EM, sarà accettata (o meglio compresa).

Ma a questo punto se l'energia è divisa in quanti sorge una domanda più che spontanea, ossia, perché non ce ne accorgiamo? La risposta è perché ce ne sono tanti. Prendendo una lampadina da 10W con $\lambda \sim 600 \text{ nm}$ (giallo-arancione) ho un energia per singolo fotone pari a:

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{6 \cdot 10^{-7} \text{ m}} \cdot 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \sim 3.3 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

e vengono irradiati $\sim 3 \cdot 10^{19}$ fotoni al secondo.

1.2 Evidenze sperimentali per i fotoni

1.2.1 L'effetto fotoelettrico

È stato un esperimento studiato da Einstein verso il 1905 e grazie al quale ha vinto il premio Nobel. I fatti sperimentali non sempre spiegati con la fisica classica erano:

- Una lastra metallica illuminata da radiazione EM monocromatica di frequenza ν può emettere elettroni
- Il numero di elettroni è proporzionale all'intensità della luce incidente
- Al di sotto di una frequenza critica ν_0 (che dipende dal metallo) non vengono emessi elettroni a prescindere dall'intensità della radiazione
- L'emissione è istantanea (nei limiti sperimentali)
- La massima energia cinetica raggiungibile dagli elettroni dipende dal metallo, ma non dall'intensità della radiazione

Alcuni fatti sono spiegabili anche classicamente, mentre altri sono assurdi per la fisica classica, ma ora so che la radiazione EM può cedere solo pacchetti di energia multipli di $h\nu$. Einstein dà la seguente spiegazione:

- Gli elettroni sono legati al metallo da un potenziale di ionizzazione $-V_0$
- La radiazione EM viene assorbita non in modo continuo, ma in pacchetti discreti di energia $E = h\nu$
- Si ha emissione solo se $h\nu - V_0 > 0$ e in tal caso $\nu_0 > \frac{V_0}{h}$. Dato che è effettivamente indipendente dall'intensità della radiazione.
- L'energia cinetica massima vale $K = h\nu - V_0$. È massima poiché l'elettrone può perderne in collisioni all'interno del metallo. In più si ipotizza e si verifica che l'evento di assorbimento di più di un fotone da parte di uno stesso elettrone sia raro.

1.2.2 Effetto Compton

Questo fenomeno è stato studiato dallo scienziato da cui prende il nome all'incirca nel 1920 (anche questo meritevole di Nobel). Il processo considerato è la collisione tra un fascio di raggi X ed un fascio di elettroni. Il dato sperimentale si spiega solo se ipotizzo i raggi X come fotoni e non usando le equazioni di Maxwell.



Figura 1.3: Schema scattering

Classicamente mi aspetto che gli elettroni assorbano e riemettono la stessa radiazione, ma sperimentalmente si osserva che la λ dipende con che inclinazione osservo la diffusione.

Trattiamo il problema come uno scattering relativistico, ossia usando il quadrimpulso

$$P^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right)$$

sapendo che si conserva e conoscendo le espressioni per le energie (anche da Planck). Per il fotone

$$E_\gamma = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = |\vec{p}_\gamma|c \implies |\vec{p}_\gamma| = \frac{E_\gamma}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

e per l'elettrone

$$E_e = \sqrt{|\vec{p}_e|^2 c^2 + m_e^2 c^4}$$

Imponendo la conservazione di P^μ totale ottengo:

$$\begin{cases} E_\gamma + E_e = E'_\gamma + E'_e \\ \vec{p}_\gamma + \vec{p}_e = \vec{p}'_\gamma + \vec{p}'_e \end{cases}$$

Mi metto nel sistema in cui l'elettrone è a riposo, ovvero, in cui

$$\vec{p}_e = 0 \implies E_e = m_e c^2$$

dalla seconda riga posso ricavare:

$$\begin{aligned} \vec{p}'_e = \vec{p}_\gamma - \vec{p}'_\gamma &\implies |\vec{p}'_e|^2 = |\vec{p}_\gamma - \vec{p}'_\gamma|^2 \\ &= |\vec{p}_\gamma|^2 + |\vec{p}'_\gamma|^2 - 2|\vec{p}_\gamma| \cdot |\vec{p}'_\gamma| \\ &= |\vec{p}_\gamma|^2 + |\vec{p}'_\gamma|^2 - 2|\vec{p}_\gamma||\vec{p}'_\gamma|\cos\theta \end{aligned}$$

e lavorando solo sulla prima vedo

$$E'_e = E_\gamma - E'_\gamma + m_e c^2$$

che posso equagliare alla definizione

$$\begin{aligned}
 E'_e &= \sqrt{m_e^2 c^4 + |\vec{p}'_e|^2 c^2} \\
 &= \sqrt{m_e^2 c^4 + c^2 |\vec{p}_\gamma - \vec{p}'_\gamma|^2} \\
 &= \sqrt{m_e^2 c^4 + E_\gamma^2 + (E'_\gamma)^2 - 2E_\gamma E'_\gamma \cos \theta} \\
 \Rightarrow (E_\gamma - E'_\gamma + m_e c^2)^2 &= m_e^2 c^4 + E_\gamma^2 + (E'_\gamma)^2 - 2E_\gamma E'_\gamma \cos \theta \\
 E_\gamma^2 + (E'_\gamma)^2 + m_e^2 c^4 - 2E_\gamma E'_\gamma + 2E_\gamma m_e c^2 - 2E'_\gamma m_e c^2 &= m_e^2 c^4 + \\
 &\quad + E_\gamma^2 + (E'_\gamma)^2 - 2E_\gamma E'_\gamma \cos \theta \\
 2m_e c^2 (E_\gamma - E'_\gamma) &= 2E_\gamma E'_\gamma (1 - \cos \theta) \\
 \Rightarrow m_e c^2 \left(\frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda'} \right) &= \frac{h^2 c^2}{\lambda \lambda'} (1 - \cos \theta) \\
 m_e c \left(\frac{\lambda' - \lambda}{\lambda \lambda'} \right) &= \frac{h}{\lambda \lambda'} (1 - \cos \theta) \\
 \Rightarrow \boxed{\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)} &\quad \text{Formula di Compton}
 \end{aligned}$$

Quindi si vede che i valori della λ dipendono da θ , in accordo con l'esperimento. Si può definire il parametro rilevante che è

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} \sim 2.4 \cdot 10^{-12} m \quad \text{Lunghezza d'onda di Compton}$$

L'effetto fotoelettrico e Compton sono stati fondamentali perché sono state le prime evidenze sperimentali che hanno verificato che la radiazione EM è quantizzata: costituita da pacchetti indivisibili di energia che in opportune circostanze si comportano come particelle relativistiche.

1.3 Spettroscopia e modelli atomici

Il fenomeno:

- Se si produce una scarica elettrica in un gas (ad esempio l'H della foto sotto) questo emette luce (visibile, UV ...), ma non con uno spettro continuo. Solo certe lunghezze d'onda sono presenti
- Se un gas viene illuminato con una radiazione a spettro continuo (monocromatica) il gas assorbe solo la luce di quelle stesse frequenze, che riemette (spettri di assorbimento)

Guardando la luce con un prisma si ottengono immagini del tipo:

Ricorda che la spettroscopia ha bisogno di strumenti tecnologici non banali e sviluppati solo nel tardo '800. Si è anche evidenziato che in realtà

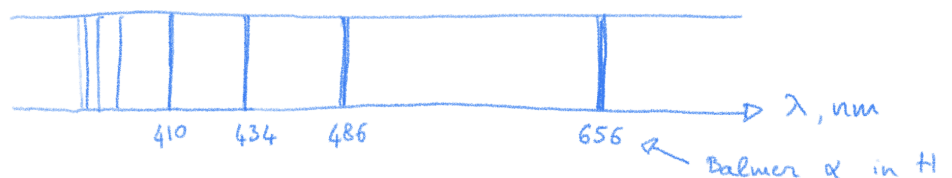


Figura 1.4: Spettro assorbimento H

le linee hanno una struttura interna (osservando con maggiore precisione): sono *multipletti* di linee (quella che si chiama struttura fine).

Il continuo sviluppo della spettroscopia ha portato a

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \mathcal{R} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)} \quad \text{Formula di Rydeberg (Balmer)} \quad (1.3.1)$$

che sostanzialmente mi dice dove stanno le righe dello spettro. I numeri n_1, n_2 sono numeri naturali e t.c. $n_1 > n_2$ e a seconda di cosa prendo ottengo serie diverse ($n_2 = 2$ ed $n_1 = 3, 4, \dots$ è la serie di Balmer).

1.3.1 Modelli atomici

Ovviamente come si sa dalle scuole superiori il modello atomico più coerente con la realtà, seppur semiclassico, è quello di Bohr, ma prima di arrivare a lui ci sono stati principalmente due modelli degni di nota.

Modello di J.J. Thomson (1907) La scoperta dell'elettrone mostra la presenza di cariche negative puntiformi negli atomi, che devono necessariamente essere bilanciate da cariche positive (la materia è neutra). Quindi il modello è il classico *modello a panettone*, ossia, gli elettroni si muovono in una distribuzione continua di carica positiva.

Modello di Rutherford (1911) È un'evoluzione del modello di Thomson, poichè a seguito degli esperimenti con Geiger e Marsden (diffusione di particelle α , ossia di particelle come nuclei di Elio con 2 neutroni e due protoni, su fogli sottili) Rutherford osserva che la carica positiva e la massa del nucleo sono necessariamente concentrati in un volume piccolissimo. Quello che facevano negli esperimenti era sparare queste particelle α contro fogli (d'oro) e queste ci passavano attraverso, ma poche volte *rimbalzavano*, il che voleva dire che la probabilità che particelle α (cariche $+$) incontrassero masse con stessa carica era molto bassa, il che contraddiceva il modello a panettone che ipotizzava una distribuzione di carica positiva in tutto l'atomo.

Il modello di Rutherford è il cosiddetto *modello planetario*, in cui gli elettroni

orbitano intorno al nucleo carico positivamente, più massiccio e localizzato. Cruciale l'osservazione che questo modello è classicamente instabile, visto che le cariche accelerate irradiano energia, quindi gli elettroni classici decadrebbero in tempi brevissimi sul nucleo ($10^{-11}s$). Altre due note sono che il modello non spiega le righe spettrali e l'identità di atomi dello stesso tipo.

Quindi arrivati a questo punto sembrerebbe che la fisica classica sia in grado di darci dei modelli atomici intuitivamente corretti, ma profondamente *sbagliati* secondo i dati sperimentali. Però attenzione, perché nonostante non siano i modelli *definitivi* non si vuole implicare che la teoria classica fallisca su tutti i problemi fisici alla scala atomica, ma che essa, nell'ottica di Einstein ricordata nell'introduzione, non sia di fatto in grado di fornire una descrizione unificata e consistente per tutti i fenomeni osservati.

Il problema del modello di Rutherford è che descrive una materia fortemente instabile. Però sembra essere consistente con la realtà, quindi, per trovare la teoria atomica *corretta* (anche se sarà ancora semi-classica visto che non si considera l'indistinguibilità degli atomi) basterebbe giustificare uno stato di equilibrio dinamico tra particelle cariche che fin'ora nessun modello basato sull'elettrodinamica riesce a riprodurre (cariche in interazione elettromagnetica in moto quasiperiodico attorno al loro centro di massa sono soggette a continue accelerazioni e quindi come sappiamo bene dalla teoria classica devono irraggiare energia sotto forma di onde EM).

1.3.2 Modello di Bohr

Nel 1913 Niels Bohr propone un modello atomico basato su quello di Rutherford, ma con la correzione che gli elettroni che orbitano attorno le cariche positive percorrono orbite stazionarie in cui non irradiano energia e in cui sono obbligati a stare. Si ha radiazione (o assorbimento) solo nei passaggi da un'orbita all'altra.

Bohr per descrivere questo modello detta due regole (le quali spiegano quali siano effettivamente queste orbite stazionarie e le righe spettrali):

- a) **Regola di selezione** (che utilizza la variabile Azione della meccanica classica)

$$\oint p_i dq_i = n_i h \quad (1.3.2)$$

- b) gli elettroni possono rimanere sulle orbite date da 1.3.2 senza irraggiare, oppure effettuare un salto ad un'altra traiettoria permessa emettendo (o assorbendo) un quanto di radiazione con frequenza

$$\nu_{21} = \frac{c}{\lambda_{21}} = \frac{E_{n_1} - E_{n_2}}{h} \quad (1.3.3)$$

Il modello di Bohr è giustificato solo a posteriori visto che fornisce un buon accordo sperimentale con lo spettro di emissione dell'idrogeno, ma è palesemente inadeguato dal punto di vista teorico (vedi motivazioni dettagliate sul Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. OD a pag. 77). Il modello di Bohr è stato utilizzato per un primo studio delle diverse serie che si possono osservare nello spettro di emissione degli elementi chimici. Bohr fornisce la regola per calcolare la ν che si osserva per una particolare transizione energetica dal livello n_1 al livello n_2 , e possiamo appunto definire particolari serie (Liemann, Balmer, Pashen ...) in cui raggruppiamo transizioni caratterizzate da punti di partenza (livelli energetici) diversi, ma stesso livello di arrivo (Liemann va da $\# \rightarrow 1$, Balmer da $\# \rightarrow 2$ e Pashen $\# \rightarrow 3$); a "Struttura della materia" vedrai tutto meglio. La teoria di Bohr è nota come *vecchia teoria dei quanti* ed è chiaramente superata dalla Meccanica Quantistica, di cui costituisce un'approssimazione in regime quasi-classico (il termine *quasi* è d'obbligo perché la teoria classica non riesce a rendere conto dell'esistenza di stati stazionari per sistemi di particelle classiche).

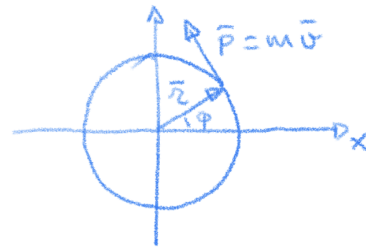
Possiamo effettivamente vedere che cosa comportano le regole di Bohr analizzando il caso più semplice che è lo spettro degli atomi idrogenoidi.

Consideriamo orbite circolari in un potenziale

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad Z = \text{numero atomico}$$

Sappiamo che per orbite circolari $|\vec{v}| = \text{cost}$ e in più prendiamo la coordinata lagrangiana

$$q = \varphi \longrightarrow dq = r d\varphi$$



così utilizzando la regola di selezione troviamo

$$\oint p dq = \oint p r d\varphi = 2\pi p r \underset{p=mv}{=} 2\pi m v r \underset{L=mv r}{=} 2\pi L_z \equiv n h \implies L_z = n \frac{h}{2\pi}$$

che se definisco la costante di Planck ridotta $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ottengo il risultato *strano*

$$\boxed{L_z = n\hbar}$$

ovvero, vedo che il momento angolare è *quantizzato*. La cosa curiosa è che non si sa bene come interpretare il risultato visto che L è un vettore nello spazio e sto dicendo che $\forall v$ una sua componente non può variare con continuità, ma avere solo certi valori multipli di una certa costante. Per di più che cosa stanno facendo le altre due componenti?

Ma accantoniamo il problema e facciamo finta di nulla (c'è un capitolo più avanti dedicato solo al momento angolare) e cerchiamo di capire quali sono

le energie (classiche) che avrebbero queste orbite

$$E \longrightarrow E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 - \frac{Ze^2}{r_n} \quad (1.3.4)$$

ma essendo nel caso di orbita circolare so che l'accelerazione è solo centripeta, quindi

$$\vec{F} = m\vec{a} \xRightarrow[\substack{F = -\frac{dV}{dr}, \\ \vec{a} = -\frac{v^2}{r}}]{\frac{Ze^2}{r_n^2} = m\frac{v_n^2}{r_n}} mv_n^2 = \frac{Ze^2}{r_n}$$

uguaglianza che messa dentro la relazione 1.3.4 mi dice

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r_n} \quad (1.3.5)$$

a questo punto possiamo usare la quantizzazione del momento angolare per trovare

$$mv_nr_n = n\hbar \longrightarrow v_n = \frac{n\hbar}{mr_n}$$

e in questo modo riesco a trovare un'espressione per r_n

$$mv_n^2 = \frac{Ze^2}{r_n} \xRightarrow{} m\frac{n^2\hbar^2}{m^2r_n^2} = \frac{Ze^2}{r_n} \xRightarrow{} r_n = \frac{\hbar^2}{mZe^2}n^2$$

che inserendola dentro l'espressione 1.3.5 dell'energia troviamo:

$$\boxed{E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}} \quad (1.3.6)$$

che è un'espressione che nonostante sia stata ricavata da un modello semi-classico si rivelerà corretta anche facendo i conti in Meccanica Quantistica (vedi capitolo atomo di idrogeno), ma soprattutto ci permette, usando la seconda regola del modello di Bohr, di fare una predizione per la costante di Rydberg. Per una transizione dal livello n_1 a n_2

$$\nu_{21} = \frac{c}{\lambda_{21}} = \frac{E_{n_1} - E_{n_2}}{h} \xRightarrow[\text{usa 1.3.6}]{\text{}} \frac{1}{\lambda_{21}} = \frac{1}{hc} \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

che ponendo $Z = 1$ è la formula di Rydberg con

$$\boxed{R_H = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3c}}$$

Chiudiamo questa piccola sezione con un breve dizionario.

- **Raggio di Bohr**

$$r_1 \equiv a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \sim 0.053 \text{ nm}$$

- **Costante di struttura fine** (governa la distanza delle sottolinee spettrali e mi dice quanto sono forti le interazioni tra particelle cariche)

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \sim \frac{1}{137}$$

- **Equivalente energetico della massa dell'elettrone**

$$m_e c^2 \sim 0.511 \text{ MeV} = 0.8 \cdot 10^{-13} \text{ J}$$

e in termini di queste quantità posso scrivere

$$r_n = a_0 n^2 \quad ; \quad E_n = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} \quad ; \quad R_H = \frac{\alpha}{4\pi a_0}$$

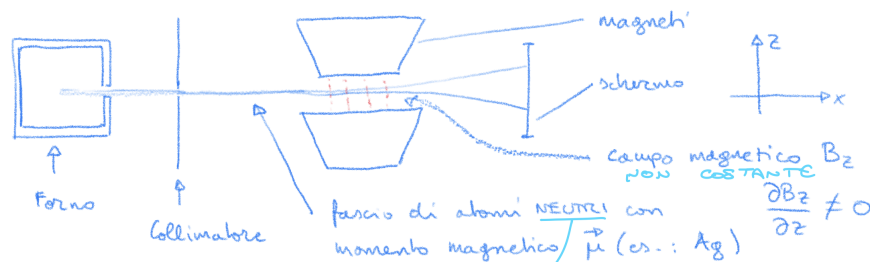
ed è utile conoscere il valore di **minima energia** di un elettrone

$$E_1 = -\frac{e^2}{2a_0} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{\alpha^2}{2} mc^2 \sim -13.6 \text{ eV}$$

1.4 Esperimento di Stern-Gerlach

Quello che sto per dire è un qualcosa di fatto molto male e approssimativo, ne riparlerò nel capitolo relativo alla composizione dei momenti angolari (oppure vedi l'esempio 4.4 del Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.GR).

È stato un'esperimento svolto circa nel 1922 ed è stata una dimostrazione della predizione che il momento angolare fosse quantizzato fatta dal modello atomico di Bohr. L'apparato sperimentale era il seguente



Quello che in sostanza succedeva è che partivano da una qualche sorgente di atomi neutri (servono neutri perché quello che voglio misurare è μ , momento magnetico, e se avessi delle particelle cariche so dall'EM classico che dovrei considerare anche un campo elettrico) che tramite un collimatore venivano fatti passare in due magneti. Questi magneti erano stati preparati in modo da avere un campo magnetico in una sola direzione (cosa che in realtà

sarebbe impossibile per via di $\nabla \cdot \vec{B} = 0$, ma per semplicità prendiamola per buona) e non costante lungo la stessa. Alla fine di tutto c'è uno schermo che raccoglie tutto.

So che il momento magnetico interagisce con B esterno con un'energia potenziale

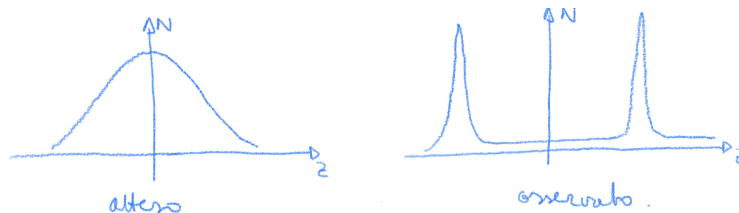
$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \implies F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

e in un modello semi-classico so (elettrone orbitante)

$$\vec{\mu} \propto \vec{L}$$

dunque, mi aspetto che la direzione di $\vec{\mu}$ sia casuale non avendo fatto nulla per selezionarla e che abbia una distribuzione (continua) sullo schermo.

Chiaramente non succede questo, ma viene verificata la predizione della quantizzazione di L di Bohr, poiché si osservano un numero finito di picchi isolati, stretti ed equidistanti



Ovviamente per l'invarianza per rotazioni è preservata e se ruoto il magnete ottengo lo stesso risultato anche per L_x ed L_y . La cosa sorprendente di questo esperimento è che se seleziono una direzione di L_z (ossia prendo un singolo picco e quindi conosco quanto vale quella componente) e metto altri due magneti in sequenza che misurano ad esempio L_x io mi aspetto che dopo lo schermo dove vedo i due picchi per la componente x se ne selezioni uno allora ho una completa conoscenza di due componenti di L (x e z), ma invece quello che succede è che se rifaccio la misura con B_z riottengo i due picchi distinti. Quindi quello che è successo è che nonostante io conoscessi il valore di L_z , nel momento in cui faccio una misura di L_x perdo tutto quello che sapevo della componente z . Questo succede perché pur non sapendolo Stern-Gerlach stavano misurando le componenti di spin delle particelle e come si scoprirà in futuro le componenti di momento angolare non sono osservabili compatibili, ossia, una misura di una influenza una misura sull'altra.

1.5 Ipotesi di De Broglie

Per *spiegare* la regola di quantizzazione che esce dal modello atomico di Bohr, nel 1924 Louis De Broglie propone un'ipotesi rivoluzionaria:

così come la luce ha una natura duale (onda e particella), anche le particelle materiali, come l'elettrone, dovrebbero mostrare una natura ondulatoria oltre quella corpuscolare.

Sappiamo già (usando le equazioni per la luce) come collegare grandezze *corpuscolari* (intendo l'energia o l'impulso posseduto da un corpo) con grandezze *ondulatorie*.

$$\boxed{E = h\nu = \frac{h}{T} = \hbar\omega} \quad ; \quad \omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu \text{ frequenza angolare} \quad (1.5.1)$$

$$\Rightarrow E = pc = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.5.2)$$

$$\Rightarrow \boxed{p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k} \quad ; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ numero d'onda} \quad (1.5.3)$$

Queste due equazioni, oltre ad essere importanti, implicano che se a delle particelle materiali di definito impulso, che suppongo percorrano orbite circolari, ci associo delle lunghezze d'onda, allora riprendendo la quantizzazione del momento angolare di Bohr

$$L_z = 2\pi mvr \underset{\substack{\text{lunghezza orbita} \\ \mathcal{L}=2\pi r}}{=} p\mathcal{L} = nh \underset{\text{usa 1.5.3}}{\Rightarrow} \frac{h}{\lambda}\mathcal{L} = nh \Rightarrow \boxed{\mathcal{L} = n\lambda}$$

vedo bene che le orbite degli elettroni individuate da Bohr corrispondono ad ONDE STAZIONARIE (che so già essere quantizzate) per le onde associate agli elettroni. Quindi questo suggerisce che le altre orbite siano instabili per *auto-interferenza* distruttiva.

immagine schematica:



Osservazioni

- Le tipiche λ individuate dall'ipotesi di De Broglie sono *sub-microscopiche*. Infatti facendo i conti guardando gli ordini di grandezza:

accelero un elettrone con $\Delta V = 100 \text{ V}$

$$\Rightarrow E \sim 10^{-17} \text{ J} = \frac{1}{2}mv^2 \quad m_e \sim 10^{-30} \text{ Kg}$$

$$\Rightarrow v \sim [10^{-17} \cdot 10^{30}]^{1/2} \text{ m/s} \sim 10^6 \text{ m/s}$$

$$\Rightarrow mv \sim 10^{-24} \text{ Kg} \frac{\text{m}}{\text{s}} \sim \frac{h}{\lambda} \sim \frac{10^{-34}}{\lambda} \Rightarrow \lambda \sim 10^{-10} \text{ m}$$

- Dal punto di vista teorico però a questo punto si deve trovare un'equazione che descriva la dualità e occorre anche dare un'interpretazione della natura dell'onda
- Dal punto di vista sperimentale invece dev'essere possibile individuare entrambi i comportamenti, ossia, devo riuscire a vedere sia fenomeni come interferenza, diffrazione... ma anche fenomeni tipici dei corpi materiali.

1.6 L'esperimento delle due fenditure

Chiudiamo il primo capitolo parlando dell'esperimento più famoso e cruciale per la nascita della Meccanica Quantistica. È anche l'esperimento in cui si incontra la difficoltà concettuale più dura da accettare in Meccanica Quantistica.

Il miglior testo per capire questo esperimento è il Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.FN, ma cercherò di farne un *riassunto*, completo e chiaro già io.

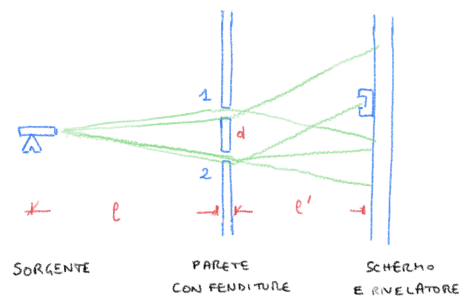


Figura 1.5: Apparato sperimentale

L'apparato sperimentale e lo svolgimento dell'esperimento sono piuttosto semplici. Abbiamo una sorgente di oggetti, posizionata ad una certa distanza da una parete su cui sono praticate due fenditure, poste ad una certa distanza, e in successione mettiamo più in là uno schermo dove raccogliamo le informazioni che ci servono grazie ad un rivelatore libero di muoversi. Le condizioni in cui ci mettiamo sono che $l, l' \gg d$.

Abbiamo già notato che le ipotesi di De Broglie ipotizzano la duplice natura dei corpi e di conseguenza noi dovremmo essere in grado di misurare entrambi i suoi comportamenti quando facciamo un'esperimento, quindi, ci conviene prima di sparare elettroni attraverso le fenditure vedere quali sono i due comportamenti che ci dobbiamo aspettare usando particelle classiche e onde.

Particelle newtoniane Per svolgere la prima parte dell'esperimento utilizziamo dei proiettili. Come sorgente possiamo prendere un cannone non troppo preciso sulla scala angolare (altrimenti spariamo proiettili solo in una direzione e non otteniamo nulla). Cominciamo a sparare proiettili sulle fenditure e misuriamo $P(z)$ che è la probabilità per l'arrivo del proiettile in z e visto che qui parliamo di probabilità a causa di imprecisioni strumentali abbiamo l'espressione

$$P(z) dz = \frac{\text{numero proiettili raccolti tra } z \text{ e } z + dz}{\text{numero totale di proiettili}}$$

Misuriamo le probabilità $P_1(z)$ e $P_2(z)$ che sono quelle quando è aperta solo una delle due fenditure, ma prendiamo anche la probabilità totale $P_{tot}(z)$.

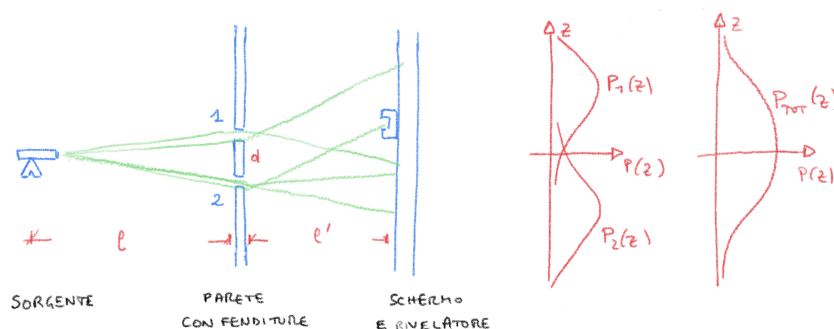


Figura 1.6: Caso classico

In questo caso quello che osserviamo è quasi banale. Vediamo che l'arrivo dei proiettili è un fenomeno discreto, ossia arrivano solo proiettili interi e localizzati (vuol dire che se penso ad un rivelatore che emette un suono ogni volta che misura qualcosa, allora in questo esperimento sento sempre lo stesso suono con la stessa intensità e potrei anche pensare l'esperimento

come un deposito di energia sullo schermo), ma soprattutto possiamo vedere che quando entrambe le fenditure sono aperte i proiettili arrivano in un certo z o passando per la fenditura 1, oppure per la fenditura 2, quindi vale

$$P_{tot}(z) = P_1(z) + P_2(z) \quad (1.6.1)$$

Onde classiche Per la seconda parte dell'esperimento si utilizzano delle onde in senso classico e ora l'energia è trasportata da esse attraverso un mezzo continuo e so già che dal rilevatore non mi aspetterò nulla di discreto. Lo svolgimento e l'apparato è uguale al caso di particelle classiche, ovvero

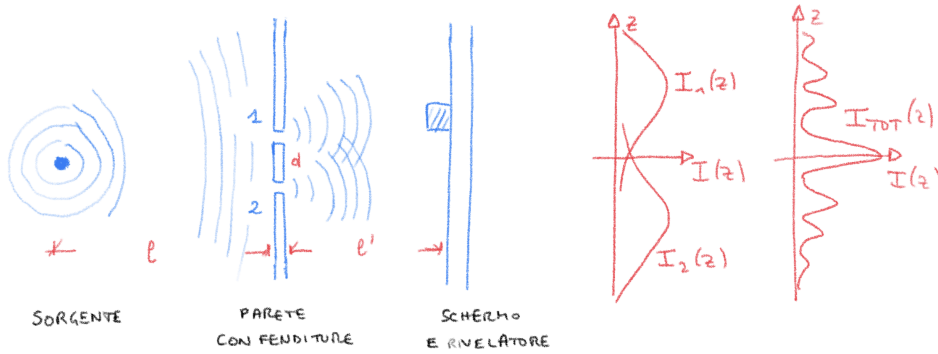


Figura 1.7: Caso onde

In questa parte oltre alla condizione $l, l' \gg d$ mi metto con $l \gg \lambda$ (dove prendo λ circa le dimensioni delle fenditure) in modo che partendo dalla sorgente con onde monocromatiche arrivo alle fenditure che ho circa onde piane. Dal corso di Fisica III so che ho interferenza e se considero $A(z)$ l'ampiezza dell'onda in z allora l'intensità è $I(z) = |A(z)|^2$ e di conseguenza la quantità di energia depositata tra z e $z+dz$ è $E \propto I(z) dz = |A(z)|^2 dz$.

Posso ricordarmi la geometria delle frange di interferenza:

(se vuoi mettere dei numeri: con $d \sim 5 \cdot 10^{-4} m$, $\lambda \sim 600 nm$, $l' \sim 1 m$ hai $\Delta z \sim 10^{-3} m = 1 mm$).

Sperimentalmente misuriamo di nuovo le $I_i(z)$ quando solo una fenditura è aperta e la $I_{tot}(z)$ che è quella totale. Osserviamo che l'energia depositata in questo caso è una variabile continua (tutte le energie sono possibili), ma soprattutto vediamo immediatamente che l'apertura della seconda fenditura per effetto dell'interferenza diminuisce $I_{tot}(z)$ per alcuni valori di z e in questo caso, visto che l'intensità è il modulo quadro dell'ampiezza dell'onda, non vale che

$$I_{tot}(z) \neq I_1(z) + I_2(z)$$

La differenza di cammino ottico tra r_1 ed r_2 è

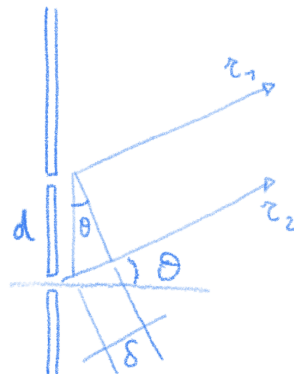
$$\delta = d \sin \theta \sim d \cdot \theta$$

I massimi di interferenza costruttiva sono a

$$\theta_n \text{ t.c. } d \cdot \theta_n = n\lambda$$

la spaziatura tra le frange è

$$\Delta\theta \sim \frac{\lambda}{d} \Rightarrow \Delta z \sim l' \frac{\lambda}{d}$$



ovvero, non è vero che l'onda passa o dalla fenditura 1 o dalla fenditura 2. È vero invece

$$I_{tot}(z) = |A_1(z) + A_2(z)|^2 = I_1(z) + I_2(z) + 2 \operatorname{Re}\{A_1^*(z)A_2(z)\} \quad (1.6.2)$$

e quindi non so dove passa in realtà l'onda.

Particelle quantistiche In questo caso utilizziamo degli elettroni.¹

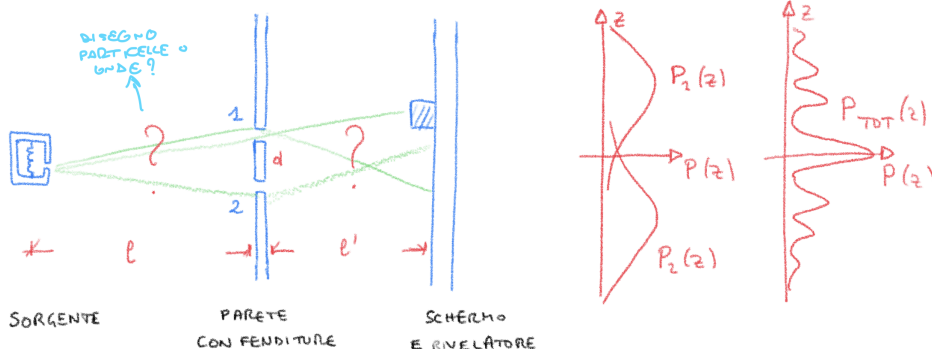


Figura 1.8: Caso elettroni

Usando e^- cominciano veramente i problemi, perché sperimentalmente osserviamo cose strane:

¹ci sarebbe un piccolo appunto da fare, perché in realtà un esperimento del genere è complicato da fare poiché con $\lambda \sim 10^{-10} \text{ m}$ il reticolo di diffrazione deve avere dimensioni atomiche (reticolo cristallino), ma quello che vediamo noi è più un esperimento concettuale verificato poi da esperimenti veramente svolti. Vedi il libro di Forte-Rottoli per un discorso dettagliato su come fare effettivamente l'esperimento.

- Gli elettroni arrivano individualmente (sono interi e localizzati) dal momento che come nel caso classico sentiamo un segnale sonoro sempre uguale e di stessa intensità. Quindi potremmo pensarci di utilizzare una distribuzione di probabilità del tipo 1.6.1
- Però se guardiamo lo schermo quando entrambe le fenditure sono aperte osserviamo interferenza, quindi non vale la relazione classica 1.6.1, ma ponendo

$$P_i(z) = |\varphi_i(z)|^2$$

abbiamo una distribuzione di probabilità del tipo ondulatorio 1.6.2, ossia

$$P_{tot}(z) = |\varphi_1(z) + \varphi_2(z)|^2 = P_1(z) + P_2(z) + 2 \operatorname{Re}\{\varphi_1^*(z)\varphi_2(z)\}$$

Quindi gli elettroni si comportano come particelle classiche perché le misuro individualmente, ma la loro distribuzione di probabilità si comporta come la distribuzione di intensità di un'onda e quindi non so da quale fenditura sia passato realmente.

Per spiegare questo comportamento *strano* si sono provate a dare spiegazioni che però si sono rivelate tutte sbagliate.

- Gli e^- sono delocalizzati (ossia, la loro massa non è concentrata in un volume infinitesimo) $\implies$ falsa perché misuro sempre elettroni interi
- Il moto degli elettroni è più complicato di quello che si crede (non va in linea retta partendo dalla sorgente) $\implies$ falsa, non c'è nessuna spiegazione dinamica, nessun campo esterno e il risultato sperimentale è semplicissimo.
- Si tratta di un effetto collettivo perché in realtà gli elettroni interagiscono tra loro durante il cammino e si ottiene questo risultato $\implies$ falsa perché posso diminuire l'intensità della sorgente fino a sparare un elettrone per volta e ottengo lo stesso risultato
- Per comprendere meglio basterebbe osservare da quale fenditura passano gli elettroni, che sembra un'obiezione sensata, quasi banale, ma la cui risposta risulta profonda e sorprendente.
Per vedere dove passano devo in qualche modo illuminare il loro cammino, quindi, metto una lampadina in ciascuna fenditura (con luce diversa) e sapendo dalla teoria classica che gli elettroni assorbono e riemettono radiazione, in base alla radiazione che da fuori capisco dove è passato l'elettrone.

Il problema è che conosco le relazioni di energia ed impulso date da De Broglie, ossia 1.5.1 e 1.5.3 e quindi capisco che se illumino un elettrone con una luce con alta ν (piccola λ) gli sto buttando addosso tanta energia e disturbo il suo cammino, mentre invece se utilizzo una lampadina con un ν piccolo (λ grande) disturbo poco l'elettrone.



Quindi è logico che in base alla luce che utilizzo osserverò risultati diversi.

Se uso una ν grande allora identifico esattamente il percorso di tutti gli elettroni, quindi i fotoni che ho hanno una λ abbastanza piccola da individuare l' e^- ma anche un'energia abbastanza grande da disturbarlo, infatti, complessivamente la figura di interferenza scompare (e posso usare la relazione 1.6.1). Quindi già da questa cosa capisco un particolare aspetto della Meccanica Quantistica, ossia, che il processo di misura influenza il risultato.

Se invece cerco di diminuire l'intensità, mantenendo fissa λ trovo che alcuni elettroni non incontrano nessun fotone e la distribuzione di probabilità totale è un'interpolazione tra quella classica (data dagli elettroni che vengono individuati con la lampadina) e quella ondulatoria (data dagli elettroni che non vengono disturbati dalla lampadina).

Se ancora provo a diminuire la ν e quindi aumento la λ , quando $d \sim \lambda$ non è più possibile individuare da quale delle due fenditure è passato l'elettrone e di nuovo al diminuire di ν la $P(z)$ interpola tra quella classica e quella di interferenza.

Quindi riassumendo possiamo dire che: una misura sperimentale che individui la traiettoria (la fenditura) distrugge l'interferenza (potrebbe essere già visto come una relazione di indeterminazione) e in generale non esiste un apparato sperimentale in grado di determinare la fenditura senza distruggere l'interferenza. Tutto questo in realtà si applica anche ai proiettili classici, ma per via della piccolezza di $\hbar$ non osservo l'interferenza:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad m = 10^{-3} \text{ Kg} \quad , \quad v \sim 1 \text{ m/s} \implies p \sim 10^{-3} \text{ Kg} \cdot \text{m/s}$$

$$\lambda \sim 10^{-34} \text{ Js} \cdot 10^3 \frac{\text{s}}{\text{Kg} \cdot \text{m}} \sim 10^{-31} \text{ m}$$

quindi le oscillazioni di $P_{tot}(z)$ sono del tutto invisibili e quello che vediamo è la media su un numero enorme di cicli.

Capitolo 2

Equazione di Schrodinger

In questo capitolo, avendo imparato che la materia ha una duplice natura, possiamo cominciare a cercare la funzione che associamo al moto di qualsiasi particella e possiamo anche cercare quale sarà l'equazione differenziale fondamentale della Meccanica Quantistica, ma nota bene che le equazioni fondamentali della fisica non vengono *derivate*, bensì, vengono postulate sulla base dell'evidenza empirica, dell'eleganza, della generalità e in seguito verificate sperimentalmente.

Se facessimo meccanica classica e avessimo per esempio un corpo di massa m , che si muove sull'asse x ed è sottoposto ad una forza $F(x, t)$, allora il nostro scopo sarebbe quello di determinare la sua *equazione del moto* $x(t)$ che mi descrive la posizione della particella in ogni istante di tempo e con cui posso calcolare tutte le osservabili del caso ($v = \frac{dx}{dt}$, poi $p = mv$ oppure $K = \frac{1}{2}mv^2$). La strategia che seguivamo era quella di applicare la seconda legge di Newton $F = ma$ che ipotizzando di avere un sistema conservativo¹ possiamo scrivere $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$ e quindi ottenere un'equazione differenziale

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

che risolvendo, grazie ad opportune condizioni iniziali (posizione e velocità iniziale tipicamente), ci restituisce $x(t)$.

In Meccanica Quantistica funziona *circa* uguale. Nel senso che dobbiamo trovare un'equazione differenziale, l'*equazione di Schrodinger* che gioca un ruolo analogo alla seconda legge di Newton, che risolvendo (sfruttando la condizione iniziale $\Psi(x, 0)$) restituisce una funzione per ogni tempo futuro t , che chiameremo *funzione d'onda* $\Psi(x, t)$ e che descrive la nostra particella di interesse.

¹Che fortunatamente sono gli unici sistemi che si verificano a livello microscopico, vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.GR.

2.1 Interpretazione di Copenhagen ed equazione di Schrodinger per la particella libera

Dal capitolo precedente abbiamo imparato delle cose fondamentali:

- Dall'esperimento delle 2 fenditure abbiamo visto la duplice natura della materia e quindi che ad ogni particella è associata un'onda
- Dalle relazioni di De Broglie 1.5.1, 1.5.3 abbiamo imparato che ad oggetti di definito impulso ed energia sono associate onde di definite ν e λ

Quello che dobbiamo fare ora però è risolvere alcuni problemi che aprono queste evidenze. Che interpretazione diamo alla funzione che associamo al moto delle particelle? Se contiene la duplice natura del corpo, che informazioni fisiche possiamo tirarne fuori? Onde di definite ν e λ sono onde che si estendono su tutto lo spazio e hanno durata infinita (non ho una soluzione in un unico punto dello spazio), so già dall'EM classico che non sono fisicamente realizzabili, quindi, dev'essere possibile, proprio come facevo nella fisica classica, interferire onde con diverse ν e λ (quindi p ed E) così da costruire pacchetti d'onda e localizzare le soluzioni (entro qualche limite). Devo cercare un'equazione lineare, così che valga il principio di sovrapposizione.

La risposta alle prime due domande è l'**interpretazione di Copenhagen**² la quale associa alla particella materiale di massa m una funzione

$$\Psi(\vec{r}, t) \quad \text{Funzione d'onda}$$

che interpreta come **ampiezza di probabilità di posizione**. Interessa anche il suo modulo quadro

$$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad \text{Densità di probabilità di posizione}$$

e in questo modo si ha l'interpretazione della quantità

$$\rho(\vec{r}, t) d^3r = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$$

che è la **probabilità di trovare la particella nel volume d^3r all'istante t** , che ovviamente si porta dietro la condizione

$$\int_V d^3r \rho(\vec{r}, t) = 1 \quad \text{Normalizzazione}$$

Quindi ora la nozione di probabilità è intrinseca nella teoria e non più associata a limitazioni dell'apparato sperimentale.

Nota tutte le cose scritte sopra sono scritte nello spazio tridimensionale, ma ovviamente sono identiche se siamo in uno spazio unidimensionale.

²Se vuoi vedere delle alternative (che si sono rivelate errate) puoi leggere il primo capitolo di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.GR.

2.1.1 Equazione di Schrodinger per la particella libera unidimensionale

Concentriamoci per prima cosa sul problema più semplice possibile, la particella libera (non relativistica) in una dimensione.

Abbiamo delle informazioni sia dalla teoria classica che da De Broglie:

- Classicamente

$$p = mv \quad ; \quad E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

- De Broglie

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad ; \quad E = h\nu = \hbar\omega$$

Conoscendo ora l'interpretazione di Copenhagen sappiamo che dobbiamo cercare un'equazione differenziale soddisfatta da $\Psi(x, t)$, ma per via di tutti i discorsi fatti prima chiediamo che sia un'equazione lineare in Ψ (così che valga il principio di sovrapposizione), con coefficienti indipendenti dai parametri del moto p ed E (così che onde con caratteristiche diverse sono soluzione della stessa equazione) e che riproduca le relazioni di De Broglie sulle soluzioni.

Possibili candidati (con p ed E fissati) sono:

$$\Psi_1(x, t) = A_1 \cos(kx - \omega t) \quad ; \quad \Psi_2(x, t) = A_2 \sin(kx - \omega t)$$

$$\Psi_{\pm}(x, t) = B_{\pm} \exp\{\pm i(kx - \omega t)\}$$

dove come al solito il segno relativo in $(kx - \omega t)$ corrisponde alla propagazione in avanti.

Possiamo già intuire che $\Psi_{1,2}$ siano ipotesi sbagliate poiché difficilmente normalizzabili, ma il professore gli ha voluto dare una chance, quindi facciamo il primo tentativo e vediamo se l'equazione delle onde di D'Alembert ha le giuste caratteristiche

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \gamma \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad , \quad \gamma = v^2$$

Ora, indipendentemente se uso Ψ_1, Ψ_2 o $\Psi_{\pm}$ osservo che

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} &= -\omega^2 \Psi \quad ; \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \Psi \\ \implies \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} &= \gamma \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \implies -\omega^2 \Psi = -\gamma k^2 \Psi \\ \implies \gamma &= \frac{\omega^2}{k^2} = \frac{E^2}{p^2} = \frac{p^2}{4m^2} \end{aligned}$$

$\begin{matrix} E=\hbar\omega \\ p=\hbar k \end{matrix}$
 $\begin{matrix} E=p^2/2m \end{matrix}$

Non va bene, visto che faccio la richiesta che i parametri dell'equazione non dipendano dall'onda. Però non si perde mai, o si vince o si impara e da questo tentativo andato male impariamo che

$$\frac{\partial}{\partial t} \propto \omega \propto E \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial x} \propto k \propto p$$

ma sapendo che $E \propto p^2$ allora devo per forza avere che ad una doppia integrazione nello spazio corrisponda una singola integrazione nel tempo perché altrimenti non riuscirei mai a semplificare i termini p ed E .

Ci tornerà utile trasformare il legame tra E e p in un legame tra k ed ω

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega \implies \boxed{\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}} \quad (2.1.1)$$

Il secondo (e definitivo) tentativo che facciamo è l'equazione del calore

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

vedo bene che $\Psi_{1,2}$ non sono soluzioni perché

$$\frac{\partial \Psi_{1,2}}{\partial t} = \pm \omega \Psi_{1,2} \quad ; \quad \frac{\partial^2 \Psi_{1,2}}{\partial x^2} = -k^2 \Psi_{1,2}$$

Quindi mi rimane solo da usare $\Psi_{\pm}$, che si dimostra soluzione, infatti

$$\frac{\partial \Psi_{\pm}}{\partial t} = \mp i \omega \Psi_{\pm} \quad ; \quad \frac{\partial^2 \Psi_{\pm}}{\partial x^2} = -k^2 \Psi_{\pm}$$

così

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_{\pm}}{\partial t} &= \gamma \frac{\partial^2 \Psi_{\pm}}{\partial x^2} \\ \implies \mp i \omega &= \gamma (-k^2) \\ \implies \gamma &= \pm \frac{i \omega}{k^2} \stackrel{\text{usa 2.1.1}}{=} \pm i \frac{\hbar k^2}{2m} \frac{1}{k^2} \implies \boxed{\gamma = \pm \frac{i \hbar}{2m}} \end{aligned}$$

che è un parametro che ci piace perché non compaiono caratteristiche dell'onda, inoltre vediamo che è un parametro che introduce variabili complesse e implica che in generale la funzione d'onda sia una funzione complessa³. Scegliendo arbitrariamente tra Ψ_+ e Ψ_- (è indifferente visto che $\Psi_{\pm}^* = \Psi_{\mp}$) ipotizziamo allora l'**equazione di Schrodinger** per la **particella libera** in una dimensione

$$\boxed{i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}} \quad (2.1.2)$$

³Che non è un problema visto che quello interessante è il suo modulo quadro. Discorso diverso era in meccanica classica in cui una equazione del moto complessa non aveva significato fisico.

che ammette soluzioni di fissati λ, ν (quindi p ed E):

$$\Psi_{p,E}(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \quad , \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Siamo riusciti quindi ad ottenere un'equazione differenziale che soddisfi le nostre richieste, ma restano comunque dei problemi aperti e soprattutto dobbiamo fare delle **richieste sulle soluzioni** affinché siano fisicamente accettabili:

- $\Psi(x,t)$ sia ovunque continua (potremmo chiedere differenziabile, ma come vedremo in casi particolari solo la continuità è richiesta)
- $\Psi(x,t)$ (funzione complessa) dev'essere monodroma, ossia, una funzione ad un sol valore (il valore della probabilità dev'essere univoco)
- L'interpretazione probabilistica richiede che $\Psi(x,t)$ sia al quadrato integrabile sul volume rilevante V

$$\Psi(x,t) \in L^2(V) \quad ; \quad P_t(dx) = |\Psi(x,t)|^2 dx \implies \int_L dx |\Psi(x,t)|^2 = 1$$

Ma, appunto, l'interpretazione probabilistica e la normalizzabilità della funzione d'onda pongono due problemi (uno concreto ed uno formale):

- Problema concreto: le funzioni che rappresentano particelle di definito impulso ed energia (onde piane) hanno $|\Psi(x,t)|^2 = \text{cost}$, per cui rappresentano particelle completamente delocalizzate nel volume accessibile (la probabilità di trovare la particella è uguale ovunque). Non è un problema insormontabile perché si risolve costruendo pacchetti d'onda (quindi sovrapponendo cose con λ diverse) localizzati, grazie alla linearità dell'equazione di Schrodinger.
- Problema formale: nel limite in cui il volume accessibile vada ad ∞ (significa che non mi preoccupo di cosa succede ai bordi del volume, e succede quando lavoro in laboratori molto più grandi rispetto i corpi) le onde piane non sono normalizzabili, ma appunto, questo è solo un problema che richiederà molta cura formale (matematica), ma non è limitante poichè bisogna sempre tenere presente:

- + Tutti i laboratori hanno estensione finita
- + Tutti i processi di misura sono di fatto discreti

quindi i problemi del limite continuo e del volume ∞ sono puramente matematici, ma che non intaccano l'interpretazione fisica. (Vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. OD per una trattazione formale.)

Un cambiamento radicale che si ha con la meccanica quantistica è che quando bisogna fare una misura di una certa osservabile fisica su una particella, agiamo con un'operatore differenziale⁴ direttamente sulla funzione d'onda, ottenendo così un'equazione agli autovalori (la funzione d'onda è autofunzione dell'operatore) e l'autovalore è proprio il risultato della misura che volevamo fare.

La nostra soluzione di definiti p ed E è

$$\Psi_{p,E}(x,t) = A \exp\{i(kx - \omega t)\} \quad , \quad p = \hbar k \quad , \quad E = \hbar \omega$$

e possiamo notare l'agire di 3 particolari operatori

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{p,E}(x,t) &= i\hbar(-i\omega) \Psi_{p,E}(x,t) = E \Psi_{p,E}(x,t) \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{p,E}(x,t) &= -i\hbar(ik) \Psi_{p,E}(x,t) = p \Psi_{p,E}(x,t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_{p,E}(x,t) &= \frac{p^2}{2m} \Psi_{p,E}(x,t) \end{aligned}$$

Detto in parole, gli operatori

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

estraggono esattamente l'impulso e l'energia cinetica (che sono gli autovalori) della particella e vedo esplicitamente che $\Psi_{p,E}(x,t)$ è autofunzione degli operatori. Vedo anche che l'equazione 2.1.2 di Schrodinger impone (eguagliando la prima e la terza riga) che $E = \frac{p^2}{2m}$ e posso vedere che l'evoluzione temporale di $\Psi_{p,E}(x,t)$ è determinata dall'azione di $\hat{K}$

$$\hat{K} \Psi_{p,E}(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{p,E}(x,t)$$

che sembra essere un'osservazione di poco conto, ma in realtà se ti vai a vedere quali saranno i principi fondativi della Meccanica Quantistica vedrai che c'è la richiesta che l'evoluzione temporale del sistema sia data dall'azione dell'hamiltoniana sul sistema stesso, ma tu sai che l'hamiltoniana è $H = K + V$, che in questo caso, avendo una particella libera ($V = 0$), è esattamente $H = K$.⁵

⁴il fatto che sia un'operatore differenziale piuttosto che un'operatore che agisce moltiplicativamente dipende dallo spazio in cui ci troviamo, vedi la continuazione del capitolo.

⁵Discorso fatto più in dettaglio (e sicuramente più corretto e completo) è fatto da Landau nel *paragrafo 8* del *capitolo 2* (pag. 43) di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. L3 e spiega come la funzione d'onda $\Psi(x,t)$ determina in modo completo (proprietà e comportamento ad ogni istante di tempo) lo stato del sistema fisico che si considera. Spiega anche perché in generale scriviamo $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$ con $\hat{H}$ proprio l'operatore hamiltoniana.

Nota che questa è solo la derivazione dell'equazione di Schrodinger nel caso di particella libera. Il caso generale di particella interagente lo tratteremo tra pochi paragrafi.

2.1.2 Soluzione generale per la particella libera e pacchetti d'onda

Possiamo cominciare a studiare il problema di costruire soluzioni localizzate sfruttando il principio di sovrapposizione. Le costruiamo seguendo lo stesso procedimento fatto nell'EM classico (ricorda i pacchetti d'onda fatti a Fisica III), ossia sfruttando una trasformata di Fourier.

Poniamo

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk A(k, t) e^{ikx} \quad (2.1.3)$$

dove consideriamo $A(k, t)$ la soluzione più generale per tutti i possibili numeri d'onda k e di cui non facciamo ipotesi sull'andamento temporale. Inoltre per il momento non ci facciamo problemi di convergenza (le guardiamo dopo), ma assumiamo solamente $\Psi \in L^2(\mathbb{R})$ (che per i teoremi dell'analisi di Fourier varrà anche per A).

Se Ψ soddisfa l'equazione di Schrodinger, allora possiamo provare a mettere quest'espressione all'interno e vedere l'equazione differenziale soddisfatta da $A(k, t)$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\partial A}{\partial t} e^{ikx} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk A(k, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) (-k^2) e^{ikx} \\ \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx} \left[i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} A \right] &= 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial A}{\partial t} = -i \frac{\hbar k^2}{2m} A &\stackrel{\text{usa 2.1.1}}{=} -i\omega(k) A \Rightarrow \frac{dA}{A} = -i\omega(k) dt \\ \boxed{A(k, t) = A(k, 0) e^{-i\omega(k)t}} &\quad (2.1.4) \end{aligned}$$

così abbiamo trovato l'andamento temporale della funzione dei numeri d'onda e possiamo scrivere la soluzione generale (che è l'espressione che poi effettivamente utilizziamo nei problemi) dell'equazione di particella libera in 1 dimensione

$$\boxed{\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk A(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}} \quad (2.1.5)$$

soluzione che è determinata dalla condizione iniziale

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk A(k) e^{ikx} \quad (2.1.6)$$

Per come l'abbiamo costruita la soluzione generale è intesa come sovrapposizione di *onde piane* con diversi k (quindi diversi p) e con ciascun k pesato dal peso $A(k)$. Ma non avendo fatto altro che una trasformata di Fourier possiamo utilizzare tutti i teoremi noti dall'analisi armonica e in particolare il teorema di Plancherel⁶ che per funzioni d'onda normalizzabili è

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi(x, 0) e^{-ikx} \quad (2.1.7)$$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dk |A(k)|^2 \quad (2.1.8)$$

e che quindi suggerisce di interpretare $A(k)$ come un'**ampiezza di probabilità per numeri d'onda** (e quindi per impulsi). Di conseguenza

$|A(k)|^2 dk$ = probabilità di osservare un numero d'onda (e quindi impulso p) in un intorno di larghezza dk dal valore k

Quindi data una distribuzione di probabilità posso averla di posizione piuttosto che di numeri d'onda "semplicemente" facendo una trasformata (o antitrasformata) di Fourier.

Nota anche che proprio per aver utilizzato una trasformata di Fourier ottieni una relazione di indeterminazione del tipo $\Delta x \Delta k = \frac{1}{2}$ (o meglio $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$) esattamente come quando costruivi pacchetti d'onda in EM classico⁷, quindi se voglio costruire una funzione di localizzata ad una certa x devo mischiare tante λ (e quindi p). In generale però (come si vedrà meglio in seguito) questo è un primo suggerimento che in realtà il famoso *principio di indeterminazione di Heisenberg*, che prende l'indeterminazione di x e p , non sia un vero e proprio principio, ma piuttosto una conseguenza di come si è costruita la Meccanica Quantistica⁸.

2.1.3 Valori medi in termini di Ψ ed A

Appare chiaro, però, che le informazioni codificate da $\Psi(x, t)$ sono ugualmente codificate da $A(k, t)$, ma abbiamo appena visto che lo step che separa queste due formulazioni della stessa informazione è una trasformata (o antitrasformata) di Fourier, quindi, se determinati risultati li calcolo in uno

⁶Vedi bene Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. METODI, ma sostanzialmente dice che per una funzione in $L^2(\mathbb{R})$ esiste la trasformata di Fourier, appartiene anch'essa a $L^2(\mathbb{R})$ e la norma quadra integrata è uguale.

⁷In quel caso avevi una relazione del tipo $\Delta\nu\Delta t = 1$.

⁸Attenzione però che quello che ho detto vale se seguiamo il modo in cui *noi* stiamo costruendo la Meccanica Quantistica, ma ci sono anche costruzioni che partono considerando il principio di indeterminazione come principio fondativo e poi tutto quello che diciamo noi è una conseguenza (ad esempio Dirac l'ha fatto).

spazio (spazio delle x se uso Ψ e spazio delle k se uso A) piuttosto che in un altro avrò chiaramente lo stesso risultato, ma la differenza sta nel calcolo che devo fare per ottenerlo. È interessante vedere come vengono codificati i valori medi nelle due formulazioni.

Le definizioni nei due distinti spazi sono:

- Nello spazio delle x

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, x |\Psi(x, t)|^2$$

e in generale per una funzione della posizione

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, f(x) |\Psi(x, t)|^2$$

- Nello spazio delle k

$$\langle p \rangle = \hbar \langle k \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, k |A(k, t)|^2$$

e in generale per una funzione dell'impulso

$$\langle g(p) \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, g(p) |A(k, t)|^2$$

ma come possiamo codificare il valor medio di p nello spazio delle x (o analogamente di x nello spazio delle k)? Ovviamente usando la trasformata di Fourier:

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, k |A(k, t)|^2 \\
&= \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, k \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \Psi(x, t) e^{-ikx}}_{A(k, t)} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dy \, \Psi^*(y, t) e^{iky}}_{A^*(k, t)} \\
&= \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, dy \, \Psi(x, t) \Psi^*(y, t) \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, k e^{-ik(x-y)} \\
&= \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, dy \, \Psi(x, t) \Psi^*(y, t) \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, i \frac{\partial}{\partial x} e^{-ik(x-y)} \\
&\text{integro per parti nella variabile } x, \text{ così spostato la derivata} \\
&\text{suppongo che non ci siano effetti di bordo essendo } \Psi(x, t) \in L^2(\mathbb{R}) \\
&= \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \, \Psi^*(y, t) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \left(-i \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dk \, e^{-ik(x-y)}}_{2\pi\delta(x-y)} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \Psi^*(x, t) \underbrace{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)}_{\hat{p}} \Psi(x, t)
\end{aligned}$$

quindi come avevamo già accennato, nello spazio delle x l'impulso è rappresentato dall'operatore differenziale

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.1.9)$$

e con un calcolo esattamente identico si mostra che nello spazio delle k la posizione è rappresentata dall'operatore differenziale

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial k} \quad (2.1.10)$$

Pacchetto d'onde gaussiano

A questo punto in aula abbiamo visto tutto quello appena visto fin'ora applicato ad un caso specifico, ma ho deciso di non inserire tutti i conti espliciti per alleggerire il tutto, visto che è un puro esercizio, però attenzione che è comunque un caso interessante, quindi scrivo testo e risultati e se vuoi vedere meglio tutti i passaggi e conti puoi vedere la *Lezione 6* di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea.

Esercizio Considera la condizione iniziale

$$\Psi(x, 0) = N \exp\left\{-\frac{x^2}{a^2}\right\}$$

Studiare:

- a) le classi di soluzioni che rappresentano una particella localizzata
- b) i momenti e la relazione di indeterminazione
- c) l'evoluzione temporale del pacchetto

Soluzione

- a) Imponendo la condizione di normalizzazione si trova

$$N = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} \implies \Psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{x^2}{a^2}\right\}$$

puoi utilizzare la relazione 2.1.7 per determinare l'espressione

$$A(k, 0) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{a}{2}} e^{-\frac{k^2 a^2}{4}}$$

A questo punto potresti fare l'osservazione che avresti potuto intuirla a partire da $\Psi(x, t)$ ($x \rightarrow k$, $a \rightarrow \frac{2}{a}$). Il che ti dice che la trasformata di Fourier di una gaussiana di semilarghezza a è una gaussiana di semilarghezza $2/a$ (fatto noto).

Ora utilizzando l'espressione 2.1.5 della soluzione generale puoi trovare (con qualche conto)

$$\Psi(x, t) = \frac{N \Delta x_0}{B} \exp\left\{-\frac{x^2}{4B^2}\right\} \quad ; \quad \Delta x_0 = \frac{a}{2} \quad , \quad B^2 = \Delta x_0^2 + \frac{i\hbar}{2m}t$$

- b) I momenti li puoi calcolare con le definizioni e trovi

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= 0 \quad , \quad \langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{4} \quad \implies \quad \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{a}{2} \\ \langle p \rangle &= 0 \quad , \quad \langle x^2 \rangle = \frac{1}{a^2} \quad \implies \quad \Delta p = \frac{\hbar}{a} \\ \Delta x \cdot \Delta p &= \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

- c) Puoi calcolarti

$$\begin{aligned} \rho(x, 0) &= \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{x^2}{2\Delta x_0^2}\right\} \\ \rho(x, t) &= N^2 \frac{\Delta x_0}{\Delta x_t} \exp\left\{-\frac{x^2}{2(\Delta x_t)^2}\right\} \quad \text{con} \quad \Delta x_t = \Delta x_0 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \Delta x_0^4}} \end{aligned}$$

Vedi bene Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea per i conti dettagliati e per le varie osservazioni, ma in generale trovi che il pacchetto gaussiano si allarga nel tempo, che è un comportamento che è comprensibile se si pensa che la gaussiana è stata ottenuta sovrapponendo onde con diversi numeri d'onda, dunque diversi impulsi, e quindi diverse velocità classiche che essendo diverse fanno evolvere le varie onde in modo diverso e l'effetto complessivo è l'allargamento.

2.2 L'equazione di Schrodinger

Ovviamente quello che abbiamo visto nella sezione §2.1.1 riguardante la particella libera è un caso *particolare* e quello che osserviamo generalmente è una particella (o un sistema) interagente con l'esterno tramite un potenziale $V(x, t)$. Ora, ci preoccupiamo di determinare l'equazione di Schrodinger nel caso generale di particella interagente.

Forse è passata un po' inosservata l'osservazione che l'equazione di Schrodinger 2.1.2 la scriviamo come

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (2.2.1)$$

dove $\hat{H}$ è l'operatore hamiltoniana, che nel caso visto prima è rappresentato dalla sola energia cinetica. Il punto di questa cosa è che 2.2.1 è la forma più generale possibile dell'equazione di Schrodinger⁹ e che in base al problema che mi ritrovo a risolvere determinando la forma di $\hat{H}$ allora trovo l'equazione di Schrodinger che poi mi darà la $\Psi(x, t)$.

È opportuno notare che c'è un parallelismo tra quello che stiamo dicendo e la meccanica classica da cui arriviamo. Ci ricordiamo da insegnamenti passati che l'evoluzione temporale di un'osservabile classica $O(q, p, t)$ è strettamente legata con l'energia totale del sistema, ossia l'hamiltoniana, tramite la relazione

$$\frac{d}{dt}O(q, p, t) = \frac{\partial O}{\partial t} + \{O, H\}_{P.P.} \quad (2.2.2)$$

dove $\{\cdot, \cdot\}_{P.P.}$ sono le parentesi di Poisson. Se non ricordi vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.M3CH.

L'hamiltoniana so che è data dalla somma di energia cinetica ed energia potenziale. L'energia cinetica di una particella la possiamo determinare (lo fa nel *paragrafo 17* del *capitolo 3* (pag. 73) di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.L3 sfruttando Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.L1) partendo dalle condizioni generali imposte al sistema fisico dall'omogeneità e dell'isotropia dello spazio (ho invarianza

⁹vedi la nota a piè di pagina numero 5 in cui ti rimando a Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.L3 per capire meglio il perché.

per rotazioni e chiediamo che tutte le direzioni siano trattate simmetricamente) e dal principio di relatività di Galilei (forma delle equazioni del moto identica in tutti i S.R.). Queste due condizioni in meccanica classica portano a $E = K = \frac{p^2}{2m}$ e scrivendo l'hamiltoniana in 3 dimensioni abbiamo

$$H = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)$$

ma in Meccanica Quantistica abbiamo detto che usiamo degli operatori, quindi ricordando la definizione 2.1.9 dell'operatore impulso otteniamo

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad (2.2.3)$$

Nota se scrivi 2.2.3 in 1 dimensione e lo metti in 2.2.1 trovi l'equazione di Schrodinger già vista 2.1.2. A questo punto per ottenere un'equazione valida per una particella interagente basterebbe semplicemente aggiungere un termine di interazione $V(\vec{r}, t)$ all'hamiltoniana se fossimo in meccanica classica, ma non è così scontato che valga anche ora visto che stiamo facendo Meccanica Quantistica, però se ci ricordiamo che abbiamo notato che funzioni di p agiscono come operatori differenziali, mentre funzioni della posizione agiscono moltiplicativamente (nello spazio delle $\vec{x}$), allora, è lecito comportarsi come nel caso classico (visto che il potenziale lo consideriamo solo in funzione di x ed eventualmente t) e quindi ottenere l'espressione dell'**operatore hamiltoniano**

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}, t) \quad (2.2.4)$$

che ci permette, mettendola in 2.2.1 di ottenere

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \Psi + V(\vec{r}, t)\Psi$$

Equazione di Schrodinger (2.2.5)

2.2.1 Derivazione dell'equazione di Schrodinger in modo alternativo

Voglio tenere traccia anche di un'altro modo di ricavare l'equazione di Schrodinger, anche se potrebbe risultare più *strana* o addirittura insensata se è la prima volta che si legge qualcosa riguardo l'argomento. È il procedimento che mesi dopo il primo approccio alla Meccanica Quantistica mi sembra il più lineare da seguire e più in linea con i procedimenti che si seguiranno in teorie successive (QFT). È un procedimento breve e che forse implica delle conoscenze pregresse su come sono fatti e come si comportano alcuni operatori, ma reputo che sia comunque il procedimento più semplice. Le note che seguiranno fanno riferimento ai testi: Capitolo 2, paragrafo 15 del Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.L3; capitolo 6, paragrafo

1 del Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.LB.

L'idea generale è quella di partire da una relazione classica ben nota e fare quella che si chiama **prima quantizzazione**, ossia, si prendono osservabili classiche e si promuovono al ruolo di operatori, che in Meccanica Quantistica sono associati proprio alle osservabili fisiche.

Partiamo dall'equazione classica ben nota

$$E = T + V = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V \quad (2.2.6)$$

in cui l'energia totale del sistema la associamo all'hamiltoniana del sistema. A questo punto promuoviamo le osservabili E , $\vec{p}$ e V al ruolo di operatori, ovvero facciamo

$$E \longrightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad ; \quad \vec{p} \longrightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad ; \quad V = \hat{V}$$

e risostituendo dentro l'equazione sopra otteniamo esattamente

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V} \quad (2.2.7)$$

che è l'equazione di Schrodinger completa.

2.2.2 Interpretazione probabilistica

Seguendo quello detto all'inizio della sezione §2.1 sull'interpretazione di Copenhagen possiamo determinare in 3 dimensioni

$$P(V) = \int_V d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (2.2.8)$$

che rappresenta la **probabilità di trovare la particella nel volume V se si effettua una misura di posizione al tempo t** .

Ovviamente possono capitare casi in cui si hanno n particelle interagenti, in quel caso si otterrà una funzione d'onda

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n; t)$$

che rappresenta un'ampiezza di probabilità di posizione **congiunta** in uno spazio di dimensione $3n$ e posso calcolare

$$P(V_1, \dots, V_n) = \int_{V_1} d^3r_1 \cdots \int_{V_n} d^3r_n |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n; t)|^2$$

è un integrale in $3n$ variabili e mi dice la probabilità di trovare la particella 1 in V_1 , la particella 2 in V_2 e così via. Se volessi conoscere solamente la

probabilità di trovare la particella i nel volume V_i allora basterebbe ignorare gli altri $n - 1$ integrale, ma facendo statistica, ignorare vuol dire integrarli su tutto il volume a disposizione (ossia $-\infty, \infty$)¹⁰.

2.2.3 Conservazione della probabilità

Abbiamo già visto che l'interpretazione probabilistica richiede la normalizzabilità, ossia

$$\int_{V_{tot}} d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$$

e chiaramente sarebbe un problema se io imponessi la normalizzazione al tempo $t = 0$ ad esempio, ma passato un certo tempo t questa non sia più rispettata, salterebbe tutta l'interpretazione che diamo alla Meccanica Quantistica. Quindi diciamo che **la normalizzazione dev'essere preservata dall'evoluzione temporale** e possiamo vedere come esprimere questa cosa in matematica.

Calcoliamo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi$$

da 2.2.5 si ha:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi - \frac{i}{\hbar} V \Psi \quad ; \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi^* + \frac{i}{\hbar} V \Psi^*$$

e dunque inserendola

$$\begin{aligned} &= \Psi^* \left(\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi - \frac{i}{\hbar} V \Psi \right) + \left(-\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi^* + \frac{i}{\hbar} V \Psi^* \right) \Psi \\ &= \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Delta \Psi^* \Psi) \end{aligned}$$

a questo punto si può sfruttare l'uguaglianza:

$$\vec{\nabla} \cdot (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi) = \vec{\nabla} \Psi^* \cdot \vec{\nabla} \Psi + \Psi^* \Delta \Psi \implies \Psi^* \Delta \Psi = \vec{\nabla} \cdot (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi) - \vec{\nabla} \Psi^* \cdot \vec{\nabla} \Psi$$

l'altra è analoga. Si ha quindi

$$= -\vec{\nabla} \cdot \left[-\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*) \right]$$

Posso definire il vettore (reale) dentro la parentesi quadra:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) \equiv -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*) = \text{Re} \left\{ -\frac{i\hbar}{2m} \Psi^* \vec{\nabla} \Psi \right\} \quad (2.2.9)$$

¹⁰nota che stiamo facendo una cosa totalmente diversa rispetto che considerare $|\Psi|^2$ una distribuzione di materia, poiché altrimenti avremmo $\int = n$.

che chiamo **densità di corrente di probabilità** e con cui posso scrivere

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0} \quad \text{Equazione di continuità} \quad (2.2.10)$$

e ci dice che *la probabilità non viene nè creata nè distrutta* (non ci sono sorgenti al 2° membro), ma varia da punto a punto solo in quanto trasportata da $\vec{J}$ ¹¹.

Possiamo calcolare la variazione nel tempo della probabilità di trovare la particella nel volume V al tempo t

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(V, t) &\equiv \frac{\partial}{\partial t} \int_V d^3r \rho(\vec{r}, t) = \int_V d^3r \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ &= - \int_V d^3r \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = - \int_{\partial V} \vec{J} \cdot \hat{n} dS \end{aligned}$$

e vedo che la probabilità contenuta in V varia solo a causa del flusso uscente dovuto a $\vec{J}$.

Se faccio lo stesso calcolo su V_{tot} però vedo

$$\frac{\partial}{\partial t} P(V_{tot}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \{1\} = 0 = - \int_{\partial V_{tot}} \vec{J} \cdot \hat{n} dS$$

come volevo.¹²

Per $V_{tot} = \mathbb{R}^3$ ogni Ψ normalizzabile deve essere nulla sulla sfera all'∞, ovvero, deve valere

$$\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \Psi(\vec{r}, t) = 0$$

ma in generale Ψ dev'essere al quadrato integrabile, quindi, deve tendere a 0 quando $x \rightarrow \infty$ più velocemente di $1/\sqrt{x}$.

2.2.4 Linearità e sue conseguenze

La richiesta principale che abbiamo fatto costruendo l'equazione 2.2.5 di Schrodinger è stata quella che fosse un'equazione differenziale **lineare** in Ψ . Questa richiesta si traduce in matematica nel **principio di sovrapposizione** che mi dice che se

$$\begin{aligned} \Psi_i(\vec{r}, t) \quad \text{sono soluzioni} \quad i = \{1, \dots, n\} \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^n \alpha_i \Psi_i(\vec{r}, t) \quad , \quad (\alpha_i \in \mathbb{C}) \quad \text{è anche soluzione} \end{aligned}$$

¹¹Osserva inoltre che è analoga a quelle note dell'elettromagnetismo classico e della dinamica dei fluidi.

¹²Vedi §1.4 del Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. GR per vedere in modo preciso che le derivata totale rispetto al tempo di $P(V_{tot}, t) = 0$.

detto in altre parole: le soluzioni dell'equazione di Schrodinger (corrispondenti ai possibili stati del sistema quantistico) formano uno spazio vettoriale su $\mathbb{C}$, che in generale ha dimensione ∞ . Dato che richiediamo alle Ψ di essere normalizzabili, questo spazio vettoriale è lo spazio $L^2(V_{tot})$ delle funzioni al quadrato integrabili su V_{tot} (che approssimeremo ad $\mathbb{R}$ per semplicità)¹³. Possiamo notare che:

- Lo spazio L^2 è uno spazio **unitario**, cioè dotato di prodotto scalare (che si porta dietro le sue solite proprietà, quali, linearità, simmetrico con una complessa coniugazione e con *norma* definita positiva)¹⁴, quindi

$$\begin{aligned} \forall \Psi_1, \Psi_2 \in L^2 \quad , \quad (\Psi_1, \Psi_2) &\equiv \int d^3r \Psi_1^*(\vec{r}, t) \Psi_2(\vec{r}, t) \\ \implies \forall \Psi \in L^2 \quad , \quad (\Psi, \Psi) &\equiv \|\Psi\| = \int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 > 0 \end{aligned}$$

e l'interpretazione probabilistica impone $\|\Psi\| = 1 \quad \forall \Psi$

- Dando l'interpretazione di Copenhagen è evidente che le funzioni d'onda che differiscono per una costante moltiplicativa o una fase definiscono lo stesso stato fisico, dato che la quantità osservabile è $|\Psi|^2$. Diciamo in generale che gli stati fisici corrispondono biunivocamente a *raggi* nello spazio L^2 , modulo fasi. Sto dicendo che esiste una relazione di equivalenza $L^2/\mathbb{C}$ tale

$$\Psi \sim C\Psi e^{i\varphi}$$

Spiegando un pochetto meglio, la condizione

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^3r |\Psi(\vec{r}, t)| = 1$$

richiede oltre al fatto che la funzione sia al quadrato integrabile (quindi dentro $L^2(\mathbb{R}^3)$)¹⁵ chiede anche che il suo integrale sia 1. Noi sappiamo che una funzione d'onda è tale se risolve l'equazione di Schrodinger, quindi, potrebbe capitare che un sistema fisico è descritto da una Ψ che risolve l'equazione 2.2.5, ma che non soddisfa la condizione $\|\Psi\| = 1$ e quindi non mi permette di dare un'interpretazione probabilistica. Nessun problema perché possiamo mettere davanti l'espressione della Ψ una costante a piacere C e quindi far valere l'interpretazione di Copenhagen. Ma mettendo la costante C la Ψ risolve ancora l'equazione di

¹³Nei prossimi paragrafi vedremo quando le soluzioni sono una base di questo spazio e che cosa questo implica.

¹⁴vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Sciuto2 per discorsi dettagliati.

¹⁵Discorsi relativi a Ψ che sono distribuzioni temperate (quindi banalmente il caso di particella libera) le ignoriamo tranquillamente e le teniamo per il corso di Meccanica Quantistica 2, ma possiamo soltanto dire che poco cambia e che tutto funziona lo stesso.

Schrodinger, quindi, la nostra costruzione della Meccanica Quantistica , ossia fondata sulla 2.2.5 e sull'interpretazione probabilistica, non crea interferenza tra le due ipotesi che imponiamo e siamo tutti contenti.¹⁶

- Abbiamo già visto nella sezione §2.1.2 che esistono descrizioni alternative dello stesso spazio L^2 , legate a diverse osservabili fisiche. Abbiamo visto infatti che la TF $A(\vec{k}, t)$ contiene le stesse informazioni di Ψ . Torneremo su questa osservazione in più dettaglio quando parleremo dei principi fondativi della Meccanica Quantistica .

Queste osservazioni sono una sorta di anticipazione di quelli che poi enunceremo come Principi fondativi della Meccanica Quantistica , ma per il momento accontentiamoci di questi punti, un po' approssimativi e prendiamo per buono che stiamo lavorando con lo spazio L^2 che è uno spazio **unitario completo** (ossia uno spazio dotato di prodotto scalare e che è uno spazio metrico¹⁷ in cui ogni successione di Cauchy è convergente) e **separabile** (ossia tale da ammettere una base numerabile).

Uno spazio unitario completo è detto di **Hilbert**.

Osservazione

È doveroso puntualizzare che in realtà già l'equazione d'onda della particella libera non appartiene allo spazio delle funzioni al quadrato sommabili, ma è in realtà una distribuzione temperata. Questa cosa verrà trattata meglio nel corso di Meccanica Quantistica 2. Basta sapere però che per $\Psi \in L^2$ si ottiene uno spettro energetico discreto, mentre per funzioni d'onda nello spazio delle distribuzioni temperata $\Psi \in S'$ si ottiene uno spettro energetico continuo¹⁸ (Vedi meglio Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.mq2).

2.2.5 Valori medi e loro evoluzione temporale

avevamo già visto in §2.1.3 come scrivere i vari valori medi di diverse osservabili fisiche nelle diverse rappresentazioni che potevamo avere e abbiamo inoltre visto che, nello spazio delle funzioni d'onda, funzioni dipendenti dalla posizione avevano la definizione

$$\langle f(\vec{r}) \rangle_{\Psi, t} \equiv \int d^3r f(\vec{r}) |\Psi(\vec{r}, t)|^2$$

¹⁶Questo discorso è fatto nel capitolo 1 paragrafo 4 del Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.GR.

¹⁷vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Sciuto2. Uno spazio metrico è un insieme dotato di una distanza che gode di certe proprietà.

¹⁸Spettro **energetico** perché mi sto riferendo ad una funzione d'onda che è autofunzione per l'hamiltoniana, ma è una cosa applicabile in generale. Un qualsiasi autostato di un certo operatore restituisce spettro continuo/discreto di quella specifica osservabile fisica.

mentre funzioni dell'impulso

$$\langle g(\vec{p}) \rangle_{\Psi,t} \equiv \int d^3r \Psi^*(\vec{r},t) g(-i\hbar\vec{\nabla}) \Psi(\vec{r},t)$$

Ma in tutta generalità possiamo scrivere

$$\langle F(\vec{r},\vec{p}) \rangle_{\Psi,t} \equiv \int d^3r \Psi^*(\vec{r},t) F(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}) \Psi(\vec{r},t) \quad (2.2.11)$$

che è la definizione più generale di valor medio dell'osservabile F .

In generale, quando dobbiamo calcolare un valor medio mettiamo l'operatore (che sarà differenziale o moltiplicativo a seconda dello spazio in cui mi trovo) in mezzo alla funzione d'onda e al suo complesso coniugato¹⁹.

Possiamo ora vedere un teorema molto importante della Meccanica Quantistica il cui enunciato dice che l'evoluzione temporale dei valori medi $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$ seguono le relazioni classiche.

Teorema di Ehrenfest

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m} \quad (2.2.12)$$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad (2.2.13)$$

Facciamo subito la dimostrazione operativa (il teorema ha l'ipotesi che il potenziale V non dipenda dal tempo):

- Operatore di posizione

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{d}{dt} \int d^3r \Psi^* x \Psi \\ &= \int d^3r \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \int d^3r \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \cdot x \Psi \end{aligned}$$

da 2.2.5 si ha:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi - \frac{i}{\hbar} V \Psi \quad ; \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi^* + \frac{i}{\hbar} V \Psi^*$$

dunque

$$\begin{aligned} &= \int d^3r \left[\Psi^* x \left(\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi - \frac{i}{\hbar} V \Psi \right) + \left(-\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi^* + \frac{i}{\hbar} V \Psi^* \right) x \Psi \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int d^3r (\Psi^* x \Delta \Psi - \Delta \Psi^* x \Psi) \end{aligned}$$

¹⁹Nota che è una definizione che andrebbe raffinata perché operatori che dipendono sia da x che da p_x ad esempio, soffrono di un'ambiguità di ordinamento dato che $\hat{x}\hat{p}_x\Psi = -i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x}$, ma $\hat{p}_x\hat{x}\Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)$. Questo problema è legato al principio di indeterminazione e a tutto un discorso sui commutatori, ma per il momento puoi accantonarlo e pensarci tra un paio di capitoli.

a questo punto devo integrare per parti il pezzo con $\Delta\Psi^*$, ricordando che le funzioni d'onda e le sue derivate si annullano ai bordi.

$$= \frac{i\hbar}{2m} \int d^3r \left(\Psi^* x \Delta\Psi + \vec{\nabla}\Psi^* \cdot \vec{\nabla}(x\Psi) \right)$$

integro ancora per parti

$$= \frac{i\hbar}{2m} \int d^3r \left(\Psi^* x \Delta\Psi - \Psi^* \Delta(x\Psi) \right)$$

osserva che:

$$\begin{aligned} \Delta(x\Psi) &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) (x\Psi) \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x\Psi) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} (x\Psi) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} (x\Psi) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi + x \frac{\partial\Psi}{\partial x} \right) + x \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + x \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} \\ &= \frac{\partial\Psi}{\partial x} + \frac{\partial\Psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + x \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + x \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} \\ &= 2 \frac{\partial\Psi}{\partial x} + x \Delta\Psi \end{aligned}$$

e dunque si conclude che:

$$\begin{aligned} &= \frac{i\hbar}{2m} \int d^3r \left(\Psi^* x \Delta\Psi - 2\Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi^* x \Delta\Psi \right) \\ &= -\frac{i\hbar}{m} \int d^3r \Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{1}{m} \int d^3r \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \\ &= \frac{\langle p_x \rangle}{m} \end{aligned}$$

quindi il valor medio della posizione è legato al valor medio dell'impulso dalla relazione classica. ■

- Operatore impulso

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle p \rangle &= -i\hbar \frac{d}{dt} \int d^3r \Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial x} \\ &= -i\hbar \int d^3r \left(\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} \frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial\Psi}{\partial x} \right) \end{aligned}$$

riuso le equazioni per $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ e $\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$ da 2.2.5, così

$$\begin{aligned} &= -i\hbar \int d^3r \left[\left(-\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi^* + \frac{i}{\hbar} V \Psi^* \right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi - \frac{i}{\hbar} V \Psi \right) \right] \\ &= \int d^3r \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* + V \Psi^* \right) \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V \Psi \right) \right] \end{aligned}$$

integro per parti due volte il termine con $\Delta \Psi^*$, così

$$= \int d^3r \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^* \Delta \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + V \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\hbar^2}{2m} \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Delta \Psi - \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} (V \Psi) \right]$$

ricordo che le derivate commutano

$$= \int d^3r \Psi^* \left(V \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (V \Psi) \right)$$

noto che vale:

$$\frac{\partial}{\partial x} (V \Psi) = \frac{\partial V}{\partial x} \Psi + V \frac{\partial \Psi}{\partial x} \implies -\frac{\partial V}{\partial x} \Psi = V \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (V \Psi)$$

quindi

$$\begin{aligned} &= \int d^3r \Psi^* \left(-\frac{\partial V}{\partial x} \right) \Psi \\ &= \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \end{aligned}$$

e di nuovo ho verificato che anche per l'impulso vale la relazione classica. ■

Nota che se hai delle forze conservative allora vale

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = \left\langle -\vec{\nabla} V \right\rangle = \langle \vec{F} \rangle$$

A lezione sono stati segnalati 2 esercizi sul Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. GR notevoli:

Es. 1.15 Vedi che non solo la norma $\|\Psi\|$ è conservata nel tempo, ma anche i prodotti scalari (Ψ_1, Ψ_2) se Ψ_1 e Ψ_2 sono soluzioni dell'equazione di Schrodinger.

Es. 1.17 Vedi che viene violata la conservazione della probabilità (particelle instabili) se si introduce un potenziale V complesso.

2.3 Sistemi conservativi e separazioni delle variabili

Fin'ora abbiamo visto diverse caratteristiche dell'equazione 2.2.5 di Schrodinger generale, ma per fare fisica, ovviamente, dobbiamo risolverla per poter conoscere la funzione d'onda Ψ che ci da informazioni sul comportamento del corpo.

In questa sezione vediamo il caso in cui abbiamo un potenziale che non dipende esplicitamente dal tempo ²⁰ $V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$. Classicamente con potenziali di questo tipo sappiamo che l'energia totale $E = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + V(\vec{r})$ è conservata ($\frac{dE}{dt} = 0$ anche nel caso in cui $\vec{p} = \vec{p}(t)$ e $\vec{r} = \vec{r}(t)$), ma quello che interessa a noi è il caso della Meccanica Quantistica, in cui fortunatamente nel caso di potenziali indipendenti da t abbiamo un'equazione di Schrodinger leggermente più semplice da risolvere.

Partiamo dall'equazione che conosciamo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\vec{r}) \Psi$$

adottando la tecnica delle separazioni delle variabili, quindi definendo

$$\Psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r}) f(t) \quad (2.3.1)$$

segue che

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = u(\vec{r}) \frac{df}{dt} \quad ; \quad \Delta \Psi = f(t) \Delta u(\vec{r})$$

sembra che sia un metodo un po' forzato di risolvere l'equazione e potremmo sospettare che le soluzioni che otterremo siano un po' restrittive e che siano in realtà un sottoinsieme di tutte le possibili soluzioni, ma in realtà quello che otterremo sarà di grande interesse e in realtà saremo in grado di scrivere le soluzioni più generali banalmente facendo combinazioni lineari di quelle che troveremo con il metodo delle separazioni delle variabili.

Se mettiamo le derivate dentro l'equazione di Schrodinger otteniamo

$$i\hbar u(\vec{r}) \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} f(t) \Delta u(\vec{r}) + V(\vec{r}) u(\vec{r}) f(t)$$

divido per $\Psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r}) f(t)$

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{u(\vec{r})} \Delta u(\vec{r}) + V(\vec{r})$$

visto che ho le due diverse e scorrelate dipendenze separate a destra e a sinistra allora affinché sia risolta l'equazione differenziale entrambi i membri

²⁰Nota che questo sembra un caso particolare, ma in realtà per quasi tutto il corso considereremo potenziali di questo tipo.

devono essere uguali ad una costante. Chiamiamo la costante E osservando che ha le dimensioni di un'energia²¹ e otteniamo due equazioni differenziali:

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df}{dt} &= E \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u(\vec{r}) + V(\vec{r})u(\vec{r}) &= Eu(\vec{r}) \end{aligned}$$

La prima è facilmente risolvibile

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df}{dt} &= E \implies \frac{df}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E f(t) \implies \frac{df}{f} = -\frac{i}{\hbar} E dt \\ \implies \ln \frac{f(t)}{f(0)} &= -\frac{i}{\hbar} E t \implies f(t) = f(0) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E t\right\} \end{aligned}$$

concludendo quindi, partendo dall'equazione di Schrodinger 2.2.5 rimaniamo con due equazioni

$$\boxed{f(t) = f(0) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E t\right\}} \quad (2.3.2)$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u(\vec{r}) + V(\vec{r})u(\vec{r}) = Eu(\vec{r})} \quad (2.3.3)$$

Da notare che il comportamento dell'equazione 2.3.2 è universale, mentre l'equazione 2.3.3 va risolta caso per caso a seconda del potenziale V che abbiamo e viene chiamata **Equazione di Schrodinger stazionaria**.

Da questo inizio di sezione ci portiamo a casa che l'evoluzione temporale della funzione d'onda (a definita energia E) la conosco sempre e se conosco la parte che si evolve con le coordinate spaziali, allora ci poggio affianco un pezzo del tipo 2.3.2 e ho la funzione d'onda completa che mi interessa; le soluzioni fattorizzabili sono dunque della forma

$$\Psi_E(\vec{r}, t) = u_E(\vec{r}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E t\right\} \quad (2.3.4)$$

Oltre ad essere *belle* da scrivere, perché possiamo separare le variabili, le funzioni d'onda nel caso di potenziali stazionari si portano dietro fondamentali proprietà e caratteristiche:

1. Rappresentano **stati stazionari**

$$\rho_E(\vec{r}, t) \equiv |\Psi_E(\vec{r}, t)|^2 = |u(\vec{r})|^2 \equiv \rho_E(\vec{r})$$

²¹

$$\left[\frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt} \right] = \frac{\text{azione}}{[f]} \left[\frac{df}{dt} \right] = \frac{\text{EN} \cdot t}{[f]} \frac{[f]}{t} = \text{ENERGIA}$$

quindi la densità di probabilità è costante nel tempo. Questo implica che le densità di probabilità delle altre osservabili che dipendono solamente dalla posizione siano anche costanti. Inoltre la trasformata di Fourier di Ψ al tempo t è determinata dalla trasformata di Fourier di $u(\vec{r})$, dunque anche la densità di impulso (e delle osservabili che ne dipendono) è costante.

2. Sono stati di **definita energia**.

In meccanica classica sappiamo che l'energia totale è rappresentata dall'hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

che in Meccanica Quantistica si traduce nell'operatore hamiltoniano [2.2.4](#) già visto

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$$

e posso notare che l'equazione [2.3.3](#) la posso scrivere come un'equazione agli autovalori di $\hat{H}$

$$\hat{H}u(\vec{r}) = Eu(\vec{r})$$

ma posso aggiungere il pezzo oscillante con la dipendenza da t e continua ad essere un'equazione agli autovalori di $\hat{H}$

$$\hat{H}\Psi_E = E\Psi_E$$

e posso verificare che nello stato descritto dal Ψ_E il valor medio dell'energia è E ed è a varianza nulla:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_{\Psi_E} &\equiv \int d^3r \Psi_E^*(\vec{r}, t) \hat{H} \Psi_E(\vec{r}, t) = \int d^3r u_E^*(\vec{r}) \underbrace{\hat{H} u_E(\vec{r})}_{Eu(\vec{r})} \\ &= \int d^3r u_E^*(\vec{r}) E u_E(\vec{r}) = E \\ \langle H^2 \rangle_{\Psi_E} &\equiv \int d^3r \Psi_E^*(\vec{r}, t) \hat{H}^2 \Psi_E(\vec{r}, t) = \int d^3r u_E^*(\vec{r}) \hat{H} \underbrace{\hat{H} u_E(\vec{r})}_{Eu(\vec{r})} \\ &= E \int d^3r u_E^*(\vec{r}) \underbrace{\hat{H} u_E(\vec{r})}_{Eu(\vec{r})} = E^2 \end{aligned}$$

quindi

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = 0$$

ma ricorda che se la varianza è nulla, allora ogni elemento del campione deve avere lo stesso valore. Concludiamo che una soluzione separabile ha la proprietà che *ogni misura dell'energia totale restituisce con certezza il valore E* .

3. La soluzione generale dell'equazione di Schrodinger completa può essere espressa come combinazione lineare di stati stazionari.

Questa cosa la verificheremo in esempi concreti, ma in generale vale che risolvendo l'equazione stazionaria possiamo trovare un'infinità numerabile di soluzioni $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ con associata a ciascuna un valore di energia $E \{E_1, E_2, \dots, E_n\}$ e che risolve un'equazione agli autovalori

$$\hat{H}u_i(\vec{r}) = E_i u_i(\vec{r}) \quad i = \{1, 2, \dots, n\}$$

quindi c'è per ciascuna una funzione d'onda diversa per ogni valore di energia

$$\Psi_i(\vec{r}, t) = u_i(\vec{r}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_i t\right\}$$

e come si può verificare una combinazione lineare di queste funzioni d'onda risolve l'equazione di Schrodinger 2.2.5 completa²². Scriviamo la soluzione più generale come

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(\vec{r}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_n t\right\} \quad c_n \in \mathbb{C} \quad (2.3.5)$$

NOTA questa cosa verrà postulata meglio in un prossimo capitolo in cui parleremo dei principi fondativi della Meccanica Quantistica .

Faccio un breve riassunto di quello detto fin'ora in questa sezione.

Il nostro fine ultimo è quello di determinare la funzione d'onda $\Psi(\vec{r}, t)$ del sistema che consideriamo risolvendo l'equazione di Schrodinger. Ci viene dato un potenziale indipendente dal tempo $V(\vec{r})$ e la condizione iniziale $\Psi(\vec{r}, 0)$. Per raggiungere il nostro scopo e da $\Psi(\vec{r}, 0)$ determinare la funzione d'onda in ogni istante successivo, avendo $V(\vec{r})$ risolviamo l'equazione di Schrodinger indipendente dal tempo e troviamo un insieme di soluzioni $\{u_n\}$ ciascuna con il suo valore di energia E_n . A questo punto cerchiamo di scrivere $\Psi(\vec{r}, 0)$ come una combinazione lineare delle soluzioni stazionarie

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(\vec{r})$$

e per costruire $\Psi(\vec{r}, t)$ basta moltiplicare ogni termine che abbiamo nella combinazione lineare per il suo specifico fattore oscillante, così otteniamo la soluzione 2.3.5.

²²Non risolve quella stazionaria perché combino diverse energie e abbiamo visto al punto sopra che una soluzione di quella stazionaria ha definita energia.

Osservazioni

- Nel punto 1 delle caratteristiche delle funzioni stazionarie abbiamo detto che la probabilità e i valori attesi sono indipendenti dal tempo e appunto li chiamiamo stati stazionari, ma attenzione che una funzione d'onda scritta come combinazione lineare di stati stazionari (la funzione 2.3.5) non rappresenta uno stato stazionario.

Ad esempio

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}, 0) &= c_1 u_1(\vec{r}) + c_2 u_2(\vec{r}) \\ \Rightarrow \Psi(\vec{r}, t) &= c_1 u_1(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + c_2 u_2(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \\ |\Psi(\vec{r}, t)|^2 &= \rho(\vec{r}, t) = |c_1|^2 |u_1(\vec{r})|^2 + |c_2|^2 |u_2(\vec{r})|^2 \\ &\quad + 2 \operatorname{Re} \left\{ \left[c_1^* c_2 u_1^*(\vec{r}, t) u_2(\vec{r}) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (E_2 - E_1) t \right\} \right] \right\}\end{aligned}$$

quindi c'è una dipendenza dal tempo e la probabilità di posizione oscilla con una frequenza angolare $\omega_{21} = \frac{1}{\hbar} (E_2 - E_1)$.

- Gli autovalori dell'equazione

$$\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n$$

sono reali. Cosa non sorprendente visto che diamo l'interpretazione fisica dell'energia totale alla costante E e se dessimo all'energia una parte immaginaria la normalizzazione degli stati stazionari non sarebbe conservata (la densità cresce nel tempo):

$$E_n \longrightarrow E_n + i\Gamma_n \Rightarrow |\Psi_n(\vec{r}, t)|^2 = |u_n(\vec{r})|^2 \exp \left\{ -\frac{2\Gamma_n}{\hbar} t \right\}$$

Anche quest'osservazione che gli autovalori di osservabili fisiche debbano essere reali verrà vista meglio nei principi fondativi della Meccanica Quantistica .

- Possiamo dare un'interpretazione statistica dei coefficienti della combinazione lineare 2.3.5. Quando nella sezione §2.1.2 abbiamo sovrapposto stati di definito impulso (numero d'onda) tramite la trasformata di Fourier abbiamo assegnato al modulo quadro $|A(\vec{k}, t)|^2$ il significato di densità di probabilità di numero d'onda. Anche ora possiamo fare la stessa cosa visto che stiamo sovrapponendo stati di definita energia, quindi interpretiamo i coefficienti c_n come **ampiezza di probabilità per l'energia** e diciamo che se si effettua una misura di energia su un sistema descritto da 2.3.5 allora possiamo ottenere il valore E_n con probabilità $|c_n|^2$.

Il problema in questo caso è che quando lo facevo con $A(\vec{k}, t)$ avevo a disposizione i teoremi dell'analisi armonica, mentre ora la condizione

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

non è gratuita, ma verificheremo in seguito che è vera.

In più da adesso abbiamo due modi per calcolare il valor medio dell'energia (quello della Meccanica Quantistica e quello statistico):

$$\langle H \rangle = \int d^3r \Psi^* \hat{H} \Psi = \sum_n |c_n|^2 E_n$$

2.3.1 Problemi unidimensionali stazionari

Sfruttando l'equazione stazionaria in una dimensione 2.3.3 siamo in grado di risolvere una serie di problemi caratterizzati da potenziali definiti a tratti. Prima di fare ciò però vediamo delle proprietà di 2.3.3 che alla fine è un'EDO di secondo ordine.

- a. Per fissata energia E e generico $V(x)$ allora la soluzione la posso scrivere genericamente come una combinazione lineare di 2 soluzioni particolari linearmente indipendenti

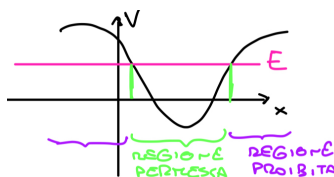
$$\Psi_E(x) = Au_E(x) + Bv_E(x)$$

- b. Date due soluzioni ad E fissato possiamo vederne il Wronskiano

$$W_E(x) = u'_E v_E - u_E v'_E$$

che in realtà è costante in x , quindi $W_E(x) = W_E$ (si dimostra calcolando $\frac{dW_E}{dx}$). Dal Wronskiano si vede se due soluzioni sono linearmente dipendenti, infatti è condizione necessaria e sufficiente affinché due soluzioni siano linearmente dipendenti che $W_E = 0$ (metti $W_E = 0$ ed integra).

- c. Però bisogna anche notare che per soluzioni normalizzabili si può concludere che gli autovalori dell'hamiltoniana E_n sono non degeneri, il che vuol dire che u_n ed v_n sono proporzionali. Infatti se le soluzioni sono normalizzabili, allora devono tendere a 0 per $x \rightarrow \pm\infty$, ma so che W_n è costante in x , quindi se deve annullarsi in $\pm\infty$ allora è nullo ovunque.
- d. Come in meccanica classica possiamo individuare delle regioni permesse e proibite in base ai valori di E e $V(x)$.



Denotiamo le regioni in cui $E \geq V(x)$ le **regioni classicamente permesse** e quelle con $V(x) > E$ come **classicamente proibite**. Questa distinzione vale anche in Meccanica Quantistica, perché se scriviamo l'equazione 2.3.3 come

$$\frac{\Psi''(x)}{\Psi(x)} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)$$

possiamo vedere che: nelle regioni permesse Ψ è oscillante in quanto il segno tra Ψ e Ψ'' è opposto. Nelle regioni proibite invece Ψ'' e Ψ hanno stesso segno e questo implica che se $E < V(x) \forall x$ allora la Ψ non può essere normalizzabile, quindi, in questa situazione non ci sono soluzioni accettabili, come suggerito dalla situazione classica.

- e. Nel caso dovessimo avere potenziali simmetrici $V(x) = V(-x)$ allora anche le soluzioni normalizzabili hanno parità definita, cioè $\Psi_n(x) = \pm \Psi_n(-x)$. Infatti se $\Psi_n(x)$ è soluzione di Schrodinger allora

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_n(x)}{dx^2} + V(x) \Psi_n(x) = E \Psi_n(x)$$

e se faccio $x \rightarrow -x$ allora ottengo l'equazione

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_n(-x)}{dx^2} + V(-x) \Psi_n(-x) = E \Psi_n(-x)$$

in cui però posso scrivere $V(x) = V(-x)$ e quindi anche $\Psi_n(-x)$ è soluzione. Ma sapendo che per soluzioni normalizzabili a fissato E_n , lo spazio delle soluzioni è unidimensionale (E_n non è degenera), dev'esserci una sola soluzione, quindi

$$\begin{aligned} \Psi(x) = c\Psi(-x) &\implies \int dx |\Psi(x)|^2 = |c|^2 \int dx |\Psi(-x)|^2 \implies 1 = c^2 \\ &\implies c = \pm 1 \end{aligned}$$

quindi Ψ o è pari oppure dispari²³.

²³Questa cosa è esprimibile meglio in termini dell'operatore P di parità, ma vedi meglio gli appunti Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.mq2 del corso di Meccanica Quantistica 2

Come già detto si può utilizzare l'equazione 2.3.3 per risolvere una serie di potenziali costanti a tratti in una dimensione. Nota che la maggior parte dei problemi di questo tipo sono risolti nelle lezioni di esercitazione del professor Badger o se vuoi vedere in Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Regis. Però in generale sono casi in cui

$$\exists \{x_1, \dots, x_n\} / V(x) = V_i \quad \text{per} \quad x_i < x < x_{i+1}$$

e generalmente si distinguono due casi

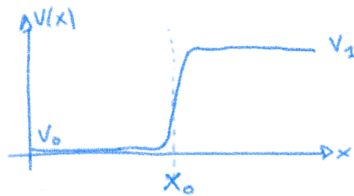


e prima ancora di iniziare a parlare di cose specifiche possiamo vedere degli aspetti generali:

- a. Chiediamo sempre la continuità della funzione d'onda Ψ e della sua derivata Ψ' per potenziali discontinui. Ma la discontinuità di $V(x)$ va considerata come una modellizzazione di un potenziale rapidamente variabile (vedi figura sotto). Possiamo vedere che partendo dall'equazione stazionaria

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} &= \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \Psi(x) \\ \Rightarrow \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} dx \frac{d^2 \Psi}{dx^2} &= \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x_0+\delta} - \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x_0-\delta} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} dx [V(x) - E] \Psi(x) \end{aligned}$$

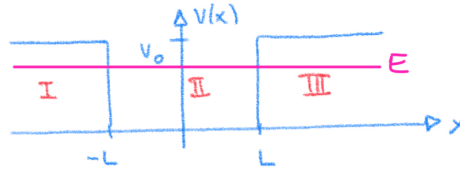
Da cui noto che se $V(x)$ è limitato in x_0 allora il limite $\delta \rightarrow 0$ esiste e la derivata è continua, mentre una discontinuità $V(x) \rightarrow \infty$ non mi fa imporre la continuità della derivata di Ψ , ma mi rimane quella di Ψ .



Le condizioni che in generale dobbiamo imporre alla funzione d'onda e alla sua derivata derivano da quello che richiediamo alla funzione d'onda (ricorda cosa abbiamo detto in 2.1.1) ossia che sia monodroma (non c'entra con quello che stiamo dicendo) e continua in tutto lo spazio. Affinché la funzione d'onda sia continua in tutto lo spazio dobbiamo ovviamente richiedere la sua continuità e pure quella della sua derivata

che devono esserci anche sulle superfici su cui il potenziale presenta delle discontinuità. L'unico caso in cui non possiamo richiedere la continuità di Ψ' è quando abbiamo discontinuità infinite del potenziale (lo abbiamo visto appena sopra), ma in questo caso la particella quantistica non può penetrare all'interno di regioni in cui $V = \infty$, cioè in queste regioni deve valere $\Psi = 0$. La continuità di Ψ in questi casi impone che Ψ si annulli sulla superficie di queste discontinuità.²⁴

b. Consideriamo il caso ad esempio $0 < E < V(x)$



in cui

$$\begin{cases} V = 0 & \text{per } -L < x < L \\ V = V_0 & \text{per } |x| > L \end{cases}$$

Classicamente mi aspetterei che una particella con quella energia rimanga indefinitivamente dentro la buca, ma proviamo a vedere in caso quantistico. Vediamo cosa ci dice l'equazione di Schrodinger nelle varie regioni

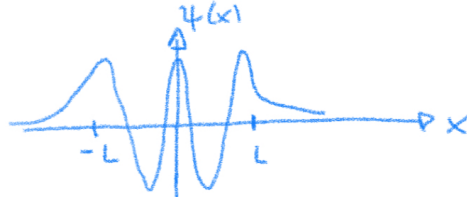
$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi}{dx^2} - \beta^2\Psi &= 0 & \beta &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} > 0 & \text{per } -L < x < L \\ \frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi &= 0 & k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} & \text{per } |x| > L \end{aligned}$$

che porta alle soluzioni

$$\begin{cases} \Psi_I(x) = Ce^{\beta x} \\ \Psi_{II}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \Psi_{III}(x) = De^{-\beta x} \end{cases}$$

in cui si è già imposta la condizione di normalizzazione ($\Psi \rightarrow 0$ per $x \rightarrow \pm\infty$), ma a cui manca ancora da imporre le condizioni di continuità di Ψ e Ψ' in $x = \pm L$. Più avanti faremo i conti ma per ora basta sapere che la forma generale di Ψ sarà del tipo:

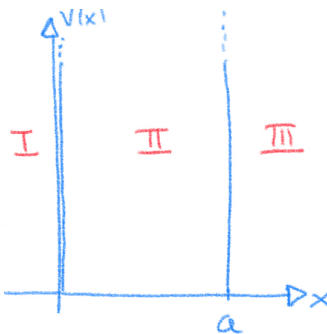
²⁴Un discorso dettagliato sui vari valori dell'energia E nelle varie regioni in cui il potenziale U assume valori diversi (anche infiniti) è fatto da Landau nel *paragrafo 18* del *capitolo 3* (pag. 75) di *Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante*.L3. È un discorso molto teorico è forse un po' troppo per questo corso, sarà fatto bene con le relative dimostrazioni al corso di Meccanica Quantistica 2, vedi *Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante*.mq2.



in cui noto una cosa particolare della Meccanica Quantistica, ossia che la funzione d'onda non si annulla per valori $|x| > L$, quindi la probabilità di trovare la particella al di fuori della buca, quindi al di fuori dalla zona classicamente permessa, non è nulla. Questo si chiama **effetto tunnel**.

2.3.2 Buca di potenziale infinita

Ora, vogliamo risolvere il problema della buca con pareti infinite e ci mettiamo in una configurazione asimmetrica, ovvero, $V = 0$ per $0 < x < a$ che per alcuni aspetti semplifica il problema, ma oscura totalmente la simmetria²⁵.



Rifacendo quello che abbiamo accennato nel punto **b.** della pagina precedente abbiamo le soluzioni

$$\begin{cases} \Psi_I(x) = Ce^{\beta x} + Fe^{-\beta x} \\ \Psi_{II}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \Psi_{III}(x) = Ee^{\beta x} + De^{-\beta x} \end{cases}$$

in cui se imponiamo la normalizzazione troviamo $F = E = 0$ ottenendo come prima

$$\begin{cases} \Psi_I(x) = Ce^{\beta x} \\ \Psi_{II}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \Psi_{III}(x) = De^{-\beta x} \end{cases}$$

²⁵Per ora il fatto che non vediamo la parità della funzione d'onda non ci interessa, ma quando cominceremo a parlare di ICOC sarà importante essere in grado di individuare tutte le osservabili del problema per eliminare la degenerazione. Per ora ignora tutto ciò.

ma se ricordiamo che

$$\beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

allora vediamo che nelle regioni proibite I e III $\beta \rightarrow \infty$ e quindi $\Psi_I \rightarrow 0$ per $x \rightarrow -\infty$ e $\Psi_{III} \rightarrow 0$ per $x \rightarrow +\infty$. Quindi otteniamo che la funzione d'onda si trova solamente nella regione II e per semplicità scrivo solamente $\Psi_{II} = \Psi$ e mi conviene scriverla esplicitando gli esponenziali complessi e scirvere

$$\Psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{con} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Occorre ancora imporre le condizioni di continuità in $x = 0$ e $x = a$ di Ψ . Solamente di Ψ e non della derivata perché abbiamo già visto che se $V \rightarrow \infty$ non possiamo imporla. La imponiamo in $x = 0$

$$\Psi(0) = \Psi_I(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0 \quad \Rightarrow \quad \Psi(x) = A \sin(kx)$$

e se la imponiamo anche in $x = a$

$$\Psi(a) = \Psi_{III}(a) = 0 \quad \Rightarrow \quad ka = n\pi \quad \Rightarrow \quad k \rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 1, 2, \dots$$

Nota che $n \neq 0$ poiché implicherebbe $\Psi = 0$, ovvero, l'assenza della particella. Nota che le soluzioni sono onde stazionarie (di probabilità) e che la seconda condizione al contorno non mi fissa la costante A , ma *quantizza* il numero d'onda e quindi l'energia

$$k_n = \frac{n\pi}{a} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \Rightarrow \quad \frac{n^2\pi^2}{a^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad \boxed{E_n = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}} \quad (2.3.6)$$

che sono tutte le sole energie possibili. Le energie presentano uno spettro discreto perché la particella è confinata.

Posso fissare la costante A imponendo la normalizzazione

$$\int_0^a |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad \rightarrow \quad |A|^2 \int_0^a \sin^2(k_n x) dx = |A|^2 \frac{a}{2} \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

così ottengo anche l'espressione per la funzione d'onda nel caso di buca infinita

$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)} \quad (2.3.7)$$

Facciamo alcune osservazioni su questo problema.

- Come previsto gli autovalori E_n non sono degeneri (ho una sola Ψ_n per ogni E_n)

- Come detto in generale parlando dell'equazione stazionaria, le autofunzioni Ψ_n hanno parità definita rispetto al centro della buca (se fai il cambio di coordinate si vede ancora meglio). In questo caso Ψ_{2n} è dispari rispetto $a/2$, mentre Ψ_{2n+1} è pari.
- La funzione d'onda ha $n + 1$ nodi in $0 \leq x \leq a$
- L'energia minima E_1 non è zero, questo perché se confino una particella dentro una buca, questa non rimarrà mai ferma, se lo facesse violerebbe il principio di indeterminazione (se la x va a zero, l'impulso deve essere grande)²⁶.
Se ad esempio ti calcoli $\langle x \rangle_n, \langle x^2 \rangle_n, \langle p \rangle_n, \langle p^2 \rangle_n$ $[\frac{a}{2}, \frac{a^2}{3}, 0, (\frac{n\pi\hbar}{a})^2]$ allora puoi verificare che $\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$ per ogni Ψ_n $[\frac{n\pi\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2}]$ (nota che $\langle p \rangle = 0$ poiché Ψ_n contiene entrambi i termini $p = \pm \hbar k$).

- Possiamo anche vedere in questo caso la proprietà che il caso classico è sempre una media del caso quantistico, quando $n \rightarrow \infty$. Noi non vediamo che le energie sono discrete poiché

$$E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} [(n+1)^2 - n^2] = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} [2n+1]$$

ma

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} \sim \frac{1}{n}$$

che tende a zero se $n \rightarrow \infty$. La densità di probabilità classica è una media su tanti n del caso quantistico



Possiamo anche fare i conti:

$$\text{so } \Delta x = v \Delta t \implies \Delta t = \frac{\Delta x}{v} \implies dt = \frac{dx}{v}$$

e so calcolare il tempo che ci mette la particella per andare da 0 ad a ossia

$$\frac{T}{2} = \frac{a}{v}$$

quindi

$$dP_{classica}(x) = \rho_{classica}(x) dx \equiv \frac{dt}{T/2} = \frac{dx}{v} \frac{v}{a} = \frac{dx}{a}$$

²⁶Cosa analoga succederà per l'oscillatore armonico visto che il suo potenziale è comunque infinito, ma solamente di forma diversa (parabola).

nel nostro caso vediamo

$$\rho_{cl.}(x) = \frac{1}{a}$$

ma potrei anche vedere che

$$\rho_n = |\Psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

che mediato mi da esattamente $1/a$.

- Possiamo anche sfruttare questo caso particolare per verificare l'ortonormalità e la completezza degli stati Ψ_n . Ci aspettiamo (per le considerazioni dette per l'equazione stazionaria) una soluzione generale dell'equazione di Schrodinger completa come una combinazione lineare delle Ψ_n con l'opportuna dipendenza da t :

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

scrivendo questo in sostanza ci aspettiamo che le Ψ_n siano una base spazio vettoriale ($L^2(0, a)$) delle soluzioni (degli stati fisici realizzabili). Possiamo effettivamente verificare che le Ψ_n sono una base dello spazio fisico, vedendo l'ortonormalità e successivamente la completezza.

- Ho ben definito il prodotto scalare in $L^2(0, a)$

$$\begin{aligned} (\Psi_m, \Psi_n) &= \int_0^a dx \Psi_m^*(x) \Psi_n(x) \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a dx \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \\ \sin \alpha \sin \beta &= \frac{1}{2} (\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)) \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a dx \frac{1}{2} \left[\cos\left(\frac{(m-n)\pi}{a}x\right) - \cos\left(\frac{(m+n)\pi}{a}x\right) \right] = \delta_{m,n} \end{aligned}$$

- Sfruttando il teorema di Dirichlet (analisi armonica) posso dire che

$$\forall \Psi(x, 0) \in L^2(0, a) \quad \exists \{c_n\} \quad / \quad \Psi(x, 0) = \sum c_n \Psi_n(x)$$

e in questo senso posso dire che le Ψ_n sono una base ortonormale nello spazio di Hilbert degli stati fisici accessibili.

- Data una specifica $\Psi(x, 0)$ è possibile determinare tutti i c_n . Ho

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x)$$

e segue che

$$\begin{aligned}
 (\Psi_m, \Psi) &= \int_0^a dx \Psi_m^*(x) \Psi(x, 0) \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_0^a dx \Psi_m^*(x) \Psi_n(x) \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{n,m} = c_m
 \end{aligned}$$

e in più per soluzioni normalizzate posso vedere:

$$\begin{aligned}
 \int_0^a dx |\Psi(x, t)|^2 &= \int_0^a dx |\Psi(x, 0)|^2 = 1 \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* \sum_{m=1}^{\infty} c_m \int_0^a dx \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n c_m \delta_{n,m} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2
 \end{aligned}$$

che legittima l'interpretazione di $|c_n|^2$ come probabilità di trovare E_n effettuando una misura di energia sullo stato descritto da Ψ .

- Effettivamente vediamo che il valor medio dell'energia nello stato descritto da Ψ è correttamente rappresentato dai c_n :

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle_{\Psi} &= \int_0^a dx \Psi^*(x, t) \hat{H} \Psi(x, t) \\
 &= \sum_{n,m=1}^{\infty} c_n^* c_m \int_0^a dx \Psi_n^*(x) \underbrace{\hat{H} \Psi_m(x)}_{=E_m \Psi_m(x)} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} \\
 &= \sum_{n,m=1}^{\infty} c_n^* c_m e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} E_m \delta_{n,m} \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n |c_n|^2
 \end{aligned}$$

come mi aspetterei dalla definizione statistica.

In sostanza data una qualsiasi condizione iniziale io posso fare i prodotti scalari con le funzioni stazionarie per trovare i c_n , una volta trovati posso scrivere la $\Psi(x, 0)$ come combinazione lineare, ci appiccico affianco la dipendenza temporale corretta e ho risolto completamente il problema, poiché posso anche calcolarmi tutte le probabilità di tutte le osservabili al tempo t .

Capitolo 3

Una nuova notazione

Questo è un capitolo sulla notazione (solo inizialmente), ma contiene concetti fondamentali, motivo per cui **non** è da saltare.

Intorno agli anni 30' del ventesimo secolo Paul Dirac ha trovato un formalismo per trattare la Meccanica Quantistica in modo decisamente più compatto e semplice, talmente tanto che questo formalismo è rimasto anche per le teorie successive (vedi QFT). Prima di trattare questo formalismo completamente nuovo ricapitoliamo fin dove siamo arrivati con lo studio della Meccanica Quantistica e le domande aperte che abbiamo lasciato.

- Abbiamo sempre associato delle osservabili classiche, quali impulso, energia, posizione, con operatori quantistici

$$x \rightarrow \hat{x} \quad ; \quad p \rightarrow \hat{p} \quad ; \quad E \rightarrow \hat{H}$$

e questa corrispondenza dovremo renderla più precisa e rigorosa.

- Abbiamo notato, anche se non ci siamo soffermati molto, che operatori associati ad osservabili classiche hanno autovalori reali e autovettori organizzati in basi ortonormali. Dovremo capire meglio questa situazione.
- Abbiamo notato che alcuni operatori hanno autovalori in uno spettro discreto (energia) mentre altri in uno spettro continuo (impulso e posizione) e forse con un piccolo cenno abbiamo visto che autovettori di operatori con spettro continuo sono funzioni d'onda non normalizzabili (vedi il caso di particella libera). Dovremo capire meglio come trattare queste funzioni, come interpretarle statisticamente e quando è lecito considerarle¹.

¹Questo sarà uno dei primi argomenti del corso di Meccanica Quantistica 2.

- Abbiamo visto, anche solo nel caso della particella libera, che lo stato di una particella quantistica può essere rappresentato in modi molti diversi (ad esempio $\Psi(x)$, $A(k)$, $\{c_n\}$), ma che comunque in tutti i casi l'evoluzione temporale la determiniamo sempre con l'equazione di Schrodinger. Come possiamo generalizzare lo stato di una particella e come mettiamo in relazione le possibili rappresentazioni.

Gli appunti che seguiranno riprendono molto, se non in modo totale le note delle lezioni Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea, ma si è scelto il più delle volte di essere molto sintetici su concetti o conti banali. Se si vogliono vedere appunti dettagliati si vedano le lezioni 12, 13, appunto, di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea.

3.1 Bra e Ket

Come modo di unificare le diverse rappresentazioni dello stato fisico, Dirac trova un modo per indicare un generico vettore nello spazio (di Hilbert) degli stati che rappresenta. In questo modo si generalizza il tutto e al posto di dare una specifica forma dello stato (Ψ nello spazio delle x , A nello spazio dei numeri d'onda, etc.) lo si indica genericamente e poi si "proietta" (in seguito vedremo che significa) nello spazio che ci interessa al momento che ci è più conveniente.

Poniamoci in una situazione in cui sono note un certo insieme di proprietà $\{\alpha_i\}$ con $i = 1, \dots, n$ sullo stato fisico. Denotiamo questo insieme con α e supponiamo che sia massimale, cioè che identifichi univocamente il vettore e che dato questo insieme io riesco ad identificare tutto quello che mi serve (è una lista di proprietà indipendenti). Indichiamo il vettore con il seguente simbolo

$$|\alpha\rangle \quad \mathbf{KET}$$

però, noi sappiamo che lo spazio degli stati fisici è metrico, ossia ammette un prodotto scalare, noto il prodotto scalare possiamo definire che cos'è l'applicazione duale (per definizioni dettagliate vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Sciuto2) e quindi i vettori duali, interpretabili sia come vettori riga (ossia i ket trasposti) sia come applicazioni lineari dallo spazio di Hilbert allo spazio $\mathbb{C}$. Definiamo i vettori duali come

$$\langle\beta| \quad \mathbf{BRA}$$

che essendo definiti dal duale sono appunto per definizione:

$$\begin{aligned} \langle\beta| : \mathcal{H} &\longrightarrow \mathbb{C} \quad / \quad \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \\ &: |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \longmapsto \langle\beta|\alpha\rangle \in \mathbb{C} \end{aligned}$$

e nel nostro caso $\langle \beta | \alpha \rangle = (\langle \beta | \alpha \rangle)^*$ e $\langle \alpha | \alpha \rangle > 0$.

Nota che definendo $|\alpha\rangle$ come un generico vettore in cui identifico un generico stato, questo unifica le varie possibilità:

$$\Psi_\alpha(x) \quad ; \quad A_\alpha(k) \quad ; \quad c_n^{(\alpha)} \quad \dots$$

e che il prodotto definito operativamente come sopra non cambia se cambiamo rappresentazione. Vediamolo facilmente prendendo $|\alpha\rangle = \Psi_\alpha(\vec{r})$ e $\langle \beta| = \Psi_\beta^*(\vec{r})$, conseguentemente si ha

$$\langle \beta | \alpha \rangle \equiv \int d^3r \Psi_\beta^*(\vec{r}) \Psi_\alpha(\vec{r}) \quad (3.1.1)$$

però potremmo utilizzare la relazione 2.1.5 che mi porta nello spazio delle k ed ho

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k d^3k' d^3r A_\beta^*(\vec{k}') A_\alpha(\vec{k}) e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} \quad (3.1.2)$$

$$= \int d^3k d^3k' A_\beta^*(\vec{k}') A_\alpha(\vec{k}) \delta(\vec{k}' - \vec{k}) \quad (3.1.3)$$

$$= \int d^3k A_\beta^*(\vec{k}) A_\alpha(\vec{k}) \quad (3.1.4)$$

che è la stessa definizione che avremmo trovato se avessimo considerato $|\alpha\rangle = A_\alpha(\vec{k})$ e $\langle \beta| = A_\beta^*(\vec{k})$. Se invece nella 3.1.1 introduciamo

$$\Psi_\alpha(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(\alpha)} \Psi_n(\vec{r}) \quad ; \quad \Psi_\beta(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(\beta)} \Psi_n(\vec{r})$$

otteniamo

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \sum_{n,m=1}^{\infty} \left(c_n^{(\beta)} \right)^* c_m^{(\alpha)} \int d^3r \Psi_n^*(\vec{r}) \Psi_m(\vec{r}) \quad (3.1.5)$$

$$= \sum_{n,m=1}^{\infty} \left(c_n^{(\beta)} \right)^* c_m^{(\alpha)} \delta_{n,m} \quad (3.1.6)$$

$$= \sum_{n,m=1}^{\infty} \left(c_n^{(\beta)} \right)^* c_n^{(\alpha)} \quad (3.1.7)$$

che è quella che mi sarei aspettato se avessi preso gli opportuni $|\alpha\rangle$ e $\langle \beta|$.

A questo punto si potrebbe fare un riassunto di cose già viste in GAL I, ma utilizzando il linguaggio dei Bra e dei Ket. È proprio ora che quello che accennavo prima avviene. Potrei risultare un po' frettoloso o sommario

in alcuni tratti di questa parte, per questo motivo se vuoi una trattazione completa rivedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea.

Un insieme di vettori $\{|i\rangle\}$ in uno spazio normato V di dimensione d è una base O.N. sse:

$$\begin{aligned} \forall |v\rangle \in V \quad , \quad |v\rangle &= \sum_{i=1}^d c_i |i\rangle \quad c_i \in \mathbb{C} \\ \langle i|j\rangle &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

ne segue che:

$$\forall |v\rangle \in V \quad \langle i|v\rangle = \langle i| \left(\sum_{j=1}^d c_j |j\rangle \right) = \sum_{j=1}^d c_j \langle i|j\rangle = \sum_{j=1}^d c_j \delta_{ij} = c_i$$

La prima condizione della base O.N. implica la completezza:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^d c_i |i\rangle = \sum_{i=1}^d \langle i|v\rangle |i\rangle = \sum_{i=1}^d |i\rangle \langle i|v\rangle \implies \boxed{\sum_{i=1}^d |i\rangle \langle i| = \mathbb{1}_{d \times d}}$$

questa è la **relazione di completezza**, sarà fondamentale per tutta la trattazione della Meccanica Quantistica, ma nota che questa è una notazione in dimensione finita e in uno spettro discreto, noi avremo a che fare con dimensioni infinite e anche con spettri continui.

3.2 Operatori Lineari

Continuiamo il ripasso di GAL I parlando anche di operatori lineari. Avendo richiesto la validità del principio di sovrapposizione avremo a che fare solo con operatori lineari, che nel caso di dimensione finita d sono rappresentabili come matici $d \times d$ (nel caso infinito saranno matrici potenzialmente infinite) la cui azione è definita come

$$\begin{aligned} |v'\rangle &= M |v\rangle \\ M \left(\alpha |v_1\rangle + \beta |v_2\rangle \right) &= \alpha M |v_1\rangle + \beta M |v_2\rangle = \alpha |v'_1\rangle + \beta |v'_2\rangle \end{aligned}$$

si può vedere cosa sono gli elementi di matrice con il linguaggio dei Bra e Ket:

$$\begin{aligned} |v'\rangle &= \sum_{j=1}^d v'_j |j\rangle \equiv M |v\rangle = M \sum_{i=1}^d v_i |i\rangle = \sum_{i=1}^d v_i (M |i\rangle) \\ \Rightarrow v'_j &\doteq \langle j | v' \rangle = \langle j | \left(\sum_{i=1}^d v_i (M |i\rangle) \right) = \sum_{i=1}^d v_i \langle j | M |i\rangle = \sum_{i=1}^d M_{ji} v_i \end{aligned}$$

dunque gli elementi di matrice dell'operatore M nella base O.N. $\{|i\rangle\}$ sono dati da

$$\boxed{M_{ij} = \langle i | M | j \rangle} \quad (3.2.1)$$

quindi più avanti quando avremo a che fare con operatori in Meccanica Quantistica, basterà prendere una base, fare il prodotto scritto sopra, quindi far agire l'operatore sul ket oppure sul bra e anche se sappiamo solo com'è fatta l'azione di un certo operatore riusciremo a scriverlo come una matrice.

Attenzione il prodotto scalare scritto in 3.2.1 può essere interpretato sia come l'azione di M su $|j\rangle$ sia come l'azione di M a sinistra su $\langle i|$. Questa cosa la possiamo fare a cuor leggero però solo in alcuni casi, ossia, quando gli operatori sono hermitiani, altrimenti l'azione a sinistra di un operatore è leggermente diversa². Definiamo:

$$M^T / \langle i | M | j \rangle = \langle j | M^T | i \rangle \quad \forall |i\rangle, |j\rangle \quad \text{Trasposto di } M$$

diciamo che M è **Simmetrico** se

$$M = M^T \quad \text{ovvero} \quad \langle i | M | j \rangle = \langle j | M | i \rangle \quad \forall |i\rangle, |j\rangle \quad \text{ovvero} \quad M_{ij} = M_{ji}$$

Definiamo inoltre

$$M^\dagger / \langle i | M | j \rangle = \langle j | M^\dagger | i \rangle^* \quad \forall |i\rangle, |j\rangle \quad \text{Aggiunto di } M$$

diciamo che M è **Hermitiano** se

$$M = M^\dagger \quad \text{ovvero} \quad \langle i | M | j \rangle = \langle j | M | i \rangle^* \quad \forall |i\rangle, |j\rangle \quad \text{ovvero} \quad M_{ij} = M_{ji}^*$$

Nota che in dimensione finita le definizioni di operatore autoaggiunto ed hermitiano sono equivalenti, ma quando si va in dimensione infinita si devono fare discorsi relativi ai domini degli operatori, lo vedremo in seguito³.

²vedi nel capitolo relativo all'oscillatore armonico nel caso algebrico l'azione degli operatori $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$.

³Brevemente e malemalente si può dire che in dimensione finita il dominio di un operatore è ancora uno spazio vettoriale e l'operatore M è un omomorfismo tra V e il dominio e lo spazio di arrivo, quando si va in dimensione infinita il dominio dell'operatore potrebbe avere natura diversa dallo spazio vettoriale di partenza V . Molte volte il dominio è lo spazio V più la sua chiusura, succede ad esempio con l'operatore derivata. Se interessato vedi capitolo 2.1 di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Sciuto2 in cui fa discorsi sull'argomento.

Parliamo ora dell'**equazione agli autovalori** di un operatore. Attrezzo fondamentale poi per tutta la trattazione della Meccanica Quantistica . Nella notazione dei Bra e Ket scriviamo

$$M |m\rangle = m |m\rangle \quad \text{dove } m \in \mathbb{C} \quad (3.2.2)$$

se prendiamo una base O.N. $\{|i\rangle\}$ e ci ricordiamo la relazione di completezza, possiamo "proiettare"⁴ su $\langle i|$

$$\begin{aligned} \langle i| M |m\rangle &= m \langle i|m\rangle \\ \implies \sum_j \langle i| M |j\rangle \langle j|m\rangle &= m \langle i|m\rangle \\ \implies \sum_j M_{ij}(\vec{m})_j &= m(\vec{m})_i \end{aligned}$$

abbiamo trovato la notazione pre Bra e Ket, in cui compare l'elemento di matrice M_{ij} e le componenti i e j del vettore $\vec{m}$.

Vediamo delle **proprietà** fondamentali di operatori hermitiani:

- Gli autovalori di un operatore hermitiano sono reali. Sappiamo

$$M |m\rangle = m |m\rangle \quad M = M^\dagger$$

allora⁵

$$\begin{aligned} \langle m| M |m\rangle &= m \langle m|m\rangle \\ \langle m| M |m\rangle &= \left(\langle m| M^\dagger |m\rangle \right)^* = (\langle m| M |m\rangle)^* = m^* (\langle m|m\rangle)^* \\ \implies m \langle m|m\rangle &= m^* \langle m|m\rangle^* = m^* \langle m|m\rangle \\ \implies m &= m^* \end{aligned}$$

- Gli autovettori di un operatore hermitiano appartenenti ad autovalori diversi sono ortogonali. Prendiamo

$$M |m_i\rangle = m_i |m_i\rangle \quad ; \quad M |m_j\rangle = m_j |m_j\rangle$$

e sappiamo che $M = M^\dagger$. Possiamo vedere l'elemento di matrice

$$\begin{aligned} \langle m_i| M |m_j\rangle &= m_j \langle m_i|m_j\rangle \\ \langle m_i| M |m_j\rangle &= \left(\langle m_j| M^\dagger |m_i\rangle \right)^* = (\langle m_j| M |m_i\rangle)^* = m_i^* (\langle m_j|m_i\rangle)^* \\ \implies m_j \langle m_i|m_j\rangle &= m_i^* (\langle m_j|m_i\rangle)^* = m_i \langle m_i|m_j\rangle \\ \implies (m_j - m_i) \langle m_i|m_j\rangle &= 0 \end{aligned}$$

⁴Molto spesso si fa questa cosa in Meccanica Quantistica , ora, io non ricordo se nel corso di GAL si usasse già questo termine, ma sostanzialmente si fa un prodotto scalare con un Bra a sinistra dell'oggetto in esame.

⁵Per calcolare l'autovalore facciamo sempre il valor medio dell'operatore nell'autostato corrispondente all'autovalore che ci interessa.

e affinché sia verificata la condizione dell'ultima riga occorre che

$$\langle m_i | m_j \rangle = 0 \quad \text{se } m_i \neq m_j \quad (3.2.3)$$

ovviamente nel caso in cui $m_i = m_j$ si ha $\langle m_i | m_j \rangle = ||m_i\rangle|^2$ e l'equazione è soddisfatta. Nota però che noi possiamo costruire una base di vettori ortogonali per cui si ha la condizione $\langle m_i | m_j \rangle = 0$ per $i \neq j$ e non è necessario che gli autovalori siano diversi e dunque può succedere che $m_i = m_j$ pur soddisfacendo la condizione. Questa situazione in cui più autovettori hanno stesso autovalore si chiama **degenerazione**. Non è una situazione molto felice per la Fisica, ma nel capitolo dei postulati della Meccanica Quantistica vedremo come risolverla.

- In dimensione infinita prenderemo come postulato della Meccanica Quantistica che gli autovettori degli operatori hermitiani formano insieme completi e sono delle basi O.N. nello spazio vettoriale di riferimento.

3.3 In dimensione infinita

Come già detto più volte quello che interessa a noi in Meccanica Quantistica è il caso in cui lo spazio di riferimento ha dimensione infinita. In uno spazio del genere il prodotto scalare è definito in termini di integrale e non di matrici. Nel nuovo formalismo scriviamo

$$\begin{aligned} \langle n | m \rangle &= \int dV \Psi_n^*(\vec{r}) \Psi_m^*(\vec{r}) \\ \langle n | \hat{p} | m \rangle &= \int dV \Psi_n^*(\vec{r}) \left(-i\hbar \vec{\nabla} \right) \Psi_m^*(\vec{r}) \\ &\dots \end{aligned}$$

È forse il caso far notare che alcuni libri (tra cui Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.GR) utilizza una notazione per l'azione di operatori leggermente diversa. Quella che si segue è

$$\langle f | Q | g \rangle = \langle g | Q^\dagger | f \rangle^* \quad (3.3.1)$$

che non modifica i ruoli dei Bra e Ket detti fin'ora e l'azione degli operatori.

Vediamo subito due esempi cruciali di operatori hermitiani.

Hermiticità dell'**operatore impulso** definito (per semplicità in una dimensione)

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.3.2)$$

Vediamolo. Conosciamo la definizione:

$$\langle \alpha | \hat{p} | \beta \rangle = \int dx \Psi_\alpha^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_\beta(x) \quad (3.3.3)$$

Verifichiamo che utilizzando $\hat{p}^\dagger$ troviamo la stessa espressione.

$$\hat{p}^\dagger / \forall \alpha, \beta : \quad \langle \beta | \hat{p}^\dagger | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{p} | \beta \rangle^*$$

calcoliamo $\langle \alpha | \hat{p} | \beta \rangle^*$ e verifichiamo che sia uguale alla definizione 3.3.3.

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{p} | \beta \rangle^* &= \left[\int dx \Psi_\alpha^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_\beta(x) \right]^* \\ &= \int dx \Psi_\alpha(x) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_\beta^*(x) \\ &\text{posso integrare per parti} \\ &= \int dx \Psi_\beta^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_\alpha(x) \\ &\equiv \langle \beta | \hat{p} | \alpha \rangle \\ &\Rightarrow \boxed{\hat{p} = \hat{p}^\dagger} \end{aligned}$$

Possiamo inoltre vedere l'hermeticità dell'**operatore posizione** $\hat{x}$ che per definizione agisce moltiplicativamente. Rifacciamo le stesse cose fatte per l'impulso.

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{x} | \beta \rangle &= \int dx \Psi_\alpha^*(x) x \Psi_\beta(x) \quad x \in \mathbb{R} \quad (3.3.4) \\ \hat{x}^\dagger / \forall \alpha, \beta : \quad \langle \beta | \hat{x}^\dagger | \alpha \rangle &= \langle \alpha | \hat{x} | \beta \rangle^* \end{aligned}$$

calcoliamo $\langle \alpha | \hat{x} | \beta \rangle^*$

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{x} | \beta \rangle^* &= \left[\int dx \Psi_\alpha^*(x) x \Psi_\beta(x) \right]^* \\ &= \int dx \Psi_\alpha(x) x \Psi_\beta^*(x) \\ &\text{posso spostarli come voglio essendo moltiplicati} \\ &= \int dx \Psi_\beta^*(x) x \Psi_\alpha(x) \\ &\equiv \langle \beta | \hat{x} | \alpha \rangle \\ &\Rightarrow \boxed{\hat{x} = \hat{x}^\dagger} \end{aligned}$$

Osservazione

Queste derivazioni formali presuppongono che gli integrali esistano sempre (non potrei fare le integrazioni per parti con leggerezza) e che l'integrazione per parti sia possibile senza termini di bordo. In generale se $\Psi \in L^2(V)$ non è detto che $\hat{p}\Psi$ e $\hat{x}\Psi$ siano pure in $L^2(V)$. Ad esempio

$$\begin{aligned} \Psi \sim x^{-1/4} \in L^2([0, 1]) &\Rightarrow \frac{d\Psi}{dx} \sim x^{-5/4} \notin L^2([0, 1]) \\ \Psi \sim \frac{e^{\alpha r}}{r} \in L^2(\mathbb{R}^3) &\Rightarrow \frac{d\Psi}{dr} \sim \frac{e^{\alpha r}}{r^2} \notin L^2(\mathbb{R}^3) \end{aligned}$$

ed è per questo motivo che bisogna distinguere tra operatori hermitiani ed autoaggiunti in dimensione infinita e fare dei discorsi (già accennati sui domini di questi operatori). Questo problema che l'azione di operatori con spettro continuo non rimanga nello spazio di interesse è oggetto del corso di Meccanica Quantistica 2, ma possiamo fare qualche cenno molto abbozzato.

Il dominio di un operatore M in uno spazio di Hilbert $\mathcal{H}$ è definito come:

$$\mathcal{D}(M) = \{|\alpha\rangle \in \mathcal{H} \mid |\alpha'\rangle = M|\alpha\rangle \in \mathcal{H}\} \subseteq \mathcal{H}$$

La definizione di **aggiunto** dell'operatore M è

$$M^\dagger \quad / \quad \langle \alpha | M^\dagger | \beta \rangle = \langle \beta | M | \alpha \rangle^*$$

il cui dominio è

$$\mathcal{D}(M^\dagger) = \left\{ |\beta\rangle \in \mathcal{H} \mid \exists |\alpha\rangle \in \mathcal{H} : \forall |\gamma\rangle \in \mathcal{D}(M), \langle \gamma | M^\dagger | \beta \rangle = \langle \gamma | \alpha \rangle \right\} \subseteq \mathcal{H}$$

e nota che in generale i due domini non coincidono, ma possiamo avvalerci di un teorema in dimensione infinita che dice:

$$\mathcal{D}(M) \subseteq \mathcal{D}(M^\dagger) \subseteq \mathcal{H}$$

Osservazione

In dimensione finita si ha:

$$\mathcal{D}(M) = \mathcal{D}(M^\dagger) = \mathcal{H}$$

Definiamo operatore **hermitiano** (i matematici lo chiamano *simmetrico*) se

$$\langle \beta | M | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | M | \beta \rangle \quad \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{D}(M) \quad (3.3.5)$$

cioè se $M = M^\dagger$ in $\mathcal{D}(M)$.

Definiamo operatore **autoaggiunto** se vale la 3.3.5 ma in più chiediamo che

$$\mathcal{D}(M) = \mathcal{D}(M^\dagger)$$

Dunque è ovvio che tutti gli operatori autoaggiunti sono anche hermitiani, ma non il viceversa.

La distinzione tra hermitiano ed autoaggiunto in realtà ci tocca poco, ma è giusto menzionarla e ritengo utile riportare un esempio per vedere la differenza. Situazioni in cui è rilevante coinvolgono la scelta di condizioni al contorno, oppure casi in cui $V(\vec{r})$ presenta singolarità. Prendiamo l'esempio della buca rettangolare infinita di larghezza a in cui imponiamo le condizioni al contorno:

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0$$

il dominio di $\hat{p}$ è:

$$\mathcal{D}(\hat{p}) = \left\{ \Psi \in L^2(0, a) / \Psi(0) = \Psi(a) = 0 \right\}$$

con questa definizione $\hat{p}$ è hermitiano, poiché integrando per parti i termini di bordo sono nulli. Lo abbiamo dimostrato poche pagine fa. Però possiamo vedere che non è autoaggiunto. Lo si può vedere dalla definizione di dominio. Vediamo che

$$\langle \beta | \hat{p}^\dagger | \alpha \rangle \equiv \langle \alpha | \hat{p} | \beta \rangle^* = \left[\int_0^a dx \Psi_\alpha^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_\beta(x) \right]^*$$

è immediato vedere che il dominio di $\hat{p}$ impone che $\Psi_\beta(0) = \Psi_\beta(a) = 0$, ma posto questo l'integrazione per parti non chiede nulla su Ψ_α e il tutto funziona anche se $\Psi_\alpha(0) = \Psi_\alpha(a) \neq 0$, dunque il dominio di $\hat{p}$ è l'intero $L^2(0, a)$.

3.4 Operatori con spettro continuo

Abbiamo già visto nel caso di particella libera che non abbiamo vincoli sui valori dell'impulso p e analogamente non abbiamo vincoli per i valori ammissibili della posizione x . Puoi immediatamente vedere che funzioni corrispondenti ad un fissato $p(k)$ non sono normalizzabili in $\mathbb{R}$ (sono banalmente onde piane). Nota che questo in realtà non è un problema, una costruzione matematicamente più formale dei postulati della Meccanica Quantistica (vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.mq2) contempla l'esistenza di queste autofunzioni non appartenenti allo spazio delle funzioni al quadrato integrabili (purché siano delle distribuzioni temperate) ed è proprio agli operatori corrispondenti a cui assegnamo uno spettro continuo piuttosto che discreto. Il tutto è lecito poiché 1. sono funzioni più comode per fare i conti, 2. in realtà tutte le misure hanno una risoluzione finita (ogni laboratorio ha dimensione finita) e possono in realtà essere ricondotte ad uno spettro discreto.



Sulla retta reale discretizzata, l'operatore posizione $\hat{x}$ ha spettro discreto.

Capito che è lecito utilizzare operatori con spettro continuo allora possiamo analizzarli meglio.

3.4.1 Operatore impulso

Vediamo prima per semplicità le cose con il linguaggio delle funzioni d'onda. Vediamo le autofunzioni di $\hat{p}$

$$\hat{p}\Psi_p(x) = p\Psi_p(x) \implies -i\hbar \frac{d\Psi_p(x)}{dx} = p\Psi_p(x) \implies \Psi_p(x) = Ce^{\frac{i}{\hbar}px}$$

notiamo appunto che $\Psi_p(x)$ non è normalizzabile, $\Psi_p(x) \notin L^2(\mathbb{R})$. Le autofunzioni soddisfano tuttavia una relazione di ortonormalità generalizzata (vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.GR). Si sceglie per convenienza:

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

dunque

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = \delta(p-p')$$

che è l'analogo di $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) = \delta_{nm}$ per lo spettro discreto.

Le $\Psi_p(x)$ soddisfano inoltre una relazione di completezza generalizzata. Infatti, sebbene $\Psi_p(x) \notin L^2(\mathbb{R})$, qualunque $\Psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ può essere espressa come combinazione lineare *continua* delle $\Psi_p(x)$ (è la trasformata di Fourier!)

$$\begin{aligned} \forall \Psi(x) \in L^2(\mathbb{R}), \exists C \in L^2(\mathbb{R}) / \quad \Psi(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp C(p) \Psi_p(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp C(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} \end{aligned}$$

da paragonarsi in questo caso a $\exists c_n / \Psi(x) = \sum c_n \Psi_n(x)$ del caso discreto. Calcoliamo i coefficienti come al solito usando l'ortonormalità generalizzata

$$\begin{aligned} (\Psi_p, \Psi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_p^*(x) \Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_p^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dp' C(p') \Psi_{p'}(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp' C(p') \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp' C(p') \delta(p-p') \\ &= C(p) \end{aligned}$$

ossia troviamo quello che potevamo già immaginare dall'antitrasformata di Fourier $C(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px}$.

3.4.2 Operatore posizione

Possiamo vedere le stesse cose anche per l'operatore posizione $\hat{x}$. Le autofunzioni:

$$\hat{x}\Psi_y(x) \equiv x\Psi_y(x) = y\Psi_y(x)$$

dove $\hat{x}$ è l'operatore, x è la variabile, y è l'autovalore della funzione localizzata in y appunto. Vediamo che l'equazione

$$(x - y)\Psi_y(x) = 0$$

ci dice che per forza la $\Psi_y(x)$ sia nulla ovunque tranne in $x = y$ e che quindi sia la distribuzione δ di Dirac:

$$\Psi_y(x) = \delta(x - y) \implies (x - y)\delta(x - y) = 0$$

(perché come sappiamo $f(x)\delta(x) = f(0)$). Anche in questo caso non abbiamo una funzione normalizzabile⁶

$$\Psi_y(x) \notin L^2(\mathbb{R})$$

ma come prima possiamo vedere un'ortonormalità generalizzata:

$$(\Psi_y, \Psi_{y'}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_y^*(x) \Psi_{y'}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(y - x) \delta(y' - x) = \delta(y - y')$$

e una completezza generalizzata, come prima, sebbene $\Psi_y(x) \notin L^2(\mathbb{R})$, qualunque funzione $\Psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ può essere scritta come combinazione lineare continua di $\Psi_y(x)$:

$$\begin{aligned} \forall \Psi(x) \in L^2(\mathbb{R}), \quad \Psi(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dy f(y) \Psi_y(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dy f(y) \delta(y - x) = f(x) \iff \Psi = f \end{aligned}$$

3.4.3 Nel linguaggio dei Bra e Ket

Come appena visto, dunque, gli operatori $\hat{x}$ e $\hat{p}$ nonostante abbiano autofunzioni non normalizzabili, soddisfano relazioni di completezza e ortonormalità generalizzate, che rendono questi operatori molto utili nella pratica poiché forniscono basi O.N. in senso generalizzato per descrivere tutte le funzioni di $\mathcal{H}$.

Rivediamo tutto con il nuovo formalismo che stiamo imparando a trattare.

Equazioni agli autovalori

$$\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle \quad ; \quad \hat{x} |x\rangle = x |x\rangle$$

⁶ $L^2(\mathbb{R})$ è uno spazio di Hilbert completo, cioè tutte le successioni di Cauchy di funzioni di $L^2(\mathbb{R})$ convergono. La δ è un limite di svariate successioni di funzioni $\in L^2(\mathbb{R})$, ma attenzione perché queste successioni non sono di Cauchy.

Ortonormalità generalizzata

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p') \quad ; \quad \langle x|y\rangle = \delta(x-y)$$

Completezza generalizzata

$$\int dp |p\rangle \langle p| = \mathbb{1} \quad ; \quad \int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}$$

Ricordiamoci un attimo del caso discreto poiché ci può aiutare a ricordare una cosa fondamentale:

$$\begin{aligned} \hat{H} |n\rangle &= E_n |n\rangle \quad ; \quad \langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad ; \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1} \\ \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad : \quad |\alpha\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle \quad ; \quad c_n = \langle n|\alpha\rangle \end{aligned}$$

Possiamo calcolarci i coefficienti delle generiche combinazioni lineari continue nella basi si $|x\rangle$ e $|p\rangle$.

$$\begin{aligned} \forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad , \quad |\alpha\rangle &= \int dy \Psi_\alpha(y) |y\rangle \\ \implies \langle x|\alpha\rangle &= \int dy \Psi_\alpha(y) \langle x|y\rangle = \Psi_\alpha(x) \end{aligned}$$

che è la probabilità di trovare x nello stato α ed è interpretabile come la **funzione d'onda**. Analogamente

$$\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad , \quad |\alpha\rangle = \int dp' A_\alpha(p') |p'\rangle \implies \langle p|\alpha\rangle = A_\alpha(p)$$

che è l'espressione interpretabile come la **funzione d'onda nello spazio degli impulsi**.

Nota anche che le espressioni esplicite delle autofunzioni di $\hat{p}$ implicano:

$$\begin{aligned} \langle x|p\rangle &= \Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} \\ \implies \langle p|x\rangle &= \Psi_p^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \end{aligned}$$

così puoi notare, usando la completezza delle basi $|x\rangle$ e $|p\rangle$, che i coefficienti delle combinazioni lineari continue sono **esattamente** le funzioni d'onda e le sue trasformate di Fourier:

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha(x) &= \langle x|\alpha\rangle = \langle x|\mathbb{1}|\alpha\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp A_\alpha(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} \\ A_\alpha(p) &= \langle p|\alpha\rangle = \langle p|\mathbb{1}|\alpha\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \Psi_\alpha(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} \end{aligned}$$

3.5 Vantaggi dei Bra e Ket

Sia pure a livello formale e con la necessità di fare le dovute attenzioni alle questioni relative alla normalizzabilità e all'appartenenza o meno ad $\mathcal{H}$, il linguaggio sviluppato consente manipolazioni semplici ed eleganti. Se non ne sarai convinto alla fine di Meccanica Quantistica 1, sicuramente in QFT sarà evidente. Vediamo alcuni esempi della loro utilità più pratica.

Conservazione della normalizzazione in basi diverse . Questo si basa sul fatto che per ciascuna base possiamo utilizzare una relazione di completezza (generalizzata o discreta che sia)

$$\begin{aligned} 1 = \langle \alpha | \alpha \rangle &= \sum_n \langle \alpha | n \rangle \langle n | \alpha \rangle = \sum_n |c_n|^2 \\ &= \int dx \langle \alpha | x \rangle \langle x | \alpha \rangle = \int dx |\Psi_\alpha(x)|^2 \\ &= \int dp \langle \alpha | p \rangle \langle p | \alpha \rangle = \int dp |A_\alpha(p)|^2 \end{aligned}$$

Rappresentazione di elementi di matrice di operatori in basi diverse . Gli operatori sono sempre solo locali, quindi dipendono da una sola variabile⁷. Vale

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1 | Q | \alpha_2 \rangle &= \int dx dy \langle \alpha_1 | x \rangle \langle x | Q | y \rangle \langle y | \alpha_2 \rangle \\ &= \int dx dy \Psi_{\alpha_1}^*(x) Q_{xy} \Psi_{\alpha_2}(y) \end{aligned}$$

Ora, se $Q = Q(x)$ allora ponendo $Q_{xy} = Q(x)\delta(x-y)$ si ha

$$\langle \alpha_1 | Q | \alpha_2 \rangle = \int dx \Psi_{\alpha_1}^*(x) Q(x) \Psi_{\alpha_2}(x)$$

come atteso. Se invece $Q = Q(p)$ si pone $Q_{xy} = \delta(x-y)Q\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)$ ottenendo

$$\langle \alpha_1 | Q | \alpha_2 \rangle = \int dx \Psi_{\alpha_1}^*(x) Q\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) \Psi_{\alpha_2}(x)$$

che è quello atteso. Analoghe espressioni si ottengono nello spazio degli impulsi.

⁷ $\hat{p}$ è locale, poiché è una derivata e interpretata come limite del rapporto incrementale, per cui lo valuto di punti molto vicini.

Rappresentazione spettrale di un operatore . Vediamo che se un operatore ammette un sistema completo di autovettori ortonormali

$$Q |n\rangle = q_n |n\rangle$$

esso ha la seguente rappresentazione spettrale

$$Q = \sum_n q_n |n\rangle \langle n| \quad (3.5.1)$$

Questo si può vedere in due modi. Uno immediato prendendo per buona la **rappresentazione spettrale dell'identità** che non è altro che la completezza

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$$

a questa applicare l'operatore Q e ottenere direttamente la 3.5.1. Il secondo fa un po' più di passaggi. Si prende

$$|\alpha\rangle \in \mathcal{H} : \quad |\alpha\rangle = \sum_n \alpha_n |n\rangle$$

lecito perché ammettiamo che $\{|n\rangle\}$ sia completo. Allora

$$Q |\alpha\rangle = \sum_n \alpha_n Q |n\rangle = \sum_n \alpha_n q_n |n\rangle = \sum_n q_n |n\rangle \langle n|\alpha\rangle$$

e si conclude dunque la 3.5.1.

Rappresentazione della δ di Dirac . Ogni base O.N. in $\mathcal{H}$ fornisce una rappresentazione della δ di Dirac nel corrispondente spazio delle configurazioni. Vediamo il caso unidimensionale.

$$\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} , \quad |\alpha\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

dove prendiamo $\{|n\rangle\}$ base O.N. . Si ha dunque

$$\begin{aligned} \langle x|\alpha\rangle &= \sum_n \langle x|n\rangle \langle n|\alpha\rangle \\ \langle x|\alpha\rangle &\equiv \Psi_\alpha(x) = \sum_n c_n^{(\alpha)} \langle x|n\rangle = \sum_n c_n^{(\alpha)} \Psi_n(x) \end{aligned}$$

usando la completezza di $\{|x\rangle\}$ in entrambe le righe

$$\begin{aligned} \langle x|\alpha\rangle &= \sum_n \int dy \langle x|n\rangle \langle n|y\rangle \langle y|\alpha\rangle \\ \Psi_\alpha(x) &= \sum_n \int dy \Psi_n(x) \Psi_n^*(y) \Psi_\alpha(y) = \int dy \left[\sum_n \Psi_n(x) \Psi_n^*(y) \right] \Psi_\alpha(y) \end{aligned}$$

da cui vediamo subito

$$\sum_n \Psi_n(x) \Psi_n^*(y) = \sum_n \langle x|n \rangle \langle n|y \rangle = \delta(x - y)$$

Questo completa la rassegna delle proprietà di vettori ed operatori nello spazio di Hilbert con la nuova notazione di Bra e Ket. Si può a questo punto parlare dei principi fondativi della Meccanica Quantistica .

Capitolo 4

Principi fondativi della Meccanica Quantistica

Ora con una notazione felice possiamo entrare veramente nel vivo della teoria ed enunciare i postulati della Meccanica Quantistica . I principi fondativi della Meccanica Quantistica sono 1/3 del programma del Meccanica Quantistica 2, quindi sicuramente la trattazione che farò in seguito sarà più breve, meno dettagliata e meno ricca di concetti teorici elaborati, ma se vuoi guarda le dispense Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.mq2.

Come sempre in Fisica i *principi* che introduciamo sono provvisori, soggetti alle approssimazioni che ci siamo imposti, e soprattutto soggetti alla costante verifica sperimentale.

Quello che segue potrebbe essere visto come un grande riassunto delle cose che abbiamo visto fin'ora con la precisazione di alcuni punti.

I postulati vengono scritti con un margine più stretto e in italico.

4.1 Spazio degli stati fisici

Gli stati possibili per un sistema fisico $\mathcal{S}$ sono in corrispondenza biunivoca con i raggi di uno spazio di Hilbert $\mathcal{H}$ sul campo dei numeri complessi.

Possiamo dare qualche indicazione sul principio:

- Lo spazio $\mathcal{H}$ è supposto completo e separabile.
- Se il sistema è definito in un volume V nello spazio delle configurazioni¹, allora $\mathcal{H}$ è isomorfo a $L^2(V)$.

¹ $\mathbb{R}^{3n}$ per n particelle in $\mathbb{R}^3$.

- I raggi in $\mathcal{H}$ sono classi di equivalenza di vettori, modulo la normalizzazione e la fase:

$$|\alpha\rangle \sim k|\alpha\rangle \sim e^{i\theta}|\alpha\rangle \implies \{|\alpha\rangle\} \equiv \bar{\mathcal{H}} \equiv \mathcal{H}/\mathbb{C}$$

- Una possibile caratterizzazione dello stato è la sua funzione d'onda nello spazio delle configurazioni, ma è solo una delle possibili rappresentazioni che possiamo dare di uno stato fisico.
- Lo spazio $\mathcal{H}$ è lo spazio degli stati ad un tempo fissato. L'evoluzione temporale degli stati è dettata dall'equazione di Schrodinger²:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\alpha(t)\rangle = \hat{H} |\alpha(t)\rangle \quad (4.1.1)$$

4.2 Corrispondenza tra osservabili fisiche e operatori su $\mathcal{H}$

Tutte le osservabili fisiche A del sistema $\mathcal{S}$ sono rappresentate in $\mathcal{H}$ da operatori lineari autoaggiunti $\hat{A}$. Questi operatori obbediscono pertanto ad equazioni agli autovalori

$$\hat{A} |a_\sigma\rangle = a_\sigma |a_\sigma\rangle$$

dove gli autovalori a_σ possono avere sia uno spettro discreto³ che continuo⁴, ma in ogni caso reali. I corrispondenti autostati $|a_\sigma\rangle$ formano insiemi ortonormali (in senso convenzionale per lo spettro discreto e in senso generalizzato per lo spettro continuo) che supponiamo in tutti i casi completi. $\{|a_\sigma\rangle\}$ sono dunque basi di $\mathcal{H}$.

Questo postulato ci dice cosa sono effettivamente le osservabili fisiche (operatori) e cosa sono le misure che facciamo (autovalori). Possiamo fare anche in questo caso un paio di osservazioni:

- Se per caso il nostro sistema si dovesse trovare in un autostato dell'osservabile A , allora saremmo molto fortunati perché gli stati $|a_\sigma\rangle$ sono stati per i quali il valore di A è esattamente determinato:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_\sigma &\equiv \langle a_\sigma | \hat{A} | a_\sigma \rangle = a_\sigma \quad ; \quad \langle \hat{A}^2 \rangle_\sigma = \langle a_\sigma | \hat{A}^2 | a_\sigma \rangle = a_\sigma^2 \\ \implies \left(\Delta \hat{A} \right)_\sigma &\equiv \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle_\sigma - \langle \hat{A} \rangle_\sigma^2} = 0 \end{aligned}$$

²Tecnicamente si potrebbe enunciare un principio di evoluzione temporale che introduce un nuovo operatore che ci dice come evolvono osservabili e stati in Meccanica Quantistica, lo vedremo in uno dei prossimi capitoli. È comunque legittimo dire come evolvono nel tempo gli stati fisici (rappresentazione alla Schrodinger) e poi una volta capitati meglio i concetti fondamentali introdurre l'operatore di evoluzione temporale.

³in questo caso $|a_\sigma\rangle \in \mathcal{H}$.

⁴ora si ha $|a_\sigma\rangle \notin \mathcal{H}$.

- Nel caso in cui abbiamo operatori con spettro continuo gli stati $|a_\sigma\rangle$ non appartengono ad $\mathcal{H}$, ma (come già visto) possono essere utilizzati come basi ortonormali in senso generalizzato. Questo corrisponde al fatto che stati in cui variabili continue sono perfettamente localizzate non sono stati fisicamente realizzabili⁵.
- Gli autovalori a_σ possono essere degeneri, ovvero, possono esistere due autovettori diversi che danno come risultato di una misura di A lo stesso a_σ . In particolare (spettro discreto) possono avere autospazio di dimensione non unitaria. Non è particolarmente preoccupante poiché dal corso di GAL 1 sappiamo che ci sono procedimenti convenzionali (Gram-Schmidt) che ci permettono di costruire a mano basi ortonormali.

4.3 Interpretazione statistica generalizzata

Gli autovalori degli operatori $\hat{A}$ associati alle osservabili a sono tutti e i soli possibili risultati di una misura sperimentale di A ⁶. Posto che ogni stato $|\alpha\rangle$ può essere espresso nella base degli autostati di $\hat{A}$

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n^{(\alpha)} |a_n\rangle \quad \text{spettro discreto}$$

$$|\alpha\rangle = \int d\sigma c_\sigma(\alpha) |a_\sigma\rangle \quad \text{spettro continuo}$$

e che in tali basi sono O.N. (eventualmente in senso generalizzato) allora si interpreta:

- $|c_n^{(\alpha)}|^2$ come la probabilità di ottenere il valore di a_n effettuando una misura di A sullo stato $|\alpha\rangle$
- $|c_\sigma^{(\alpha)}|^2$ come la densità di probabilità per ottenere il valore a_σ effettuando una misura di A sullo stato $|\alpha\rangle$

e conseguentemente si ha:

$$c_n^{(\alpha)} = \langle a_n | \alpha \rangle \quad ; \quad c_\sigma^{(\alpha)} = \langle a_\sigma | \alpha \rangle$$

Come abbiamo già visto queste densità di probabilità sono correttamente normalizzate se $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$ (vedi il capitolo §3).

⁵Questo è legato in qualche modo all'incertezza sperimentale. Possiamo su un foglio di carta costruire un pacchetto d'onda con impulso perfettamente definito e avere autofunzioni di $\hat{p}$, ma nella pratica dobbiamo scontrarci con il fatto che abbiamo un'incertezza sperimentale e quindi non riusciamo mai a costruire nello spazio degli impulsi una delta di Dirac centrata sul nostro impulso, ma avrà sempre una certa larghezza.

⁶indico con $\hat{A}$ l'operatore e con A l'osservabile fisica associata.

4.4 Processo di misura

Questo è il punto che personalmente ho trovato più oscuro ad un primo approccio.

Fare una misura di un'osservabile A in uno stato $|\alpha\rangle$ implica un processo in due fasi.

1. Una **preparazione**, in cui viene identificato lo stato $|\alpha\rangle$. Vuol dire che facciamo delle misure preliminari di un certo insieme di osservabili $\{a_1, \dots, a_n\}$ sufficienti a caratterizzare univocamente lo stato $|\alpha\rangle$.

Ma attenzione:

- Questo implica una conoscenza sufficiente del nostro spazio di Hilbert, in modo da sapere in che modo possiamo univocamente caratterizzare lo stato $|\alpha\rangle$ e quindi quali misure preliminari fare.
- In meccanica classica era più semplice perché note le $2n$ coordinate e quindi un punto $\{q^i, p_i\}$, allora tutte le osservabili, che sono funzioni $A(q^i, p_i)$ delle sole coordinate, erano determinate esattamente e la loro evoluzione temporale è dettata da H .
- In Meccanica Quantistica può capitare che se misuro un certo insieme di p osservabili A_i il sistema è univocamente caratterizzato⁷, possono esistere in generale altre osservabili indipendenti B_k il cui valore non è ben determinato⁸.
- C'è da tener conto che il processo di misura in Meccanica Quantistica è un processo idealizzato, poiché la maggior parte delle volte non tutte le osservabili A_p possono essere misurate per motivi sperimentali e in questo caso si comincia a parlare di stati puri e stati misti in cui si introduce il concetto di matrice densità. Vedi capitolo §10.
- Ovviamente come per tutto il resto delle scienze sperimentali si suppone che la preparazione sia ripetibile in modo identico, così da effettuare un gran numero di misure su stati α identici (dal momento che una misura modifica il mio stato e per ripeterla devo usare un altro campione).

2. Una **misura** di una generica osservabile tra $\{A_i, B_k\}$ che si immagina ripetibile molte volte su stati identici $|\alpha\rangle$.

⁷Vuol dire che se faccio la misura di A_j e trovo il valore a_j , allora se rifaccio la misura riottengo lo stesso risultato.

⁸Ora, significa che una misura ripetuta di una stessa osservabile B_l non dà lo stesso risultato, ma la misura segue una distribuzione di probabilità.

Dobbiamo fare attenzione a cosa esce e a cosa può uscire.

- Se si misura una delle A_i osservabili (ricorda: è una delle osservabili usate per preparare il sistema) allora si trova con certezza il valore determinato dalla preparazione. In questo caso $|\alpha\rangle$ è autostato di ciascuna A_i .
- Se misuriamo un'altra osservabile tra le B_k allora dobbiamo fare caso a che succede. Possiamo sempre scrivere:

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n^{(\alpha)} |b_n\rangle$$

dove $|b_n\rangle$ sono autovettori di $\hat{B}$ (che è l'operatore autoaggiunto associato all'osservabile B_k) e quindi tali per cui $\hat{B}|b_n\rangle = b_n|b_n\rangle$. Allora si troverà il valore b_n con probabilità $|c_n^{(\alpha)}|^2$ ⁹. Questo è radicalmente diverso da quello a cui siamo abituati in Meccanica Classica, ma anche qua se la misura di B_k viene ripetuta immediatamente (senza perturbare ulteriormente il sistema), si ritrova con certezza lo stesso valore b_n . Ne varrebbe il potere predittivo della fisica.

Quindi riassunto brevemente quello che succede è che prima di qualsiasi misura ho lo stato $|\alpha\rangle$ preparato. Se faccio una misura di una delle osservabili A_i con cui ho preparato il sistema, allora lo stato non cambia e rimango in $|\alpha\rangle$ misurando a_i . Se però faccio una misura di un osservabile B_k indipendente, allora posso ottenere come valori di misura gli autovalori b_n dell'operatore $\hat{B}$ ciascuno con una probabilità $|c_n^{(\alpha)}|^2$, ma soprattutto lo stato dopo la misura si ritrova, si dice che lo stato **collassa**, nello stato $|b_n\rangle$ autostato di $\hat{B}$, motivo per cui se ripeto una misura riottengo con certezza b_n . Quindi vediamo nuovamente che il processo di misura ha modificato irreversibilmente lo stato del sistema. Il processo di misura non è descritto dall'equazione di Schrodinger.

4.5 Relazioni di indeterminazione

Una volta assorbiti i principi scritti sopra, le relazioni di indeterminazione di Heisenberg caratteristiche della Meccanica Quantistica sono un teorema e non un principio indipendente. Dobbiamo ancora vedere alcuni punti per poterci arrivare.

⁹Se non hai capito molto bene ci sono diversi esercizi in Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Regis in cui calcola la probabilità che una certo sistema abbia un certo momento angolare di spin banalmente scomponendo uno stato in autostati di S_z e vedendo il modulo quadro del coefficiente davanti.

Prendiamo uno stato $|\alpha\rangle$. Le osservabili A e B hanno entrambe valori definiti se e solo se $|\alpha\rangle$ è autostato sia di $\hat{A}$ che di $\hat{B}$, ossia se e solo se

$$\hat{A}|\alpha\rangle = a_n|\alpha\rangle \quad ; \quad \hat{B}|\alpha\rangle = b_n|\alpha\rangle$$

Infatti se $|\alpha\rangle$ non fosse autostato di entrambe le osservabili, ma solamente di A ad esempio, avremmo che una misura di B avrebbe uno spettro di risultati possibili, come visto poco fa. In generale due osservabili possono essere simultaneamente definite se e solo se ammettono una base di autovettori comuni, cioè se

$$\begin{aligned} \exists\{|a_n, b_m\rangle\} \quad / \quad & \begin{cases} \hat{A}|a_n, b_m\rangle = a_n|a_n, b_m\rangle \\ \hat{B}|a_n, b_m\rangle = b_m|a_n, b_m\rangle \end{cases} \\ \text{e } \forall \alpha \in \mathcal{H}, \quad |\alpha\rangle = & \sum_{n,m} c_{n,m}^{(\alpha)} |a_n, b_m\rangle \end{aligned}$$

Si dice che sono misure **compatibili**, proprio perché in questo caso una misura di A non preclude mai una misura di B . Misurando A si fa collassare il sistema in un autostato di $\hat{A}$, ma che è sempre anche autostato di $\hat{B}$, quindi una misura di $\hat{B}$ fornisce un valore definito senza modificare lo stato. Occorre enunciare un teorema:

Teorema Due operatori autoaggiunti $\hat{A}$ e $\hat{B}$ ammettono una base comune di autovettori se e solo se commutano, cioè se e solo se

$$\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}, \quad (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\alpha\rangle \equiv [\hat{A}, \hat{B}]|\alpha\rangle = 0$$

Dimostrazione Condizione necessaria: ammettono base comune di autovettori

$$\begin{aligned} \exists\{|a_n, b_m\rangle\} \quad / \quad & \hat{A}|a_n, b_m\rangle = a_n|a_n, b_m\rangle \quad , \quad \hat{B}|a_n, b_m\rangle = b_m|a_n, b_m\rangle \\ \text{e } \forall \alpha \in \mathcal{H}, \quad |\alpha\rangle = & \sum_{n,m} c_{n,m}^{(\alpha)} |a_n, b_m\rangle \end{aligned}$$

Allora

$$\forall |a_n, b_m\rangle \quad : \quad (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|a_n, b_m\rangle = (a_nb_m - b_ma_n)|a_n, b_m\rangle = 0$$

e quindi

$$\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \quad [\hat{A}, \hat{B}]|\alpha\rangle = 0$$

Condizione sufficiente: commutano e conosco $\hat{A}$ e i suoi autovettori

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad \hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$$

supponiamo che ciascun a_n sia non degenero (quindi abbia autospazio unidimensionale). Allora

$$\begin{aligned} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|a_n\rangle &= 0 \\ \implies \hat{A}(\hat{B}|a_n\rangle) &= a_n \hat{B}|a_n\rangle \end{aligned}$$

per cui anche $\hat{B}|a_n\rangle$ è autostato di $\hat{A}$ appartenente allo stesso autovalore dello stato $|a_n\rangle$. Però se l'autovalore è non degenero ne segue che

$$\hat{B}|a_n\rangle \propto |a_n\rangle \implies \exists b / \hat{B}|a_n\rangle = b|a_n\rangle$$

per cui gli autostati di $\hat{A}$ sono anche autostati di $\hat{B}$.

Prima di concludere parliamo anche del caso in cui a_n sia degenero. Abbiamo

$$\hat{A}|nl\rangle = a_n|nl\rangle \quad l = 1, \dots, d_n$$

si riesce comunque a dimostrare che nell'autospazio di a_n (che ha dimensione d_n) si può sempre trovare una base costruita da autostati di $\hat{B}$:

$$\exists\{|nk\rangle, k = 1, \dots, d_n\} / |nk\rangle = \sum_{l=1}^{d_n} c_l^{(k)} |nl\rangle, \quad \hat{B}|nk\rangle = b_k|nk\rangle$$

che completa la dimostrazione. ■

A questo punto possiamo usare una pagina per fare una rapida carrellata sui commutatori, vista la loro importanza, poiché gli operatori lineari su $\mathcal{H}$ costituiscono un'algebra, con l'operazione di commutazione.

Valgono le seguenti proprietà formali:

- **Antisimmetria**¹⁰

$$[A, B] = -[B, A]$$

- **Linearità**

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$$

- **Commutatori di prodotti**

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

¹⁰Si definisce anche l'**anticommutatore** che è simmetrico

$$\{A, B\} = AB + BA = \{B, A\}$$

- **Identità di Jacobi**

$$[A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [B, [C, A]] = 0$$

- **Hermiticità** Come per gli spazi vettoriali di dimensione finita, il prodotto di due operatori hermitiani non è hermitiano; in generale:

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

che se $B^\dagger = B$ e $A^\dagger = A$ diventa

$$(AB)^\dagger = BA$$

Ne segue che se:

$$B^\dagger = B \quad , \quad A^\dagger = A \quad , \quad [A, B] = iC \quad , \quad \{A, B\} = D$$

allora¹¹

$$C^\dagger = C \quad , \quad D^\dagger = D$$

Belle le proprietà, ma come si calcolano? Il calcolo esplicito dei commutatori si effettua facendoli agire sugli stati fisici, che ad esempio possiamo prendere nella rappresentazione delle funzioni d'onda. Vediamo i due commutatori più importanti.

- Commutatore tra $\hat{x}$ e $\hat{p}$:

$$\begin{aligned} [x, p]\Psi &= -i\hbar x \frac{d\Psi}{dx} - \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)(x\Psi) = i\hbar\Psi \\ \implies [x, p] &= i\hbar \end{aligned}$$

- Commutatore tra $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ ed $\hat{x}$:
Possiamo scrivere

$$[H, x] = \frac{1}{2m} [p_x^2 + p_y^2 + p_z^2, x]$$

vedendo che valgono:¹²

$$[x_i, x_j] = 0 \quad , \quad [p_i, p_j] = 0 \quad , \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

abbiamo

$$\begin{aligned} [H, x] &= \frac{1}{2m} [p_x^2, x] = \frac{1}{2m} \left(p_x \underbrace{[p_x, x]}_{-i\hbar} + \underbrace{[p_x, x]}_{-i\hbar} p_x \right) \\ \implies [H, x] &= -i\hbar \frac{p_x}{m} \end{aligned}$$

¹¹Si dimostra vedendo che cos'è $[A, B]^\dagger$, ossia, $[A, B]^\dagger = -[A, B]$, per cui se il commutatore è anti-hermitiano, se ci metto una i allora il coefficiente C diventa hermitiano. Simile per D .

¹²Poiché le coordinate agendo solo moltiplicativamente commutano e le derivate (momenti) commutano sempre.

Capite queste premesse possiamo cominciare a parlare delle **relazioni di indeterminazioni**¹³ e chiederci che cosa succede quando facciamo una misura contemporanea di due osservabili rappresentate da due operatori hermitiano che non commutano¹⁴.

Prendiamo i soliti operatori $\hat{A}$ e $\hat{B}$ e tali che siano rappresentativi di due osservabili $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$, e dunque autoaggiunti (omettiamo i cappelletti):

$$A = A^\dagger, \quad B = B^\dagger$$

e tali per cui

$$[A, B] = iC \quad \text{con} \quad C = C^\dagger \neq 0$$

Prendiamo anche $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ stato normalizzabile e tale per cui

$$\{|\alpha\rangle, A|\alpha\rangle, B|\alpha\rangle\} \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B)$$

Possiamo definire due nuovi operatori *traslati* (di solito si chiamano anche *di scarto*):

$$\begin{aligned} \hat{A} &\equiv A - \langle A \rangle_\alpha = A - \langle \alpha | A | \alpha \rangle \\ \hat{B} &\equiv B - \langle B \rangle_\alpha = B - \langle \alpha | B | \alpha \rangle \end{aligned}$$

che sono comodi perché

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_\alpha &= \langle A \rangle_\alpha - \langle A \rangle_\alpha = 0 \\ \langle \hat{B} \rangle_\alpha &= 0 \\ [\hat{A}, \hat{B}] &= [A, B] = iC \\ \langle \hat{A}^2 \rangle_\alpha &= \langle A^2 + \langle A \rangle_\alpha^2 - 2\langle A \rangle_\alpha A \rangle_\alpha = \langle A^2 \rangle_\alpha - \langle A \rangle_\alpha^2 = (\Delta_\alpha A)^2 \\ \langle \hat{B}^2 \rangle_\alpha &= (\Delta_\alpha B)^2 \end{aligned}$$

che torneanno utili nei conti successivi e in cui Δ_α è proprio l'incertezza sulla misura. Introduciamo la famiglia di operatori (non hermitiani, vista la i) ad un parametro:

$$O_\alpha(\lambda) \equiv \hat{A}_\alpha + i\lambda\hat{B}_\alpha, \quad \lambda \in \mathbb{R} \quad (4.5.1)$$

$$O_\alpha^\dagger(\lambda) = \hat{A}_\alpha - i\lambda\hat{B}_\alpha \quad (4.5.2)$$

¹³Per questa parte si fa riferimento a Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.OD.

¹⁴Se commutassero abbiamo appena visto che entrambe sono ben determinate.

Dal momento che abbiamo $|\alpha\rangle \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B)$, allora anche lo stato $O_\alpha(\lambda) |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ e in particolare è uno stato normalizzabile. Per cui

$$\begin{aligned}
0 &\leq \|O_\alpha(\lambda) |\alpha\rangle\| \\
&= \langle \alpha | O_\alpha^\dagger(\lambda) O_\alpha(\lambda) | \alpha \rangle \\
&= \langle \alpha | \left(\hat{A}_\alpha - i\lambda \hat{B}_\alpha \right) \left(\hat{A}_\alpha + i\lambda \hat{B}_\alpha \right) | \alpha \rangle \\
&= \langle \hat{A}_\alpha^2 \rangle_\alpha + \lambda^2 \langle \hat{B}_\alpha^2 \rangle_\alpha + i\lambda \left\langle \left[\hat{A}_\alpha, \hat{B}_\alpha \right] \right\rangle_\alpha \\
&= \langle \hat{A}_\alpha^2 \rangle_\alpha + \lambda^2 \langle \hat{B}_\alpha^2 \rangle_\alpha - \lambda \langle C \rangle_\alpha \\
&= (\Delta_\alpha A)^2 + \lambda^2 (\Delta_\alpha B)^2 - \lambda \langle C \rangle_\alpha
\end{aligned}$$

Questa è una forma quadratica in λ ($a\lambda^2 + b\lambda + c$) ed è semi-definita positiva se il discriminante ($b^2 - 4ac \leq 0$) è negativo o nullo. Quindi

$$\begin{aligned}
&\langle C \rangle_\alpha^2 - 4 (\Delta_\alpha B)^2 (\Delta_\alpha A)^2 \leq 0 \\
&\implies \Delta_\alpha A \cdot \Delta_\alpha B \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle_\alpha| \\
&\implies \boxed{\Delta_\alpha A \cdot \Delta_\alpha B \geq \frac{1}{2} |\langle -i[A, B] \rangle_\alpha|} \quad (4.5.3)
\end{aligned}$$

che è la **relazione di indeterminazione generale**. Si possono osservare alcune cose:

- Non sono comparsi vincoli sugli scarti quadratici medi per osservabili commutanti

$$[A, B] = 0 \implies \Delta_\alpha A \cdot \Delta_\alpha B \geq 0 \quad \forall |\alpha\rangle$$

- Ritroviamo il caso semplice e più famoso di $\hat{x}$ e $\hat{p}$

$$[x, p] = i\hbar \implies \Delta_\alpha x \cdot \Delta_\alpha p \geq \frac{\hbar}{2} \quad \forall |\alpha\rangle$$

- Possiamo vedere che ci sono stati che minimizzano il prodotto delle incertezze.

Le relazioni 4.5.3 sono realizzate con il segno di uguaglianza (prodotto dei Δ è minimo) quando:

$$\|O_\alpha(\lambda) |\alpha\rangle\| = 0$$

che avviene per un particolare valore di $\lambda = \lambda_{min}$ dipendente da $|\alpha\rangle$, A e B . In particolare

$$\text{se } \lambda = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \implies \lambda_{min} = -\frac{b}{2a} \quad ; \quad b^2 - 4ac = 0$$

per cui

$$\lambda_{min} = + \frac{\langle -i[A, B] \rangle_\alpha}{2 (\Delta_\alpha B)^2}$$

ma l'unico vettore con norma nulla è il vettore nullo. Dunque gli stati $|\alpha\rangle$ che cerchiamo soddisfano

$$O_\alpha(\lambda) |\alpha\rangle = 0 \implies [A - \langle A \rangle_\alpha + i\lambda_{min}(B - \langle B \rangle_\alpha)] |\alpha\rangle = 0$$

che possiamo facilmente tradurla nel linguaggio delle funzioni d'onda¹⁵:

$$\left[-i(A - \langle A \rangle_\alpha) + \frac{\langle -i[A, B] \rangle_\alpha}{2 (\Delta_\alpha B)^2} (B - \langle B \rangle_\alpha) \right] \Psi_\alpha(\vec{r}) = 0$$

che è in generale un'equazione differenziale che può essere usata per determinare $\Psi_\alpha(\vec{r})$. Ad esempio se poni $A \rightarrow p_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ $B \rightarrow x$ allora trovi facilmente

$$\Psi_\alpha(x) = N \exp \left\{ -\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4 (\Delta x)^2} \right\} e^{\frac{i}{\hbar} \langle p_x \rangle x}$$

che come prevedibile è il risultato che avevamo trovato per il pacchetto di onde gaussiano centrato intorno $\langle x \rangle$, con larghezza Δx ed impulso medio $\langle p_x \rangle$.

Osservazione Occorre solo fare un'importante distinzione su operatori autoaggiunti ed hermitiani. Abbiamo visto che gli stati a cui si applica il teorema di indeterminazione per le osservabili A e B soddisfano

$$|\alpha\rangle \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B) \subseteq \mathcal{H}$$

e sono stati normalizzabili. Prendiamo ad esempio una particella in moto su una circonferenza ($R = 1$) e misuriamo posizione e momento. Lo spazio $\mathcal{H} \sim L^2(S^1)$ contiene funzioni al quadrato sommabili in $x \in [0, 2\pi)$ e tali che siano periodiche, ossia

$$\Psi_\alpha(0) = \Psi_\alpha(2\pi)$$

Le autofunzioni

$$\Psi_n(x) = N e^{inx}$$

(con n per la periodicità) sono autofunzioni di $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Si vede

$$\hat{p}\Psi_n(x) = \hbar n \Psi_n(x)$$

¹⁵Ricordando:

$$\langle \vec{r} | \alpha \rangle = \Psi_\alpha(\vec{r})$$

$$\langle \vec{r} | A | \alpha \rangle = \int d^{3n} \vec{r}' \langle \vec{r} | A | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \alpha \rangle = \int d^{3n} \vec{r}' A_{op. diff.} \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') \Psi_\alpha(\vec{r}) = A_{op. diff.} \Psi_\alpha(\vec{r})$$

per cui $p = n\hbar$ è perfettamente definito, mentre ovviamente (calcolando $\langle x^2 \rangle$ e $\langle x \rangle^2$) $\Delta x = 2\pi(R)$, per cui si ha

$$\Delta x \cdot \Delta p = 0$$

ma si è veramente rotto il teorema 4.5.3? No, perché non si può applicare. $\Psi_n(x)$ non è nel dominio di x , in quanto $x\Psi_n(x) \equiv \hat{\Psi}_n(x)$ non soddisfa la periodicità.

4.5.1 Relazione di indeterminazione Energia-Tempo

Insieme alle classiche relazioni di indeterminazione viene spesso citata anche la relazione di indeterminazione energia-tempo

$$\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (4.5.4)$$

ma è importante notare che questa relazione ha una natura del tutto diversa dalle altre che si possono incontrare, non discende dal teorema generale e richiede una interpretazione diversa. Nonostante ciò è comunque di estrema importanza poiché ad esempio in QFT permette di rompere per un certo intervallo di tempo Δt la relazione di mass-shell e quindi permettere a particelle messaggere di *trasportare* un certo quantitativo di energia ΔE tra due particelle elementari. Questo però si vedrà in altri corsi. I motivi della diversa interpretazione sono:

- il tempo t non è un osservabile, nè in Meccanica Classica, nè in Meccanica Quantistica non relativistica, ma è invece un parametro che caratterizza l'evoluzione dei sistemi e delle osservabili. Non si misura il tempo di una particella, ma solamente la posizione che essa occupa ad un dato tempo, e così per ogni evento nella Meccanica non relativistica.
- È anche importante precisare che non discenda da una generalizzazione relativistica di $\Delta x \cdot \Delta p$, poiché una generalizzazione del genere richiede accortezze maggiori.

La relazione 4.5.4 è comunque ricavabile, valida e correttamente interpretata. Cerchiamo un attimo la forma generale del teorema di Ehrenfest. Prendiamo l'osservabile Q che in generale è $Q = Q(q_i, p_i, t)$ e calcoliamo il

suo valor medio in uno stato $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ e la sua evoluzione temporale.

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\langle Q \rangle_\alpha &= \frac{d}{dt} \langle \alpha | Q | \alpha \rangle \\
 &= \left(\frac{d}{dt} \langle \alpha | \right) Q | \alpha \rangle + \langle \alpha | \frac{dQ}{dt} | \alpha \rangle + \langle \alpha | Q \left(\frac{d}{dt} | \alpha \rangle \right) \\
 &\text{usando } i\hbar \frac{d}{dt} | \alpha \rangle = H | \alpha \rangle \quad ; \quad -i\hbar \frac{d}{dt} \langle \alpha | = \langle \alpha | H \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle \alpha | H Q | \alpha \rangle + \left\langle \frac{dQ}{dt} \right\rangle_\alpha - \frac{i}{\hbar} \langle \alpha | Q H | \alpha \rangle \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, Q] \rangle_\alpha + \left\langle \frac{dQ}{dt} \right\rangle_\alpha
 \end{aligned}$$

ossia si è trovato

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle Q \rangle_\alpha = \frac{i}{\hbar} \langle [H, Q] \rangle_\alpha + \left\langle \frac{dQ}{dt} \right\rangle_\alpha} \quad (4.5.5)$$

che è appunto il teorema di Ehrenfest generalizzato¹⁶.

Pensiamo ora ad un'osservabile Q che non dipenda esplicitamente dal tempo e scriviamo la relazione di indeterminazione tra H e Q :

$$\Delta_\alpha E \cdot \Delta_\alpha Q \geq \frac{1}{2} |\langle -i[H, Q] \rangle_\alpha| \quad \implies \quad \Delta_\alpha E \cdot \Delta_\alpha Q \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle Q \rangle_\alpha \right|$$

Questa è la *vera* forma dell'indeterminazione E-t. Il termine dentro il valore assoluto a destra dell'uguaglianza è la velocità di variazione di $\langle Q \rangle_\alpha$ nel tempo e se definiamo $\Delta_\alpha^Q t$ come il tempo necessario affinché il valore $\langle Q \rangle_\alpha$ cambi di una deviazione standard $\Delta_\alpha Q$ allora si ha precisamente

$$\Delta_\alpha^Q t \equiv \frac{\Delta_\alpha Q}{\left| \frac{d\langle Q \rangle_\alpha}{dt} \right|}$$

per cui si trova proprio

$$\Delta_\alpha E \Delta_\alpha^Q t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.5.6)$$

¹⁶Si può notare il parallelismo con il caso classico in cui si aveva

$$\frac{dQ}{dt} = \{Q, H\} + \frac{\partial Q}{\partial t}$$

com'era già emerso dal calcolo dei commutatori. È dunque evidente la corrispondenza: (parentesi di Poisson) $\longleftrightarrow -\frac{i}{\hbar}$ (commutatore). Questa corrispondenza può essere elevata a postulato (Dirac l'ha fatto) e si può ricostruire la Meccanica Quantistica a partire da lì.

ma si noti che $\Delta_\alpha^Q t$ non è una deviazione standard e che soprattutto dipende da Q .

L'interpretazione è la solita che si dà anche per osservabili *usuali*:

- Se $\Delta_\alpha E$ è piccolo, allora la variazione temporale di tutte osservabili dev'essere lenta.
- Se una qualunque osservabile Q varia rapidamente nel tempo allora l'incertezza sul risultato di una misura di E in $|\alpha\rangle$ dev'essere grande.
- L'argomento non si applica a casi stazionari nei quali

$$\frac{d}{dt}\langle Q \rangle_\alpha = 0 \quad , \quad \Delta_\alpha E = 0 \quad , \quad \Delta_\alpha^Q t \rightarrow +\infty$$

4.6 Insieme completo di osservabili compatibili

Ci possiamo chiedere quando il nostro sistema è completamente determinato, ovvero quando noi conosciamo esattamente il comportamento del sistema e non abbiamo più degenerazione delle misure. Diamo alcune definizioni:

- Un insieme di osservabili $\{\mathcal{A}_i\}$ con $i = 1, \dots, p$ sono **compatibili** se sono contemporaneamente misurabili, cioè se i corrispondenti operatori autoaggiunti commutano $[A_i, A_j] = 0 \quad \forall i, j$
- Due osservabili $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ sono **indipendenti** se la conoscenza (misura) di una delle due non determina l'altra¹⁷. Da questa definizione si vede che se due osservabili sono sia compatibili che indipendenti allora ci dev'essere degenerazione dei loro autovalori. Infatti se abbiamo

$$A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad [A, B] = 0$$

gli autostati $|a_i\rangle$ possono essere scelti come una base O.N. di $\mathcal{H}$, ma la misura di a_i non deve determinare completamente il valore di una misura di $\mathcal{B}$. Per cui devono esistere diversi vettori da usare nella base che abbiamo autovalori diversi di B . Li possiamo indicare come

$$|a_i\rangle \longrightarrow |a_i, b_j\rangle$$

così che

$$\begin{aligned} A|a_i, b_j\rangle &= a_i|a_i, b_j\rangle \\ B|a_i, b_j\rangle &= b_j|a_i, b_j\rangle \end{aligned}$$

¹⁷Ad MQ2 si vedrà poi il concetto di stati entangled, che è esattamente la situazione opposta.

- Dato un qualsiasi sistema fisico, gli stati di $\mathcal{H}$ saranno sempre completamente caratterizzati (individuati) dopo che si saranno misurate p osservabili compatibili e indipendenti tali da rimuovere completamente la degenerazione. Un insieme siffatto viene detto **insieme completo di osservabili compatibili (commutanti)** ICOC (a volte detto anche SCOC=sistema completo di osservabili commutanti).

Una cosa importante da notare però è che matematicamente si trovano ICOC anche facilmente, ma non sempre contengono le osservabili fisicamente rilevanti e la completezza o assenza di degenerazioni saranno sempre questioni sperimentali. Storicamente con un ICOC facilmente individuato da $\{\hat{H}, \hat{L}\}$ si sono cominciati a fare esperimenti di Effetto Zeeman (ossia si facevano passare le particelle in zone in cui erano presenti cambi magnetici), ma anche quando ci si aspettava di misurare 0, in realtà si vedevano effetti inattesi; questo portò all'introduzione dello spin elettronico e della modifica dell'ICOC a $\{\hat{H}, \hat{L}, \hat{S}\}$. Nota anche che in alcuni momenti il tuo ICOC può essere utile considerarlo come $\{A, B, C\}$ ed in altri momento con lo stesso sistema fisico è più conveniente utilizzare altre osservabili e quindi altre descrizioni del sistema $\{A, C, D, E\}$.

Capitolo 5

Oscillatore armonico quantistico

In questo capitolo risolveremo uno dei problemi più famosi ed importanti della Meccanica Quantistica, l'oscillatore armonico unidimensionale. È un caso importante in primo luogo perché è uno dei pochi problemi che si è in grado di risolvere in modo analitico completamente in Fisica e soprattutto perché alcuni concetti utilizzati verranno riutilizzati in teorie successive (gli operatori di creazione e distruzione saranno importantissimi in QFT poiché saranno proprio loro che creeranno e distruggeranno particelle ed antiparticelle). Una nota che mi sento di inserire è che quando si modella un cristallo o un solido in Meccanica Statistica lo si fa come un insieme di oscillatori armonici, prima classici, ma che poi diventano quantistici e saranno proprio loro che faranno nascere il concetto di fonone e che porteranno alla statistica di Bose-Einstein.

Vedremo due metodi differenti, ma ugualmente utili per risolvere il problema.

Cominciamo richiamando un po' i concetti classici. L'oscillatore armonico classico (unidimensionale) è una particella puntiforme di massa m soggetta ad una *forza elastica di richiamo* secondo la legge di Hooke

$$F = -kx$$

quindi l'equazione del moto è

$$m\ddot{x} + kx = 0$$

la cui soluzione generale è

$$x(t) = A \cos(\omega t + \varphi) \quad \text{con} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

La forza elastica è conservativa, quindi derivabile da un potenziale (indipendente dal tempo, quindi stazionario)

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad \Longleftrightarrow \quad F = -\frac{dV}{dx}$$

Se vale tutto ciò si può scrivere la Lagrangiana

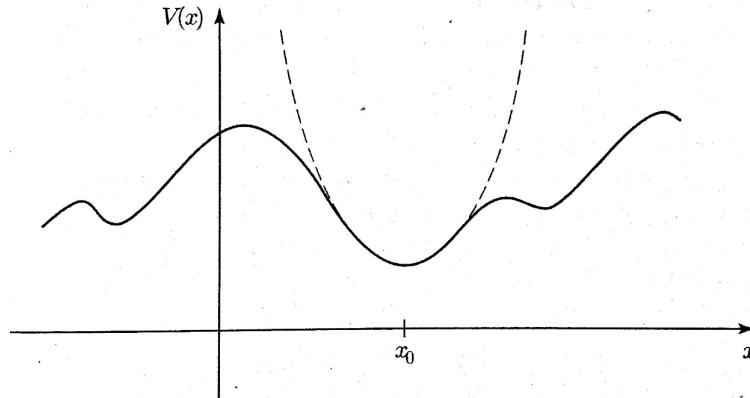
$$L = T - V = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

e quindi l'Hamiltoniana del sistema la trovo come

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \quad \Longrightarrow \quad \dot{x} = \frac{p}{m}$$

$$H = p\dot{x} - L = \frac{p^2}{m} - \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = T + V \quad (5.0.1)$$

Riprendiamo bravemente il perché l'oscillatore armonico è molto importante in Fisica. Prendiamo un generico potenziale unidimensionale $V(x)$ dipendente dalla posizione il cui andamento è il seguente



Naturalmente non esiste un oscillatore armonico perfetto, se si allunga troppo la molla si rompe e tipicamente la legge di Hooke non funziona molto mentre mi avvicino a quella situazione. La parte però interessante in Fisica è quando possiamo fare approssimazioni che ci semplificano problemi complicati. Il potenziale in figura vediamo avere un minimo in x_0 e attorno a quel punto è approssimabile a parabolico. Formalmente, sviluppiamo in serie $V(x)$ attorno al punto di minimo locale

$$V(x) \sim V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$$

possiamo sottrarre $V(x_0)$ a $V(x)$ (nota che è una cosa sempre lecita fare poiché questo non cambia la forza), notiamo che $V'(x_0) = 0$ (poiché x_0 è

appunto un minimo locale) e trascuriamo i termini successivi al second'ordine assumendo $(x - x_0)$ molto piccolo. Otteniamo così

$$V \approx \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$$

ossia, un oscillatore armonico semplice (attorno al punto x_0) di costante elastica $k = V''(x_0)$. Questo è il motivo per cui risolvere questo problema è molto importante. Praticamente qualsiasi moto oscillatorio è armonico semplice in prima approssimazione quando l'ampiezza è piccola. Quindi preso un qualsiasi potenziale con un minimo locale e che si discosti di poco da quella posizione potrebbe essere approssimabile, almeno in via teorica, come un oscillatore armonico semplice. Nota che l'ipotesi che x_0 sia un minimo è fondamentale poiché implica $V''(x_0) \geq 0$, quindi una costante elastica positiva, come dovrebbe essere. Punti in cui $V''(x_0) = 0$ l'oscillazione non è lontanamente armonica.

5.1 Oscillatore armonico quantistico (procedimento analitico)

Siamo stati bravi con il caso classico, ma ora facciamo le cose serie e passiamo alla Meccanica Quantistica. Possiamo trovare una soluzione per l'equazione di Schrodinger stazionaria 2.3.3 che, promuovendo l'Hamiltoniana trovata nel caso classico al ruolo di operatore, in questo caso risulta essere

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \Psi = E\Psi$$

che scritta in modo più comodo è

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \Psi = 0 \quad (5.1.1)$$

A questo punto possiamo introdurre delle quantità adimensionali. Questa operazione è molto popolare in Fisica poiché permette di individuare quantità importanti o caratteristiche del problema. In questo caso trovo quali sono le quantità che scrivo come energie o lunghezze, ossia, trovo lunghezze o energie caratteristiche.

$$\xi = \alpha x \quad ; \quad \varepsilon = \beta E$$

logicamente vale

$$[\alpha] = L^{-1} \quad ; \quad [\beta] = E^{-1}$$

Una scelta naturale che possiamo fare su β è quella di

$$\beta = \frac{1}{\hbar\omega}$$

per via della definizione di energia di Planck. Per quanto riguarda α è un po' più complicato, ma si può notare che

$$\begin{aligned} [E] = ML^2T^{-2} &\implies [\hbar\omega] = ML^2T^{-2} \implies \left[\frac{\hbar\omega}{m}\right] = L^2T^{-2} \\ \implies \underset{\text{tolgo il } T^2}{\left[\frac{\hbar\omega}{m} \cdot \frac{1}{\omega^2}\right]} &= L^2 \left[\frac{\hbar}{m\omega}\right] = L^2 \implies \left[\frac{m\omega}{\hbar}\right] = L^{-2} \implies \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \end{aligned}$$

Quindi posso sostituire

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad ; \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

(il 2 lo si mette con il seno del poi) nell'equazione 5.1.1

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{d\xi^2} \frac{1}{\frac{\hbar}{m\omega}} + \left(\frac{1}{2}\varepsilon\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi \right)^2 \right) \Psi &= 0 \\ \implies \frac{\hbar\omega}{2} \left[\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2)\Psi \right] &= 0 \\ \implies \boxed{\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2)\Psi} &= 0 \end{aligned} \tag{5.1.2}$$

e otteniamo la vera equazione differenziale che cercheremo di risolvere. Cercheremo subito la soluzione asintotica per $\xi \rightarrow \pm\infty$, che è interessante per noi visto che il potenziale che abbiamo corrisponde ad una buca di potenziale infinita¹ e quindi la particella sarà sempre confinata al suo interno (oltre una certa x non potrà andare) e sarà quindi localizzata per ogni valore di energia E (e quindi ε). Come soluzione mi aspetto un'andamento tipo $\exp < 0$, visto che so che devono valere le condizioni al contorno $\Psi \rightarrow 0$ per $\xi \rightarrow \pm\infty$. Per ogni ε finita l'equazione da risolvere si riduce a

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} - \xi^2\Psi = 0 \tag{5.1.3}$$

e come già intuito ha soluzione

$$\Psi(\xi) \propto \exp\left\{\pm\frac{1}{2}\xi^2\right\}$$

per le condizioni di normalizzazione solamente la soluzione con il segno meno è accettabile. Come ansatz al nostro problema facciamo

$$\Psi(\xi) = \exp\left\{-\frac{1}{2}\xi^2\right\} H(\xi) \tag{5.1.4}$$

¹se ci pensi è un potenziale che va come x^2 ed è sostanzialmente una parabola rivolta verso l'alto illimitata, quindi un problema identico a quello risolto poche pagine fa, ma con una forma del fondo differente.

dove imponiamo che $H(\xi)$ non modifichi il comportamento di Ψ quando $\xi \rightarrow \pm\infty$.

Facciamo i conti e mettiamo le derivate dentro la 5.1.3:

$$\begin{aligned}\frac{d\Psi}{d\xi} &= -\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H(\xi) + e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \frac{dH}{d\xi} \\ \frac{d^2\Psi}{d\xi^2} &= \frac{d^2\Psi}{d\xi^2} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - 2\xi \frac{d\Psi}{d\xi} - H(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} + \xi^2 H(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\end{aligned}$$

sostituisco

$$\begin{aligned}\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} - (1 - \xi^2)H(\xi) + (\varepsilon - \xi^2)H(\xi) &= 0 \\ \frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\varepsilon - 1)H(\xi) &= 0\end{aligned}\tag{5.1.5}$$

So che le equazioni differenziali del secondo ordine in forma normale hanno soluzioni che possono essere singolari solo nei punti singolari dei coefficienti (ricordati Metodi I). $H(\xi)$ quindi è regolare ovunque tranne che per $\xi \rightarrow \pm\infty$. Cerchiamo una soluzione per serie di potenze del tipo:

$$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n$$

essendo $H(\xi)$ regolare ovunque possiamo centrarla in $\xi = 0$. Facciamo i conti

$$\begin{aligned}\frac{dH}{d\xi} &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n n \xi^{n-1} \\ \frac{d^2H}{d\xi^2} &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n n(n-1) \xi^{n-2} \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} c_n n(n-1) \xi^{n-2} - 2 \sum_{n=0}^{\infty} c_n n \xi^{n-1} + (\varepsilon - 1) \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n &= 0 \\ \sum_{n=-2}^{\infty} c_{n+2} (n+2)(n+1) \xi^n - 2 \sum_{n=0}^{\infty} c_n n \xi^n + (\varepsilon - 1) \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n &= 0 \\ \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+2} (n+2)(n+1) \xi^n + \sum_{n=0}^{\infty} c_n (-2n + (\varepsilon - 1)) \xi^n &= 0 \\ \sum_{n=0}^{\infty} (c_{n+2} (n+2)(n+1) + c_n (-2n + \varepsilon - 1)) \xi^n &= 0\end{aligned}$$

si trova dunque

$$c_{n+2} = \frac{2n+1-\varepsilon}{(n+2)(n+1)} c_n\tag{5.1.6}$$

è dunque chiaro che ci siano due relazioni di ricorrenza, una per indici pari ed una per indici dispari. Quindi le soluzioni avranno parità definita (se poniamo $c_0 = 0$ avremo solo soluzioni dispari e se $c_1 = 0$ avremo solo quelle pari). Però è in questo punto che bisogna ricordarsi della condizione che $H(\xi)$ non modifichi il comportamento di Ψ per $\xi \rightarrow \pm\infty$. Il comportamento per grande ξ è determinato dal comportamento dei coefficienti per grande n . Vediamo

$$\frac{c_{n+2}}{c_n} = \frac{2n+1-\varepsilon}{(n+2)(n+1)} \sim \frac{2n}{n^2} = \frac{2}{n} \quad n \rightarrow \infty$$

e questo comportamento corrisponde a (per soluzioni pari)

$$c_{n+2} \sim \frac{1}{n/2} c_n \implies c_{n+2} = \frac{1}{\left(\frac{n-2}{2}\right) \left(\frac{n-4}{2}\right) \dots \left(\frac{n-n+2}{2}\right)} c_0 \implies c_n \sim \frac{1}{(n/2)!} C$$

in cui $C \in \mathbb{R}$. Si ha dunque una soluzione

$$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C}{(n/2)!} \xi^n \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C}{(n)!} \xi^{2n} \sim C e^{\xi^2}$$

che non rispetta appunto il vincolo che $H(\xi)$ non modifichi il comportamento di Ψ . Quindi $H(\xi)$ deve troncarsi, ovvero, $H(\xi)$ dev'essere un polinomio, ossia

$$\exists n / c_n \neq 0 \wedge c_{n+2} = 0$$

il che implica

$$c_{n+2} = \frac{2n+1-\varepsilon}{(n+2)(n+1)} c_n = 0 \implies \boxed{\varepsilon \equiv \varepsilon_n = 2n+1} \quad (5.1.7)$$

e questa condizione è molto importante, porta ad una caratteristica fondamentale della Meccanica Quantistica, ossia che l'energia sia quantizzata. Infatti si vede che

$$\varepsilon = \beta E \longrightarrow E = \frac{\beta \varepsilon_n}{2} = (2n+1) \frac{\hbar \omega}{2} \implies \boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega} \quad (5.1.8)$$

che rappresenta l'energia di un oscillatore armonico quantistico. Per ogni energia E_n fissata (ovvero per ogni n fissato) c'è un'unica soluzione

$$\boxed{\Psi_n(\xi) = N_n H_n(\xi) \exp\left\{-\frac{1}{2}\xi^2\right\}} \quad (5.1.9)$$

in cui N_n è una costante di normalizzazione arbitraria e $H(\xi)$ sono polinomi di grado n per cui valgono:

- hanno parità definita

$$\bullet H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0$$

e sono detti **polinomi di Hermite**. A questo punto si potrebbero enunciarne alcune proprietà dei polinomi di Hermite che sono un insieme di polinomi ortogonali in $L^2(\mathbb{R})$, ma per brevità non vengono riportate in seguito, ma vedi l'Appendice A se sei interessato o vuoi approfondire. Ovviamente trattazioni rigorose sono su un qualsiasi testo. Possiamo però vedere le proprietà delle soluzioni dell'oscillatore armonico.

Ortonormalità

Le soluzioni trovate formano un insieme ortogonale in $L^2(-\infty, +\infty)$ che può essere ortonormalizzato, proprio perché i polinomi di Hermite, se presi con il giusto peso, sono ortogonali

$$(H_n, H_m) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) = h_n \delta_{n,m}$$

dove h_n è una costante dipendente da n . Si può verificare che effettivamente gli H_n siano ortogonali usando la funzione generatrice e trovando

$$h_n = \sqrt{\pi} n! 2^n$$

I conti sono fatti in un apposita sottosezione A.1 nell'Appendice A. Nota l'ortogonalità dei polinomi di Hermite possiamo normalizzare la funzione d'onda

$$\Psi_n(x) = N_n H_n(\alpha x) \exp\left\{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right\} \quad (5.1.10)$$

in cui abbiamo esplicitato $\xi = \alpha x$ e ricordiamo che $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x)|^2 \\ &= |N_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2} (H_n(\alpha x))^2 && \text{cambio } \xi = \alpha x \\ &= \frac{|N_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} (H_n(\xi))^2 \\ &= \frac{|N_n|^2}{\alpha} \sqrt{\pi} n! 2^n \end{aligned}$$

dunque

$$N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} n! 2^n}} \quad (5.1.11)$$

Valori medi e relazione di indeterminazione

Si può verificare che

$$\begin{aligned}\langle x \rangle_n &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_n^*(x) x \Psi_n(x) = 0 \\ \langle p \rangle_n &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_n^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_n(x) = 0\end{aligned}$$

essendo le Ψ_n a parità definita (essendole i polinomi H_n) e quindi nella prima riga si ha Ψ_n^2 pari e di conseguenza se integrata da 0, mentre nella seconda riga si vede che se ad esempio Ψ_n è pari, allora Ψ'_n è dispari, quindi complessivamente $\Psi_n \Psi'_n$ è dispari che integrata in un intervallo simmetrico da 0. Tutto ciò è più semplice grazie al fatto che si ha a che fare con funzioni reali.

Però si ha:

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle_n &= \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 (\Psi_n(x))^2 \\ &= N_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2} H_n^2(x) x^2 \\ &= \frac{N_n^2}{\alpha^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) \xi^2\end{aligned}$$

si può usare la relazione di ricorrenza [A.0.3](#) indicata nell'Appendice [A](#)

$$\xi H_n(\xi) = \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) + n H_{n-1}(\xi)$$

ne faccio il quadrato

$$(\xi H_n(\xi))^2 = \frac{1}{4} H_{n+1}^2(\xi) + n^2 H_{n-1}^2(\xi) + \dots$$

dove si indicano con ... termini misti che si annullano quando integrati

essendo H_n ortogonali. Quindi

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle_n &= \frac{N_n^2}{\alpha^3} \left(\frac{1}{4} h_{n+1} + n^2 h_{n-1} \right) \\
 &= \frac{1}{\alpha^2} \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \left(\frac{1}{4} \sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)! + n^2 \sqrt{\pi} 2^{n-1} (n-1)! \right) \\
 &= \frac{1}{\alpha^2} \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{1}{4} 2 2^n (n+1) (n)! + n n \frac{1}{2} 2^n (n-1)! \right) \\
 &= \frac{1}{\alpha^2} \frac{1}{2^n n!} \frac{1}{2} 2^n n! \left((n+1) + n \right) \\
 &= \frac{\hbar}{m\omega} \frac{1}{2} (2n+1) \\
 &= \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)
 \end{aligned}$$

A questo punto per calcolare $\langle p^2 \rangle_n$ si possono sfruttare le relazioni per l'energia:

$$\langle V(x) \rangle_n = \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle_n = \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \frac{1}{2} E_n$$

Dunque

$$\langle T \rangle_n = \langle E - V(x) \rangle_n = \frac{1}{2} E_n$$

e abbiamo ritrovato il teorema del viriale! Sapendo

$$\langle T \rangle_n = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle_n$$

è immediato vedere

$$\langle p^2 \rangle_n = m \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

A questo punto si è pronti a vedere la relazione di indeterminazione

$$\begin{aligned}
 (\Delta x)_n \cdot (\Delta p)_n &= \sqrt{\langle x^2 \rangle_n} \sqrt{\langle p^2 \rangle_n} \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot m \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega} \\
 &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar
 \end{aligned}$$

è verificato il principio di Heisemberg e si vede che lo stato che minimizza l'indeterminazione è lo stato di minima energia, ossia Ψ_0 .

Limite classico

Si può vedere che succede se facciamo un limite classico, ovvero, se vediamo

$n \rightarrow \infty$. Si vuole sostanzialmente mimare quello fatto per il caso di buca di potenziale infinita (vedi le osservazioni fatte in §2.3.2). Sappiamo che la probabilità classica di trovare la particella in un intervallo dx nei pressi di un punto x è data da

$$dP_{classica}(x) = \rho_{cl.}(x)dx = \frac{dt(x)}{T/2}$$

ossia il rapporto tra il tempo intercorso nel passaggio da x ad $x + dx$ in funzione di x e il semiperiodo del moto. In questo caso non mi aspetto una densità di probabilità classica costante, ma più alta sui bordi in cui il corpo è quasi fermo, piuttosto che al centro dove la velocità è massima. $dt(x)$ lo estraggo dalla legge oraria. So per l'oscillatore armonico classico

$$\begin{aligned} x(t) = A \cos(\omega t + \beta) &\implies t = \frac{1}{\omega} \left[\arccos\left(\frac{x}{A}\right) - \beta \right] \\ dt = \frac{1}{\omega} \frac{dx}{\sqrt{A^2 - x^2}} &\implies \frac{T}{2} = \int_0^{T/2} dt = \frac{1}{\omega} \int_{-A}^A \frac{dx}{\sqrt{A^2 - x^2}} = \frac{\pi}{\omega} \end{aligned}$$

dunque si trova

$$\begin{aligned} \rho_{cl.}(x)dx &= \frac{dt(x)}{T/2} = \frac{1}{\omega} \frac{dx}{\sqrt{A^2 - x^2}} \cdot \frac{\pi}{\omega} = \frac{1}{\pi} \frac{dx}{\sqrt{A^2 - x^2}} \\ \implies \rho_{cl.}(x) &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{A^2 - x^2}} \end{aligned}$$

si vede facilmente che vale

$$\int_{-A}^A \rho_{cl.}(x)dx = 1$$

Se passo dall'ampiezza classica a quella quantistica trovo una certa corrispondenza:

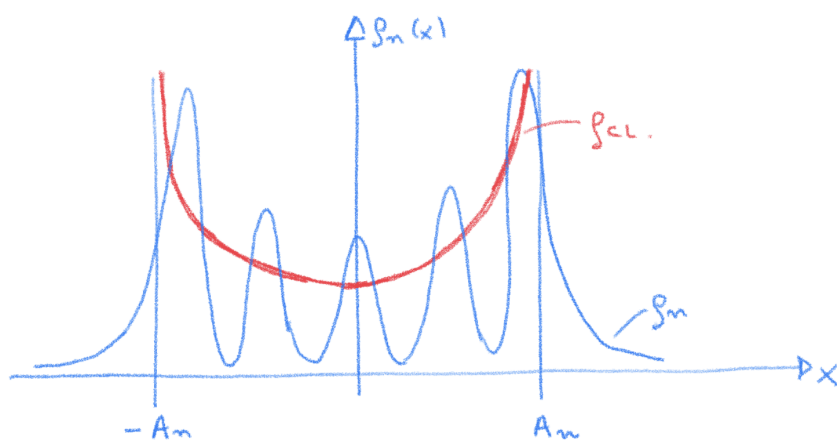
$$\begin{aligned} E_{cl.} = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 &\implies A = \sqrt{\frac{2E_{cl.}}{m\omega^2}} \\ \implies A_n = \sqrt{\frac{2E_n}{m\omega^2}} &= \sqrt{\frac{(2n+1)\hbar}{m\omega}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{2n}}{\alpha} \end{aligned}$$

Ricordando che sussiste un teorema sui polinomi di Hermite che hanno zeri tutti reali e con $n \rightarrow \infty$ confinati in

$$-\sqrt{2n} \leq \xi \leq \sqrt{2n}$$

allora, per grandi n si può vedere anche graficamente che $\rho_n(x)$ oscilla nella regione classicamente permessa², mentre decade esponenzialmente al di fuori

²se avessi avuto uno zero $\in \mathbb{C}$ avrei avuto la $\rho_n(x)$ con dei picchi al di fuori della zona classicamente permessa.



e in più vale che

$$\forall \Delta \text{ fissato} \quad \lim_{n \rightarrow +\infty} \int_{x_0}^{x_0+\Delta} \rho_n(x) dx = \int_{x_0}^{x_0+\Delta} \rho_{cl.}(x) dx$$

Esercizio. Pacchetto gaussiano oscillante

A questo punto in aula abbiamo visto tutto quello appena visto fin'ora applicato ad un caso specifico, ma ho deciso di non inserire tutti i conti espliciti per alleggerire il tutto, visto che è un puro esercizio, però attenzione che è comunque un caso interessante, quindi scrivo testo e risultati e se vuoi vedere meglio tutti i passaggi e conti puoi vedere la *Lezione 11* di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea. È un esercizio collegato a quello già visto nel capitolo §2.1.3.

Si parte dalla condizione iniziale (gaussiana, normalizzata e centrata in $x = x_0$)

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\alpha^2(x - x_0)^2\right\}$$

e si vuole studiare la sua evoluzione temporale. Sappiamo che si può sempre scrivere $\Psi(x, t)$ come combinazione lineare delle soluzioni stazionarie Ψ_n dell'oscillatore armonico, quindi, puoi calcolarti i vari coefficienti della serie (sfruttando il fatto che l'integrale

$$I_n(\xi_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi H_n(\xi) \exp\left\{-\frac{1}{2}\xi^2 - \frac{1}{2}(\xi - \xi_0)^2\right\}$$

si può calcolare utilizzando la funzione generatrice dei polinomi di Hermite, ne parlo nell'Appendice A, definendo

$$I(z, \xi_0) = \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{z^m}{m!} I_m(\xi_0)$$

e deducendone appunto il comportamento (di $I_n(\xi_0)$). Trovati i coefficienti ti puoi scrivere $\Psi(x, t)$ al tempo t , che conterrà una somma infinita, ma accorgendoti che dentro c'è una funzione generatrice puoi scriverla con la sua definizione esponenziale e quindi trovare una funzione d'onda della forma

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \exp\{\mathcal{R} + i\mathcal{I}\}$$

da cui ricavi cos'è $\rho(x, t)$ (quello rilevante è la parte reale $\mathcal{R}$ in $\Psi(x, t)$)

$$\rho(x, t) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left\{-\alpha^2(x - x_0 \cos \omega t)^2\right\}$$

e puoi vedere che il pacchetto gaussiano oscilla, ma senza allargarsi. Puoi anche vedere che tutti gli stati stazionari contribuiscono a questo comportamento, ma il contributo più grande viene dallo stato con l'energia corrispondente a quella classica. Lo fai controllando per quale valore di n che

corrisponde il c_n massimo (*SUGGERIMENTO* metti c_n in un log e vedi il massimo). Troverai

$$n = \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x_0^2$$

ossia quella classica.

5.2 Oscillatore armonico quantistico (procedimento algebrico)

Rivediamo la soluzione dell'oscillatore armonico monodimensionale in un modo detto à la Heisenberg, poiché utilizzeremo metodi algebrici (operatori) piuttosto che analitici.

Sappiamo scriverci l'hamiltoniana del sistema:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (5.2.1)$$

In una dimensione ci aspettiamo che l'ICOC del nostro sistema sia composto da una sola osservabile e trattandosi di un problema stazionario scegliamo l'energia (rappresentata chiaramente da H). Dobbiamo dunque cercare una base di $\mathcal{H}$ per cui dobbiamo risolvere l'equazione agli autovalori:

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (5.2.2)$$

dobbiamo dunque diagonalizzare H . L'indice n non è (ancora) necessariamente intero, ma sicuramente è discreto. Dai principi fondativi chiediamo che

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \quad ; \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$$

e nota che queste informazioni sono sufficienti per risolvere completamente il problema.

Prima di attaccare il problema e cercare una soluzione completa, vediamo alcune caratteristiche degli autovalori dell'hamiltoniana.

Gli autovalori E_n sono strettamente positivi Infatti se li calcoliamo:

$$\begin{aligned} E_n &= \langle n| H |n\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \langle n| p^2 |n\rangle + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle n| x^2 |n\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \left[(\Delta_n p)^2 + \langle n| p |n\rangle^2 \right] + \frac{1}{2} m\omega^2 \left[(\Delta_n x)^2 + \langle n| x |n\rangle^2 \right] \\ &\geq \frac{1}{2m} (\Delta_n p)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 (\Delta_n x)^2 \end{aligned}$$

avendo usato che $(\Delta_n Q)^2 = \langle Q^2 \rangle_n - \langle Q \rangle_n^2$. Posso già notare che $E_n > 0$ poiché potrebbe essere 0 solo se i due Δ_n fossero 0, che so essere proibito dall'indeterminazione. Ora sfrutto $\Delta_n x \cdot \Delta_n p \geq \hbar/2$

$$\geq \frac{1}{2m} (\Delta_n p)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{(\Delta_n p)^2}$$

possiamo cercare il minimo di questa espressione in funzione di $(\Delta_n p)^2 \equiv z \geq 0$. Calcoliamo dunque

$$\begin{aligned} \min \left(\frac{z}{2m} + \frac{\hbar^2 m \omega^2}{8} \frac{1}{z} \right) \\ \frac{1}{2m} - \frac{\hbar^2 m \omega^2}{8} \frac{1}{z^2} = 0 \\ \implies z = \frac{1}{2} m \hbar \omega \end{aligned}$$

per cui possiamo vedere che

$$E_{min} = \frac{1}{2m} \frac{1}{2} m \omega \hbar + \frac{\hbar^2 m \omega^2}{8} \frac{2}{m \hbar \omega} = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

Nota questa non è una dimostrazione del valore minimo di E_n poiché ci siamo messi in una situazione particolare in cui il valore minimo è saturato ($\langle p \rangle_n = \langle x \rangle_n = 0$).

Una dimostrazione alternativa si potrebbe fare sfruttando il commutatore $[x, p] = i\hbar$:

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{1}{2m} \langle n | p^2 | n \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle n | x^2 | n \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \sum_k [\langle n | p | k \rangle \langle k | p | n \rangle + m^2 \omega^2 \langle n | x | k \rangle \langle k | x | n \rangle] \\ &= \frac{1}{2m} \sum_k [|\langle n | p | k \rangle|^2 + m^2 \omega^2 |\langle n | x | k \rangle|^2] \end{aligned}$$

che è la somma di quantità positive o nulle, per cui si ha $E_n \geq 0$. Si può però vedere che

$$E_n = 0 \iff \langle n | p | k \rangle = \langle n | x | k \rangle = 0 \quad \forall |k\rangle$$

cosa che però è proibita:

$$\begin{aligned} [x, p] &= i\hbar \\ \implies i\hbar &= \langle n | xp - px | n \rangle \\ i\hbar &= \sum_k [\langle n | x | k \rangle \langle k | p | n \rangle - \langle n | p | k \rangle \langle k | x | n \rangle] \neq 0 \end{aligned}$$

Per cui $E_n > 0 \quad \forall |n\rangle$.

per cui viola il principio di indeterminazione, per cui non può esistere. Dunque tutti gli autovalori di H sono organizzati in una sequenza equispaziata, e autovalori adiacenti differiscono di $\hbar\omega$.

Soluzione completa In Fisica come già detto è comodo lavorare in quantità adimensionali. Per cui definiamo

$$\mathcal{H} \equiv \frac{H}{\hbar\omega} = \frac{1}{2m\hbar\omega} (p^2 + m^2\omega^2 x^2) \quad , \quad \varepsilon_n \equiv \frac{E_n}{\hbar\omega} \quad (5.2.3)$$

e dunque

$$\mathcal{H} |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle \quad (5.2.4)$$

Possiamo inoltre fattorizzare l'hamiltoniana definendo due nuovi operatori (non autoaggiunti) che sono l'uno l'aggiunto dell'altro:

$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (p - im\omega x) \quad (5.2.5)$$

$$a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (p + im\omega x) \quad (5.2.6)$$

vediamo il loro prodotto:

$$a^\dagger a = \frac{1}{2m\omega\hbar} (p^2 + m^2\omega^2 x^2 + im\omega[x, p]) = \mathcal{H} - \frac{1}{2}$$

per cui possiamo fattorizzare l'hamiltoniana come

$$\mathcal{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} \quad (5.2.7)$$

Possiamo vedere che algebra soddisfano i tre operatori:

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2m\omega\hbar} (-im\omega[x, p] + im\omega[p, x]) = 1 \quad (5.2.8)$$

$$[\mathcal{H}, a] = [a^\dagger a, a] = -a \quad (5.2.9)$$

$$[\mathcal{H}, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger \quad (5.2.10)$$

questa prende il nome di **algebra di Heisenberg** e ha delle fondamentali conseguenze (riusciamo a vedere come agiscono gli operatori a e $a^\dagger$) $\forall |l\rangle$:

$$\mathcal{H}[a^\dagger |l\rangle] = (a^\dagger \mathcal{H} + a^\dagger) |l\rangle = (\varepsilon_l + 1)(a^\dagger |l\rangle)$$

$$\mathcal{H}[a |l\rangle] = (a\mathcal{H} - a) |l\rangle = (\varepsilon_l - 1)(a |l\rangle)$$

avendo sfruttato i commutatori. In altre parole abbiamo trovato:

$a^\dagger |l\rangle$ è un autostato di $\mathcal{H}$ e $\in$ all'autovalore $\varepsilon_l + 1$

$a |l\rangle$ è un autostato di $\mathcal{H}$ e $\in$ all'autovalore $\varepsilon_l - 1$

Dunque possiamo considerare a e $a^\dagger$ come gli operatori di distruzione e creazione di quanti di energia che ci permettono di salire e scendere lungo lo spettro di $\mathcal{H}$. Per cui dato un singolo stato abbiamo di fatto costruito tutti gli altri; basta agire un numero sufficiente di volte con a piuttosto che con $a^\dagger$ per scendere o salire di quanti di energia. Avendo dimostrato che $E_n > 0$ e quindi $\varepsilon_n > 0$ allora l'azione di a deve terminare (cioè dev'essere un limite inferiore):

$$\text{deve esistere } |0\rangle \text{ / } a|0\rangle = 0$$

Nota l'azione di a dovrebbe terminare anche se non avessimo visto che $\varepsilon > 0$, poichè se non lo facesse vorrebbe dire che noi potremmo prelevare energia dal nostro sistema all'infinito, il che però vorrebbe dire che il sistema non è stabile.

L'energia dello stato fondamentale (lo stato di minima energia, il vuoto $|0\rangle$) è data da:

$$\mathcal{H}|0\rangle = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)|0\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle \quad \longrightarrow \quad \varepsilon_0 = \frac{1}{2}$$

ovvero

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

che implica

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (5.2.11)$$

come già trovato nella 5.1.8 nel metodo analitico.

5.2.1 Operatori di creazione e distruzione

È facile calcolare esplicitamente gli elementi di matrice degli operatori a e $a^\dagger$ nella base $\{|n\rangle\}$. Infatti

$$\langle k|\mathcal{H}a^\dagger|l\rangle = \begin{cases} \varepsilon_k \langle k|a^\dagger|l\rangle \\ \langle k|a^\dagger\mathcal{H} + a^\dagger|l\rangle = (\varepsilon_l + 1) \langle k|a^\dagger|l\rangle \end{cases}$$

da cui trovo

$$[\varepsilon_k - (\varepsilon_l + 1)] \langle k|a^\dagger|l\rangle = 0$$

per cui

$$\langle k|a^\dagger|l\rangle = 0 \quad \text{a meno che} \quad \varepsilon_k = \varepsilon_l + 1 \iff k = l + 1 \quad (5.2.12)$$

e in modo del tutto analogo si trova

$$\langle k|a|l\rangle = 0 \quad \text{a meno che} \quad \varepsilon_k = \varepsilon_l - 1 \iff k = l - 1 \quad (5.2.13)$$

Dunque si può scrivere

$$\langle k | a | l \rangle \equiv \lambda_l \delta_{k,l-1} \quad \lambda_l \in \mathbb{R} \quad (5.2.14)$$

$$(\langle k | a | l \rangle)^* = \langle l | a^\dagger | k \rangle = \lambda_l^* \delta_{k,l-1} \quad (5.2.15)$$

e nota che nella δ rimane il $l - 1$ poiché $a^\dagger$ fa crescere³. Vediamo che

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) = \langle n | \mathcal{H} | n \rangle = \langle n | a^\dagger a | n \rangle + \frac{1}{2} \implies \langle n | a^\dagger a | n \rangle = n$$

per cui possiamo dire che l'operatore $N = a^\dagger a$ conta il numero di quanti di energia. Conseguenza di quello appena visto è:

$$\begin{aligned} n &= \langle n | a^\dagger a | n \rangle = \sum_k \langle n | a^\dagger | k \rangle \langle k | a | n \rangle \\ &= \langle n | a^\dagger | n-1 \rangle \langle n-1 | a | n \rangle = |\lambda_n|^2 \end{aligned}$$

e quindi possiamo scegliere (stiamo modulando la fase di $|n\rangle$)

$$\lambda_n = \sqrt{n} \quad (5.2.16)$$

Dunque usando le relazioni 5.2.15, 5.2.14 e 5.2.16 possiamo scrivere esplicitamente le matrici degli operatori a e $a^\dagger$:

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (5.2.17)$$

possiamo fare il trasposto e complesso coniugato (o semplicemente il conto con 5.2.15)

$$a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (5.2.18)$$

Riusciamo dunque a scrivere l'azione di a e $a^\dagger$ su un generico stato stazionario:

$$a |n\rangle = \sqrt{n-1} |n-1\rangle \quad ; \quad a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n} |n+1\rangle \quad (5.2.19)$$

³Lo vedi bene da

$$\left(\langle l+1 | a^\dagger | l \rangle \right)^* = \langle l | a^\dagger | l+1 \rangle$$

Nota che oltre a fattorizzare $\mathcal{H}$ dalle espressioni 5.2.6 e 5.2.5 possiamo scrivere le espressioni:

$$p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a + a^\dagger) \quad (5.2.20)$$

$$x = -i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger - a) \quad (5.2.21)$$

per cui possiamo facilmente ottenere un'espressione matriciale di x e p e possiamo vedere che hanno elementi di matrice non nulli solo immediatamente sopra e immediatamente sotto la diagonale. Ne segue subito dunque che

$$\langle n|p|n\rangle = \langle n|x|n\rangle = 0$$

e anche il calcolo di $\langle n|p^2|n\rangle$ e $\langle n|x^2|n\rangle$ è elementare⁴.

Prima però abbiamo detto che conosciuta l'azione di a e $a^\dagger$ e dato un qualsiasi stato allora erano determinati anche gli altri; per cui ora vediamo come esprimere un generico stato in termini di operatori di creazione e distruzione. Parto dicendo che se agisco con $a^\dagger$ sul vuoto avrò qualcosa di proporzionale a $|1\rangle$ che so dover essere normalizzabile, per cui

$$|1\rangle = N_1 a^\dagger |0\rangle \implies \langle 1|1\rangle = 1 = N_1 \langle 1|a^\dagger|0\rangle = N_1 \sqrt{1} \implies N_1 = 1$$

posso fare ragionamenti simili anche per $|2\rangle$

$$\begin{aligned} |2\rangle = N_2 (a^\dagger)^2 |0\rangle &\implies \langle 2|2\rangle = 1 = N_2 \langle 2|(a^\dagger)^2|0\rangle \\ &= N_2 \langle 2|a^\dagger|1\rangle \langle 1|a^\dagger|0\rangle = N_2 \sqrt{1}\sqrt{2} \implies N_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Procedendo così possiamo concludere che possiamo scrivere

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (5.2.22)$$

Questo è tutto quello che ci serve per vedere come costruire le funzioni d'onda $\Psi_n(x) = \langle x|n\rangle$. Usiamo

$$a|0\rangle = 0 \implies (p - im\omega x)|0\rangle = 0$$

⁴Basta vedere

$$\begin{aligned} p^2 &= \frac{m\omega\hbar}{2} (a^2 + (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a) \\ &= \frac{m\omega\hbar}{2} (a^2 + (a^\dagger)^2 + 2a^\dagger a + 1) \end{aligned}$$

e analogamente per x^2 . Per cui

$$\langle n|p^2|n\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}(2n+1) = \left(n + \frac{1}{2}\right)m\omega\hbar$$

come visto con il procedimento analitico.

$$\begin{aligned}
\Rightarrow 0 &= \langle x | (p - im\omega x) | 0 \rangle \\
&= \int dy \langle x | p | y \rangle \langle y | 0 \rangle - im\omega x \langle x | 0 \rangle \\
&= \int dy \delta(x - y) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_0(y) - im\omega x \Psi_0(x) \\
&= \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_0(x) - im\omega x \Psi_0(x) \\
\Rightarrow \frac{d\Psi_0}{dx} &= -\frac{m\omega}{\hbar} x \Psi_0(x) \\
\Rightarrow \Psi_0(x) &= N e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}
\end{aligned}$$

che normalizzando troviamo

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad \text{con} \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (5.2.23)$$

come noto. Possiamo fare anche la stessa cosa per $\Psi_n(x) \equiv \langle x | n \rangle$:

$$\begin{aligned}
\Psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{(2m\omega\hbar)^{n/2}} \langle x | (p + im\omega x)^n | 0 \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{(2m\omega\hbar)^{n/2}} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} + im\omega x \right)^n \Psi_0(x)
\end{aligned}$$

introduciamo $\xi = \alpha x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ per cui si ha

$$-i\hbar \frac{d}{dx} + im\omega x = -i\hbar \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{d\xi} + im\omega \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \xi = -i\sqrt{m\omega\hbar} \left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right)$$

e se utilizziamo anche la relazione

$$\left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right)^n f(\xi) = e^{\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \left[e^{-\frac{1}{2}\xi^2} f(\xi) \right]$$

allora la funzione d'onda diventa

$$\begin{aligned}
\Psi_n(\alpha x) &= \underbrace{\sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}}}_{N_n} (-i)^n \left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\
&= N_n (i)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \left[(-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right] \\
&= (i)^n \Psi_n^{(Schr.)}(\alpha x)
\end{aligned}$$

Quindi abbiamo ritrovato i polinomi di Hermite con una potenza di i davanti che è l'unica possibile differenza che uscirebbe se definissimo a e $a^\dagger$ in modo diverso, ma che comunque non importa poiché è una fase che si può riassorbire in $|n\rangle$ permettendoci di ritrovare esattamente il risultato analitico a là Schrodinger.

Capitolo 6

Momento angolare in Meccanica Quantistica

In questo capitolo studieremo meglio un punto importante di tutta la teoria: il momento angolare. È un argomento fondamentale, non solo perché permette di parlare di orbitali atomici in un atomo di H, oppure perché permette di introdurre il concetto di spin di una particella, ma soprattutto perché è di vitale importanza per problemi con potenziali centrali.

Facciamo una breve introduzione e vediamo quale algebra soddisfa. Con questo capitolo cominciamo a trattare problemi tridimensionali e il primo problema che ci interessa studiare quello in cui abbiamo un potenziale centrale $V = V(r)$, per il quale:

$$H = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + V(r) \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$$

con questa forma di hamiltoniana non è molto comodo lavorare e cercare di risolvere l'equazione di Schrodinger, per cui cerchiamo di scrivere in modo più semplice il laplaciano Δ . Ripartiamo da concetti classici e li quantizziamo (eleviamo a ruolo di operatore). Ci ricordiamo che il momento angolare $\vec{L}$ è uno pseudovettore, ossia, è invariante per rotazioni, ma usando la parità non inverte di segno, e ci ricordiamo la sua definizione:

$$\begin{aligned}\vec{L} \equiv \vec{r} \times \vec{p} &\implies \vec{L} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla} \\ L_i = \sum_{j,k=1}^3 \varepsilon_{ijk} x_j p_k &\implies \vec{L} = -i\hbar \sum_{j,k=1}^3 \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \\ \begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{cases} &\implies \begin{cases} L_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ L_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{cases}\end{aligned}$$

Si verifica subito che questi operatori quantistici non commutano:

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y \\ &= i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z\end{aligned}$$

Gli altri commutatori si trovano in maniera analoga, oppure basta imporre la covarianza per rotazioni. In ogni caso si trova:

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad ; \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

essendo evidente che ci sono permutazioni cicliche viene naturale utilizzare il tensore di Levi-Civita¹, per cui:

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} L_k \equiv i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \quad (6.0.1)$$

Possiamo definire un altro importantissimo operatore:

$$L^2 \equiv |\vec{L}|^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = \sum_{i=1}^3 L_i^2 \quad (6.0.2)$$

che se ne vede il commutatore con un qualsiasi L_i :

$$\begin{aligned}[L^2, L_z] &= [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_z] \\ &= L_x[L_x, L_z] + [L_x, L_z]L_x + L_y[L_y, L_z] + [L_y, L_z]L_y \\ &= -i\hbar L_x L_y - i\hbar L_y L_x + i\hbar L_y L_x + i\hbar L_x L_y \\ &= 0\end{aligned}$$

e in generale vale

$$[L^2, L_i] = 0 \quad (6.0.3)$$

Per cui, fin'ora abbiamo capito quale algebra soddisfa il momento angolare 6.0.1, che ci dice una cosa fondamentale, ossia, che le tre componenti del momento angolare non sono osservabili compatibili in Meccanica Quantistica, per cui non avremo mai degli ICOC con tutte e tre le componenti dentro. Cosa ben diversa dalla Meccanica Classica in cui non avevamo nessun divieto o problema nel misurare ad esempio la componente L_z e subito dopo la componente L_x , che in questo caso non ci faceva perdere informazioni sulla prima misura. In più abbiamo definito l'operatore L^2 e abbiamo invece visto che lui commuta con tutte le componenti di L , per cui in Meccanica Quantistica potremmo usare un ICOC definito da L^2 e una delle 3 componenti, che solitamente è L_z .

¹Si è utilizzata anche la notazione di Einstein per cui tutti gli indici ripetuti sono intesi come sommati

6.1 Quantizzazione del momento angolare

Come abbiamo già visto nel modello semiclassico per l'atomo di H di Bohr, il momento angolare è quantizzato, ossia, può assumere solo certi valori discreti. Questa cosa si può vedere anche con procedimenti un pelo più rigorosi anche con la Meccanica Quantistica.

Studiamo il problema da un punto di vista formale e prendiamo 3 generici operatori che soddisfano l'algebra del momento angolare 6.0.1. Questi operatori non sono per forza gli operatori differenziali visti prima, per questo li chiamiamo J_i . Nota che tendenzialmente con J indicheremo nei capitoli successivi il momento angolare totale, ovvero, momento angolare orbitale L + momento angolare di spin S , ma per ora non facciamoci caso e trattiamo J in modo generico. Abbiamo dunque l'algebra

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k \quad (6.1.1)$$

$$[J^2, J_i] = 0 \quad (6.1.2)$$

Richiediamo agli operatori J_i di essere autoaggiunti su $\mathcal{H}$ e scegliamo la base $|j, m\rangle$ di autostati comuni di J^2 e J_z , per cui abbiamo le equazioni agli autovalori:

$$J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad (6.1.3)$$

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \quad (6.1.4)$$

nota che sicuramente $j(j+1)$ ed m sono autovalori reali (anche se non abbiamo ancora visto che sono discreti), e la scelta di chiamare l'autovalore di J^2 $j(j+1)$ è solo per futura convenienza. Vediamo che gli autovalori di J^2 sono positivi:

$$\begin{aligned} \langle j, m | J^2 | j, m \rangle &= \hbar^2 j(j+1) \\ \langle j, m | J^2 | j, m \rangle &= \sum_{i=1}^3 \langle j, m | J_i^2 | j, m \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle j, m | J_i^\dagger J_i | j, m \rangle \\ &= \sum_{i=1}^3 \|J_i | j, m \rangle\|^2 \end{aligned}$$

per cui abbiamo $j \geq 0$ oppure $j \leq -1$. Tuttavia l'espressione $j(j+1)$ è simmetrica sotto lo scambio $j \longleftrightarrow -j-1$ (sto banalmente scambiando le due soluzioni e posso sceglierne solo una) per cui posso scegliere $j \geq 0$. Dobbiamo ancora caratterizzare questo spazio, abbiamo solo mostrato che sono positivi. Definiamo degli operatori di innalzamento e abbassamento² (l'uno il complesso coniugato dell'altro) di J (in similitudine

²Nota che esistono analoghi anche per L ed S .

a quanto fatto per l'oscillatore armonico):

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y \quad (6.1.5)$$

vediamo l'algebra con questi operatori:

$$[J^2, J_{\pm}] = 0 \quad (6.1.6)$$

$$[J_+, J_-] = [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = -i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] = 2J_z \quad (6.1.7)$$

$$[J_z, J_{\pm}] = [J_z, J_x \pm iJ_y] = iJ_y \pm i(-iJ_x) = \pm J_x + iJ_y = \pm J_{\pm} \quad (6.1.8)$$

Da quest'algebra possiamo vedere che gli operatori $J_{\pm}$ sono effettivamente quello che abbiamo dichiarato poco sopra, ovvero, operatori di innalzamento e abbassamento per J_z nel sottospazio di $\mathcal{H}$ con fissato valore di j . infatti

$$J^2 (J_{\pm} |j, m\rangle) = J_{\pm} J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) (J_{\pm} |j, m\rangle)$$

per cui $J_{\pm} |j, m\rangle$ è autostato di J^2 con lo stesso autovalore di $|j, m\rangle$.

$$J_z (J_{\pm} |j, m\rangle) = (J_{\pm} J_z \pm J_{\pm}) |j, m\rangle = \hbar(m \pm 1) (J_{\pm} |j, m\rangle)$$

$J_{\pm} |j, m\rangle$ è autostato di J_z con autovalore $\hbar(m \pm 1)$. Dal momento che lavoriamo con ICOC sappiamo che non dev'esserci degenerazione (gli autospazi a fissati j ed m hanno $\dim = 1$) per cui dev'esserci una proporzionalità tale che

$$J_{\pm} |j, m\rangle = N_{jm}^{\pm} |j, m \pm 1\rangle$$

la costante di proporzionalità la possiamo calcolare notando che

$$\begin{aligned} J_- J_+ &= (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = \underbrace{J_x^2 + J_y^2}_{J^2 - J_z^2} + i \underbrace{[J_x, J_y]}_{iJ_z} \\ &= J^2 - J_z^2 - J_z \end{aligned}$$

analogamente

$$J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + J_z$$

Dunque (poniamo per pulizia di conti $\hbar = 1$)

$$\begin{aligned} |N_{jm}^{\pm}|^2 &= \langle j, m | J_{\mp} J_{\pm} | j, m \rangle \\ &= \langle j, m | (J^2 - J_z^2 \mp J_z) | j, m \rangle \\ &= j(j+1) - m^2 \mp m \\ &= j(j+1) - m(m \pm 1) \end{aligned}$$

Per cui abbiamo trovato

$$N_{jm}^{\pm} = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \quad (6.1.9)$$

e in più vediamo che l'equazione

$$j(j+1) - m(m \pm 1) \geq 0$$

è un sistema a due disequazioni che lega m a j . Vediamo le due disequazioni:

- quella con il +

$$j(j+1) - m(m+1) \geq 0 \implies m^2 + m - j(j+1) \leq 0$$

le sue radici sono:

$$m = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{1+4j(j+1)} = -\frac{1}{2} \pm \frac{2j+1}{2} = \begin{cases} j \\ -j-1 \end{cases}$$

per cui si ha

$$-j-1 \leq m \leq j \quad (6.1.10)$$

- la disequazione con il -

$$j(j+1) - m(m-1) \geq 0 \implies m^2 - m - j(j+1) \leq 0$$

le sue radici sono:

$$m = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{1+4j(j+1)} = \frac{1}{2} \pm \frac{2j+1}{2} = \begin{cases} j+1 \\ -j \end{cases}$$

per cui si ha

$$-j \leq m \leq j+1 \quad (6.1.11)$$

entrambe le disequazioni sono soddisfatte per

$$\boxed{-j \leq m \leq j} \quad (6.1.12)$$

che è la versione quantistica del fatto che $L_z \leq L^2$ (poiché fissato j ho che L^2 ha autovalore $j(j+1) = j^2 + j$, e che L_z^2 ha massimo autovalore $m^2 = j^2$ che è più piccolo di L^2). Questo risultato trovato per m richiede che le azioni di J_+ e J_- debbano terminare entrambe³. Dalla forma di $N_{jm}^\pm$ si vede che:

- L'azione di J_- termina se il valore minimo $m = -j$ è raggiunto:

$$N_{j,-j}^- = \sqrt{j(j+1) - (-j)(-j-1)} = 0 \implies J_- |j, -j\rangle = 0$$

- L'azione di J_+ termina se il valore massimo $m = +j$ è raggiunto:

$$N_{j,j}^+ = \sqrt{j(j+1) - (j)(j+1)} = 0 \implies J_+ |j, j\rangle = 0$$

Ma siccome abbiamo visto con l'azione di $J_\pm$ che il valore m cresce a passi interi allora i valori estremi possono essere entrambi raggiunti se e solo se

$$\boxed{2j \in \mathbb{N}} \implies j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (6.1.13)$$

³Se non lo facessero le disequazioni non sarebbero risolte e avremmo valori di $|N_{jm}^\pm|$ negativi.

dunque il **momento angolare è quantizzato** e in generale m può assumere $2j + 1$ valori, con il valore $m = 0$ possibile solo per j interi.

Gli operatori $J_{\pm}$ permettono anche di sapere come agiscono gli operatori J_x e J_y su autostati di J^2 e J_z , poiché possiamo scrivere:

$$J_x = \frac{J_+ + J_-}{2} \quad (6.1.14)$$

$$J_y = -i \frac{J_+ - J_-}{2} \quad (6.1.15)$$

Se non avessimo queste espressioni sarebbe più complicato intuire l'azione di $J_{x,y}$ poiché non commutando con J_z sicuramente se li facciamo agire su $|l, m\rangle$ non ricado su un loro autostato.

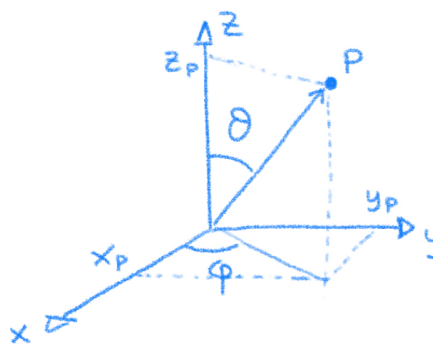
6.2 Il momento angolare in coordinate sferiche

Questa parte potrebbe risultare un po' frettolosa e con tanti conti saltati, ma appunto, sono solo conti. Se vuoi vedi la lezione 17 di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea.

Torniamo a trattare gli operatori differenziali L in $\mathbb{R}^3$ che sarà utile saper rappresentare in coordinate sferiche:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \phi = \arctan \frac{y}{x} \\ \theta = \arccos \frac{z}{r} \end{cases}$$



puoi differenziare⁴ (conviene differenziare r^2 e $\cos \theta$) e trovi:

$$r dr = x dx + y dy + z dz$$

$$d\phi = -\frac{y}{x^2 + y^2} dx + \frac{x}{x^2 + y^2} dy$$

$$-\sin \theta d\theta = -\frac{z}{r^3} (x dx + y dy + z dz) + \frac{dz}{r}$$

⁴Ricorda:

$$\frac{d}{dx} \arctan \frac{y}{x} = \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} = \frac{x^2}{x^2 + y^2}$$

da cui ora è facile calcolare le componenti della matrice jacobiana:

$$\begin{array}{ccc} \frac{\partial r}{\partial x} & , & \frac{\partial r}{\partial y} & , & \frac{\partial r}{\partial z} \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} & , & \frac{\partial \phi}{\partial y} & , & \frac{\partial \phi}{\partial z} \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} & , & \frac{\partial \theta}{\partial y} & , & \frac{\partial \theta}{\partial z} \end{array}$$

che sfruttando la regola della catena è facile sostituire ai $\frac{\partial}{\partial x}, \dots$ che compaiono nelle definizioni di L_i viste nella prima pagina di questo capitolo. Si trovano dunque le seguenti definizioni:

$$L_x = i\hbar \left[\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi \cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \quad (6.2.1)$$

$$L_y = -i\hbar \left[\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi \cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \quad (6.2.2)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (6.2.3)$$

$$L_{\pm} = \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \quad (6.2.4)$$

In cui possiamo interpretare che L_z genera le traslazioni in ϕ nello stesso modo in cui $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$ le generava in x . Questa è un'argomentazione che viene dalla teoria dei gruppi, ma la rivedremo meglio in seguito (capitolo §9), o se vuoi vedi la lezione 20 di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea. Vale che

$$[\phi, L_z] = i\hbar$$

per cui ho una relazione di indeterminazione tra ϕ ed L_z , ma non è vero che vale il principio di indeterminazione secondo cui $\Delta L_z \cdot \Delta \phi \geq \hbar/2$ poiché se l'incertezza su L_z va a zero ho che $\Delta \phi$ deve andare ad ∞ , ma chiaramente non può essere possibile poiché ϕ è limitato superiormente a 2π . Quello che salta nel ragionamento sul principio di indeterminazione è che moltiplicare per ϕ mi porta fuori dallo spazio $\mathcal{H}$. Vedi l'ultima osservazione della sezione §4.5.

Possiamo anche vedere che operando con una generica funzione $f(\theta, \phi)$ con L_x, L_y, L_z si verifica che:

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (6.2.5)$$

Osservazioni

- Vediamo che le espressioni per L_i (e quindi per L^2) non dipendono da r , menomale perché così la dimensionalità è data solo da $\hbar$. Questo, però, non è sorprendente perché come vedremo i momenti angolari saranno strettamente legati alle rotazioni spaziali (ne sono i generatori).
- Gli operatori L_i sono autoaggiunti sullo spazio vettoriale delle funzioni al quadrato sommabili (in θ e ϕ), differenziabili e ad un sol valore sulla sfera unitaria. Segue da questo che $L_+^\dagger = L_-$ sullo stesso spazio.

6.3 Le autofunzioni del momento angolare: le armoniche sferiche

Armati dell'espressione esplicita degli operatori di momento angolare come operatori differenziali in $\mathbb{R}^3$, possiamo determinare le autofunzioni (di L^2 ed L_z).

Cerchiamo le autofunzioni di L_z . Richiediamo

$$\begin{aligned} L_z f(\phi) &= \hbar m f(\phi) \\ \implies -i\hbar \frac{\partial f}{\partial \phi} &= \hbar m f(\phi) \\ \implies f(\phi) &= N e^{im\phi} \end{aligned}$$

però le $f(\phi)$ devono essere normalizzate in $[0, 2\pi)$ e soprattutto monodrome sulla sfera unitaria: $f(\phi + 2\pi) = f(\phi)$. Segue dunque

$$f_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad ; \quad m \in \mathbb{Z} \quad (6.3.1)$$

m è intero perché impongo la periodicità⁵. Ma questo significa che gli auto-stati con m semi-intero non sono ammessi quando gli operatori di momento angolare sono realizzati come operatori differenziali e le autofunzioni non possono essere quelle scritte appena sopra. È un po' una sorpresa perché nelle pagine prima non avevamo trovato nessun motivo per dover separare la trattazione di valori di momento angolare intero o semi-intero.

⁵I valori semi-interi corrispondono ad un'ambiguità di segno

$$f_{1/2}(\phi + 2\pi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{i}{2}(\phi + 2\pi)} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{i}{2}\phi} = -f_{1/2}(\phi)$$

che attenzione non è solo una fase irrilevante poiché abbiamo la ben nota relazione di equivalenza in $\mathcal{H}$, ma qua è proprio una funzione polidroma per cui presa una funzione e scelta una fase davanti, quando io faccio un giro di 2π ottengo un valore diverso della funzione.

6.3.1 Realizzazione dell'algebra del momento angolare per valori semi-interi

Come appena visto gli operatori di momento angolare per valori semi-interi di j, m non saranno operatori differenziali, bensì matrici. Il caso più semplice e famoso è quando $j = \frac{1}{2}$ e dunque $m = \pm\frac{1}{2}$ in cui si hanno le **matrici di Pauli**:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.3.2)$$

e possiamo definire degli operatori che si riveleranno essere gli **operatori di Spin**:

$$S_i \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad / \quad [S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k \quad (6.3.3)$$

$$S^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbb{1}_{2 \times 2} \quad (6.3.4)$$

per cui gli autovalori di S^2 sono $s(s+1) = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)$, mentre quelli di S_z chiaramente $m_s = \pm s = \pm\frac{1}{2}$.

Nota però che quello degli autovalori semi-interi non è un caso particolare per cui si hanno gli operatori matriciali, ma in realtà $\forall j$ esistono rappresentazioni matriciali degli operatori di momento angolare, in termini di matrici $(2j+1) \times (2j+1)$. Ad esempio con $j = 1$ troviamo:

$$J_x = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad J_y = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J_z = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

che se diagonalizzo trovo ad esempio:

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.3.5)$$

dunque autovalori $0, \pm 1$.

Ci accorgiamo dunque che in Meccanica Quantistica a differenza della Fisica Classica esistono alcuni sistemi con funzioni d'onda multicomponenti che prima non si avevano. Per $j = 1$ abbiamo matrici 3×3 e funzioni d'onda a 3 componenti, proprio come un caso classico di vettore in 3 dimensioni. Però ora, sbucano anche indici $j = 1/2$ che portano a matrici 2×2 (matrici di Pauli) che nel caso classico non esistevano perché se le avessimo applicate ad un vettore bidimensionale (ossia, se avessimo provato a trasformarlo con σ_i) saremmo andati sicuramente in $\mathbb{C}$, cosa che in Fisica classica non è

contemplata. Caso diverso è la Meccanica Quantistica per la quale andare in $\mathbb{C}$ non è per nulla un problema poiché l'informazione fisica della teoria è il modulo quadro della funzione d'onda. È proprio da questo ragionamento che nasce la necessità di introdurre i nuovi operatori S_i chiamati appunto di *momento angolare di spin*, così da differenziarli da L_i chiamati di *momento angolare orbitale*. Sul Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. GR c'è l'introduzione al capitolo sullo spin che forse spiega le cose in maniera più chiara e lineare di come le spiego io. Il sunto però è che in Meccanica Quantistica quando introduciamo S questo è un oggetto totalmente differente dal concetto di spin classico, che era semplicemente il momento angolare che aveva la particella solamente per il fatto di ruotare su se stessa. Qui è sbagliato considerare lo spin di un elettrone come il momento angolare legato al fatto che l' e^- ruota su se stesso, primo perché l' e^- è una particella puntiforme e non si sa cosa voglia dire che un punto ruota su se stesso e secondo perché questo concetto di spin è intrinseco nella natura delle particelle, dei valori interi o semi-interi di j , ma soprattutto è intrinseco nella teoria della Meccanica Quantistica. Anche il Griffiths però dice che se fa bene all'animo è comunque comodo pensare al momento di spin come il momento che le particelle hanno intrinsecamente poiché ruotano su se stesse, mentre pensiamo al momento orbitale L come il momento che le particelle hanno poiché ruotano attorno ad un certo asse (corpo). L'importante è essere consapevoli fin dove queste interpretazioni siano corrette.

Nota Puoi banalmente trovare le espressioni matriciali scrivendo gli elementi di matrice $\langle j, m' | J_z | j, m \rangle$ e posizionarli nella matrice variando i numeri m' ed m , che rappresentano rispettivamente le righe e le colonne della matrice. Infatti dobbiamo calcolare i singoli elementi di matrice e metterli in J_z seguendo l'ordine (riga, colonna) riportato appena qua sotto:

$$\langle 1, m' | J_z | 1, m \rangle \quad J_z = \begin{pmatrix} (1, 1) & (1, 0) & (1, -1) \\ (0, 1) & (0, 0) & (0, -1) \\ (-1, 1) & (-1, 0) & (-1, -1) \end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{ll} \langle 1, 1 | J_z | 1, 1 \rangle = \hbar & \langle 1, 0 | J_z | 1, -1 \rangle = 0 \\ \langle 1, 1 | J_z | 1, 0 \rangle = 0 & \langle 1, -1 | J_z | 1, 1 \rangle = 0 \\ \langle 1, 1 | J_z | 1, -1 \rangle = 0 & \langle 1, -1 | J_z | 1, 0 \rangle = 0 \\ \langle 1, 0 | J_z | 1, 1 \rangle = 0 & \langle 1, -1 | J_z | 1, -1 \rangle = -\hbar \\ \langle 1, 0 | J_z | 1, 0 \rangle = 0 & \end{array} \quad J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Questo è un metodo generale che puoi utilizzare per scrivere espressioni matriciali. Nota però che le rappresentazioni di J_x e J_y non le scrivi in modo immediato, ma te le ricavi utilizzando le espressioni matriciali di $J_{\pm}$, poiché non sai come agiscono $J_{x,y}$ su autostati $|l, m\rangle$.

6.4 Le armoniche sferiche dell'algebra lineare

Costruiamo le autofunzioni di L^2 (e di L_z) con metodi algebrici. Queste varranno per valori di j, l, s interi. Definiamo

$$Y_l^m(\theta, \phi) \equiv \langle \theta, \phi | l, m \rangle \quad (6.4.1)$$

che è una cosa equivalente a quando proiettavamo un vettore su $\langle x|$, solo che ora lo facciamo sulla sfera in cui nota che abbiamo ancora la nozione di completezza, che è:

$$\int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi |\theta, \phi\rangle \langle \theta, \phi| = \mathbb{1} \quad (6.4.2)$$

Abbiamo dunque

$$\frac{1}{\hbar^2} L^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (6.4.3)$$

$$\frac{1}{\hbar} L_z Y_l^m(\theta, \phi) = m Y_l^m(\theta, \phi) \quad (6.4.4)$$

Ci conviene ricordare

$$L_{\pm} |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |l, m \pm 1\rangle \quad ; \quad L_- |l, -l\rangle = 0$$

Ed è proprio la seconda equazione che abbiamo scritto che sfruttiamo e in cui di mettiamo una completezza in mezzo

$$\begin{aligned} L_- |l, -l\rangle &= 0 \\ \langle \theta', \phi' | L_- |l, -l\rangle &= 0 \\ \Rightarrow \int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi &\underbrace{\langle \theta', \phi' | L_- | \theta, \phi \rangle}_{\delta(\cos\theta - \cos\theta') \delta(\phi - \phi') L_-^{op}} \underbrace{\langle \theta, \phi | l, -l \rangle}_{Y_l^{-l}(\theta, \phi)} = 0 \\ \Rightarrow L_-^{op} Y_l^{-l}(\theta, \phi) &= 0 \\ \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) &Y_l^{-l}(\theta, \phi) = 0 \end{aligned}$$

ora, abbiamo un'equazione differenziale che mi dà l'armonica sferica inferiore, le successive le costruisco applicandoci sopra l'operatore L_+ . Risolviamola

per separazione di variabili

$$\begin{aligned}
 Y_l^{-l}(\theta, \phi) &\equiv A(\theta)B(\phi) \\
 B(\phi) \frac{dA}{d\theta} - i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} A(\theta) \frac{dB}{d\phi} &= 0 \\
 \text{divido per } Y_l^{-l} \text{ e } \cos \theta / \sin \theta & \\
 \frac{1}{A(\theta)} \tan \theta \frac{dA}{d\theta} = \frac{i}{B(\phi)} \frac{dB}{d\phi} &= K \quad , \quad \text{forzatamente}
 \end{aligned}$$

La seconda equazione fornisce facilmente

$$B(\phi) = N e^{-iK\phi} \quad (6.4.5)$$

e la richiesta

$$L_z Y_l^{-l} = -\hbar l Y_l^{-l}$$

implica⁶

$$K = l$$

per cui se continuiamo con la prima equazione

$$\begin{aligned}
 \tan \theta \frac{dA}{d\theta} &= l A(\theta) \\
 z \equiv \sin \theta \quad , \quad dz &= \cos \theta d\theta \\
 z \frac{dA'}{dz} &= l A'(z) \quad \implies \quad \frac{dA'}{A'} = l \frac{dz}{z} \\
 A'(z) &= N z^l \quad \implies \quad A(\theta) = N (\sin \theta)^l
 \end{aligned}$$

per cui la soluzione è

$$Y_l^{-l}(\theta, \phi) = N (\sin \theta)^l e^{-il\phi} \quad (6.4.6)$$

normalizzando troviamo:

$$\begin{aligned}
 1 &= (Y_l^{-l}, Y_l^{-l}) = |N|^2 \int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\phi (\sin \theta)^{2l} \\
 x &= \cos \theta \quad , \quad \sin \theta = \sqrt{1-x^2} \\
 &= 2\pi |N|^2 \int_{-1}^1 dx (1-x^2)^l \\
 t &= \frac{1+x}{2} \implies x = 2t-1 \implies \begin{cases} (1-x) = 2(1-t) \\ (1+x) = 2t \end{cases} \quad dx = 2dt \\
 &= 4\pi |N|^2 2^{2l} B(l+1, l+1) \\
 &= 4\pi |N|^2 2^{2l} \frac{(l!)^2}{(2l+1)!}
 \end{aligned}$$

⁶Applica l'operatore differenziale L_z ad Y_l^{-l} .

per cui l'armonica sferica di fondo è

$$Y_l^{-l}(\theta, \phi) = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} (\sin \theta)^l e^{-il\phi} \quad (6.4.7)$$

e le altre armoniche sferiche con $-l < m \leq +l$ si ottengono come già detto con l'azione iterata dell'operatore differenziale L_+ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} L_+^{op} Y_l^m(\theta, \phi) &= \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} Y_l^{m+1}(\theta, \phi) \\ \text{con } L_+^{op} &= \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{aligned}$$

La trattazione generale del momento angolare finisce qua, ma vedi in appendice [B](#) le proprietà delle armoniche sferiche.

Capitolo 7

Composizione di momenti angolari

Per scrivere questo capitolo farò riferimento al Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.GR, anche se aggiungerò una parte (che sarà la mera applicazione del metodo sviluppato) fatta in aula durante le esercitazioni. È un capitolo fondamentale, non solo per Meccanica Quantistica I, ma anche per corsi successivi. Spero di aver scritto un capitolo comprensibile e chiaro anche se ho incollato insieme diverse fonti.

7.1 Sistema di due particelle

In questo capitolo vogliamo occuparci del problema di quando abbiamo due particelle con spin s_1 ed s_2 e vogliamo capire che momento angolare di spin ha il sistema che comprende entrambe le particelle. Mi spiego meglio. Abbiamo le *due* particelle negli stati

$$|s_1, m_1\rangle \quad ; \quad |s_2, m_2\rangle$$

indichiamo lo stato composto come

$$|s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle$$

a cui possiamo applicare gli operatori di singola particella senza avere problemi¹

$$S_1^2 |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle = \hbar^2 s_1(s_1 + 1) |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (7.1.1)$$

¹In realtà questi operatori sarebbero delle cose del tipo

$$S_{z1} = S_{z1} \otimes \mathbb{1}$$

che vuol dire che l'operatore S_{z1} agisce sullo spazio di prima particella descritta dal ket $|s_1, m_1\rangle$, mentre l'operatore identità agisce sullo spazio di seconda particelle $|s_2, m_2\rangle$. Questo è un discorso formale che se interessa è negli appunti di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.mq2 nel capitolo degli spazi prodotto.

$$S_2^2 |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle = \hbar^2 s_2(s_2 + 1) |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (7.1.2)$$

$$S_{z1} |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle = \hbar m_1 |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (7.1.3)$$

$$S_{z2} |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle = \hbar m_2 |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (7.1.4)$$

I problemi arrivano quando vogliamo applicare operatori di momento angolare totale

$$S = S_1 + S_2 \quad (7.1.5)$$

In realtà la componente z è semplice da vedere cosa fa:

$$S_z = S_{z1} + S_{z2} \quad (7.1.6)$$

per cui

$$S_z |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle = S_{z1} |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle + S_{z2} |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (7.1.7)$$

$$= \hbar m_1 |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle + \hbar m_2 |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (7.1.8)$$

$$= \hbar(m_1 + m_2) |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (7.1.9)$$

e vediamo quindi

$$m = m_1 + m_2 \quad (7.1.10)$$

quindi la componente z del sistema composto di due particelle è proprio la somma delle componenti z di singola particelle. Va notato però che questo è un caso fortuito, che avviene poiché stiamo guardando delle componenti di vettori. Infatti se guardiamo l'operatore S , che essendo in realtà un vettore, è più complicato da trattare. Infatti vediamo (ometto i segni di vettori e di modulo quadro, per cui metto solo il quadrato, ma chiaramente sono da considerare):

$$S^2 = (S_1 + S_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2 \quad (7.1.11)$$

i moduli quadri sono felice di vederli, ma come tratto il prodotto $S_1 \cdot S_2$? Sicuramente posso scrivere

$$S_1 \cdot S_2 = S_{x1}S_{x2} + S_{y1}S_{y2} + S_{z1}S_{z2} \quad (7.1.12)$$

e se lo applico ad un ket del sistema composto posso vedere che l'operatore con il pedice 1 viene applicato al ket di prima particella, mentre l'operatore con 2 viene applicato al ket di seconda. Quello che intendo è che succede una cosa del tipo

$$S_{z1} |s_1, m_1\rangle \otimes S_{z2} |s_2, m_2\rangle = (\hbar m_1 + \hbar m_2) |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle$$

che però è l'unica equazione agli autovalori che riusciamo a scrivere, dal momento che gli stati $|s_i, m_i\rangle$ sono autostati di S_i^2 ed S_{zi} , ma non delle componenti x e y . Per cui devo trovare un modo per riscrivere due dei tre prodotti che compaiono nell'espressione di S^2 . Possiamo ricordarci degli operatori di salita e discesa già introdotti in capitolo precedenti²

$$S_{+i} = S_{xi} + iS_{yi} \quad ; \quad S_{-i} = S_{xi} - iS_{yi} \quad (7.1.13)$$

$$S_{\pm i} |s_i, m_i\rangle = \hbar \sqrt{l_i(l_i + 1) - m_i(m_i \pm 1)} |s_i, m_i \pm 1\rangle \quad (7.1.14)$$

da cui possiamo estrarre le definizioni

$$S_{xi} = \frac{S_{+i} + S_{-i}}{2} \quad ; \quad S_{yi} = \frac{S_{+i} - S_{-i}}{2i} \quad (7.1.15)$$

che se introdotte in 7.1.12 ci forniscono

$$S_1 \cdot S_2 = \frac{1}{2} \frac{1}{2} (S_{+1} + S_{-1}) (S_{+2} + S_{-2}) + \quad (7.1.16)$$

$$+ \frac{1}{2i} \frac{1}{2i} (S_{+1} - S_{-1}) (S_{+2} - S_{-2}) + S_{z1} \cdot S_{z2} \quad (7.1.17)$$

$$= \frac{1}{4} \left(S_{+1}S_{+2} + S_{+1}S_{-2} + S_{-1}S_{+2} + S_{-1}S_{-2} - S_{+1}S_{+2} + \quad (7.1.18)$$

$$+ S_{+1}S_{-2} + S_{-1}S_{+2} - S_{-1}S_{-2} \right) + S_{z1} \cdot S_{z2} \quad (7.1.19)$$

$$= \frac{1}{4} \left(S_{+1}S_{-2} + S_{-1}S_{+2} + S_{+1}S_{-2} + S_{-1}S_{+2} \right) + S_{z1} \cdot S_{z2} \quad (7.1.20)$$

$$= \frac{1}{4} \left(2S_{+1}S_{-2} + 2S_{-1}S_{+2} \right) + S_{z1} \cdot S_{z2} \quad (7.1.21)$$

$$= \frac{1}{2} \left(S_{+1}S_{-2} + S_{-1}S_{+2} \right) + S_{z1} \cdot S_{z2} \quad (7.1.22)$$

dove si intende tra tutti gli operatori $S_{\pm i}S_{\pm j}$ un simbolo di prodotto. Inserendo questo in 7.1.11 ci permette di ottenere l'operatore di momento angolare totale

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2 \cdot \frac{1}{2} \left(S_{+1}S_{-2} + S_{-1}S_{+2} \right) + 2S_{z1} \cdot S_{z2} \quad (7.1.23)$$

$$= S_1^2 + S_2^2 + S_{+1}S_{-2} + S_{-1}S_{+2} + 2S_{z1}S_{z2} \quad (7.1.24)$$

Grazie a quest'ultimo risultato siamo in grado di addentrarci in un problema pratico. Consideriamo un sistema con due particelle con spin intero $s_1 =$

²Nota che qua stiamo trattando operatori di Spin, ma tutto il ragionamento si applica in generale a qualsiasi osservabile a cui è associato un operatore che rispetta l'algebra dei momenti angolari.

$s_2 = 1$ e quindi ciascuna con valori possibili $m = 0, \pm 1$. Vogliamo comporre i due stati di particella singola, che possono dunque essere:

$$|s_i, m_i\rangle = |s_i = 1, m_i = 0; \pm 1\rangle \quad (7.1.25)$$

e ottenere stati che scriviamo come

$$|s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (7.1.26)$$

di questi stati ce ne saranno 9. Tutte le possibili combinazioni di stati di singola particella:

$$|1, -1\rangle \otimes |1, -1\rangle, \quad |1, 0\rangle \otimes |1, -1\rangle, \quad |1, 1\rangle \otimes |1, -1\rangle \quad (7.1.27)$$

$$|1, -1\rangle \otimes |1, 0\rangle, \quad |1, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle, \quad |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle \quad (7.1.28)$$

$$|1, -1\rangle \otimes |1, 1\rangle, \quad |1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle, \quad |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle \quad (7.1.29)$$

ma attenzione, perché se applichiamo l'operatore S_z abbiamo visto con la 7.1.9 che gli stati composti scritti appena sopra sono autostati di S_z , ma questo non è detto se usiamo S^2 , infatti applicando 7.1.24 ad un generico stato 7.1.26:

$$S^2 |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (7.1.30)$$

$$= S_1^2 |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle + S_2^2 |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle + \quad (7.1.31)$$

$$+ (S_{+1} |s_1, m_1\rangle) \otimes (S_{-2} |s_2, m_2\rangle) + \quad (7.1.32)$$

$$+ (S_{-1} |s_1, m_1\rangle) \otimes (S_{+2} |s_2, m_2\rangle) + \quad (7.1.33)$$

$$+ 2 (S_{z1} |s_1, m_1\rangle) \otimes (S_{z2} |s_2, m_2\rangle) \quad (7.1.34)$$

$$= \hbar^2 (s_1(s_1 + 1) + s_2(s_2 + 1) + 2m_1m_2) |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle + \quad (7.1.35)$$

$$+ (S_{+1} |s_1, m_1\rangle) \otimes (S_{-2} |s_2, m_2\rangle) + \quad (7.1.36)$$

$$+ (S_{-1} |s_1, m_1\rangle) \otimes (S_{+2} |s_2, m_2\rangle) \quad (7.1.37)$$

e appunto, dal momento che gli operatori di salita e discesa operano nel modo descritto da 7.1.14 non è chiaro che gli stati 7.1.26 siano autostati di S^2 . Possiamo prendere ad esempio lo stato

$$|1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle$$

e vediamo che

$$\begin{aligned} S^2 |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle &= \hbar^2(2 + 2 + 0) |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle + (S_{+1} |1, 1\rangle) \otimes (S_{-2} |1, 0\rangle) + \\ &\quad + (S_{-1} |1, 1\rangle) \otimes (S_{+2} |1, 0\rangle) \\ &= 4\hbar^2 |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle + \hbar^2 \left(\sqrt{2} |1, 1\rangle \right) \otimes \left(\sqrt{2} |1, 0\rangle \right) \end{aligned}$$

dunque non è autostato di S^2 . Possiamo però far sparire (fare interferenza) quei termini problematici con gli operatori di salita e discesa, prendendo

valori di m_1 ed m_2 minimali (o massimali). In questo modo potremmo costruire lo stato di fondo e applicando l'operatore L_+ potremmo ottenere tutti gli altri. Vediamo infatti i due stati

$$S^2 |1, 1\rangle \otimes |1, 1\rangle = \hbar^2 6 |1, 1\rangle \otimes |1, 1\rangle \quad (7.1.38)$$

$$S^2 |1, -1\rangle \otimes |1, -1\rangle = \hbar^2 6 |1, -1\rangle \otimes |1, -1\rangle \quad (7.1.39)$$

ma quindi possiamo notare che stati di questo tipo equivalgono ad uno stato con $s = 2$ ed $m = \pm 2$:

$$|2, 2\rangle = |1, 1\rangle \otimes |1, 1\rangle \quad (7.1.40)$$

$$|2, -2\rangle = |1, -1\rangle \otimes |1, -1\rangle \quad (7.1.41)$$

Applichiamo dunque $L_- = L_{-1} + L_{-2}$ allo stato $|1, 1\rangle \otimes |1, 1\rangle$ ³:

$$\begin{aligned} L_- \left(|1, 1\rangle \otimes |1, 1\rangle \right) &= L_- |2, 2\rangle \\ \left(L_{-1} |1, 1\rangle \right) \otimes |1, 1\rangle + |1, 1\rangle \otimes \left(L_{-2} |1, 1\rangle \right) &= 2\hbar |2, 1\rangle \\ \sqrt{2}\hbar |1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle + \sqrt{2}\hbar |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle &= 2\hbar |2, 1\rangle \end{aligned}$$

quindi vediamo

$$|2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle + |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle \right) \quad (7.1.42)$$

per simmetria, anche

$$|2, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, 0\rangle \otimes |1, -1\rangle + |1, -1\rangle \otimes |1, 0\rangle \right) \quad (7.1.43)$$

Per ottenere altri stati continuiamo ad applicare L_- :

$$\begin{aligned} L_- |2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left((L_{-1} |1, 0\rangle) \otimes |1, 1\rangle + |1, 0\rangle \otimes (L_{-2} |1, 1\rangle) + \right. \\ &\quad \left. + (L_{-1} |1, 1\rangle) \otimes |1, 0\rangle + |1, 1\rangle \otimes (L_{-2} |1, 0\rangle) \right) \\ \hbar\sqrt{6} |2, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hbar\sqrt{2} |1, -1\rangle \otimes |1, 1\rangle + \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle + \right. \\ &\quad \left. + \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle + \hbar\sqrt{2} |1, 1\rangle \otimes |1, -1\rangle \right) \end{aligned}$$

dunque scriviamo

$$|2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|1, 1\rangle \otimes |1, -1\rangle + |1, -1\rangle \otimes |1, 1\rangle + 2 |1, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle \right) \quad (7.1.44)$$

³Nota che va bene uguale applicare L_+ allo stato $|1, -1\rangle \otimes |1, -1\rangle$.

quindi partendo da uno stato generico abbiamo trovato 5 (7.1.40, 7.1.41, 7.1.42, 7.1.43, 7.1.44) stati che sono autostati di S^2 e rappresentano il sistema con un valore di spin totale $s = 2$ e i vari valori $m = 0, \pm 1, \pm 2$. Ne mancano ancora 4 però. Avranno momento di spin $s < 2$. Prendiamo un generico stato (tipo quello 7.1.42)

$$\chi_{\alpha\beta} = \alpha |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle + \beta |1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle \quad (7.1.45)$$

e vediamo che succede se ci applichiamo S^2 :

$$\begin{aligned} L^2 \chi_{\alpha\beta} &= \hbar^2 \alpha \left(4 |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle + 2 |1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle \right) + \hbar^2 \beta \left(4 |1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle + 2 |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle \right) \\ \hbar^2 s(s+1) \chi_{\alpha\beta} &= 2\hbar^2 \left((2\alpha + \beta) |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle + (\alpha + 2\beta) |1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle \right) \\ \hbar^2 s(s+1) \left(\alpha |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle + \beta |1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle \right) &= \dots \\ [2(2\alpha + \beta) - s(s+1)\alpha] |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle + [2(\alpha + 2\beta) - s(s+1)\beta] |1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle &= 0 \end{aligned}$$

possiamo prendere questo risultato e sostituirci dei valori di s totale e vedere che condizione ci esce sui coefficienti. Vediamo subito che se mettiamo $s = 2$ ritroviamo 7.1.42 con $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$. Mettiamo $s = 1$:

$$\begin{aligned} (2\alpha + 2\beta) |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle + (2\alpha + 2\beta) |1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle &= 0 \\ \implies \alpha &= -\beta \end{aligned}$$

per cui possiamo scrivere un altro stato (dopo averlo normalizzato) con $s = 1$ e $m = m_1 + m_2 = 1 + 0 = 1$:

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle - |1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle \right) \quad (7.1.46)$$

Puoi verificare che applicando S^2 ad ambo i membri trovi lo stesso risultato. Da questo stato applicando S_- , come già fatto in precedenza, possiamo trovarci:

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, 1\rangle \otimes |1, -1\rangle - |1, -1\rangle \otimes |1, 1\rangle \right) \quad (7.1.47)$$

$$|1, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, 0\rangle \otimes |1, -1\rangle - |1, -1\rangle \otimes |1, 0\rangle \right) \quad (7.1.48)$$

Dunque siamo riusciti ad avere 8 stati interessanti per il sistema combinato. La soluzione che ci manca è proprio quella con $s = 0$ (e dunque $m = 0$). La condizione trovata partendo dallo stato 7.1.45 non ha soluzione per $s = 0$, per cui dobbiamo trovare un'altra strada. Vedendo lo stato 7.1.44 con $m = 0$ proviamo a scrivere

$$|0, 0\rangle = \alpha_1 |1, -1\rangle \otimes |1, 1\rangle + \alpha_2 |1, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle + \alpha_3 |1, 1\rangle \otimes |1, -1\rangle \quad (7.1.49)$$

Vediamo facilmente che:

$$S^2 |0, 0\rangle = 0 \quad (7.1.50)$$

per cui applicando l'operatore S^2 anche al membro di destra e imponendo l'uguaglianza troviamo:

$$\alpha_2 = -\alpha_1 \quad ; \quad \alpha_3 = \alpha_1 \quad (7.1.51)$$

e imponendo la normalizzazione di $|0, 0\rangle$:

$$\alpha_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (7.1.52)$$

per cui possiamo scrivere l'ultimo dei 9 stati che stavamo cercando:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|1, -1\rangle \otimes |1, 1\rangle - |1, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle + |1, 1\rangle \otimes |1, -1\rangle \right) \quad (7.1.53)$$

Quindi riassumendo, gli autostati che abbiamo trovato per il sistema composto hanno:

s	m
2	-2, -1, 0, 1, 2
1	-1, 0, 1
0	0

da cui possiamo notare la regola generale che mi dice che presi due spin⁴ di singola particella s_1 ed s_2 , il momento angolare di spin totale potrà assumere valori **a passi interi** compresi tra:

$$|s_1 - s_2| \leq s \leq (s_1 + s_2) \quad (7.1.54)$$

i valori di m totale seguono la solita regola $m \in \{-s, s\}$ a passi interi in base a cos'è s . Un generico autostato di S^2 lo possiamo scrivere come combinazione lineare degli stati composti:

$$|s, m\rangle = \sum_{m=m_1+m_2} C_{m_1, m_2, m}^{s, s_1, s_2} |s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (7.1.55)$$

Nota che le componenti z sommandosi gli unici stati che contribuiscono sono quelli tali per cui $m = m_1 + m_2$. I coefficienti $C_{m_1, m_2, m}^{s, s_1, s_2}$ che mettiamo negli stati composti si chiamano **Coefficienti di Clebsh-Gordan** e mi permettono appunto di andare da una rappresentazione in cui ho i momenti angolari di singola particella ad una rappresentazione in cui vedo i momenti angolari totali. Alcuni dei più comuni sono raggruppati nella tabella riportata alla fine del capitolo 7.1.

⁴Momenti angolari.

Nota che la colonna verticale evidenziata è lo stato:

$$|3, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} |2, 1\rangle \otimes |1, -1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} |2, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}} |2, -1\rangle \otimes |1, 1\rangle \quad (7.1.56)$$

dunque i tre numeri nel riquadro più grande sono i 3 coefficienti della combinazione lineare, i due numeri nella colonna in alto sono s ed m totali e infine le righe corrispondenti a ciascun coefficiente sono i valori di m_1 ed m_2 , visto che i valori di s_1 ed s_2 dovresti conoscerli visto che ti guidano nella scelta della tabella giusta.

La tabella funziona anche al contrario. Vedi la riga evidenziata, corrisponde allo stato:

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |1, 0\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}} \left| \frac{5}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{15}} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (7.1.57)$$

Questo capitolo termina qua, si potrebbero fare altri mille esempi. Sul Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. GR è presente il caso di due particelle di spin $s = \frac{1}{2}$, che forse è il caso più iconico e semplice, ma anche il più fondamentale. Basti pensare a quando si ha un atomo di elio e si vuole scrivere la funzione d'onda dei due elettroni che orbitano attorno al nucleo. La parte spinoriale del sistema dei due elettroni non è altro che uno stato che trovo componendo i singoli momenti angolari. Se sei interessato ai passaggi vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. GR. Riporto solo il risultato in seguito vista l'importanza:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \quad (7.1.58)$$

$$|1, 1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (7.1.59)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \quad (7.1.60)$$

$$|1, -1\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (7.1.61)$$

$$(7.1.62)$$

È un risultato fondamentale perché in questi 4 stati riconosciamo uno stato (7.1.58) che è antisimmetrico rispetto lo scambio delle due particelle, e prende il nome di **singoletto**. Gli altri tre stati prendono il nome di **tripletto** e sono simmetrici. Ritroverai questi quattro stati infinite volte nella Meccanica Quantistica .

Capitolo 8

Equazione di Schrodinger radiale

Quando nel capitolo §6 abbiamo visto le armoniche sferiche forse è sembrata una cosa utile per quello specifico problema, ma quelle funzioni sono di estrema importanza in Fisica e ci permettono di risolvere tutti i problemi con potenziali centrali $V = V(r)$ in 3 dimensioni. Prima di tuffarci in questi problemi e cercare di riscrivere l'equazione di Schrodinger per questo tipo di problemi, però vediamo un attimo il problema che sorge quando vogliamo studiare come sono legati ad esempio un e^- ed un protone, che in generale è il problema dei due corpi.

8.1 Problema dei due corpi

Il problema dei due corpi coinvolge 2 particelle di masse m_1 ed m_2 interagenti tramite un potenziale $V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, come richiesto in generale dall'invarianza per traslazioni. Classicamente per questi problemi sappiamo scrivere:

$$H = \frac{|\vec{p}_1|^2}{2m_1} + \frac{|\vec{p}_2|^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

quantisticamente ci aspettiamo una funzione d'onda del tipo $\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ con la sua solita interpretazione probabilistica. L'equazione di Schrodinger stazionaria è

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_T \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (8.1.1)$$

Classicamente sappiamo che quando abbiamo due corpi il moto del baricentro è disaccoppiato ed il sistema nel suo complesso si muove di moto rettilineo

uniforme. Conviene per cui utilizzare le coordinate

$$\begin{aligned}\vec{r} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 && \text{posizione relativa} \\ \vec{R} &= \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} && \text{posizione del baricentro}\end{aligned}$$

e scrivendo $\vec{r} = \{x, y, z\}$ ed $\vec{R} = \{X, Y, Z\}$ allora questo implica nella scrittura dei laplaciani:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} &= \frac{\partial x}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial X} = -\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} \\ \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} &= \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \\ \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} &= \left(-\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2}\end{aligned}$$

facendo la stessa cosa anche per le coordinate y_1, y_2, z_1, z_2 e mettendole insieme si ottiene:

$$\begin{aligned}& -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\Delta_r + \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \Delta_R + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_r \cdot \vec{\nabla}_R \right) - \\ & \quad - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\Delta_r + \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \Delta_R + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_r \cdot \vec{\nabla}_R \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{m_1 + m_2} \Delta_R \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R\end{aligned}$$

in cui abbiamo indicato

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} && \text{massa ridotta} \\ M &= m_1 + m_2 && \text{massa totale}\end{aligned}$$

possiamo vedere cosa diventa l'equazione di Schrodinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E_T \Psi(\vec{r}, \vec{R}) \quad (8.1.2)$$

ponendo $\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \Psi_1(\vec{r})\Psi_2(\vec{R})$ si ottiene la separazione dell'equazione di Schrodinger in modo naturale

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r + V(\vec{r})\right)\Psi_1(\vec{r}) = E_1\Psi_1(\vec{r}) \quad (8.1.3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\Psi_2(\vec{R}) = E_2\Psi_2(\vec{R}) \quad (8.1.4)$$

con $E_T = E_1 + E_2$. Come previsto con il caso classico si vede che la dinamica interessante è nell'equazione per Ψ_1 , mentre Ψ_2 descrive il moto libero del baricentro.

8.2 Stati stazionari in potenziali centrali ed equazione radiale

A questo punto abbiamo capito come scrivere l'equazione di Schrodinger per un problema a due corpi, nel caso generale $V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, ma ora mettiamoci proprio nel caso puramente radiale $V = V(r)$ che ha notevole rilevanza fisica¹. L'equazione di Schrodinger stazionaria abbiamo visto nella sezione precedente essere:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (8.2.1)$$

in cui l'unico problema è dato dal laplaciano che dobbiamo riscrivere in coordinate polari sferiche. Per fare ciò potremmo scriverci il laplaciano ecc. oppure seguire una strada diversa che in questo caso conviene poiché ci permette di separare più facilmente l'equazione. A livello classico sappiamo che vale l'identità

$$|\vec{p}|^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \quad (8.2.2)$$

è una relazione vantaggiosa da usare perché $p_r = \frac{\vec{r} \cdot \vec{p}}{r}$ dipende solo da r , mentre L^2 solamente da θ e ϕ , per cui viene comodo separare le variabili. Però non è così semplice perché a livello quantistico ci sono diversi problemi con p_r . Innanzitutto l'operatore

$$-i\hbar \frac{\vec{r} \cdot \vec{\nabla}}{r} = -i\hbar \left(\frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{z}{r} \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \quad (8.2.3)$$

evidentemente non è hermitiano². Questo problema è connesso al fatto che

$$(xp)^\dagger = p^\dagger x^\dagger = px$$

¹L'oscillatore armonico: $V = \frac{1}{2}kr^2$. Atomi idrogenoidi: $V = -\frac{Ze^2}{r}$.

²Sembrerebbe di sì, vista l'ultima scrittura in coordinate polari, ma bisogna ricordare che nel prodotto scalare in 3 dimensioni la misura di integrazione in r è $r^2 dr$. L'espressione 8.2.3 la vedi banalmente usando la regola della catena sulle $\frac{\partial}{\partial x_i}$ e ricordando $\frac{\partial r}{\partial x_i} = \frac{x_i}{r} \frac{\partial}{\partial r}$.

per cui conviene definire

$$p_r = \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) = -\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} + \vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) \quad (8.2.4)$$

Possiamo vedere che

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{r}}{r} f \right) = \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} f + \frac{f}{r} \vec{\nabla} \cdot \vec{r} + \vec{r} f \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{r} \quad (8.2.5)$$

$$= \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} f + \frac{3}{r} f - \frac{1}{r} f \quad (8.2.6)$$

$$= \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} f + \frac{2}{r} f \quad (8.2.7)$$

per cui possiamo scrivere

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{r}}{r} \right) = \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} + \frac{2}{r}$$

che sostituito dentro l'espressione di p_r e ricordando che abbiamo visto in 8.2.3 che $\frac{\vec{r} \cdot \vec{\nabla}}{r} = \frac{\partial}{\partial r}$, ci permette di ottenere:

$$-\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} + \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} + \frac{2}{r} \right) = -\frac{i\hbar}{2} \left(2 \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} + \frac{2}{r} \right) = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$$

che è proprio un operatore che ci piace:

$$p_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (8.2.8)$$

che si verifica essere hermitiano (il pezzo non hermitiano di 8.2.3 viene ucciso dall' $1/r$ che abbiamo messo in più). Questo ci permette di ottenere la corretta espressione per p_r^2 :

$$p_r^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (8.2.9)$$

C'è però un'importante questione sul dominio di p_r^2 . Prendiamo la relazione

$$\langle f | p_r^2 | g \rangle = \langle g | (p_r^2)^\dagger | f \rangle$$

(continua la nota 2) Senza integrare o provare su funzioni, puoi calcolare l'espressione di $p_r^\dagger$ (attento che $\hat{p} = \hat{p}^\dagger$):

$$\begin{aligned} p_r^\dagger &= -i\hbar \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{r}}{r} = -i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \frac{x}{r} + \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{y}{r} + \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{z}{r} + \frac{z}{r} \frac{\partial}{\partial z} \right\} \equiv -i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r} \right\} \\ &= p_r - i\hbar \frac{2}{r} \end{aligned}$$

quindi $p_r^\dagger \neq p_r$.

per la parte radiale abbiamo:

$$\langle f | p_r^2 | g \rangle^* \propto \int_0^\infty dr \, r^2 f(r) \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) g^*(r)$$

per verificare che effettivamente p_r^2 sia autoaggiunto dobbiamo integrare per parti (2 volte) il primo pezzo:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr \, r^2 f(r) \frac{\partial^2 g^*}{\partial r^2} &= - \int_0^\infty dr \, \frac{\partial}{\partial r} (r^2 f(r)) \frac{\partial g^*}{\partial r} + \left[r^2 f(r) \frac{\partial g^*}{\partial r} \right]_0^\infty \\ &= \int_0^\infty dr \, \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r^2 f(r)) g^* + \left[r^2 f(r) \frac{\partial g^*}{\partial r} \right]_0^\infty + \left[g^* \frac{\partial}{\partial r} (r^2 f) \right]_0^\infty \\ &= \int_0^\infty dr \, r^2 g^* \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r^2 f) \right] + \left[r^2 \left(f(r) \frac{\partial g^*}{\partial r} + g^* \frac{2}{r} f + g^* \frac{\partial f}{\partial r} \right) \right]_0^\infty \end{aligned}$$

si vede che se $f(r) \sim \frac{1}{r}$ per $r \rightarrow 0$ il termine di bordo ad $r = 0$ non si annulla (se ad esempio $\lim_{r \rightarrow 0} g(r) = \text{cost}$). Per cui le funzioni $f(r)$ che appartengono al dominio di p_r^2 devono soddisfare

$$\lim_{r \rightarrow 0} [r f(r)] = 0$$

oltre alle solite condizioni per $r \rightarrow \infty$. In modo alternativo ai conti si può notare che se $f(r) \sim \frac{1}{r}$ per $r \rightarrow 0$ è comunque una funzione al quadrato integrabile intorno a 0 in $\mathbb{R}^3$, poiché

$$\int_0^\infty dr \, r^2 |f(r)|^2 \sim \int_0^\infty dr$$

mentre invece $p_r^2 f(r) \sim \frac{1}{r^3}$ non è in $L^2(\mathbb{R}^3)$ poiché

$$\int_0^\infty dr \, r^2 |p_r^2 f(r)|^2 \sim \int_0^\infty \frac{dr}{r^4}$$

Adesso fatte tutte queste premesse possiamo finalmente non pensarci più troppo ed elevare la relazione 8.2.2 al ruolo di operatore e scrivere

$$|\vec{p}|^2 \longrightarrow -\hbar^2 \Delta \quad ; \quad \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{|\vec{L}|^2}{\hbar^2 r^2} \equiv \Delta_r - \frac{|\vec{L}|^2}{\hbar^2 r^2}$$

dove non ho riportato l'espressione in coordinate sferiche per $|\vec{L}|^2$ già ricavata nel capitolo §6. Per cui siamo in grado di scrivere:

$$\Delta_r = |\vec{p}|^2 + \frac{|\vec{L}|^2}{\hbar^2 r^2} \quad (8.2.10)$$

per cui l'equazione di Schrodinger stazionaria 8.2.1 diventa

$$\left[\frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{|\vec{L}|^2}{2\mu r^2} + V(r) - E \right] \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (8.2.11)$$

possiamo scrivere $\Psi(\vec{r}) = \varphi(r)Y(\theta, \phi)$ e viene immediato separare le variabili:

$$Y(\theta, \phi) \left[\frac{p_r^2}{2\mu} + V(r) - E \right] \varphi(r) + \frac{\varphi(r)}{2\mu r^2} |\vec{L}|^2 Y(\theta, \phi) = 0$$

divido per $\Psi(\vec{r})$

$$\left[\frac{1}{\varphi(r)} \left(\frac{p_r^2}{2\mu} \varphi(r) \right) + V(r) - E \right] 2\mu r^2 = -\frac{1}{Y(\theta, \phi)} |\vec{L}|^2 Y(\theta, \phi) \equiv -\lambda$$

dove abbiamo imposto (dipendenza da r)=(dipendenza da θ, ϕ) $\equiv$ (una costante). Per cui otteniamo

$$|\vec{L}|^2 Y(\theta, \phi) = \lambda Y(\theta, \phi) \quad (8.2.12)$$

$$\left(\frac{p_r^2}{2\mu} + V(r) - E \right) \varphi(r) = -\frac{\lambda}{2\mu r^2} \varphi(r) \quad (8.2.13)$$

ma la prima delle due è un'equazione che abbiamo già risolto e le funzioni $Y(\theta, \phi)$ sono proprio le armoniche sferiche. Possiamo scrivere diversamente la seconda equazione

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \varphi(r) + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) \varphi(r) = E \varphi(r) \quad (8.2.14)$$

che è una prima forma dell'**equazione radiale di Schrodinger**. $\varphi(r)$ che propriamente dipende sia da l che da E (ma non da m), e dovrebbe essere indicata con $\varphi_{El}(r)$, viene detta **funzione d'onda radiale**. Possiamo semplificare ulteriormente le cose se definiamo

$$\chi(r) \equiv r\varphi(r) \quad \implies \quad \varphi(r) = \frac{1}{r}\chi(r) \quad (8.2.15)$$

che implica

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{dr} &= -\frac{1}{r^2}\chi(r) + \frac{1}{r} \frac{d\chi}{dr} \\ \frac{d^2\varphi}{dr^2} &= \frac{2}{r^3}\chi(r) - \frac{2}{r^2} \frac{d\chi}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2\chi}{dr^2} \end{aligned}$$

e otteniamo l'**equazione radiale ridotta**

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi(r) = 0 \quad (8.2.16)$$

Osservazioni

- L'equazione appena scritta si tratta dell'equazione di Schrodinger stazionaria in 1 dimensione per il potenziale effettivo:

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \quad (8.2.17)$$

dove possiamo interpretare il secondo pezzo come una barriera centrifuga sempre repulsiva. È una situazione del tutto analoga al caso classico.

- Le osservabili $\{H, L^2, L_z\}$ sono un ICOC per potenziali centrali. Si noti infatti che L^2 non dipende da r , ma solo da θ e ϕ , per cui

$$[L^2, p_r^2] = 0 \implies [L^2, |\vec{p}|^2] = 0$$

per cui se $V = V(r)$ anche

$$[H, L^2] = 0$$

e analogamente

$$[H, L_z] = 0$$

Inoltre sappiamo già che

$$[L^2, L_z] = 0$$

- La soluzione generale dell'equazione di Schrodinger stazionaria per potenziali centrali si scrive allora come³

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \sum_{n,l,m} c_{nlm} \varphi_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (8.2.18)$$

per la quale consideriamo solo stati legati, quindi ipotizziamo uno spettro discreto per E :

$$H\Psi = E_n\Psi$$

Se dovessero esistere anche stati non legati (come per potenziali coulombiani) questi dovranno essere inclusi e trattati.

- Vediamo cosa implica chiedere la normalizzazione della funzione d'onda:

$$\begin{aligned} 1 = (\Psi_{nlm}, \Psi_{nlm}) &\equiv \int d^3r |\Psi_{nlm}|^2 \\ &= \int_0^\infty dr r^2 |\varphi_{nl}(r)|^2 \underbrace{\int d\Omega |Y_l^m(\theta, \phi)|^2}_{=1} \\ &= \int_0^\infty dr |\chi_{nl}(r)|^2 \end{aligned}$$

- Le condizioni al contorno per la funzione radiale ridotta:

$$\chi_{nl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad (8.2.19)$$

che vuol semplicemente dire $\chi_{nl} \sim 1/r^\alpha$ con $\alpha > 1/2$. La seconda è:

$$\chi_{nl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0 \quad (8.2.20)$$

³Dato che gli autostati comuni di $\{H, L^2, L_z\}$ sono una base ON in $L^2(\mathbb{R}^3)$ in questo caso.

nota che in questo caso basterebbe $\chi_{nl} \sim (\text{costante})$ affinché χ sia normalizzabile, ma questo implicherebbe $\varphi_{nl}(r) \sim 1/r$, che come abbiamo visto sta fuori dal dominio di p_r^2 e quindi di Δ e per questo non lo possiamo scegliere.

8.3 Atomi idrogenoidi

Con atomi idrogenoidi intendiamo un qualsiasi nucleo atomico, ma con un solo e^- che ci orbita attorno, per cui o è un atomo di idrogeno oppure è un qualsiasi altro elemento, ma ionizzato. In questo caso abbiamo

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad \Longrightarrow \quad H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{Ze^2}{r} \quad (8.3.1)$$

consideriamo l'equazione ricavata poco fa

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi(r) = 0 \quad (8.3.2)$$

come già fatto più volte in questi appunti, definiamo variabili adimensionali

$$\rho = \alpha r \quad ; \quad \alpha = 2\frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}$$

in cui si sono messi i fattori 2 per convenienza e $E < 0$ perché stiamo considerando stati legati. Per cui abbiamo

$$\begin{aligned} \alpha^2 \frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \left[-\frac{\alpha^2}{4} + \frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2} \frac{\alpha}{\rho} - \alpha^2 \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \chi &= 0 \\ \Longrightarrow \frac{d^2\chi}{d\rho^2} - \left[\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \chi &= 0 \end{aligned}$$

dove si è messo

$$\lambda = \frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha} = \frac{Ze^2}{\hbar} \sqrt{-\frac{\mu}{2E}} \quad (8.3.3)$$

che è adimensionale e positivo. Vediamo gli andamenti asintotici. Vediamo $r \rightarrow +\infty$

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} - \frac{1}{4}\chi = 0 \quad \Longrightarrow \quad \chi_{as}(\rho) = e^{\pm\rho/2}$$

e la soluzione è

$$\chi(\rho) = e^{-\rho/2} Q(\rho) \quad (8.3.4)$$

poiché la soluzione con il $+$ divergerebbe, e la $Q(\rho)$ serve a garantire che l'esponenziale non venga ribaltato, e questo implicherà $Q(\rho) \sim \rho^\beta$ per $\rho \rightarrow$

$+\infty$. Cerchiamo un'equazione differenziale per $Q(\rho)$:

$$\begin{aligned}\chi'(\rho) &= \left(-\frac{Q(\rho)}{2} + Q'(\rho)\right) e^{-\rho/2} \\ \chi''(\rho) &= \left(\frac{Q(\rho)}{4} - Q'(\rho) + Q''(\rho)\right) e^{-\rho/2}\end{aligned}$$

che sostituendo ci porta a

$$Q''(\rho) - Q'(\rho) + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) Q(\rho) = 0 \quad (8.3.5)$$

Vediamo l'andamento $\rho \rightarrow 0$. Notiamo che $\rho = 0$ è un punto singolare e se ti ripassi come si risolvono le equazioni differenziali in un intorno di singolarità fuchsiana da Metodi I sai scrivere (a prescindere se usando χ o Q):

$$p_0 = 0 \quad ; \quad q_0 = -l(l+1)$$

riusciamo dunque a scrivere l'equazione indiciale (o caratteristica)

$$\begin{aligned}x^2 + (p_0 - 1)x + q_0 &= 0 \\ x^2 - x - l(l+1) &= 0 \\ \implies x &= \begin{cases} l+1 \\ -l \end{cases}\end{aligned}$$

questi due indici determinano i possibili comportamenti asintotici di $Q(\rho)$ e quindi di χ per $\rho \rightarrow 0$. Infatti possiamo scrivere:

$$Q(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} \rho^{l+1} \quad (8.3.6)$$

$$Q(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} \rho^{-l} \quad (8.3.7)$$

dove $l = 0, 1, 2, 3$. Però ρ^{-l} non è permesso nemmeno per $l = 0$ poiché non è verificata l'integrabilità⁴. Dunque

$$Q(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k \quad (8.3.8)$$

i coefficienti di questa funzione possono essere determinati esplicitamente per ricorrenza, ma noi non lo abbiamo fatto esplicitamente, ma il risultato che si trova è che la serie si deve troncarsi⁵, così si tira fuori la condizione di quantizzazione come fatto nell'oscillatore armonico. Tutto ciò è sufficiente a determinare lo spettro degli autovalori degli atomi idrogenoidi.

⁴Ricorda: se la funzione d'onda ridotta $\sim$ costante nell'origine, allora la funzione d'onda va come $1/r$ che non è nel dominio di p_r^2 .

⁵Altrimenti $Q(\rho) \sim e^{+\rho}$

8.3.1 Spettro degli atomi idrogenoidi

Abbiamo visto nella sezione sopra che $Q(\rho)$ dev'essere un polinomio. Dunque

$$\forall l \quad , \quad \exists n' / \forall k > n' \quad , \quad c_k = 0$$

quindi

$$Q(\rho) \sim \rho^{l+1+n'} \quad \text{per } \rho \rightarrow \infty$$

se sostituiamo nell'equazione per Q (alla potenza dominante)

$$(l+1+n')(l+n')\rho^{l+n'-1} - (l+1+n')\rho^{l+n'} + \lambda\rho^{l+n'} - l(l+1)\rho^{l+n'-1} = 0$$

prendo la potenza più alta

$$\begin{aligned} [\lambda - (l+1+n')] \rho^{l+n'} &= 0 \\ \lambda = n' + l + 1 \equiv n & \quad n \text{ numero quantico principale} \end{aligned}$$

che implica

$$n \geq l + 1 \tag{8.3.9}$$

ricordando la definizione di λ 8.3.3 scriviamo

$$\lambda^2 = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2E\hbar^2} = n^2$$

e quindi delle energie

$$E = E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \tag{8.3.10}$$

e sorprendentemente si trova il risultato di Bohr con $m_e \rightarrow \mu$. Da notare la degenerazione degli autovalori E_n . Il numero di stati per fissato n vale

$$D(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2$$

8.3.2 Funzioni d'onda degli atomi idrogenoidi

Risolvendo esplicitamente la relazione di ricorrenza per $Q(\rho)$ si trovano i **polinomi di Laguerre**. In dettaglio

$$\chi_{nl}(\rho) = N_{nl} \rho^{l+1} e^{-\frac{\rho}{2}} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \tag{8.3.11}$$

dove $L_p^\alpha(x)$ è un polinomio associato di Laguerre, con grado p e definito (ad esempio) dalla funzione generatrice

$$F_\alpha(x, z) = \frac{1}{(1-z)^{\alpha+1}} e^{-\frac{zx}{1-z}} = \sum_{p=0}^{\infty} L_p^\alpha(x) z^p$$

non sorprendentemente gli $L_p^\alpha(x)$ sono ortogonali nello spazio $L^2(0, \infty)$ con un opportuna misura:

$$\int_0^\infty dx e^{-x} x^\alpha L_p^\alpha(x) L_{p'}^\alpha(x) = K_p^\alpha \delta_{p,p'} \quad (8.3.12)$$

e si verifica che

$$K_p^\alpha = \frac{\Gamma(\alpha + p + 1)}{p!} \quad (8.3.13)$$

Il calcolo della costante di normalizzazione N_{nl} in 8.3.11 richiede un po' di pazienza e fornisce

$$N_{nl} = \sqrt{\frac{\alpha(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} = \sqrt{\frac{Z}{a_0} \frac{1}{n}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} \quad (8.3.14)$$

dove si è notato che $\alpha = \alpha_n$ dipende da n. Infatti

$$\alpha = 2\sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}} \equiv \alpha_n = 2\sqrt{\frac{2\mu \mu Z^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{2\hbar^2}} \frac{1}{n} = \frac{2\mu Z e^2}{\hbar^2} \frac{1}{n} = \frac{2Z}{a_0} \frac{1}{n} \quad (8.3.15)$$

dove $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ è il raggio di Bohr (con $m_e \rightarrow \mu$). Inserendo esplicitamente tutti i fattori troviamo finalmente una funzione d'onda definitiva per gli atomi idrogenoidi:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} \chi_{nl}(\alpha_n, r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (8.3.16)$$

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{n^2} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} \left(\frac{2Z}{na_0} r \right)^l e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2Z}{na_0} r \right) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (8.3.17)$$

Osservazioni

- La dimensionalità è corretta

$$[\Psi_{nlm}] = L^{-3/2}$$

così che quando ne faccio il modulo quadro e la integro in 3 dimensioni esce una probabilità.

- Come dev'essere sono funzioni ON:

$$(\Psi_{nlm}, \Psi_{n'l'm'}) = \int_0^\infty dr r^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi \Psi_{nlm}^*(\vec{r}) \Psi_{n'l'm'}(\vec{r}) = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

- Lo stato fondamentale, e quindi di minima energia è: $n = 1, l = 0, m = 0$

$$\Psi_{100}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

è una funzione a simmetria sferica, ossia la parte angolare data dalle armoniche sferiche è appunto rappresentabile come una sfera in 3 dimensioni. A differenza del modello di Bohr in cui le orbite stavano su un piano.

- La densità di probabilità di posizione ha simmetria cilindrica (è indipendente da ϕ), dato che

$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto e^{im\phi} \implies |Y_l^m|^2 = \rho_l^m(\theta)$$

Precisamente

$$\begin{aligned} \rho_{nlm}(\vec{r}) d^3r &= |\Psi_{nlm}(\vec{r})|^2 r^2 dr d\Omega \\ &= |\chi_{nlm}|^2 dr |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 d\cos\theta d\phi \\ &\quad \text{integro in } d\phi \\ &= \rho_{nl}(r) dr 2\pi \rho_l^m(\theta) d\cos\theta \end{aligned}$$

per cui ad esempio

$$\rho_{10}(r) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 r^2 e^{-\frac{2Zr}{a_0}}$$

che ha il suo massimo in $r = \frac{a_0}{Z}$.

Questo capitolo sugli atomi idrogenoidi finisce qua, ma ovviamente per ogni approfondimento, ulteriori dettagli o conti fatti in modo più approfondito si rimanda ai sacri testi citati in bibliografia. Tutto quello visto, o almeno i risultati fondamentali saranno fondamentali per corsi successivi, ad esempio *Struttura della Materia*, o più in generale in tutto l'ambito della Fisica atomica.

Capitolo 9

Trasformazioni, simmetrie e leggi di conservazione

In questo capitolo cerchiamo di capire come si modificano le leggi di simmetria e le leggi di trasformazione degli operatori passando dalla Meccanica Classica alla Meccanica Quantistica . Il capitolo sarà organizzato con una parte iniziale in cui vediamo le leggi di trasformazione degli operatori, poi passeremo a parlare di simmetrie e leggi di conservazione così da arrivare alla parte finale riguardante le diverse rappresentazioni che diamo di un sistema fisico.

9.1 Proprietà di trasformazione dei campi classici

Prendiamo un generico campo scalare in $\mathbb{R}^3$, $\phi = \phi(x, y, z)$ e effettuiamo una generica trasformazione di coordinate $\vec{x}' = \vec{x}'(\vec{x})$, ovvero facciamo:

$$x' = x'(x, y, z) \quad , \quad y' = y'(x, y, z) \quad , \quad z' = z'(x, y, z)$$

la domanda più spontanea che ci possiamo fare è: come si trasforma il campo ϕ per effetto di questa trasformazione? La risposta è: si trasforma in modo che

$$\phi'(x', y', z') = \phi(x, y, z) \tag{9.1.1}$$

che vuol dire: la nuova funzione valutata nello stesso punto fisico, ma con diverse coordinate ha stesso valore della funzione valutata con le vecchie coordinate.

Ora però per capire come scrivere questa trasformazione e quindi come caratterizzare ϕ' in termini di ϕ , devo valutarle con gli stessi argomenti (mi chiedo come differisce $\phi'(x)$ da $\phi(x)$). In una dimensione:

$$x' = f(x) \quad , \quad \phi'(x') = \phi(x) \implies \phi'(f(x)) = \phi(x)$$

però l'argomento delle funzioni lo scelgo io. Scelgo di applicarci l'operatore inverso (in senso funzionale, ossia $f^{-1}(f(x)) = f(f^{-1}(x)) = x$), per cui ho

$$\phi'(x) = \phi(f^{-1}(x)) \implies \boxed{\phi' = \phi \circ f^{-1}} \quad (9.1.2)$$

e abbiamo dunque raggiunto il nostro scopo e in più nota che quello che abbiamo ottenuto è valido per qualsiasi trasformazione: lineare o no, continua o discreta, e anche in dimensione generica.

9.1.1 Traslazioni in $d=1$

Prendiamo

$$f_a(x) = x + a \quad (x' = x + a \implies x = x' - a) \quad (9.1.3)$$

per cui se applichiamo il risultato trovato appena sopra abbiamo:

$$\phi'(x + a) = \phi(x) \implies \phi'(x) = \phi(x - a)$$

Vediamo i vari casi. Se **a infinitesimo**:

$$\phi(x - a) = \phi(x) - a \frac{d\phi}{dx} + O(a^2) \implies \phi'(x) - \phi(x) = -a \frac{d\phi}{dx}$$

Se **a finito** e ϕ differenziabile:

$$\phi'(x) = \phi(x - a) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-a)^n \frac{d^n}{dx^n} \right] \phi(x) \equiv e^{-a \frac{d}{dx}} \phi(x)$$

Se i campi appartengono ad uno spazio funzionale normato, per esempio $L^2(\mathbb{R})$, si può definire un **operatore di traslazione** $T(a)$:

$$\phi'(x) = T(a)\phi(x) = e^{-a \frac{d}{dx}} \phi(x) \quad (9.1.4)$$

se abbiamo l'ordinario prodotto scalare in $L^2(\mathbb{R})$, allora $\frac{d}{dx}$ è anti-hermitiano, per cui si vede subito che $T(a)$ è un operatore unitario¹ (preserva le norme):

$$(T(a))^{-1} = T(-a) = (T(a))^{\dagger} \quad (9.1.5)$$

poiché possiamo scrivere²

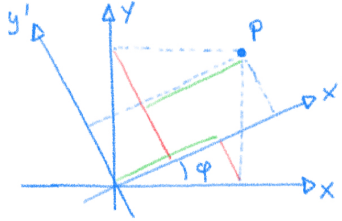
$$(T(a))^{\dagger} = \left(e^{-a \frac{d}{dx}} \right)^{\dagger} = e^{-a \left(\frac{d}{dx} \right)^{\dagger}} = e^{a \frac{d}{dx}}$$

¹Vuole sostanzialmente dire che l'inverso di una traslazione in avanti è una traslazione indietro.

²Qua vediamo il primo caso di operatore definito tramite esponenziale, che attenzione è una definizione per serie di potenze. Per ora prendilo per buono, nel caso quantistico vedremo come applicare una definizione per serie ad una funzione e fare effettivamente i calcoli.

9.1.2 Rotazioni in 3 dimensioni

Consideriamo ad esempio una rotazione attorno l'asse z : per un ϕ finito

$$\begin{cases} x' = x \cos \phi + y \sin \phi \\ y' = -x \sin \phi + y \cos \phi \\ z' = z \end{cases}$$


possiamo scrivere

$$\vec{x}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \equiv R_z(\phi) \vec{x} \quad (9.1.6)$$

da cui possiamo vedere che

$$R_z^{-1}(\phi) = R_z(-\phi) = R_z^T(\phi)$$

R_z è ortogonale. Per un ϕ **infinitesimo** scriviamo:

$$R_z(\phi) \sim \begin{pmatrix} 1 & \phi & 0 \\ -\phi & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1} + \begin{pmatrix} 0 & \phi & 0 \\ -\phi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv \mathbb{1} + \phi r$$

dove abbiamo scritto un generico generatore della rotazione

$$r = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (9.1.7)$$

che è una matrice antisimmetrica (anti-hermitiana).

Ora, proviamo effettivamente a ruotare una funzione di $\vec{x}$. In coordinate polari sferiche una rotazione intorno all'asse z è una traslazione della coordinata ϕ di un certo angolo $\delta\phi$ (che posso fare se applico l'operatore R , che come scoprirò, è un operatore differenziale):

$$R_z(\delta\phi)\Phi(r, \theta, \phi) \equiv \Phi'(r, \theta, \phi) = \Phi(r, \theta, \phi + \delta\phi) \quad (9.1.8)$$

ci aspettiamo di trovare un'espressione dell'operatore R_z simile a quella trovata per T , 9.1.4, ma con una derivata in ϕ piuttosto che in x . Verifichiamo il un caso particolare: Sia

$$\Phi(x, y, z) = xyz e^{-r^2}$$

per cui

$$\begin{aligned}
 \Phi(x, y, z) &= xyz e^{-r^2} = (x' \cos \delta\phi - y \sin \delta\phi)(x' \sin \delta\phi + y' \cos \delta\phi) z' r'^{-2} \\
 &= [(x'^2 - y'^2) \sin \delta\phi \cos \delta\phi + x' y' (\cos^2 \delta\phi - \sin^2 \delta\phi)] z' e^{-r'^2} \\
 &= \left(\frac{x'^2 - y'^2}{2} \sin 2\delta\phi + x' y' \cos 2\delta\phi \right) z' e^{-r'^2} \\
 &\equiv \Phi'(x', y', z')
 \end{aligned}$$

a questo punto per vedere come si trasforma devo calcolare Φ' in (x, y, z) e poi sottrarre Φ . Dunque

$$\begin{aligned}
 \Phi'(x, y, z) &= \left(\frac{x^2 - y^2}{2} \sin 2\delta\phi + xy \cos 2\delta\phi \right) z e^{-r^2} \\
 &\xrightarrow{\delta\phi \rightarrow 0} [(x^2 - y^2)\delta\phi + xy] z e^{-r^2} \\
 &= \Phi(x, y, z) + \delta\phi \frac{x^2 - y^2}{xy} \Phi(x, y, z) \\
 &\equiv (1 + \delta\phi \tilde{r}) \Phi
 \end{aligned}$$

ma dal capitolo §6 sul momento angolare possiamo ricordarci che³:

$$\frac{\partial}{\partial\phi} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}$$

per cui possiamo osservare che

$$\delta\Phi(x, y, z) \equiv \Phi'(x, y, z) - \Phi(x, y, z) = \delta\phi \frac{x^2 + y^2}{xy} \Phi(x, y, z) \quad (9.1.9)$$

mentre

$$\begin{aligned}
 \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \Phi(x, y, z) &= \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) xyz e^{-r^2} \\
 &= x(xze^{-r^2} - 2yxyze^{-r^2}) - y(yze^{-r^2} - 2xxyze^{-r^2}) \\
 &= (x^2 - y^2)ze^{-r^2} \\
 &= \frac{x^2 + y^2}{xy} \Phi(x, y, z)
 \end{aligned}$$

dunque possiamo vedere

$$\tilde{r} = \frac{\partial}{\partial\phi} \quad (9.1.10)$$

per cui l'operatore è⁴

$$R_z(\delta\phi) = 1 - \delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi} + o(\delta\phi^2) \quad (9.1.11)$$

³Non è altro che la definizione 6.2.3 senza il pezzo $(-i\hbar)$

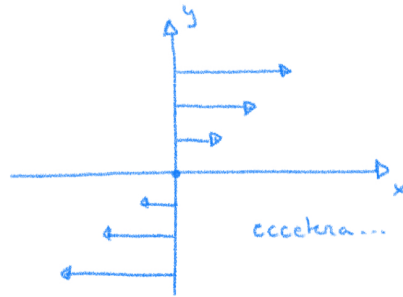
⁴Nota che c'è il segno meno in analogia con $\frac{\partial}{\partial x}$

e come previsto possiamo vedere che $\frac{\partial}{\partial \phi}$ genera le rotazioni, nello stesso senso in cui $\frac{d}{dx}$ genera le traslazioni lungo l'asse x .

9.1.3 Rotazione di un campo vettoriale

Nelle sezioni appena passate abbiamo visto che rotazioni (attorno l'asse z) possono essere rappresentata da matrici se vengono ruotati vettori, oppure come operatori differenziali, se vengono ruotate funzioni. Cosa succede se voglio far ruotare un campo vettoriale? Vediamolo con un esempio. Abbiamo

$$\begin{cases} A_x = y \\ A_y = 0 \\ A_z = 0 \end{cases}$$



usiamo nuovamente una rotazione attorno l'asse z :

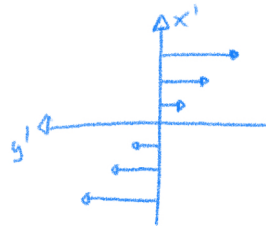
$$\begin{cases} x = x' \cos \phi - y' \sin \phi \\ y = x' \sin \phi + y' \cos \phi \\ z = z' \end{cases} \implies \begin{cases} A_x = x' \sin \phi + y' \cos \phi \\ A_y = 0 \\ A_z = 0 \end{cases}$$

ma attenzione perché così abbiamo trasformato le coordinate, ma $\vec{A}$ è un vettore e va soggetto alla stessa rotazione (si trasforma come $\vec{x}$):

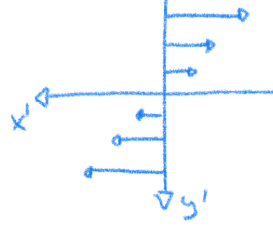
$$\begin{cases} A'_x = A_x \cos \phi + A_y \sin \phi = x' \sin \phi \cos \phi + y' \cos^2 \phi \\ A'_y = -A_x \sin \phi + A_y \cos \phi = -x' \sin^2 \phi - y' \sin \phi \cos \phi \\ A'_z = A_z = 0 \end{cases}$$

ma verifichiamo che effettivamente questo rappresenti lo stesso campo vettoriale nelle nuove coordinate:

$$\phi = \frac{\pi}{2} \implies \vec{A}' = \begin{pmatrix} 0 \\ -x' \\ 0 \end{pmatrix}$$



$$\phi = \pi \implies \vec{A}' = \begin{pmatrix} y' \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$



quindi verifichiamo che sono lo stesso campo con cui siamo partiti. Per cui capiamo anche che ruotare le componenti, oltre che le coordinate, è indispensabile per preservare la richiesta Fisica:

$$\vec{A}'(\vec{x}') = \vec{A}(\vec{x}) \quad (9.1.12)$$

analoga a quella del campo scalare.

Vediamo che nel caso infinitesimo (tenendo i termini lineari in ϕ):

$$\vec{A}'(\vec{x}) = \begin{pmatrix} x \sin \phi \cos \phi + y \cos^2 \phi \\ -x \sin^2 \phi - y \sin \phi \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \phi x + y \\ -\phi y \\ 0 \end{pmatrix}$$

dunque vedo

$$\delta \vec{A}(\vec{x}) \equiv \vec{A}'(\vec{x}) - \vec{A}(\vec{x}) = \phi \begin{pmatrix} x \\ -y \\ 0 \end{pmatrix}$$

e questa variazione ha due parti:

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_1 \vec{A} = \phi(x\partial_y - y\partial_x) \vec{A} = \phi(x\partial_y - y\partial_x) \begin{pmatrix} y \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \delta_2 \vec{A} = \phi r \vec{A} = \phi \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\phi y \\ 0 \end{pmatrix} \end{array} \right. \quad (9.1.13)$$

dove r è la matrice 9.1.7 che abbiamo definito sopra.

Riassumiamo un attimo cosa abbiamo trovato fin'ora. Sotto l'azione di una rotazione, un campo vettoriale subisce due trasformazioni: la dipendenza dalle coordinate viene ruotata, e le componenti vengono rimescolate

$$\delta \vec{A}(\vec{x}) = \phi \left(\frac{\partial}{\partial \phi} + r \right) \vec{A}(\vec{x}) \quad (9.1.14)$$

Visto che $\frac{\partial}{\partial \phi}$ genera le rotazioni e non è altro che la componente z del momento angolare, allora, qualunque cosa che genera una rotazione la chiamo momento angolare, ma facendo qualche differenza sui diversi termini. Nell'espressione 9.1.14 il pezzo $\frac{\partial}{\partial \phi}$ lo chiamiamo appunto **momento angolare orbitale**, e coinvolge solo la dipendenza funzionale dalle coordinate, invece, il termine r lo chiamiamo **momento angolare di spin**, e coinvolge solo una rotazione delle componenti.

Osservazione Abbiamo trattato solo il caso di rotazioni intorno all'asse z , ma la covarianza sotto rotazioni implica l'equivalenza di tutti gli assi di rotazione. Negli altri casi si devono trovare operatori (e matrici) che chiudono l'algebra $[J_i, J_z] = i\varepsilon_{ijk}J_k$.

9.2 Il caso quantistico: trasformazione delle funzioni d'onda

Sotto l'azione di trasformazioni di coordinate le funzioni d'onda $\Psi(x, y, z)$ della Meccanica Quantistica si trasformano come campi scalari (o come vettori, come campi a più componenti). È naturale tuttavia esprimere queste leggi di conservazione in termini di operatori quantistici, leggermente aggiustati a partire dal caso classico.

Traslazioni : in una dimensione

$$\Psi'(x) = T(a)\Psi(x) = e^{-a\frac{d}{dx}}\Psi(x) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}_x\right\}\Psi(x)$$

in 3 dimensioni:

$$\Psi'(\vec{r}) = T(\vec{a})\Psi(\vec{r}) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot \vec{p}\right\}\Psi(\vec{r}) \quad (9.2.1)$$

Rotazioni (per funzioni d'onda scalari) per rotazioni intorno all'asse z :

$$\Psi'(r, \theta, \phi) = R_z(\delta\phi)\Psi(r, \theta, \phi) = e^{-\delta\phi\frac{\partial}{\partial \phi}}\Psi(r, \theta, \phi) \quad (9.2.2)$$

$$= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\delta\phi L_z\right\}\Psi(r, \theta, \phi) \quad (9.2.3)$$

Per una generica rotazione di un angolo $\delta\phi$ intorno ad un asse arbitrario $\hat{n}$, si noti che $L_z = \hat{n}_z \cdot \vec{L}$, per cui per covarianza allora

$$\Psi'(r, \theta, \phi) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\delta\phi \hat{n} \cdot \vec{L}\right\}\Psi(r, \theta, \phi) \quad (9.2.4)$$

diciamo che: l'impulso $\vec{p}$ è il generatore delle traslazioni e il momento angolare $\vec{L}$ è il generatore delle rotazioni.

Osservazioni

- Se ad esempio in una rotazione generica avessimo $\hat{n} = (1, 1, 0)$, allora otterremmo $\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\delta\phi(L_x + L_y)\right\}$, che però non potremmo spezzare in due esponenziali distinti poiché le osservabili L_x ed L_y non commutano.
- Queste affermazioni fatte fin'ora sono vere anche per campi scalari classici, e, in forma leggermente diversa anche per campi quantistici e relativistici. La forma esplicita delle relative equazioni richiede una conoscenza della dinamica (Teorema di Emmy Noether).

Rotazioni per funzioni d'onda multi-componenti La questione se esistano sistemi (di particelle) quantistici con funzioni d'onda a più componenti è una questione empirica. L'esistenza di sistemi (particelle) con spin $1/2$ ad esempio è confermato dall'esperimento di Stern-Gerlach. L'esistenza in natura di campi vettoriali $(\vec{E}, \vec{B})$ suggerisce che questo sia effettivamente possibile: se a questi campi associamo particelle (fotoni), ci si può attendere che le corrispondenti funzioni d'onda siano *vettori*. La situazione reale è però più complicata, ma non dissimile: siccome i campi E.M. sono intrinsecamente relativistici, si dovrà parlare di quadrivettori (ai quali imporre vincoli dovuti all'invarianza di gauge). In generale per particelle descritte da Ψ (campo scalare in $\mathbb{R}^3$) a più componenti, ci aspettiamo che:

$$\Psi'_\alpha(r, \theta, \phi) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\delta\phi \hat{n} \cdot \vec{L}\right\} \left(\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\delta\phi \hat{n} \cdot \vec{S}\right\}\right)_{\alpha\beta} \Psi_\beta(r, \theta, \phi) \quad (9.2.5)$$

in cui $\alpha, \beta = 1, \dots, 2j+1$. Sappiamo infatti dal calcolo generale che esistono operatori $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ che rappresentano le rotazioni (hanno la stessa algebra di $\vec{L}$) e sono matrici $(2j+1) \times (2j+1)$, $\forall j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

Osservazioni

- Scritto così sto assunto che gli operatori $\vec{L}$ ed $\vec{S}$ commutino tra loro.
- Il termine $(\dots)_{\alpha\beta}$ è una matrice ottenuta facendo l'esponenziale di una matrice.

Il caso di spin semi-intero Si noti che, mentre il caso di spin=1 (3 componenti) presenta un'evidente analogia classica (particelle vettoriali), il caso di spin $1/2$ (2 componenti) non ha alcun equivalente classico, ed è un fenomeno del tutto nuovo e puramente quantistico. Più in generale, lo spin intero ammette un'analogia classica, ma non è così per spin semi-intero. Per discorsi di questo tipo vedi il capitolo §6.3.1. Consideriamo appunto il caso

di spin 1/2: abbiamo

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.2.6)$$

$$S_i \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad / \quad [S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k \implies S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbb{1}_{2 \times 2} \quad (9.2.7)$$

notiamo ancora, che:

- Si tratta di matrici complesse (S_i hermitiani), dunque, anche partendo da una Ψ reale, la rotazione genera una Ψ complessa. Questo non ha senso per campi classici, ma non è un problema per funzioni d'onda.
- Una rotazione di 2π produce un cambiamento di segno, infatti

$$R_z^{1/2}(2\pi) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} 2\pi S_z\right\} = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} 2\pi \frac{\hbar}{2} \sigma_z\right\} = \exp\{-i\pi \sigma_z\}$$

che porta a⁵:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} &\longrightarrow \begin{pmatrix} \Psi'_1 \\ \Psi'_2 \end{pmatrix} = R_z^{1/2}(2\pi) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \\ &= e^{-i\pi \sigma_z} \left[\Psi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= e^{-i\pi} \Psi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + e^{i\pi} \Psi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= - \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

che di nuovo è inammissibile classicamente, ma quantisticamente possibile, dato che $\Psi(\vec{r})$ e $e^{i\alpha} \Psi(\vec{r})$ rappresentano lo stesso stato fisico. Si noti però che non stiamo introducendo funzioni d'onda a più valori, stiamo proprio osservando gli effetti di una trasformazione di coordinate su uno stato fisico.

9.3 Trasformazione degli operatori

Le leggi di trasformazione fin'ora enunciate per le funzioni d'onda (dunque per gli stati fisici) possono essere tradotte anche in leggi di trasformazione

⁵Attenzione che nella seconda riga abbiamo esplicitato la definizione di operatore definito come serie di potenze. Intendo dire (in tutti i casi in cui si ha una definizione di questo tipo) che l'operatore si, è definito nel modo scritto sopra, ma come si fa ad applicarlo ad una generica funzione? Si esplicita lo sviluppo in serie di potenze dell'esponenziale ($\sum \dots$), così che quando lo si applica ad una generica funzione ogni termine della serie becca la funzione e produce un termine che farà parte di un successivo sviluppo in serie di potenze, che potrà essere di nuovo scritto in modo compatto come un altro esponenziale.

per gli operatori. Diamo una definizione di operatore trasformato.

Sia T un operatore di trasformazione ($T(a)$, $R_n(\phi)$,...) che agisce sugli stati come:

$$T : |\alpha\rangle \mapsto |\alpha'\rangle \equiv T|\alpha\rangle \implies \langle\alpha'| = \langle\alpha|T^\dagger = \langle\alpha|T^{-1} \quad (9.3.1)$$

T unitario. Allora dato un operatore Q definiamo l'operatore trasformato (per effetto dell'azione di T), Q' , con la relazione⁶

$$\langle\alpha|Q'|\alpha\rangle \equiv \langle\alpha'|Q|\alpha'\rangle = \langle\alpha|T^\dagger QT|\alpha\rangle \quad \forall |\alpha\rangle \quad (9.3.2)$$

$$\implies \boxed{Q' = T^\dagger QT} \quad (9.3.3)$$

Osservazioni

- Non è difficile passare al linguaggio delle funzioni d'onda. Prendiamo ad esempio le traslazioni $T(a)$. Allora

$$|\alpha\rangle \mapsto |\alpha'\rangle = T(a)|\alpha\rangle$$

quello che vorrei ottenere con le definizioni date è che se $T(a)$ agisce su $\Psi(x)$ mi dia $\Psi(x-a)$. Vediamo appunto

$$\begin{aligned} \langle x|\alpha'\rangle &= \Psi_{\alpha'}(x) \equiv \Psi'_\alpha(x) = \langle x|T(a)|\alpha\rangle \\ &= \int dy \langle x|T(a)|y\rangle \langle y|\alpha\rangle \\ &= \int dy \langle x|T(a)|y\rangle \Psi_\alpha(y) \\ &= \int dy \underbrace{\langle x|y+a\rangle}_{\delta(x-y-a)} \Psi_\alpha(y) \\ &= \Psi_\alpha(x-a) \end{aligned}$$

- Possiamo notare che

$$\langle\alpha'|Q|\alpha'\rangle \neq \langle\alpha|Q|\alpha\rangle \quad (9.3.4)$$

consideriamo per esempio, $Q \longrightarrow \hat{x}$, $\Psi_\alpha(x) = N \exp\{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\}$ e di nuovo le traslazioni $T(a)$, allora vediamo

$$\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = 0$$

⁶Nota che nell'ultimo passaggio di 9.3.2 puoi interpretare T e $T^\dagger$ che agiscono a sinistra o destra (rispettivamente) sugli stati, oppure entrambi che agiscono sull'operatore. Questa doppia interpretazione mi dice soltanto che il valor medio nello stato originario dell'operatore traslato è uguale al valor medio dello stato trasformato dell'operatore originario. Questa duplice interpretazione tornerà nel seguito del capitolo quando parleremo dell'interpretazione di Heisenberg e di Schrodinger (vedi sezione §9.6).

poiché non è altro che il valor medio della gaussiana nello stato fondamentale, invece

$$\begin{aligned}\Psi_\alpha(x) &\equiv T(a)\Psi_\alpha(x) = \Psi_\alpha(x-a) = N \exp\left\{-\frac{1}{2}\alpha^2(x-a)^2\right\} \\ \implies \langle \alpha' | \hat{x} | \alpha' \rangle &= a\end{aligned}$$

- Nel caso delle traslazioni è facile ricavare il risultato in generale. Dalla definizione scriviamo:

$$\hat{x}' \equiv T^\dagger(a)\hat{x}T(a) = T^{-1}\hat{x}T(a) = T(-a)\hat{x}T(a)$$

che mi dice

$$\begin{aligned}\implies \hat{x}'\Psi(x) &= T(-a)\hat{x}T(a)\Psi(x) = T(-a)\hat{x}\Psi(x-a) \\ &= T(-a)\left(x\Psi(x-a)\right) = (x+a)\Psi(x)\end{aligned}$$

però

$$\hat{x}'\Psi(x) = (x+a)\Psi(x) \quad \forall \Psi \implies \hat{x}' = \hat{x} + a$$

come prevedibile.

- Sempre dalla definizione è facile ricavare che l'operatore $\hat{p}$ è invariante per traslazioni⁷, ossia $\hat{p}' = \hat{p}$. Infatti

$$\begin{aligned}\langle \alpha | \hat{p}' | \alpha \rangle &= \langle \alpha' | \hat{p} | \alpha' \rangle = \int dx \Psi_\alpha'^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi_\alpha'(x) \\ &= \int dx \Psi_\alpha^*(x-a) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi_\alpha(x-a) \\ &\quad \text{cambio variabile: } y = x-a \\ &= \int dy \Psi_\alpha^*(y) \left(-i\hbar \frac{d}{dy}\right) \Psi_\alpha(y) \\ &= \langle \alpha | \hat{p} | \alpha \rangle \\ \implies \hat{p}' &= \hat{p}\end{aligned}$$

La definizione di operatore trasformato è utile per definire in modo conciso ed efficiente che cos'è una simmetria.

⁷Nota che avrei anche potuto vederlo da:

$$\hat{p}' = T^\dagger(a)\hat{p}T(a) = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}\hat{p}e^{\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}$$

ma sapendo che $\hat{p}$ commuta con se stesso e che $T^\dagger(a)T(a) = 1$, allora ho $\hat{p}' = \hat{p}$

9.4 Simmetrie e leggi di conservazione in Meccanica Quantistica

Il profondo legame tra simmetrie e leggi di conservazione è presente in tutta la Fisica, meccanica classica, QFT, ma in Meccanica Quantistica questo legame è particolarmente chiaro. Vediamo le definizioni.

Simmetria Sia S un operatore che implementa sugli stati fisici (sulle funzioni d'onda) una trasformazione di coordinate, e sia $\mathcal{S}$ un sistema fisico descritto da un hamiltoniana H . Diciamo che S è una simmetria di $\mathcal{S}$ se l'hamiltoniana H (che ricordiamo è l'operatore che mi dice come evolve il sistema) resta invariata sotto l'azione di S . Per cui se⁸

$$H' = S^\dagger H S = H \quad \xRightarrow{S^\dagger = S^{-1}} \quad H S = S H \quad \implies \quad [H, S] = 0 \quad (9.4.1)$$

Legge di conservazione Sia Q un osservabile di $\mathcal{S}$, rappresentata da un operatore hermitiano $Q^\dagger = Q$. Diciamo che l'osservabile Q è conservata se le probabilità di ottenere per Q uno dei suoi valori possibili, q_n , sono costanti nel tempo:

$$\frac{dP(q_n)}{dt} = 0 \quad (9.4.2)$$

Questo implica in particolare che i valori medi di Q , $\langle Q \rangle_\alpha$, sono costanti. Questo però avviene se e solo se:

- Q non dipende esplicitamente dal tempo
- Q commuta con l'hamiltoniana H , $[H, Q] = 0$

Infatti, per i valori medi vale:

$$\frac{d}{dt} \langle Q \rangle_\alpha = \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle_\alpha + \frac{i}{\hbar} \langle [H, Q] \rangle_\alpha$$

per le probabilità $P(q_n)$ vale (considerando per semplicità uno spettro discreto):

$$P_\alpha(q_n; t) = |\langle n | \alpha(t) \rangle|^2 \quad \text{dove} \quad Q |n\rangle = q_n |n\rangle$$

per cui se ora abbiamo $[H, Q] = 0$, H e Q ammettono una base ON comune di autostati. Possiamo dunque scegliere $|n\rangle$ in modo che

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle$$

possiamo sviluppare $|\alpha(0)\rangle$ nella base $|n\rangle$:

$$|\alpha(0)\rangle = \sum_m c_m |m\rangle \quad \implies \quad |\alpha(t)\rangle = \sum_m e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} c_m |m\rangle$$

⁸Nota che vale quello che c'è scritto sotto se S è unitario.

ma allora

$$P_\alpha(q_n; t) = \left| \sum_m e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} c_m \langle n|m \rangle \right|^2 = \left| e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n \right|^2 = |c_n|^2 \quad (9.4.3)$$

indipendente dal tempo.

Vediamo, ora, che legame c'è tra le simmetrie e le leggi di conservazione. Consideriamo una trasformazione di coordinate che dipende in modo continuo (simmetrie discrete sono un po' più complicate) da uno o più parametri (traslazioni, rotazioni,...) e che sia rappresentata da un'operatore unitario. Allora

$$S = S(\{\alpha_i\}) \equiv S(\alpha) \quad ; \quad S^{-1} = S^\dagger \quad (9.4.4)$$

Scegliendo i parametri in modo che $S(0) = \mathbb{1}$ (che è una scelta naturale, che vuol dire che se non faccio nulla la trasformazione è l'identità), possiamo sempre scrivere $S(\alpha)$ come⁹

$$S(\alpha) \equiv e^{i\alpha Q} \quad , \quad \text{dove} \quad Q^\dagger = Q \quad (\text{e } \{\alpha_i\} \in \mathbb{R}) \quad (9.4.5)$$

Infatti

$$S^\dagger(\alpha) = e^{-i\alpha Q^\dagger} = e^{-i\alpha Q} = S^{-1}(\alpha) \quad (9.4.6)$$

Dato che Q è un operatore hermitiano, può essere associato ad una osservabile fisica $\mathcal{Q}$. Se S è una simmetria, allora Q è una quantità conservata, perché

$$0 = [H, S(\alpha)] = [H, e^{i\alpha Q}] \implies [H, Q] = 0 \quad (9.4.7)$$

come visto prima, e questa cosa implica che Q è conservato nel senso della Meccanica Quantistica .

Nota bene che la scelta di prendere S unitario non è né casuale né particolarmente restrittiva. Infatti, gli operatori unitari preservano i prodotti scalari (in uno spazio complesso), dunque le probabilità, e si vede da

$$|\alpha'\rangle \equiv S|\alpha\rangle \quad ; \quad |\beta'\rangle \equiv S|\beta\rangle \implies \langle\beta'|\alpha'\rangle = \langle\beta|S^\dagger S|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$$

una seconda motivazione è che questa cosa è un teorema generale dovuto a Eugene Wigner, che mi dice che tutte le trasformazioni che preservano le probabilità (e quindi in generale i moduli $|\langle\beta|\alpha\rangle|$) sono rappresentate nello spazio di Hilbert da operatori unitari, oppure anti-unitari, definiti da

$$\begin{aligned} |\alpha'\rangle &\equiv \bar{S}|\alpha\rangle \quad ; \quad |\beta'\rangle \equiv \bar{S}|\beta\rangle \\ \implies \langle\beta'|\alpha'\rangle &= \langle\beta|\bar{S}^\dagger \bar{S}|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|\beta\rangle \end{aligned}$$

⁹**Nota** In presenza di più parametri α_i dovremmo scrivere $S(\alpha_i) = \exp\{i \sum_i \alpha_i Q_i\}$ sempre con $Q_i^\dagger = Q_i$.

Gli operatori anti-unitari coinvolgono una complessa coniugazione, e includono (di solito) l'inversione temporale¹⁰. Si noti infatti che, sotto $t \rightarrow -t$, si ha $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ ($\vec{p}$ è una velocità, quindi con una derivata rispetto t), $\vec{x} \rightarrow \vec{x}$, e, per una hamiltoniana che non dipenda esplicitamente da t , parto da

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi \quad (9.4.8)$$

se inverte il tempo ottengo

$$-i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi \quad (9.4.9)$$

se invece prendo il complesso coniugato ottengo

$$-i\hbar \frac{d\Psi^*}{dt} = H\Psi^* \quad (9.4.10)$$

dunque vedo che se Ψ soddisfa l'equazione di Schrodinger, allora anche Ψ^* soddisfa l'equazione di Schrodinger con $t \longleftrightarrow -t$. Nota che in meccanica classica fare $t \rightarrow -t$ non mi faceva cambiare il moto, ma in realtà questo è così anche in Meccanica Quantistica, poiché se faccio $t \rightarrow -t$ e quindi $\Psi \rightarrow \Psi^*$ i moduli quadri in realtà rimangono gli stessi e la fase che ho cambiato non la vedo.

9.4.1 Esempi ed applicazioni

Invarianza per traslazioni Si $T(\vec{a})$ l'operatore di traslazione (con $\vec{a}$ un vettore nello spazio delle configurazioni del sistema, $\mathbb{R}^{3n}$ per n particelle). Se $H' = T(\vec{a})^\dagger H T(\vec{a}) = H$, allora il sistema è invariante, e $[T(\vec{a}), H] = 0$. Ma abbiamo

$$T(\vec{a}) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}\right\} \implies [H, \vec{p}] = 0 \quad (9.4.11)$$

dunque anche l'impulso (totale) è conservato. Per una particella singola questo è un caso *banale*:

$$H = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + V(\vec{r}) \implies T(\vec{a})^\dagger H T(\vec{a}) = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + V(\vec{r} + \vec{a}) \quad (9.4.12)$$

poiché $\vec{p}$ è invariante per traslazioni. Dunque $H = H'$ solo se $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{a})$. Questo accade solo per potenziali periodici ($\vec{a}$ discreto¹¹) oppure costanti ($\sim$ particella libera). Vedremo tra poche pagine il caso di potenziali periodici.

¹⁰Fare un'inversione temporale di $\Psi(\vec{x}, t)$ vuol dire prendere $\Psi^*(\vec{x}, t)$.

¹¹Il gruppo delle traslazioni è sempre lo stesso individuato nella sezione precedente, ma il gruppo delle simmetrie è più piccolo poiché contiene solo $\vec{a}$ multiplo intero del passo reticolare (ad esempio).

Per sistemi di molte particelle mutuamente interagenti, ma non soggette a forze esterne, comunque questo è il caso generico¹²

$$H = \sum_i \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m_i} + V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$

$$\Rightarrow H' = T(\vec{a})^\dagger H T(\vec{a}) = \sum_i \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m_i} + V[(\vec{r}_i + \vec{a}) - (\vec{r}_j + \vec{a})] = H$$

dove abbiamo $H' = H$ perché le traslazioni avvengono sia per $\vec{r}_i$ che per $\vec{r}_j$ per cui si semplificano nella parentesi. In tutti questi casi l'impulso totale $\vec{p} = \sum_i \vec{p}_i$ è sempre conservato. Per cui possiamo dire:

Invarianza per traslazioni $\iff$ conservazione dell'impulso
--

Invarianza per rotazioni Possiamo fare considerazioni analoghe anche quando abbiamo a che fare con delle rotazioni (intorno ad un generico asse $\hat{n}$, di un angolo α), implementate dall'operatore (unitario)

$$R_{\hat{n}}(\alpha) \equiv \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{n} \cdot \vec{L}\right\} \quad (9.4.13)$$

anche qui possiamo vedere che se le rotazioni sono una simmetria del sistema allora

$$H' = R_{\hat{n}}^\dagger(\alpha) H R_{\hat{n}}(\alpha) = H \quad \Rightarrow \quad [H, \vec{L}] = 0 \quad (9.4.14)$$

per cui il momento angolare¹³ è conservato, come in meccanica classica. In questo caso scriviamo:

Invarianza per rotazioni $\iff$ conservazione del momento angolare
--

In questo caso però possiamo entrare in maggior dettaglio e osservare come l'invarianza viene concretamente realizzata. Notiamo che

$$[L_i, |\vec{p}|^2] = \sum_{j=1}^3 \left(p_j [L_i, p_j] + [L_i, p_j] p_j \right)$$

mentre ad esempio

$$[L_z, p_x] = [x p_y - y p_x, p_x] = [x, p_x] p_y = i\hbar p_y \quad \Rightarrow \quad [L_i, p_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k$$

dunque

$$[L_i, |\vec{p}|^2] = \sum_{j,k=1}^3 \left(2i\hbar \underbrace{\varepsilon_{ijk} p_j p_k}_{\vec{p} \times \vec{p} = 0} \right) = 0 \quad (9.4.15)$$

¹²Mi aspetto che sistemi isolati siano sempre invarianti per traslazioni.

¹³Le componenti non commutano tra loro, ma tutte commutano con H .

come previsto. In modo analogo si verifica che

$$[L_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k \implies [L_i, r^2] = 0 \quad (9.4.16)$$

Possiamo ora dare una definizione rilevante:

- **Operatori scalari:** quelli che commutano con L_i (e quindi con $|\vec{L}|^2$)

$$[L_i, F] = 0$$

- **Operatori vettoriali:**¹⁴ quelli che si trasformano come le coordinate

$$[L_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k$$

Potenziali periodici Per un gran numero di importanti sistemi fisica (cristalli, metalli,...) ha rilevanza la simmetria per traslazioni discrete, effettuate cioè tramite $T(a)$, ma non con a generico, bensì multiplo di una lunghezza fondamentale a_0 (passo reticolare), $a = a_n = na_0$ con $n \in \mathbb{Z}$. I sistemi che hanno potenziali periodici (in 1 dimensione: $V(x + na_0) = V(x)$) sono invarianti sotto queste traslazioni discrete.

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad , \quad V(x + na_0) = V(x) \quad (n \in \mathbb{Z}) \quad (9.4.17)$$

$$\longrightarrow T^\dagger(a_n)HT(a_n) = \frac{p^2}{2m} + V(x + na_0) = H \quad (9.4.18)$$

Nota che costruire potenziali periodici è molto facile, per esempio

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(x + na_0) \quad (9.4.19)$$

è evidentemente periodico $\forall f$. Un caso interessante è quando $f(x) = \delta(x)$. In questo caso $T(a)$ commuta con H per $a = a_n$, $\forall n \in \mathbb{Z}$.

Tutto ciò ha importanti conseguenze, infatti:

- Se $T(a_n)$ commuta con H , i due operatori ammettono una base comune di autostati¹⁵. Possiamo dunque scegliere gli autostati di H in modo che siano anche autostati di $T(a_n)$.

$$H\Psi(x) = E\Psi(x) \quad ; \quad T(a_0)\Psi(x) = \lambda_0\Psi(x) \quad (9.4.20)$$

¹⁴**Nota.** Questa è probabilmente la definizione più significativa del concetto di vettore in $\mathbb{R}^3$. Analoghe definizioni si possono costruire per tensori di $SO(3)$ di rango superiore ad 1, e più in generale per spazi vettoriali su cui agiscono linearmente gruppi di Lie diversi da $SO(3)$.

¹⁵Noi avevamo dimostrato questa cosa nel capitolo §3 nel caso di due operatori hermitiani, ma vale in generale anche per operatori unitari.

- Gli autovalori di un operatore unitario hanno $|\lambda| = 1$, infatti

$$\begin{aligned} T|\Psi\rangle &= \lambda|\Psi\rangle \implies \langle\Psi|T^\dagger = \langle\Psi|\lambda^* \\ \implies \langle\Psi|T^\dagger T|\Psi\rangle &= \langle\Psi|\Psi\rangle = 1 = |\lambda|^2 \end{aligned}$$

dunque

$$\lambda_0 = \exp\{i\varphi(a_0)\} \equiv \exp\{-iqa_0\} \quad , \quad \varphi(a_0) \in \mathbb{R} \quad (9.4.21)$$

e nota che il segno della fase è convenzionale: che la fase φ sia lineare in a_0 segue dalla necessità di poter comporre traslazioni:

$$T(a_0)T(a_0) = T(2a_0) \quad , \quad \dots$$

q dunque è un numero d'onda, $[q] = L^{-1}$, e $\hbar q$ un impulso.

- Ne segue:

$$T(a_0)\Psi(x) = \Psi(x - a_0) = e^{-iqa_0}\Psi(x) \quad (9.4.22)$$

dove secondo e terzo termine equagliati rappresentano l'equazione funzionale per $\Psi(x)$, la cui soluzione si può scrivere¹⁶

$$\Psi(x) = e^{iqx}u(x) \quad (9.4.23)$$

con $u(x)$ periodica, $u(x + a_0) = u(x)$. Infatti allora

$$\Psi(x - a) = e^{iq(x-a_0)}u(x - a_0) = e^{-iqa_0}e^{iqx}u(x) = e^{-iqa_0}\Psi(x)$$

Concludiamo dunque che gli stati stazionari nel caso di potenziali periodici sono onde piane, modulate (l'ampiezza) da funzioni periodiche. I cristalli e molti metalli, forniscono esempi di potenziali periodici per gli elettroni che vi si muovono. Queste soluzioni suggeriscono che gli elettroni possano muoversi di moto libero (onde piane) con una modulazione periodica di ampiezza. Si tratta di un moto realistico (e non di un modello troppo restrittivo) alla base della teoria della conduzione nei metalli. La resistenza elettrica viene attribuita alle imperfezioni (difetti) del reticolo ionico. (Rivedrai queste cose nella parte finale di *Struttura della Materia*).

Concludiamo questa sezione con un'altra *applicazione*, il teorema di Wigner-Eckart, che racchiunde un interessante regola di selezione per gli elementi di matrice degli operatori scalari. Infatti, tra le conseguenze più importanti dell'invarianza per rotazioni in Meccanica Quantistica ci sono, appunto delle regole di selezione per gli elementi di matrice di operatori che si trasformano in modo definito sotto l'azione delle rotazioni spaziali (ad esempio: scalari,

¹⁶Nota che questo è già il teorema di Bloch che rivedremo nel capitolo §14.1.5.

vettori, tensori,...). Queste regole di selezione sono centrali quando si studiano sistemi complessi con tecniche perturbative. La formulazione più generale delle regole di selezione è data dal teorema che segue, che però richiede tecniche più avanzate di teoria dei gruppi. Ne vedremo solo l'esempio più semplice.

Teorema 1 *Sia F un operatore scalare, prendiamo un ICOC che include il momento angolare $\{L^2, L_z\}$, dunque abbiamo stati del tipo $|\{n_i\}, l, m\rangle$, dove $\{n_i\}$ sono altri numeri quantici (tra cui tipicamente l'energia). Allora gli elementi di matrice di F soddisfano la regola di selezione:*

$$\langle n'l'm' | F | nlm \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \langle n'l | F | nl \rangle \quad (9.4.24)$$

dove l'elemento di matrice ridotto $\langle n'l | F | nl \rangle$ non dipende da m .

Presi dunque un ICOC $\{L^2, L_z\}$, degli stati $|n, l, m\rangle$ (mettiamo per brevità $n_i \rightarrow n$), richiediamo che valgano le solite

$$\begin{aligned} L^2 |n, l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |n, l, m\rangle \\ L_z |n, l, m\rangle &= \hbar m |n, l, m\rangle \end{aligned}$$

e sia F operatore scalare (ad esempio r , $|\vec{p}|^2$, H , ...), tale quindi che

$$[L_i, F] = 0 \quad \implies \quad [L^2, F] = 0$$

cerchiamo dunque di dimostrare il teorema e vedere che in realtà la maggior parte degli elementi di matrice di F nella base $|n, l, m\rangle$ sono nulli, e quelli non nulli soddisfano la regola 9.4.24. Sfruttiamo l'annullarsi degli elementi di matrice dei commutatori.

$$\begin{aligned} [L_z, F] &= 0 \quad \implies \quad \langle n'l'm' | [L_z, F] | n, l, m \rangle = 0 \\ \implies \quad \langle n'l'm' | (L_z F - F L_z) | n, l, m \rangle &= 0 \\ \implies \quad \hbar(m' - m) \langle n'l'm' | F | n, l, m \rangle &= 0 \end{aligned}$$

dunque gli elementi di matrice $\langle n'l'm' | F | n, l, m \rangle$ sono non nulli solo se $m = m'$. Scriviamo dunque

$$\langle n'l'm' | F | n, l, m \rangle \propto \delta_{mm'} \quad (9.4.25)$$

continuiamo con l'altro commutatore.

$$\begin{aligned} [L^2, F] &= 0 \quad \implies \quad \langle n'l'm' | [L^2, F] | n, l, m \rangle = 0 \\ \implies \quad \langle n'l'm' | (L^2 F - F L^2) | n, l, m \rangle &= 0 \\ \implies \quad \hbar^2[l'(l'+1) - l(l+1)] \langle n'l'm' | F | n, l, m \rangle &= 0 \end{aligned}$$

dunque gli elementi di matrice $\langle n'l'm' | F | n, l, m \rangle$ sono non nulli solo se

$$l'(l' + 1) = l(l + 1) \implies l' = l$$

(ci sarebbe anche $l' = -l - 1$, ma non è consentito poiché $l, l' \geq 0$) Scriviamo dunque

$$\langle n'l'm' | F | n, l, m \rangle \propto \delta_{mm'} \delta_{ll'} \quad (9.4.26)$$

Possiamo usare ancora un'utile commutatore

$$\begin{aligned} [L_+, F] &= 0 \implies \langle n'l'm' | [L_+, F] | n, l, m \rangle = 0 \\ \implies \langle n'l'm' | (L_+ F - F L_+) | n, l, m \rangle &= 0 \end{aligned}$$

qua sorge il problema di sapere che un generico operatore agisce a destra nel suo modo usuale, mentre agisce a sinistra come il suo hermitiano coniugato (se $Q = Q^\dagger$ tanto meglio, come L^2 ed L_z), ma in questo caso risulta facile vederlo, poiché sappiamo

$$\begin{aligned} \langle l, m + 1 | L_+ | l, m \rangle &= \hbar \sqrt{l(l + 1) - m(m + 1)} \\ \implies \langle l, m | L_+ | l, m - 1 \rangle &= \hbar \sqrt{l(l + 1) - m(m - 1)} \end{aligned}$$

ovvero, L_+ agisce a sinistra come $(L_+)^\dagger = L_-$, come previsto. Per cui potremmo anche scrivere

$$\langle n'l'm' | L_+ F | n, l, m \rangle^* = \langle nlm | F L_- | n', l', m' \rangle$$

tornando a noi, abbiamo

$$\begin{aligned} 0 &= \hbar \sqrt{l'(l' + 1) - m'(m' - 1)} \langle n'l'm' - 1 | F | n, l, m \rangle - \\ &\quad - \hbar \sqrt{l(l + 1) - m(m + 1)} \langle n'l'm' | F | n, l, m + 1 \rangle \end{aligned}$$

ma da quello che abbiamo imparato prima gli elementi di matrice sono proporzionali a $\delta_{m', m+1}$ e $\delta_{l, l'}$. Dunque

$$0 = \hbar \sqrt{l(l + 1) - m(m + 1)} \left(\langle n'lm | F | n, l, m \rangle - \langle n'lm + 1 | F | n, l, m + 1 \rangle \right)$$

e dato che questo deve valere $\forall m$, gli elementi di matrice di F non possono dipendere da m , e questo si scrive:

$$\langle n'l'm' | F | nlm \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \langle n'l | F | nl \rangle \quad (9.4.27)$$

che è l'enunciato del teorema e dove per definizione l'elemento di matrice ridotto $\langle n'l | F | nl \rangle$ non dipende da m .

Riassumendo. Abbiamo ridotto il calcolo di un gran numero di elementi di matrice di F a solo pochi casi. Anche se non lo vediamo il teorema

si estende anche ad operatori vettoriali $\vec{V}$ definiti da $[L_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k$, come $\vec{r}, \vec{p}$. Questi hanno *spin* 1, per cui le regole di selezione richiederanno $\Delta m \equiv m' - m = 0, \pm 1$ e $\Delta l \equiv l' - l = 0, \pm 1$. Gli elementi di matrice non nulli saranno connessi dai coefficienti di Clebsh-Gordan. Vedi §6.7.2 di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.GR. Non abbiamo neanche trattato il caso della parità (simmetria discreta sotto $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$), che consente di distinguere scalari da pseudo-scalari e vettori da pseudo-vettori. Vedi §6.4 di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.GR.

9.5 Traslazioni nel tempo

Ora vediamo una delle trasformazioni di coordinate (nel caso non relativistico) più interessante, utile ed importante. Una traslazione temporale è una trasformazione del tipo:

$$t \longrightarrow t' = t + t_0 \quad (9.5.1)$$

come visto per le traslazioni spaziali e angolari anche ora ci aspettiamo che le traslazioni temporali siano generate dall'operatore differenziale $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$. Fatta questa ipotesi, allora conosciamo già l'operatore (osservabile) che le genera. L'equazione di Schrodinger infatti ci dice:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (9.5.2)$$

dunque possiamo dire che le traslazioni nel tempo sono generate dall'hamiltoniana (energia). Possiamo esprimere questo fatto introducendo un nuovo modo di risolvere l'equazione. Definiamo l'**operatore di evoluzione temporale** come

$$U(t_2, t_1) \ / \ \Psi(\vec{r}, t_2) = U(t_2, t_1)\Psi(\vec{r}, t_1) \quad (9.5.3)$$

Nel caso in cui H non dipenda esplicitamente da t è anche facile trovare un'espressione esplicita per $U(t_2, t_1)$:

$$\begin{aligned} \Psi(t_2) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial t^n} \Psi(t) \Big|_{t=t_1} (t_2 - t_1)^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[-\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1) \right]^n \Psi(t_1) \\ &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1) \right\} \Psi(t_1) \end{aligned}$$

dove nel primo passaggio abbiamo scritto lo sviluppo in serie di Taylor della funzione d'onda, successivamente abbiamo fatto la sostituzione $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -\frac{i}{\hbar} H$ ¹⁷

¹⁷Nota che se $H = H(t)$ allora questa cosa non la potrei scrivere, riuscirei comunque a scrivere il tutto in modo compatto, ma ci sarebbero delle complicazioni, vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.mq2.

e nella terza riga abbiamo ricompattato tutto. Quindi abbiamo trovato

$$U(t_2, t_1) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1)} \quad (9.5.4)$$

Ora l'evoluzione temporale delle funzioni d'onda nel caso stazionari è trasparente. Data una base di autofunzioni di H ,

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n$$

per $t = 0$, qualsiasi condizione iniziale $\Psi(\vec{r}, 0)$ può essere espressa nella base Ψ_n :

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r})$$

ma allora

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= U(t, 0)\Psi(\vec{r}, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}) \\ &= \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \Psi_n(\vec{r}) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \Psi_n(\vec{r}) \end{aligned}$$

come ben sappiamo.

Così come $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$ è il generatore delle trasformazioni spaziali ed è la quantità conservata per sistemi invarianti sotto $T(a) = e^{-\frac{i}{\hbar} ap}$, così $H \longleftrightarrow i\hbar \frac{d}{dt}$ è il generatore delle traslazioni temporali, e l'osservabile corrispondente, l'energia, è conservata per sistemi invarianti sotto traslazioni temporali, ossia, invarianza sotto l'azione di U . Nota che questa invarianza è definita da

$$U(t_2, t_1) = U(t_2 + \Delta t, t_1 + \Delta t)$$

ed è manifestata se H non dipende esplicitamente da t . In tal caso

$$U(t_2 + \Delta t, t_1 + \Delta t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} H(t_2 + \Delta t - t_1 - \Delta t)\right\} = U(t_2, t_1)$$

L'energia è conservata (nel senso già discusso) perché

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial t} &= 0 \quad , \quad [H, H] = 0 \\ \implies \frac{d}{dt} \langle H \rangle_\alpha &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, H] \rangle_\alpha + \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle_\alpha = 0 \end{aligned}$$

per cui abbiamo

Invarianza per traslazioni nel tempo $\iff$ conservazione dell'energia
--

9.6 Descrizioni di Schrodinger, Heisenberg e di interazione

In questa sezione analizzeremo i diversi modi che abbiamo di interpretare l'azione di un operatore su uno stato fisico. Come abbiamo fatto per le traslazioni spaziali e per le rotazioni, possiamo scrivere come si trasforma un operatore per traslazioni temporali. Per un generico operatore Q scriviamo (ipotizzando H indipendente da t)¹⁸

$$\begin{aligned} Q(t) &= U^\dagger(t, 0)Q(0)U(t, 0) \\ &= U(0, t)Q(0)U(t, 0) \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}Ht}Q(0)e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \end{aligned}$$

Nel calcolare l'evoluzione temporale degli elementi di matrice e dei valori medi, abbiamo quindi una famiglia di scelte.

a. Gli stati fisici evolvono nel tempo secondo l'equazione di Schrodinger, mentre gli operatori sono indipendenti dal tempo. Questo è quello che abbiamo fatto fin'ora, e va sotto il nome di **descrizione di Schrodinger**,

$$|\alpha(t)\rangle = U(t, 0) |\alpha(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\alpha(0)\rangle \quad (9.6.1)$$

$$\langle Q \rangle_{\alpha, t} \equiv \langle \alpha(t) | Q(0) | \alpha(t) \rangle = \langle \alpha(0) | e^{\frac{i}{\hbar}Ht} Q(0) e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} | \alpha(0) \rangle \quad (9.6.2)$$

o più in generale

$$\langle \beta | Q | \alpha \rangle_t = \langle \beta(t) | Q(0) | \alpha(t) \rangle = \langle \beta(0) | e^{\frac{i}{\hbar}Ht} Q(0) e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} | \alpha(0) \rangle \quad (9.6.3)$$

b. In modo del tutto equivalente, si possono immaginare gli stati come fissati nel tempo, e attribuire l'evoluzione temporale agli operatori. Questa viene detta **descrizione di Heisenberg**, e si scrive

$$|\alpha\rangle_H \equiv |\alpha(0)\rangle \quad , \quad Q_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} Q_H(0) e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (9.6.4)$$

notando che nelle due rappresentazioni $Q(0) = Q_S(0) = Q_H(0)$. Allora evidentemente

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_{\alpha, t} &\equiv_H \langle \alpha | Q_H(t) | \alpha \rangle_H = \langle \alpha(0) | e^{\frac{i}{\hbar}Ht} Q_H(0) e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} | \alpha(0) \rangle \\ &=_S \langle \alpha(t) | Q_S | \alpha(t) \rangle_S \end{aligned}$$

e analogamente per gli elementi di matrice. È chiaro dunque che si tratta di descrizioni equivalenti. La descrizione di Heisenberg presenta però strette

¹⁸Nota che U è unitario essendo H hermitiano.

analogie con la meccanica hamiltoniana: per esempio, si possono scrivere le equazioni del moto per gli operatori

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} Q_H(t) &= i\hbar \left(\frac{i}{\hbar} H e^{\frac{i}{\hbar} H t} \right) Q_H(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} + i\hbar e^{\frac{i}{\hbar} H t} Q_H(0) \left(-\frac{i}{\hbar} H \right) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \\ &= -H Q_H(t) + Q_H(t) H \\ &= [Q_H(t), H] \end{aligned}$$

che presentano la solita analogia con il caso classico dato in termini delle parentesi di Poisson.

c. Vediamo anche il caso della rappresentazione che suddivide l'evoluzione temporale tra stati ed operatori. Se per esempio abbiamo

$$H = H_0 + H_1 \quad (9.6.5)$$

con (ad esempio) H_0 facilmente risolvibile, possibilmente libera ($H_0 = H_{cin}$), mentre H_1 rappresenta un'interazione, allora si ha¹⁹

$$U(t, 0) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} H t\right\} = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} (H_0 + H_1) t\right\} \quad (9.6.6)$$

$$= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} H_1 t\right\} \quad (9.6.7)$$

e si può attribuire l'evoluzione libera agli operatori e quella dovuta all'interazione agli stati. Dunque, in questa rappresentazione mischiamo la rappresentazione di Heisenberg con quella di Schrodinger.

$$\langle Q \rangle_{\alpha, t} = \langle \alpha(0) | e^{\frac{i}{\hbar} H_1 t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} Q(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_1 t} | \alpha(0) \rangle \quad (9.6.8)$$

$$\equiv \langle \alpha(t) | Q_I(t) | \alpha(t) \rangle_I \quad (9.6.9)$$

in cui abbiamo scritto:

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H_1 t} |\alpha(0)\rangle \quad (9.6.10)$$

$$Q_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} Q(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (9.6.11)$$

Questa classe di descrizioni viene denominata **descrizione di interazione**, e viene spesso utilizzata (vedi Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.LB o qualsiasi libro di QFT) per sviluppi perturbativi, soprattutto se $H_1 = H_1(t)$. Questa sommaria descrizione si generalizza infatti al caso in cui H dipenda da t , sia al caso in cui $[H_0, H_1] \neq 0$, per cui gli esponenziali della riga 9.6.6 non fattorizzano esattamente e compaiono una serie di commutatori (potenzialmente ∞).

¹⁹Attenzione! Solo se $[H_0, H_1] = 0$.

Capitolo 10

Matrice densità

Quando è valido il postulato della Meccanica Quantistica che mi dice che uno stato fisico è un raggio nello spazio di Hilbert, allora io ho la massima informazione sul sistema. Nel momento in cui però non ho completa conoscenza dello stato del sistema, allora ho una distribuzione statistica che mi dice che il sistema si trova in un certo stato, piuttosto che in un qualunque altro, con una certa probabilità (classica). Infatti se non riesco a determinare completamente lo stato, per motivi sperimentali il più delle volte, non ho più un ensemble di stati tutti uguali tra loro, ma ho appunto, una distribuzione statistica (classica) di stati puri. Gli **stati puri** sono quelli che determiniamo completamente. Parliamo a questo punto di **stati misti**, che sono gli stati che utilizziamo quando abbiamo una miscela statistica di stati puri. Se ho uno di questi stati non posso definire gli stati con raggi nello spazio di Hilbert, ma devo descriverli tramite un operatore, chiamato **matrice densità** ρ .

Si potrebbe dare una definizione motivata della matrice densità, ma la lascio per il corso di Meccanica Quantistica 2. Mi limito a dire che indico con ω_k la probabilità di trovarmi in uno stato puro $|\Psi_k\rangle$ ¹ e così definisco la matrice densità come:

$$\rho = \sum_k \omega_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \quad (10.0.1)$$

Nota che con questa definizione la matrice densità che descrive uno stato puro è quello che di solito si chiama **proiettore**

$$\rho = |\Psi\rangle \langle \Psi| \quad (10.0.2)$$

Ora, proviamo a vedere alcune proprietà della matrice densità e a vedere le differenze tra stato puro e stato misto.

Per uno stato misto, quindi una ρ della forma 10.0.1, si ha:

¹ovviamente vale che $\sum_k \omega_k = 1$ e in più presa una base ortogonale posso sempre fare lo sviluppo di Fourier dello stato puro.

1. Per prima cosa possiamo notare che la matrice densità è un'operatore hermitiano, per cui

$$\rho = \rho^\dagger$$

2. Possiamo vedere cos'è la traccia della matrice densità:

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\rho\} &= \sum_i \langle i | \left(\sum_k \omega_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \right) | i \rangle = \sum_k \omega_k \sum_i \langle \Psi_k | i \rangle \langle i | \Psi_k \rangle \\ &= \sum_k \omega_k \langle \Psi_k | \Psi_k \rangle = \sum_k \omega_k = 1 \end{aligned}$$

avendo riconosciuto la completezza della base $\{|i\rangle\}$ e l'ortonormalità degli stati.

3. Possiamo anche (in modo banale) vedere che gli autovalori di ρ sono numeri positivi (ho detto banale perché se gli diamo un'interpretazione probabilistica devono per forza essere positivi). Prendiamo

$$\rho |v_l\rangle = \lambda_l |v_l\rangle$$

vediamo dunque

$$\begin{aligned} \langle v_l | \rho | v_l \rangle &= \sum_k \omega_k \langle v_l | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | v_l \rangle = \sum_k \omega_k |\langle \Psi_k | v_l \rangle|^2 \geq 0 \\ \implies \lambda_l &\geq 0 \end{aligned}$$

4. Come ultima cosa possiamo notare che per uno stato misto si ha

$$\rho^2 \neq \rho$$

poiché

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \rho \rho = \sum_{k,j} \left(\omega_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \right) \left(\omega_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \right) \\ &= \sum_{k,j} \omega_k \omega_j |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k | \Psi_j \rangle \langle \Psi_j| \end{aligned}$$

Dunque vale anche che

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\rho^2\} &= \sum_{k,j} \omega_k \omega_j \langle i | \left(|\Psi_k\rangle \langle \Psi_k | \Psi_j \rangle \langle \Psi_j| \right) | i \rangle \\ &= \sum_{k,j} \omega_k \omega_j \langle \Psi_k | \Psi_j \rangle \langle \Psi_j | \Psi_k \rangle \\ &= \sum_{k,j} \omega_k \omega_j |\langle \Psi_k | \Psi_j \rangle|^2 \end{aligned}$$

possiamo utilizzare la disuguaglianza di Schwartz²

$$\begin{aligned} &\leq \sum_{k,j} \omega_k \omega_j \langle \Psi_k | \Psi_k \rangle^2 \langle \Psi_j | \Psi_j \rangle^2 \\ &= \sum_{k,j} \omega_k \omega_j = 1 \end{aligned}$$

Concludiamo in definitiva che per uno stato misto

$$\text{Tr}\{\rho^2\} \leq 1$$

5. Possiamo vedere l'evoluzione temporale della matrice densità:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \sum_k \omega_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \right\} \\ &= i\hbar \sum_k \omega_k \left(\frac{\partial}{\partial t} \{ |\Psi_k\rangle \} \langle \Psi_k| + |\Psi_k\rangle \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi_k| \right) \end{aligned}$$

ma gli stati $|\Psi_k\rangle$ sono stati puri ed evolvono secondo l'equazione di Schrodinger³, dunque

$$\begin{aligned} &= \sum_k \omega_k \left(\hat{H} |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| - |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \hat{H} \right) \\ &= \hat{H} \rho - \rho \hat{H} \\ &= [\hat{H}, \rho] \end{aligned}$$

Quindi complessivamente diciamo che l'evoluzione temporale della matrice densità è:

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [\hat{H}, \rho] \quad (10.0.3)$$

Vediamo le stesse proprietà, ma per una matrice densità che descrive uno stato puro, quindi della forma 10.0.2:

1. Anche in questo caso si ha

$$\rho = \rho^\dagger$$

²Dunque

$$|\langle \Psi_k | \Psi_j \rangle| \leq \| |\Psi_k\rangle \| \cdot \| |\Psi_j\rangle \| = \langle \Psi_k | \Psi_k \rangle \langle \Psi_j | \Psi_j \rangle$$

³Fai attenzione però che $\langle \Psi_k |$ ha la sua "complessa coniugata", ossia, valgono

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_k\rangle = \hat{H} |\Psi_k\rangle \quad ; \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi_k| = \langle \Psi_k| \hat{H}$$

2. Possiamo vedere in questo caso la traccia:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}\{\rho\} &= \sum_i \langle i|\Psi\rangle \langle\Psi|i\rangle \\
 &= \sum_i \langle i|\left(\sum_j c_j |j\rangle\right)\left(\sum_j c_j^* \langle j|\right)|i\rangle \\
 &= \sum_{i,j} |c_j|^2 \langle i|j\rangle \langle j|i\rangle \\
 &= \sum_j |c_j|^2 = 1
 \end{aligned}$$

3. Prendiamo

$$\rho |v_l\rangle = \lambda_l |v_l\rangle$$

cerchiamo di vedere se anche in questo caso gli autovalori sono sempre positivi.

$$\begin{aligned}
 \langle v_l|\rho|v_l\rangle &= \langle v_l|\Psi\rangle \langle\Psi|v_l\rangle = |\langle\Psi|v_l\rangle|^2 \\
 \implies \lambda_l &\geq 0
 \end{aligned}$$

4. Possiamo vedere che in questo caso si ha:

$$\rho^2 = |\Psi\rangle \langle\Psi|\Psi\rangle \langle\Psi| = \rho$$

e automaticamente

$$\text{Tr}\{\rho^2\} = \text{Tr}\{\rho\} = 1$$

5. Anche in questo caso possiamo vedere l'evoluzione temporale:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d\rho}{dt} &= i\hbar \frac{d}{dt} \left\{ |\Psi\rangle \langle\Psi| \right\} \\
 &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \{|\Psi\rangle\} \langle\Psi| + |\Psi\rangle \frac{\partial}{\partial t} \langle\Psi| \right) \\
 &= \hat{H} |\Psi\rangle \langle\Psi| - |\Psi\rangle \langle\Psi| \hat{H} \\
 &= \hat{H}\rho - \rho\hat{H} \\
 &= [\hat{H}, \rho]
 \end{aligned}$$

ossia l'evoluzione temporale che avevamo già visto.

Queste proprietà sono essenziali perché: guardando le prime 3 proprietà

1. $\rho = \rho^\dagger$
2. $\text{Tr}\{\rho\} = 1$
3. $\lambda_l \geq 0$

possiamo controllare di avere un oggetto che effettivamente sia interpretabile come una matrice densità. Successivamente essendo sicuri di avere una matrice densità possiamo vedere se quell'operatore rappresenta uno stato puro o uno stato misto controllando la proprietà 4

1. $\rho^2 = \rho$?
2. $\text{Tr}\{\rho^2\} = 1$?

e vedere dunque se si ricade nel caso misto o puro.

Un'altra cosa essenziale è capire come sono fatti gli elementi di matrice di una matrice densità. Guardiamo il caso di stato misto, ma è immediato trasportarlo al caso di stato puro. Prendiamo come base O.N. sempre la solita $\{|i\rangle\}$ e una generica osservabile $\hat{A}$ tale che

$$\hat{A}|i\rangle = a_i |i\rangle$$

allora vediamo:

$$\begin{aligned} \rho_{ij} &= \langle i | \rho | j \rangle = \langle i | \left(\sum_k \omega_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \right) | j \rangle \\ &= \sum_k \omega_k \langle i | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | j \rangle \end{aligned}$$

potendo scrivere $|\Psi_k\rangle$ come combinazione lineare della base O.N. si ottiene:

$$= \sum_k \omega_k c_i^{(k)} c_j^{*(k)}$$

concentrandoci solo sulla diagonale possiamo vedere che:

$$\rho_{ii} = \sum_k \omega_k |c_i^{(k)}|^2$$

a cui possiamo dare il seguente significato: gli elementi sulla diagonale identificati dall'equazione sopra danno la **popolazione di $|\mathbf{a}_n\rangle$** poiché vediamo che $|c_i^{(k)}|^2$ è la probabilità di pescare l'autovalore a_i nello stato $|\Psi_k\rangle$, il tutto pesato per ω_k , che è la probabilità classica di essere effettivamente nello stato $|\Psi_k\rangle$, quindi, complessivamente, ρ_{ii} è la probabilità media che facendo una misura sullo stato descritto da ρ andiamo a misurare a_i . Vista in un altro modo, ρ mi dice quanto pesa l'elemento della base $|i\rangle$ nella matrice densità.

Chiaramente l'elemento di matrice di una ρ che rappresenta uno stato puro è

$$\rho_{ij} = c_i c_j^*$$

Inoltre scrivendo in generale

$$|\Psi_k\rangle = \sum_i c_i^{(k)} |i\rangle \quad ; \quad |\Psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$$

possiamo vedere che una matrice densità di uno stato puro

$$\rho = |\Psi\rangle \langle\Psi| = \sum_{i,j} c_i c_j^* |i\rangle \langle j|$$

è una matrice "*piena*", nel senso che non è solo diagonale. Invece per uno stato misto si vede

$$\rho = \sum_k \omega_k |\Psi_k\rangle \langle\Psi_k| = \sum_k \omega_k |c_k^{(k)}|^2 |i\rangle \langle i|$$

dunque è una matrice diagonale essendo $\{|i\rangle\}$ una base O.N..

Ovviamente la cosa che ci interessa di più è trovare il valor medio di un qualsiasi operatore associato ad un'osservabile. Vediamo la definizione generale valida per uno stato misto, ma che si trasforma immediatamente in una definizione per uno stato puro. Se vogliamo un valor medio di un'osservabile quando il sistema si trova nello stato $|\Psi_k\rangle$ dobbiamo tener conto che abbiamo una probabilità ω_k di trovarci effettivamente in quello stato, dunque si ha:

$$\langle F \rangle_\rho = \sum_k \omega_k \langle\Psi_k| F |\Psi_k\rangle \quad (10.0.4)$$

definizione in cui vediamo l'interfaccia tra la probabilità quantistica (insopprimibile) e la probabilità classica (causata da limiti sperimentali e dunque potenzialmente sopprimibile). Possiamo ridefinire:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_\rho &= \sum_{i,j,k} \omega_k \langle\Psi_k|i\rangle \langle i| F |j\rangle \langle j|\Psi_k\rangle \\ &= \sum_{i,j,k} \omega_k \langle j|\Psi_k\rangle \langle\Psi_k|i\rangle \langle i| F |j\rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle i| F |j\rangle \sum_k \omega_k \langle j|\Psi_k\rangle \langle\Psi_k|i\rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle i| F |j\rangle \langle j|\rho|i\rangle \\ &= \sum_i \langle i| F \rho |i\rangle \\ &= \text{Tr}\{F\rho\} \end{aligned}$$

valida sia per le matrici densità che descrivono stati puri o stati misti.

10.1 Matrice densità ed entropia

Gli scopi della matrice densità sono molteplici, la modellizzazione dell'entanglement quantistico forse è il più famoso, ma in questa sezione useremo le cose appena imparate per definire l'entropia quantistica.

Prendiamo un generico operatore autoaggiunto

$$\hat{Q} / \hat{Q} |i\rangle = q_i |i\rangle$$

e conosciamo la sua rappresentazione spettrale

$$\hat{Q} = \sum_i q_i |i\rangle \langle i|$$

mostriamo un attimo che data la rappresentazione spettrale vale

$$\hat{Q}^2 = \sum_i q_i^2 |i\rangle \langle i|$$

sono conti quasi banali:

$$\begin{aligned} \hat{Q}^2 &= \left(\sum_i q_i |i\rangle \langle i| \right) \left(\sum_j q_j |j\rangle \langle j| \right) = \sum_{i,j} q_i q_j |i\rangle \langle i|j\rangle \langle j| \\ &= \sum_i q_i^2 |i\rangle \langle i| \end{aligned}$$

come volevamo. Possiamo vedere che applicare una generica funzione f all'operatore $\hat{Q}$ equivale a dire

$$f(\hat{Q}) = \sum_i f(q_i) |i\rangle \langle i| \quad (10.1.1)$$

Possiamo definire l'**entropia** come l'insieme statistico di ρ , ossia come:

$$S(\rho) = -\text{Tr}\{\rho \log \rho\} = -\langle \log \rho \rangle_\rho \quad (10.1.2)$$

Possiamo indagare un po' meglio questa definizione. Scriviamo nel caso di stato misto

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_k \omega_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \\ \log \rho &= \log \left(\sum_k \omega_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \right) \stackrel{\text{usa } 10.1.1}{=} \sum_k \log(\omega_k) |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \end{aligned}$$

dunque avremo

$$\begin{aligned}
 S(\rho) &= -\text{Tr} \left\{ \left(\sum_j \omega_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \log \left(\sum_k \omega_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \right) \right) \right\} \\
 &= -\text{Tr} \left\{ \sum_{j,k} \omega_j \log(\omega_k) |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \right\} \\
 &= -\sum_{j,k} \omega_j \log(\omega_k) \text{Tr}\{|\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \Psi_k\rangle \langle \Psi_k|\} \\
 &\geq -\sum_{j,k} \omega_j \log(\omega_k)
 \end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo usato il fatto che $\text{Tr}\{\rho^2\} \leq 1$, ma in uno stato misto la matrice è solamente diagonale e gli elementi sulla diagonale sono solo moduli quadri moltiplicati per probabilità (quindi positive), dunque $\text{Tr}\{\rho^2\} \in (0, 1]$. Notando inoltre che $\omega_j \in [0, 1]$ e che dunque $\log \omega_k \leq 0$ allora possiamo concludere che:

$$S(\rho) \geq 0$$

nota che per stati puri gli stati sono ortogonali e si ha

$$\text{Tr}\{|\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \Psi_k\rangle \langle \Psi_k|\} = \delta_{ij}$$

e le $\omega_k = 1 \ \forall k$, dunque per uno stato puro si ha:

$$S(\rho) = 0$$

L'entropia può essere un'ulteriore parametro per vedere se siamo in presenza di uno stato puro o misto.

10.1.1 Esercizio

Testo Supponiamo di avere un sistema con momento angolare $j = 1$, quindi 3 valori possibili di una misura di J_z , ossia, è possibile avere $m_j = -1, 0, +1$. Questo sistema è descritto dalla matrice densità al tempo $t = 0$:

$$\rho(0) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

mostra che:

- a) se è una matrice densità valida e se rappresenta uno stato misto o puro
- b) Si calcoli il valore medio di J_z
- c) Si calcoli la deviazione standard nei valori misurati di J_z

Soluzione a) Dobbiamo mostrare che:

- $\text{Tr}\{\rho\} = 1$
- $\rho = \rho^\dagger$
- $\langle \Psi | \rho | \Psi \rangle \geq 0$

Si possono vedere le prime due in modo immediato. Per il terzo punto possiamo scrivere lo stato generico in componenti:

$$|\Psi\rangle = (\alpha \quad \beta \quad \gamma)$$

dunque possiamo verificare

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \rho | \Psi \rangle &= (\alpha \quad \beta \quad \gamma) \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^* \\ \beta^* \\ \gamma^* \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{4} (\alpha \quad \beta \quad \gamma) \begin{pmatrix} 2\alpha^* + \beta^* + \gamma^* \\ \alpha^* + \beta^* \\ \alpha^* + \gamma^* \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{4} (2|\alpha|^2 + \alpha\beta^* + \alpha\gamma^* + \beta\alpha^* + |\beta|^2 + \gamma\alpha^* + |\gamma|^2) \\ &= \frac{1}{4} (2|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + 2\text{Re}\{\alpha\beta\} + 2\text{Re}\{\alpha\gamma\}) \\ &= \frac{1}{4} (|\alpha + \beta|^2 + |\alpha + \gamma|^2) \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

Verificato che è una matrice densità vediamo se descrive uno stato puro o misto. Calcoliamo

$$\rho^2 = \rho\rho = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 6 & 3 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

quindi abbiamo $\rho^2 \neq \rho$ e dunque uno stato misto, ma è immediato vedere

$$\text{Tr}\{\rho^2\} = \frac{1}{16} 10 = \frac{5}{8} < 1$$

dunque si è più che sicuri che abbiamo uno stato misto.

b) Per calcolare il valor medio di J_z usiamo la definizione vista nel capitolo appena concluso. Abbiamo la rappresentazione matriciale di J_z (se non la ricordi guarda il capitolo del momento angolare):

$$J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

e possiamo dunque calcolare

$$\rho J_z = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

e vedere dunque

$$\langle J_z \rangle_\rho = \text{Tr}\{\rho J_z\} = \frac{1}{4}$$

c) Per calcolare la deviazione standard dei valori assunti da J_z dobbiamo usare

$$\Delta J_z = \sqrt{\langle J_z^2 \rangle - \langle J_z \rangle^2}$$

Calcoliamo a questo scopo

$$J_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\rho J_z^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Dunque possiamo concludere

$$\langle J_z^2 \rangle = \text{Tr}\{\rho J_z^2\} = \frac{3}{4}$$

e quindi

$$\Delta J_z = \sqrt{\frac{3}{4} - \left(\frac{1}{4}\right)^2} = \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{1}{16}} = \frac{\sqrt{11}}{4}$$

Capitolo 11

Particelle identiche

In questo capitolo tratteremo l'argomento delle particelle identiche che in Meccanica Quantistica assume un'inattesa profondità e porta alla formulazione di alcuni aspetti fondamentali. In Meccanica classica il concetto di particelle identiche è solo approssimato e circostanziale. Gli oggetti macroscopici possono essere solo approssimativamente identici (due biglie, pianeti, gocce d'acqua). Anche ammettendo l'esistenza di oggetti indistinguibili in un contesto classico, possiamo sempre in realtà distinguerli, ossia, identificarli ad un dato istante e poi seguirne la traiettoria (è qui che la Meccanica Quantistica cambia la storia). I sistemi classici sono deterministici, per cui oggetti identificati al tempo t_0 sono sempre in seguito distinguibili, proprio per il fatto che posso *seguirne* la traiettoria. In Meccanica Quantistica il concetto di traiettoria non è più utilizzabile e il determinismo gioca un ruolo limitato. Anche se esistono due oggetti fisicamente identici (due e^-), questi risultano genuinamente indistinguibili, anche in linea di principio. L'esistenza di oggetti di questo tipo è resa più plausibile dal fatto che i sistemi quantistici sono caratterizzati (in modo esaustivo) da un set limitato di numeri quantici. Però ammessa l'esistenza di oggetti indistinguibili le conseguenze in Meccanica Quantistica sono di grande impatto: i processi fisici possono avvenire in diversi modi, che differiscono tra loro per lo scambio di particelle identiche. Spiego meglio sotto con un esempio. Secondo le regole della Meccanica Quantistica si dovranno sommare le ampiezze di probabilità di questi diversi processi prima di farne il modulo quadro per ottenere la probabilità. Questo come abbiamo già visto cambia le cose rispetto al caso classico. Prendiamo ad esempio il caso, che c'è su Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.FN, di un processo di collisione tra due elettroni raffigurato in figura 11.1. Se prendiamo le particelle emergenti dalle sorgenti G_1 e G_2 distinguibili (diverse), allora, se le chiamiamo A e B , la probabilità di misurare A nel rivelatore R_1 (e conseguentemente di misurare B nel

rivelatore R_2) sarà¹

$$P(A \rightarrow R_1, B \rightarrow R_2) = |\mathcal{A}(A \rightarrow R_1, B \rightarrow R_2)|^2 \equiv |f(\theta)|^2$$

Caso diverso però se le particelle sono indistinguibili, poiché il processo può avvenire in 2 modi, e si ha:

$$\begin{aligned} P(A \vee B \rightarrow R_1) &= |\mathcal{A}(A \rightarrow R_1, B = A \rightarrow R_2) + \mathcal{A}(A \rightarrow R_2, B = A \rightarrow R_1)|^2 \\ &= |f(\theta) + e^{i\alpha} f(\pi + \theta)|^2 \end{aligned}$$

in cui si ipotizza che le due ampiezze siano descritte dalla stessa funzione f^2 , e abbiamo consentito una fase arbitraria α .

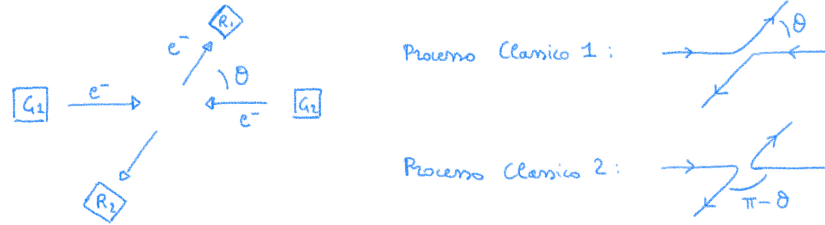


Figura 11.1: Processi di collisione tra due e^-

Conclusion Le predizioni Fisiche della Meccanica Quantistica sono drasticamente diverse nei casi di particelle identiche o distinguibili. Nota che questo fornisce un test empirico decisivo per verificare se le particelle sono davvero identiche in un senso fondamentale e non solo approssimativo.

Fatta questa non brevissima introduzione possiamo entrare nel vivo dell'argomento.

11.1 Degenerazione di scambio

Subito c'è da precisare che con degenerazione di scambio si intende dire che esistono tanti stati con stessa energia e che posso scambiare perché indistinguibili. Forse non è ben chiara l'importanza di questo capitolo, ma i colleghi Chimici usano questi concetti quotidianamente per trattare strutture atomiche o molecole. Per approfondire meglio prendiamo come caso di studio un sistema di elettroni nel campo coulombiano di un nucleo, che immaginiamo fisso. L'hamiltoniana sarà

$$H = \sum_{k=1}^N \left(\frac{|\vec{p}_k|^2}{2m} - \frac{Ne^2}{r_k} \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (11.1.1)$$

¹Si indica con $\mathcal{A}$ l'ampiezza di probabilità.

²Cosa vera per covarianza sotto rotazioni, in assenza di altri vettori che individuino direzioni privilegiate, per esempio lo spin.

che è manifestamente invariante sotto tutte le permutazioni del tipo

$$\vec{r}_i \longleftrightarrow \vec{r}_j \quad ; \quad \vec{p}_i \longleftrightarrow \vec{p}_j$$

Nota stiamo trascurando lo spin per semplicità, ma lo buttiamo dentro tra un po'.

Immaginiamo ora di aver determinato le autofunzioni di H

$$H\Psi_E(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E\Psi_E(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

Notiamo ora che H ha un nuovo tipo di simmetria discreta, la **simmetria di scambio**, ossia, $\forall \{i, j\}$, $i, j \in \{1, \dots, N\}$ si può definire l'operatore

$$P_{ij} / P_{ij} [\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N)] = \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N) \quad (11.1.2)$$

e questo operatore gode delle seguenti proprietà:

- È hermitiano³, $P_{ij} = P_{ij}^\dagger$
- È unitario, $P_{ij}^{-1} = P_{ij}^\dagger$ dato che ovviamente $P_{ij}^2 = \mathbb{1}$
- I suoi autovalori sono $\lambda_{ij} = \pm 1$
- Commuta con qualsiasi hamiltoniana che descriva un sistema di particelle identiche (ossia commuta con H quando c'è simmetria):

$$H' \equiv P_{ij}^\dagger H P_{ij} = P_{ij}^{-1} H P_{ij} = P_{ij} H P_{ij} = H \implies [H, P_{ij}] = 0$$

Segue però che ci aspettiamo una massiccia degenerazione dello spettro di H . Dato che preso uno stato $|1, \dots, N\rangle$ (con una sua funzione d'onda $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$) che soddisfi

$$H |1, \dots, N\rangle = E |1, \dots, N\rangle$$

allora tutti gli stati ottenuti con una generica permutazione delle etichette delle particelle avranno la stessa energia E , dato che

$$\begin{aligned} H(P_{ij} |1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle) &= H |1, \dots, j, \dots, i, \dots, N\rangle \\ H(P_{ij} |1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle) &= P_{ij} H |1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle \\ &= E P_{ij} |1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle \\ &= E |1, \dots, j, \dots, i, \dots, N\rangle \end{aligned}$$

³Lo dimostri ad esempio mettendo $N = 2$ e calcolando $\langle \alpha | P_{12} | \beta \rangle^*$ e vedendo che è uguale a $\langle \beta | P_{12} | \alpha \rangle$, facendo attenzione che puoi ribattezzare i nomi delle variabili anche dentro l'integrale.

e dato che tutte le $N!$ permutazioni delle N particelle sono raggiungibili tramite successioni di scambi, ci aspettiamo $N!$ stati indipendenti. Nota però che non è vero che ci sono $N!$ stati indipendenti con stessa energia in natura.

Quindi riassumendo, ci aspettiamo che qualsiasi stato della forma

$$|\{\alpha_p\}\rangle \equiv \sum_p \alpha_p |P[1, \dots, N]\rangle \quad (11.1.3)$$

abbia energia E . Abbiamo indicato con $P \in S_N$ una permutazione di $(1, \dots, N)$.

Questa massiccia degenerazione viene detta **degenerazione di scambio** e porta a fatti sperimentali sorprendenti che esaminiamo nella prossima sezione.

11.2 Bosoni e Fermioni

La prima evidenza sperimentale che emerge dalla degenerazione di scambio è che in realtà non è mai realizzata in natura, ma esistono solo due possibili combinazioni (altrenative) di stati⁴ di particelle identiche:

$$\alpha_P = 1 \quad \forall P \quad \text{stato completamente simmetrico} \quad (11.2.1)$$

$$\alpha_P = (-1)^{\sigma(P)} \quad \text{stato completamente anti-simmetrico} \quad (11.2.2)$$

in cui $\sigma(P)$ è la segnatura della permutazione.

Queste due combinazioni possibili non coesistono mai, sono alternative. In particolare:

- Per le particelle di spin intero, dette **Bosoni**, è possibile solo la combinazione simmetrica
- Per le particelle di spin semi-intero, dette **Fermioni**, è possibile solo la combinazione anti-simmetrica.

Queste conclusioni non sono troppo giustificabili con la Meccanica Quantistica non relativistica, è necessario andare nella QFT per poter vedere il Teorema della Spin-statistica per capire meglio il tutto.

11.3 Esempi ed applicazioni

Quindi, abbiamo capito cos'è la degenerazione di scambio derivante da un sistema di particelle identiche, abbiamo capito (con un po' di aiuto dall'alto) che possiamo distinguere particelle con stato simmetrico (Bosoni) e con

⁴Modulo la normalizzazione complessiva.

stato anti-simmetrico (Fermioni), ma tutto ciò per cosa potremmo usarlo? I casi più semplici sono quelli di particelle non interagenti, ma soggette ad un potenziale comune, ad esempio due particelle identiche in una buca di potenziale, o un sistema coulombiano (ad esempio due elettroni legati ad un nucleo, l'atomo di He) in cui si trascurino le interazioni tra elettroni. Se prendiamo esempi di questo tipo si ha

$$H(\{p_i\}, \{q^i\}) = \sum_{i=1}^N H_i(p_i, q^i)$$

per cui si ha la separazione delle variabili, e quindi

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2) \dots \Psi_N(\vec{r}_N)$$

dove se

$$H_i\Psi_i = E_i\Psi_i$$

allora si ha

$$H\Psi = (E_1 + \dots + E_N)\Psi$$

Prendiamo il caso di solamente due particelle non identiche. Le autofunzioni possono essere:

$$\begin{aligned}\Psi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2) \\ \Psi_{21}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \Psi_1(\vec{r}_2)\Psi_2(\vec{r}_1)\end{aligned}$$

ma comunque

$$E_{12} = E_{21} = E_1 + E_2$$

se queste nostre particelle sono di spin intero, ossia, sono bosoni, allora le autofunzioni permesse sono

$$\Psi_{12}^B(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2) + \Psi_1(\vec{r}_2)\Psi_2(\vec{r}_1)) \quad E_{12} = E_1 + E_2$$

se invece abbiamo fermioni, quindi particelle con spin semi-intero⁵

$$\Psi_{12}^F(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2) - \Psi_1(\vec{r}_2)\Psi_2(\vec{r}_1)) \quad E_{12} = E_1 + E_2$$

Osservazione È proprio da qua che si vede bene che due fermioni non possono occupare lo stato quantistico, poiché altrimenti

$$\Psi_{kk}^F(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0$$

e questo è appunto il **principio di esclusione di Pauli**.

⁵Qua stiamo un po' facendo le cose poco precise, per questo immaginiamo che Ψ_i includa anche la parte di spin. Non è possibile avere $j = 0$, ma minimo $j = 1/2$.

11.3.1 Bosoni e Fermioni non interagenti in una buca di potenziale

Abbiamo visto nel capitolo §2.3.2 che per una particella singola in una buca infinita di larghezza $0 \leq x \leq a$ le autofunzioni sono:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad ; \quad E_N = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \equiv Kn^2$$

e avremo che per due particelle distinguibili le autofunzioni sono

$$\Psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) = \Psi_{n_1}(x_1)\Psi_{n_2}(x_2) \implies E_{n_1, n_2} = E_{n_1} + E_{n_2} = K(n_1^2 + n_2^2)$$

per cui lo stato di minima energia è

$$\Psi_{11}(x_1, x_2) / E_{11} = 2K$$

lo stato immediatamente sopra in energia è lo stato con energia $5K$. Ci sono due stati con quella energia (spazio bidimensionale):

$$\Psi_{12}(x_1, x_2) \quad , \quad \Psi_{21}(x_1, x_2) \quad \text{t.c.} \quad E_{21} = E_{12} = (1^2 + 2^2)K = 5K$$

Distinguiamo ora il caso bosonico da quello fermionico. Se abbiamo due bosoni lo stato di minima energia è ancora Ψ_{11} , che è simmetrico in $x_1 \longleftrightarrow x_2$, ma c'è un solo stato ad energia $5K$:

$$\Psi_{12}^B(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2) + \Psi_1(x_2)\Psi_2(x_1))$$

Se invece, abbiamo due fermioni, lo stato di minima energia non è $2K$, poiché simmetrico, bensì è lo stato ad energia $5K$:

$$\Psi_{12}^F(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2) - \Psi_1(x_2)\Psi_2(x_1))$$

per cui in questo esempio vediamo bene che la simmetria di scambio riduce drasticamente il numero di stati.

11.3.2 Forze di scambio

Più in generale consideriamo ora un sistema unidimensionale con due particelle non interagenti, ma entrambe soggette ad un potenziale $V(x)$. Vogliamo vedere le differenze tra: particelle distinguibili, particelle bosoniche e particelle fermioniche. I rispettivi stati saranno:

- Se le particelle sono distinguibili, un possibile autostato dell'hamiltoniana è

$$\Psi(x_1, x_2) = \Psi_a(x_1)\Psi_b(x_2) \quad (11.3.1)$$

- Se le particelle sono Bosoni identici, si ha invece

$$\Psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_a(x_1)\Psi_b(x_2) + \Psi_a(x_2)\Psi_b(x_1)) \quad (11.3.2)$$

- Se le particelle sono Fermioni identici, si ha invece

$$\Psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_a(x_1)\Psi_b(x_2) - \Psi_a(x_2)\Psi_b(x_1)) \quad (11.3.3)$$

in tutti e tre i casi abbiamo

$$E = E_a + E_b \quad (11.3.4)$$

Calcoliamo a questo punto il valor medio della distanza (tipica) al quadrato

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle \equiv \langle (\Delta x)^2 \rangle$$

tra le due particelle in tutti e tre i casi.

- Caso particelle distinguibili

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \int dx_1 dx_2 (x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 x_2) |\Psi_a(x_1)|^2 |\Psi_b(x_2)|^2 \quad (11.3.5)$$

$$= \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \quad (11.3.6)$$

in cui indichiamo i valori medi negli stati di particella singola come

$$\langle x^2 \rangle_a \equiv \int dx x^2 |\Psi_a(x)|^2$$

- Casi Bosoni e Fermioni

$$\begin{aligned} \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \int dx_1 dx_2 (x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 x_2) \cdot \frac{1}{2} \left[|\Psi_a(x_1)|^2 |\Psi_b(x_2)|^2 + \right. \\ \left. + |\Psi_a(x_2)|^2 |\Psi_b(x_1)|^2 \pm \right. \\ \left. \pm 2 \operatorname{Re}\{\Psi_a^*(x_1)\Psi_b^*(x_2)\Psi_a(x_2)\Psi_b(x_1)\} \right] \end{aligned}$$

possiamo individuare diversi contributi. Il termine con $|\Psi_a(x_1)|^2 |\Psi_b(x_2)|^2$ fornisce come prima:

$$\frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b) \quad (11.3.7)$$

che è simmetrico sotto $a \longleftrightarrow b$. Quindi il termine $|\Psi_a(x_2)|^2|\Psi_b(x_2)|^2$ fornisce lo stesso risultato e cancella il fattore $1/2$. Il termine misto

$$\Psi_a^*(x_1)\Psi_b^*(x_2)\Psi_a(x_2)\Psi_b(x_1) + (x_1 \longleftrightarrow x_2)$$

in cui la parentesi con lo scambio è equivalente a prenderne la parte reale, fornisce contributo nullo⁶ quando accoppiato con x_1^2 o x_2^2 e rimane solo

$$\begin{aligned} & \mp \int dx_1 dx_2 x_1 x_2 (\Psi_a^*(x_1)\Psi_b^*(x_2)\Psi_a(x_2)\Psi_b(x_1) + (x_1 \longleftrightarrow x_2)) \\ & \mp 2 \cdot \left| \int dx \Psi_a^*(x)x\Psi_b(x) \right|^2 \\ & \mp 2|(\Psi_a, x\Psi_b)|^2 \end{aligned}$$

per cui riassumendo i risultati abbiamo:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle_{BF} = \langle(\Delta x)^2\rangle_D \mp 2|(\Psi_a, x\Psi_b)|^2 \quad (11.3.8)$$

in cui è doveroso specificare che il segno $-$ nel $\mp$ appartiene ai Bosoni e il segno $+$ ai Fermioni. Per cui da quest'ultima relazione impariamo una lezione molto importante: in assenza di forze esterne, i Bosoni non interagenti si comportano come se fossero soggetti ad una forza attrattiva, mentre i Fermioni si comportano come se fossero soggetti ad una forza repulsiva, e questo lo vediamo proprio dalla 11.3.8, che ci dice, appunto, che due bosoni identici occupano in media posizioni più vicine tra loro rispetto a particelle distinguibili, mentre due fermioni identici occupano in media posizioni più lontane.

Nota bene La differenza tra Bosoni e Fermioni (la forza di scambio) è proporzionale al grado di sovrapposizione tra le due funzioni d'onda di particella singola. Se Ψ_a e Ψ_b hanno supporti disgiunti o se $\Psi_{a(b)}$ è trascurabile laddove $\Psi_{b(a)}$ è dominante, allora il contributo di scambio è minimo (o nullo). Il principio di esclusione dunque non è rilevante per sistemi disgiunti, o distanti in senso macroscopico.

11.4 Trattazione esplicita con spin

In modo alquanto paradossalmente le considerazioni fatte fin'ora non hanno incluso esplicitamente i fattori di spin delle funzioni d'onda, che sono evidentemente essenziali in pratica. In questa sezione vogliamo descrivere meglio i sistemi di particelle identiche, ma utilizzando anche le parti spinoriali delle funzioni d'onda. Consideriamo il caso più semplice, ma anche più rilevante,

⁶Poiché ad esempio quando accoppio x_1^2 l'integrale dx_2 è una roba del tipo (Ψ_a, Ψ_b) che essendo stato ON fa 0.

di due fermioni identici di spin $1/2$ (ad esempio due elettroni). Le funzioni d'onda di particella singola possono essere scritte come prodotto di funzioni d'onda spaziali e spinori bidimensionali:

$$\Psi_{\pm}(\vec{r}) = \phi_{\pm}(\vec{r})\chi_{\pm} \quad (11.4.1)$$

dove abbiamo indicato

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

che sono gli autostati di S_z . Una soluzione generale sarà una combinazione lineare:

$$\Psi_s(\vec{r}) = a\Psi_+(\vec{r}) + b\Psi_-(\vec{r}) = \begin{pmatrix} a\phi_+(\vec{r}) \\ b\phi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (11.4.2)$$

in cui $|a|^2 + |b|^2 = 1$ se le $\phi_{\pm}$ sono correttamente normalizzate nello spazio. Scritta così vedo che $|a\phi_+(\vec{r})|^2$ è la densità di probabilità per trovare la particella in d^3r intorno a $\vec{r}$ con autovalore di $S_z = +\frac{\hbar}{2}$. Nel capitolo sulla composizione del momento angolare abbiamo visto che due particelle di spin $1/2$ possono formare uno stato di spin 1 in 3 modi diversi (stati di tripletto), che sono combinazioni simmetriche di stati di spin di particella singola, e possono formare un unico stato di spin 0, antisimmetrico nello scambio delle due particelle. Nella notazione $|s, s_z\rangle$ questi quattro stati li scriviamo:

$$\begin{cases} |1, 1\rangle = \chi_+ \otimes \chi_+ \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+ \otimes \chi_- + \chi_- \otimes \chi_+) \\ |1, -1\rangle = \chi_- \otimes \chi_- \end{cases} \quad \text{tripletto} \quad (11.4.3)$$

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+ \otimes \chi_- - \chi_- \otimes \chi_+) \quad \text{singoletto} \quad (11.4.4)$$

Avendo Fermioni dobbiamo richiedere l'antisimmetria complessiva (rispetto lo scambio di tutti i numeri quantici) della funzione d'onda. Questa richiesta può essere soddisfatta in due modi differenti:

- Funzione d'onda spaziale simmetrica $\otimes$ Stato di spin anti-simmetrico

$$\Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes \chi_a(1, 2) \quad (11.4.5)$$

$$\text{dove: } \phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_s(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (11.4.6)$$

$$\chi_a(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+^{(1)} \otimes \chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)} \otimes \chi_+^{(2)}) = -\chi_a(2, 1) \quad (11.4.7)$$

- Funzione d'onda spaziale anti-simmetrica $\otimes$ Stato di spin simmetrico

$$\Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes \chi_s(1, 2) \quad (11.4.8)$$

$$\text{dove: } \phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\phi_a(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (11.4.9)$$

$$\chi_s(1, 2) = \begin{cases} |1, 1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \end{cases} \quad (11.4.10)$$

11.5 Atomo di He e oltre

In questa sezione a lezione si è parlato di come grazie agli strumenti visti in questo capitolo storicamente si è riusciti in modo qualitativo (almeno inizialmente) a studiare elementi della tavola periodica. Quello visto a lezione non è stato nulla di più di quello di cui si parlerà in una parte del corso di *Struttura della Materia*, motivo per cui ho deciso di non riportare questo capitolo per intero. I punti salienti sono stati:

- Scrivere l'hamiltoniana di un sistema atomico come la somma di termini relativi ai singoli elettroni interagenti con il nucleo, ma non tra loro. Cosa che porta a poter scrivere la funzione d'onda come produttoria di autofunzioni di tipo idrogenoide:

$$\Psi = \prod_{k=1}^N \Psi_{\alpha_k}(\vec{r}_k) \quad (11.5.1)$$

dove $\alpha_k = (n_k, l_k, m_k, s_k)$ è la stringa di numeri quantici.

- Notare che esiste solo un modo di scrivere lo stato fondamentale dell'atomo di Elio:

$$\Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_{100}(\vec{r}_1) \Psi_{100}(\vec{r}_2) \otimes (Spin) \quad (11.5.2)$$

- Notare anche che stati eccitati permettono più rappresentazioni possibili, ed è proprio qua che distinguiamo stati di tipo **para** e di tipo **orto**.

11.5.1 Alcune importanti conseguenze del principio di Pauli

Le conseguenze sperimentali del legame tra spin e statistica sono immense ed in alcuni casi esistenziali. I seguenti sono i più rilevanti. Per quanto riguarda i Bosoni:

- Emissione stimolata di fotoni, che porta alle tecnologie laser
- Superfluidità nell'Elio liquido

Per i Fermioni occorre citare:

- Tutta la struttura della tavola periodica e di conseguenza tutta la chimica. Per i motivi detti nella sezione appena sopra.
- La pressione di degenerazione di un gas di elettroni, è un elemento centrale nella teoria elettronica dei metalli e una trattazione quantistica porta alla struttura a bande dei metalli e semiconduttori.
- In astrofisica le nane bianche e le stelle di neutroni evitano il collasso gravitazionale per la pressione di degenerazione.

Capitolo 12

Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo

La teoria delle perturbazioni è una parte della Meccanica Quantistica fondamentale poiché ci permette di risolvere problemi che altrimenti non riusciremo a risolvere esattamente. In Meccanica Quantistica ci sono pochissimi problemi di cui riusciamo a trovare una soluzione esatta, per cui tutti gli altri non ci arrendiamo e cerchiamo di trovare delle soluzioni approssimate, che comunque ci danno delle risposte quantitative sul fenomeno. Metodi che permettono di trovare soluzioni approssimate sono diversi, la teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo è solo la più semplice e generale, ma ne esistono molte altre utilizzate, il metodo variazionale è fondamentale in chimica-fisica poiché permette di descrivere atomi multielettronici, esiste anche il metodo WKB (argomento di MQ2) importante in altri ambiti della Fisica.

12.1 Teoria delle perturbazioni, caso non degenero

Consideriamo un'hamiltoniana indipendente dal tempo:

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad (12.1.1)$$

in cui H_0 rappresenta la parte di problema che riusciamo a risolvere, λ è il parametro di espansione e H_1 è la perturbazione, ossia il termine energetico che disturba la risoluzione del mio problema, che noi riteniamo piccolo.

Nota Alcune volte il parametro λ ha significato fisico (ad esempio in QFT è la costante di accoppiamento), ma il più delle volte è solo un artificio matematico e viene posto $\lambda = 1$ alla fine del calcolo.

Si opera come segue. Si presume di aver risolto esattamente il problema H_0 :

$$H_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)} \quad , \quad (\Psi_n^{(0)}, \Psi_m^{(0)}) = \delta_{n,m} \quad (12.1.2)$$

e ipotizziamo gli autovalori non degeneri. Vogliamo determinare però autovalori esatti di

$$H \Psi_n = E_n \Psi_n \quad (12.1.3)$$

in termini di approssimazioni successive in potenze di λ . Scriviamo allora lo sviluppo in serie di Taylor di λ :

$$\begin{aligned} \Psi_n &= \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots \\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \end{aligned}$$

che se sostituiti in 12.1.3:

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda H_1)(\Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots) &= \\ = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(\Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots) \end{aligned}$$

uguagliando i termini con le stesse potenze di λ troviamo:

$$\begin{aligned} \lambda^0 &: H_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)} \\ \lambda^1 &: H_0 \Psi_n^{(1)} + H_1 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \Psi_n^{(0)} \\ \lambda^2 &: H_0 \Psi_n^{(2)} + H_1 \Psi_n^{(1)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(2)} + E_n^{(1)} \Psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Scritte così sembra che ci siano troppe incognite per essere un problema risolvibile, ma per fortuna possiamo sfruttare l'ortonormalità delle soluzioni imperturbate ($\Psi_n^{(0)}$). Cerchiamo le energie e autofunzioni al primo ordine. Moltiplichiamo scalarmente l'equazione del primo ordine per $\Psi_n^{(0)}$:

$$\begin{aligned} (\Psi_n^{(0)}, H_0 \Psi_n^{(1)}) + (\Psi_n^{(0)}, H_1 \Psi_n^{(0)}) &= E_n^{(0)} (\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}) + E_n^{(1)} \\ \text{vale } (\Psi_n^{(0)}, H_0 \Psi_n^{(1)}) &= (H_0 \Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}) = E_n^{(0)} (\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}) \\ \implies E_n^{(0)} (\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}) + (\Psi_n^{(0)}, H_1 \Psi_n^{(0)}) &= E_n^{(0)} (\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}) + E_n^{(1)} \end{aligned}$$

Per cui troviamo che le energie al primo ordine sono:

$$\boxed{E_n^{(1)} = (\Psi_n^{(0)}, H_1 \Psi_n^{(0)}) \equiv \langle n, 0 | H_1 | n, 0 \rangle} \quad (12.1.4)$$

Vediamo dunque le autofunzioni al primo ordine. Naturalmente partiamo dall'equazione al prim'ordine che ora però viene comodo riscrivere come:

$$(H_0 - E_n^{(0)}) \Psi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - H_1) \Psi_n^{(0)} \quad (12.1.5)$$

che è un'equazione differenziale non omogenea per $\Psi_n^{(1)}$ che però facile risolvere sfruttando la completezza della base $\{\Psi_m^{(0)}\}$ e conoscendo $E_n^{(0)}$. Scriviamo

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_m c_m^{[n]} \Psi_m^{(0)} \quad (12.1.6)$$

è importante notare che la componente $m = n$ non è vincolata dall'equazione (il termine $c_n^{[n]} \Psi_n^{(0)}$ dà contributo nullo al I membro). Scegliamo dunque $c_n^{[n]} = 0$, che implica che

$$(\Psi_n^{(1)}, \Psi_n^{(0)}) = 0$$

è utile anche notare che questa scelta è correttamente normalizzata all'ordine λ :

$$\begin{aligned} (\Psi_n, \Psi_n) &= (\Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)}, \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)}) + o(\lambda^2) \\ &= 1 + \lambda 2 \operatorname{Re} \left\{ (\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}) \right\} + o(\lambda^2) \\ &= 1 + o(\lambda^2) \end{aligned}$$

Abbiamo dunque

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} c_m^{[n]} \Psi_m^{(0)}$$

che sostituendola nella 12.1.5 a primo membro troviamo:

$$(H_0 - E_n^{(0)}) \sum_{m \neq n} c_m^{[n]} \Psi_m^{(0)} = \sum_{m \neq n} c_m^{[n]} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \Psi_m^{(0)}$$

uguagliata al secondo membro abbiamo

$$\sum_{m \neq n} c_m^{[n]} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \Psi_m^{(0)} = (E_n^{(1)} - H_1) \Psi_n^{(0)}$$

a questo punto se facciamo il prodotto scalare con $\Psi_n^{(0)}$ riotteniamo l'espressione di prima per $E_n^{(1)}$ poiché il primo membro si annulla. Prendiamo però il prodotto scalare con $\Psi_l^{(0)}$ con $l \neq n$, per cui troviamo a primo membro:

$$\sum_{m \neq n} c_m^{[n]} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \underbrace{(\Psi_l^{(0)}, \Psi_m^{(0)})}_{\delta_{l,m}} = (E_l^{(0)} - E_n^{(0)}) c_l^{[n]}$$

a secondo membro

$$E_n^{(1)} \underbrace{(\Psi_l^{(0)}, \Psi_n^{(0)})}_0 - (\Psi_l^{(0)}, H_1 \Psi_n^{(0)})$$

per cui troviamo

$$c_l^{[n]} = \frac{(\Psi_l^{(0)}, H_1 \Psi_n^{(0)})}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} \equiv \frac{\langle l, 0 | H_1 | n, 0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} \quad (12.1.7)$$

quindi arriviamo a

$$\boxed{\Psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m, 0 | H_1 | n, 0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \Psi_m^{(0)}} \quad (12.1.8)$$

importante notare che questa espressione è ben definita solo nel caso in cui non ci sia degenerazione poiché altrimenti il denominatore non sarebbe ben definito e si annullerebbe. Invece nel nostro caso non degenera e avendo $m \neq n$ il denominatore non si annulla mai.

Potrebbe tornare utile anche calcolare energie al II ordine. Prendiamo l'equazione al secondo ordine:

$$H_0 \Psi_n^{(2)} + H_1 \Psi_n^{(1)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(2)} + E_n^{(1)} \Psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \Psi_n^{(0)} \quad (12.1.9)$$

Come nel caso precedente se prendiamo il prodotto scalare con $\Psi_n^{(0)}$ otteniamo:

$$\begin{aligned} (\Psi_n^{(0)}, H_0 \Psi_n^{(2)}) + (\Psi_n^{(0)}, H_1 \Psi_n^{(1)}) &= E_n^{(0)} (\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(2)}) + (\Psi_n^{(0)}, H_1 \Psi_n^{(1)}) \stackrel{12.1.9}{=} \\ &= E_n^{(0)} (\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(2)}) + E_n^{(1)} \underbrace{(\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)})}_{=0} + E_n^{(2)} \end{aligned}$$

per cui un pezzo si semplifica e troviamo:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} (\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}) &= (\Psi_n^{(0)}, H_1 \Psi_n^{(1)}) = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m, 0 | H_1 | n, 0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle n, 0 | H_1 | m, 0 \rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m, 0 | H_1 | n, 0 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \end{aligned}$$

quindi in conclusione

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m, 0 | H_1 | n, 0 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}} \quad (12.1.10)$$

che di nuovo è un'espressione non ben definita nel caso degenera per gli stessi motivi detti sopra.

Il calcolo è logicamente proseguibile fino ad un ordine perturbativo grande a piacere.

12.2 Teoria delle perturbazioni caso degenera

Vediamo un caso semplice in cui abbiamo una degenerazione di ordine 2, cioè abbiamo il caso in cui H_0 ha un autovalore $E^{(0)}$ il cui autospazio ha

dimensione 2. Abbiamo dunque

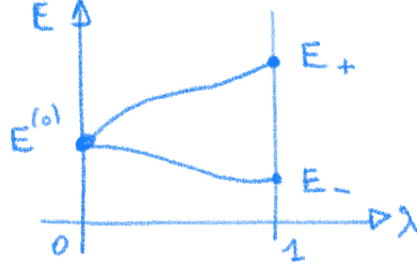
$$H_0 \Psi_a^{(0)} = E^{(0)} \Psi_a^{(0)} \quad ; \quad H_0 \Psi_b^{(0)} = E^{(0)} \Psi_b^{(0)} \quad ; \quad (\Psi_a^{(0)}, \Psi_b^{(0)}) = \delta_{a,b}$$

e il più generale stato appartenente all'autospazio di $E^{(0)}$ è la combinazione lineare

$$\Psi^{(0)} = \alpha \Psi_a^{(0)} + \beta \Psi_b^{(0)} \quad , \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad (12.2.1)$$

come già accennato nella precedente sezione i risultati già trovati non funzionano. In generale la degenerazione degli autovalori di H_0 è associata all'esistenza di una simmetria, per cui ci aspettiamo che esista un operatore $Q = Q^\dagger$ che commuta con $H^{(0)}$ e i cui autovalori caratterizzano gli stati degeneri. Altrettanto in generale però ci aspettiamo che se presente H_1 non commuti con Q e rompa la simmetria. Dato che dunque $[Q, H] \neq 0$ la degenerazione è rimossa. Per cui questa situazione la possiamo vedere come se quando consideriamo H_1 perturbativo a 0, la degenerazione c'è perché $[Q, H] = 0$ e quindi abbiamo due stati $\Psi_\pm$ degeneri in energia, ma appena accendiamo λ e lo portiamo da 0 ad 1, quindi accendiamo H_1 , la degenerazione la rimuoviamo e i due autostati esatti $\Psi_\pm$ fluiscono con continuità in due particolari stati dell'autospazio di $E^{(0)}$. Utile la rappresentazione grafica:

$$\begin{aligned} (H_0 + H_1) \Psi_+ &= E_+ \Psi_+ \\ (H_0 + H_1) \Psi_- &= E_- \Psi_- \\ \Psi_\pm \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \Psi_\pm^{(0)} &= \alpha_\pm \Psi_a^{(0)} + \beta_\pm \Psi_b^{(0)} \end{aligned}$$



possiamo liberamente scegliere gli stati ortogonali

$$(\Psi_+^{(0)}, \Psi_-^{(0)}) = 0 \quad (12.2.2)$$

dato che $\forall \lambda$ finito i due autostati esatti possono essere scelti ortogonali. L'unico problema è che non conosciamo a priori le particolari combinazioni lineari che evolvono negli stati perturbati. Dobbiamo cercare quindi di scoprire gli stati *giusti* che sono il limite degli autostati esatti di H quando $\lambda \rightarrow 0$ nel sottospazio degenere. Procediamo come nel caso non degenere, ma utilizzando

$$\Psi^{(0)} = \alpha \Psi_a^{(0)} + \beta \Psi_b^{(0)} \quad (12.2.3)$$

con α e β generici. Al primo ordine abbiamo (con lo stesso procedimento di prima)

$$H_0 \Psi^{(1)} + H_1 \Psi^{(0)} = E^{(0)} \Psi^{(1)} + E^{(1)} \Psi^{(0)}$$

a questo punto al posto di moltiplicare scalarmente per $\Psi^{(0)}$, moltiplichiamo separatamente per $\Psi_a^{(0)}$ e $\Psi_b^{(0)}$ che abbiamo supposto ortogonali. Si ottiene con $\Psi_a^{(0)}$

$$\begin{aligned} (\Psi_a^{(0)}, H_0 \Psi^{(1)}) + (\Psi_a^{(0)}, H_1(\alpha \Psi_a^{(0)} + \beta \Psi_b^{(0)})) = \\ = E^{(0)}(\Psi_a^{(0)}, \Psi^{(1)}) + E^{(1)}(\Psi_a^{(0)}, \alpha \Psi_a^{(0)} + \beta \Psi_b^{(0)}) \end{aligned}$$

i primi termini si semplificano e si ottiene

$$\alpha(\Psi_a^{(0)}, H_1 \Psi_a^{(0)}) + \beta(\Psi_a^{(0)}, H_1 \Psi_b^{(0)}) = \alpha E^{(1)} \quad (12.2.4)$$

Analogamente con $\Psi_b^{(0)}$ si ottiene

$$\alpha(\Psi_b^{(0)}, H_1 \Psi_a^{(0)}) + \beta(\Psi_b^{(0)}, H_1 \Psi_b^{(0)}) = \beta E^{(1)} \quad (12.2.5)$$

Come prevedibile le equazioni coinvolgono tutti i 4 elementi di matrice di H_1 nel sottospazio degenere. Definiamo la matrice 2×2

$$W_{ij} \equiv (\Psi_i^{(0)}, H_1 \Psi_j^{(0)}) \quad (12.2.6)$$

per cui le due equazioni trovate le possiamo scrivere come un sistema

$$\begin{cases} \alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^{(1)} \\ \alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \beta E^{(1)} \end{cases} \implies \begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} \\ W_{ba} & W_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (12.2.7)$$

e riconosciamo facilmente l'equazione agli autovalori per la matrice W . È naturale interpretare i due autovalori come i due diversi valori da assegnare alle energie degli stati perturbati, all'ordine λ . Allora calcoliamo le energie all'ordine λ nel sottospazio degenere visto che ora ci siamo messi in una situazione che sappiamo gestire (equazione agli autovalori di W). L'equazione secolare è

$$\begin{aligned} \det \{W - E^{(1)} \mathbb{1}\} &= 0 \\ \implies \det \begin{pmatrix} W_{aa} - E^{(1)} & W_{ab} \\ W_{ba} & W_{bb} - E^{(1)} \end{pmatrix} &= 0 \\ \implies (W_{aa} - E^{(1)})(W_{bb} - E^{(1)}) - W_{ab}W_{ba} &= 0 \\ \text{la matrice è hermitiana, per cui } W_{ba} &= W_{ab} \\ \implies (E^{(1)})^2 - (W_{aa} + W_{bb})E^{(1)} - |W_{ab}|^2 &= 0 \end{aligned}$$

dunque si trova

$$E_{\pm}^{(1)} = \frac{1}{2} \left[W_{aa} + W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2} \right] \quad (12.2.8)$$

e questi autovalori rappresentano le correzioni perturbative al I ordine all'energia $E^{(0)}$ nel caso degenere. Se il determinante dell'equazione quadratica fosse nullo, allora la perturbazione al I ordine non separa i livelli energetici e occorrerebbe andare al II ordine perturbativo per vedere un effetto. Nota che $E_{\pm}^{(1)}$ coincidono solo se valgono entrambe le condizioni:

$$W_{aa} = W_{bb} \qquad W_{ab} = 0 \qquad (12.2.9)$$

appunto, se sono soddisfatte entrambe le condizioni la correzione al primo ordine non permette di distinguere due livelli energetici e occorre andare al secondo. Viceversa però, se una delle due non è soddisfatta, allora con la correzione al primo ordine si riesce a sdoppiare il livello degenere. Gli autovettori di W sono gli *stati giusti* che la perturbazione fa evolvere indipendentemente in λ (e li possiamo scegliere ortogonali perché H_1 è hermitiana).

Non abbiamo detto nulla sul come viene curato il problema dei denominatori nulli che emerge dal calcolo del caso non degenere. Prima avevamo

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m, 0 | H_1 | n, 0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \Psi_m^{(0)} \qquad (12.2.10)$$

e ora avendo diagonalizzato la matrice H_1 nel sottospazio degenere, i numeratori (elementi off-diagonale) corrispondenti ai denominatori che si annullano, sono anch'essi nulli (i corrispondenti termini sono assenti dall'equazione originaria).

Riporto in seguito un utile teorema per scegliere effettivamente gli stati giusti da utilizzare che sfrutta il fatto che sappiamo che quando c'è degenerazione di solito è legata ad una simmetria del problema e alla presenza di operatori che commutano con H . Questo però non è stato visto a lezione, per cui rimando alla lezione 25 di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea per la dimostrazione e discorsi dettagliati.

Teorema 2 Sia $H = H_0 + \lambda H_1$ e sia A un operatore hermitiano tale che¹

$$[A, H_0] = [A, H_1] = [A, H] = 0$$

Supponiamo che $\Psi_a^{(0)}$ e $\Psi_b^{(0)}$ siano autofunzioni comuni di H_0 e di A ², per cui

$$A\Psi_a^{(0)} = \mu\Psi_a^{(0)} \quad ; \quad A\Psi_b^{(0)} = \nu\Psi_b^{(0)} \quad ; \quad H_0\Psi_{a,b}^{(0)} = E^{(0)}\Psi_{a,b}^{(0)}$$

con $\mu, \nu \in \mathbb{R}$ e $\mu \neq \nu$. Allora si possono scegliere gli stati $\Psi_{a,b}^{(0)}$ per rompere la degenerazione (diagonalizzano H_1 nel sottospazio degenere).

¹**Nota** $[A, H_0] = 0$ individua A come una possibile simmetria di H_0 . L'esistenza di un A / $[A, H_1] = 0$ è fornita.

²Cosa sempre possibile se $[A, H_0] = 0$.

12.3 Carrellata sulle perturbazioni degli atomi idrogenoidi

In questa sezione l'intento sarebbe quello di esaminare (in modo qualitativo) alcune correzioni allo spettro degli atomi idrogenoidi in modo perturbativo. Non riporterò passaggi matematici, perché li ritengo pesanti e non utili al fine di questi appunti; in aula sono stati visti, ma molto alla veloce. Rimando comunque alla lezione 25 di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea oppure al capitolo 7 di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. GR per discorsi più dettagliati e dimostrazioni.

Ci sono evidentemente un gran numero di correzioni note e prevedibili all'hamiltoniana classica scritta con il modello di Bohr:

$$H_{Bohr} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (12.3.1)$$

c'è una sorta di gerarchia di correzioni che vanno fatte per descrivere in modo accurato gli atomi idrogenoidi. Tutte queste correzioni fanno riferimento³ ad una perturbazione che è

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \sim \frac{1}{137,036} \quad (12.3.2)$$

che è la famosa **costante di struttura fine**. Per cui se introduciamo le diverse correzioni possiamo stilare la nostra *gerarchia* di correzioni. Il primo termine correttivo alle energie trovate con il modello di Bohr è la correzione dovuta alla **struttura fine** dei livelli energetici. Essa al suo interno contiene due termini: la correzione relativistica per il moto degli e^- e l'accoppiamento spin-orbita. La correzione relativistica in particolare rimuove la degenerazione accidentale che implicava una degenerazione dei livelli energetici caratterizzati da stesso numero quantico n , ma diverso l . Questa correzione porta ad un termine correttivo:

$$E_{n,l,m}^{(1)} = -\frac{(E_n)^2}{2mc^2} \left[\frac{4n}{l+1/2} - 3 \right] \quad (12.3.3)$$

L'altro termine correttivo nominato è l'accoppiamento spin-orbita, che descrive l'effetto che ha il considerare il campo magnetico generato dal protone che orbita attorno l'elettrone (nel S.R. dell' e^-) accoppiato con il momento magnetico dell'elettrone stesso. Per questo effetto è cruciale il concetto di spin e l'utilizzo di un ICOC formato da $\{H, L^2, S^2, J^2, J_z\}$ ⁴. Il risultato non

³Noi diciamo che qualcosa è grande o piccolo rispetto ad una certa grandezza di riferimento.

⁴Detta anche rappresentazione L.J.

immediato⁵ di questa correzione è:

$$E_{so}^{(1)} = \frac{(E_n)^2}{mc^2} \left[\frac{n[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)} \right] \quad (12.3.4)$$

Se sommiamo la correzione relativistica e di spin-orbita troviamo la correzione di struttura fine:

$$E_{sf}^{(1)} = \frac{(E_n)^2}{2mc^2} \left(3 - \frac{4n}{j+1/2} \right) \quad (12.3.5)$$

Combinata con la formula di Bohr troviamo dei livelli energetici ragionevolmente accurati descritti da:

$$E_{nj} = -\frac{E_{Ry}}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (12.3.6)$$

dove $E_{Ry} = 13.6 \text{ eV}$ è l'energia caratteristica del modello di Bohr. Nota che la struttura fine rimuove la degenerazione in l , ma preserva la degenerazione in j . Per cui è opportuno anche considerare le ulteriori correzioni perturbative che esistono in modo da rimuovere completamente la degenerazione energetica. Il termine correttivo successivo è il **lamb shift** che è associato alla quantizzazione del campo elettrico. Un ulteriore termine correttivo è la **struttura iperfine** in cui si considera l'interazione tra i momenti di dipolo magnetico dell'elettrone e del protone. La gerarchia dei termini correttivi è riassunta nella tabella in seguito.

Termine correttivo	ordine perturbativo
Energie di Bohr	$\alpha^2 mc^2$
Struttura fine	$\alpha^4 mc^2$
Lamb shift	$\alpha^5 mc^2$
Struttura iperfine	$(m/m_p)\alpha^4 mc^2$

Tabella 12.1: Gerarchia delle correzioni alle energie di Bohr

⁵Implica l'introduzione di fattori giromagnetici non banali da calcolare.

Capitolo 13

Paradosso EPR, entanglement e disuguaglianza di Bell

Il paradosso EPR, il concetto di entanglement quantistico e la disuguaglianza di Bell (tutti argomenti in qualche modo collegati) non sono stati affrontati in aula durante le ore del corso, ma sono stati trattati in due ore aggiuntive fuori dall'orario delle lezioni. Sono indubbiamente argomenti interessanti, ma che sono sicuramente trattati meglio in altri corsi; fanno infatti parte del programma di Meccanica Quantistica 2. Per questo motivo ho scelto di non riportare nulla, ma se sei interessato guarda i relativi capitoli sul Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. GR oppure la lezione 26 di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Magnea.

Capitolo 14

Esercitazioni

Inserirò in questo capitolo appunti di argomenti rilevanti svolti durante le esercitazioni o solamente dei rimandi a testi (o appunti) se sono esercizi classici della Meccanica Quantistica per evitare di aggiungere una trattazione ad argomenti già fatti da persone più capaci. La maggior parte degli esercizi sono presenti su Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.ES, quindi dai un occhio se vuoi maggiori dettagli o spiegazioni migliori. Anche su Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Regis sono presenti diversi esercizi uguali a quelli svolti.

14.1 Potenziali unidimensionali

14.1.1 Gradino di potenziale

vedi **esercizio 1** di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Regis.

14.1.2 Barriera di potenziale

vedi **esercizio 3** di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Regis.

14.1.3 Buca di potenziale e stati legati

vedi **esercizio 4** di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Regis oppure per una trattazione più dettagliata vedi il capitolo di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.mq2.

14.1.4 Potenziale deltiforme

Esercizio 1 Consideriamo un potenziale attrattivo del tipo:

$$V(x) = -V_0\delta(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}W\delta(x) \quad (14.1.1)$$

- a) Esistono stati legati? In caso affermativo, determinarne energia e funzione d'onda.
- b) Senza effettuare calcoli e considerando i risultati del punto precedente, qual è il valor medio di x ? Qual è la probabilità di trovare la particella a $x < 0$?
- c) Determinare il minor valore x_0 tale che la probabilità di trovare la particella con $x < x_0$ sia $1/4$.

Soluzione Cerchiamo una soluzione all'equazione di Schrodinger stazionari per $E < 0$ (ossia stati legati). Dobbiamo risolvere

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m} W\delta(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

consideriamo le regioni $x \neq 0$ e possiamo definire

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

e cerchiamo le soluzioni nelle due regioni:

$$\begin{aligned} & \begin{cases} \frac{d^2\Psi_I}{dx^2} - k^2\Psi_I = 0 & x < 0 \\ \frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} - k^2\Psi_{II} = 0 & x > 0 \end{cases} \\ \Rightarrow & \begin{cases} \Psi_I(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx} & x < 0 \\ \Psi_{II}(x) = Ce^{kx} + De^{-kx} & x > 0 \end{cases} \\ \Rightarrow & \begin{cases} \Psi_I(x) = Ae^{kx} & x < 0 \\ \Psi_{II}(x) = De^{-kx} & x > 0 \end{cases} \end{aligned}$$

in cui si è posto $B = C = 0$ per evitare divergenze ad $x \rightarrow \pm\infty$. Possiamo imporre la continuità della funzione d'onda in $x = 0$:

$$\Psi_I(0) = A \equiv \Psi_{II}(0) = D \quad \Rightarrow \quad A = D$$

e quindi la funzione d'onda è:

$$\Psi(x) = Ae^{-k|x|} \quad (14.1.2)$$

Il problema del potenziale deltiforme però è che la derivata prima presenta una discontinuità¹. Integrando l'equazione di Schrodinger tra $-\epsilon$ e $+\epsilon$ (con

¹Infatti in questo caso si trova che si deve imporre la condizione sulla derivata:

$$\Delta(\Psi'(x_0)) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\Psi(x)dx$$

lo vedi meglio con i conti espliciti.

$\epsilon \rightarrow 0$) otteniamo:

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{+\epsilon} - \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{-\epsilon}$$

facciamo i conti

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{+\epsilon} &= -kDe^{-kx} \Big|_{+\epsilon} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0^+} -kD \\ \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{-\epsilon} &= -kAe^{kx} \Big|_{-\epsilon} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0^-} kA \end{aligned}$$

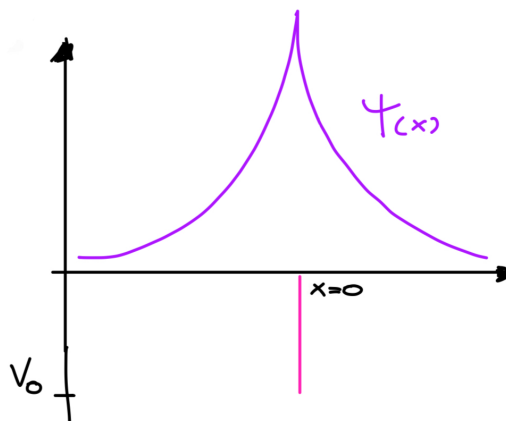
manca ancora il membro di destra dell'equazione di Schrodinger:

$$\begin{aligned} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \Psi(x) &= \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} W \delta(x) - E \right) \Psi(x) \\ &= - \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx W \delta(x) \Psi(x) - E \Psi(x) \Big|_{-\epsilon}^{+\epsilon} \\ &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -W \Psi(0) \end{aligned}$$

ora, imponiamo l'uguaglianza dei due membri:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{+\epsilon} - \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{-\epsilon} &= \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \Psi(x) \\ \implies -kD - kA &= -W \Psi(0) \\ \text{ricordiamo che: } \Psi(0) &= A = D \\ \implies 2kA &= WA \\ \implies 2k &= W \\ \implies 4k^2 &= W^2 \\ \implies -4 \frac{2mE}{\hbar^2} &= W^2 \\ \implies E &= -\frac{\hbar^2 W^2}{8m} \end{aligned}$$

quindi uno stato legato lo abbiamo trovato. Siamo in una situazione del tipo:



Siccome la funzione d'onda, e quindi $|\Psi(x)|^2$, è pari, allora è immediato vedere che $\langle x \rangle = 0$ e la probabilità di trovare la particella ad $x < 0$ è $1/2$. Possiamo finire di determinare la funzione d'onda imponendo la normalizzazione e notando che abbiamo trovato prima che $2k = W$:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x)|^2 &= 1 \\ |A|^2 \left(\int_{-\infty}^0 dx e^{2kx} + \int_0^{+\infty} dx e^{-2kx} \right) &= 1 \\ |A|^2 \left(\frac{1}{2k} + \frac{1}{2k} \right) &= 1 \\ |A|^2 \frac{1}{k} &= 1 \\ A &= \sqrt{k} \\ \Rightarrow A &= \sqrt{\frac{W}{2}} \end{aligned}$$

e dunque la funzione d'onda è

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{W}{2}} e^{-\frac{W}{2}|x|} \quad (14.1.3)$$

Per l'ultimo punto possiamo imporre che la probabilità di trovare la particella con $x < x_0$ sia $1/4$ e quindi trovare:

$$\int_{-\infty}^{x_0} dx |\Psi(x)|^2 = \frac{1}{4} \Rightarrow \frac{1}{2} e^{Wx_0} = \frac{1}{4} \Rightarrow x_0 = -\frac{\ln 2}{W}$$

Esercizio 2 Consideriamo un potenziale del tipo

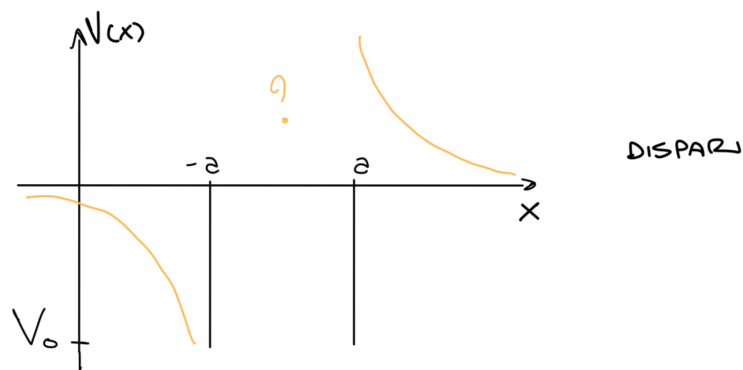
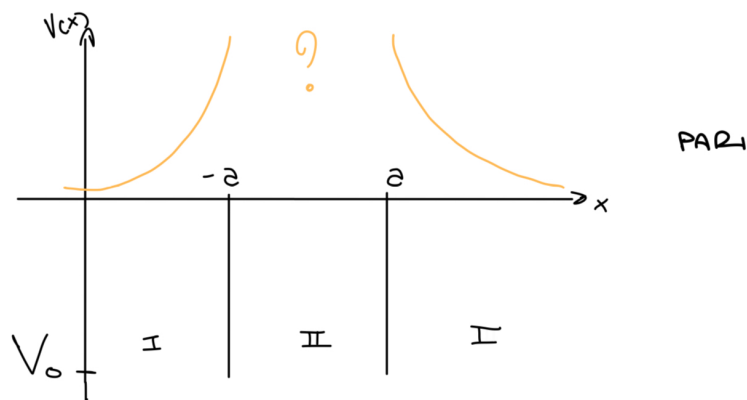
$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\lambda}{a} (\delta(x-a) + \delta(x+a))$$

Verifica se esistono stati legati, $E < 0$. HINT distingui i due casi pari e dispari.

Soluzione Definiamo

$$k = \frac{2m}{\hbar^2}|E|$$

avendo risolto l'esercizio 1 mi aspetto delle funzioni d'onda del tipo:



nel caso pari abbiamo: $\Psi(x) = \Psi(-x)$ e avremo:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_I(x) = e^{kx} & x < -a \\ \Psi_{II}(x) = A \cosh(kx) & -a < x < a \\ \Psi_{III}(x) = e^{-kx} & x > a \end{cases}$$

in cui nella soluzione Ψ_{II} la forma generale sarebbe stata:

$$\Psi_{II}(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx} \implies \Psi_{II}(x) = A \cosh(kx) + B \sinh(kx)$$

ma volendo una funzione pari togliamo il termine con il seno. Dobbiamo imporre le condizioni al contorno²:

$$\begin{aligned}\Psi_I(-a) &= \Psi_{II}(-a) \\ \Psi_{II}(a) &= \Psi_{III}(a) \\ \Psi'_{II}(-a) - \Psi'_I(-a) &= -\frac{\lambda}{a}\Psi_I(-a) \\ \Psi'_{III}(a) - \Psi'_{II}(a) &= -\frac{\lambda}{a}\Psi_{II}(a)\end{aligned}$$

per simmetria si trova che le prime due condizioni sono uguali e analogamente la terza e la quarta.

$$\begin{aligned}1 + 2 &\implies A = \frac{e^{-ak}}{\cosh(ka)} \\ 3 + 4 &\implies Ak \sinh(-ka) - ke^{-ka} = -\frac{\lambda}{a}e^{-ka} \\ &\quad Ak \sinh(ka) + ke^{-ka} = \frac{\lambda}{a}e^{-ka}\end{aligned}$$

sostituiamo la (1 + 2) nella (3 + 4) così otteniamo

$$\begin{aligned}e^{-ka}k \tanh(ka) + ke^{-ka} &= \frac{\lambda}{a}e^{-ka} \\ k(\tanh(ka) + 1) &= \frac{\lambda}{a}\end{aligned}$$

non riuscendo a risolvere l'equazione analiticamente, possiamo definire

$$y = ka$$

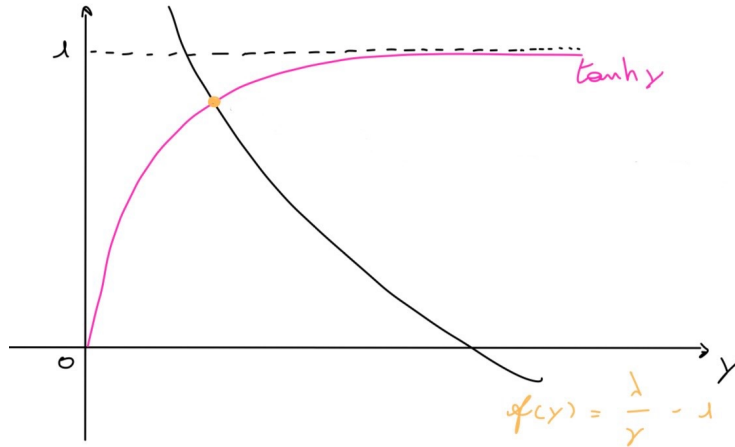
dunque scrivere

$$\tanh y = \frac{\lambda}{y} - 1 \quad (14.1.4)$$

e risolvere l'equazione per via grafica:

²Attenzione alla condizione sulla derivata che bisogna imporre:

$$\Delta(\Psi'(x_0)) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\Psi(x)dx = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\lambda}{a} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \delta(x \pm a)\Psi(x)dx = -\frac{\lambda}{a}\Psi(\mp a)$$



e vediamo che c'è un unico stato legato nel caso pari.

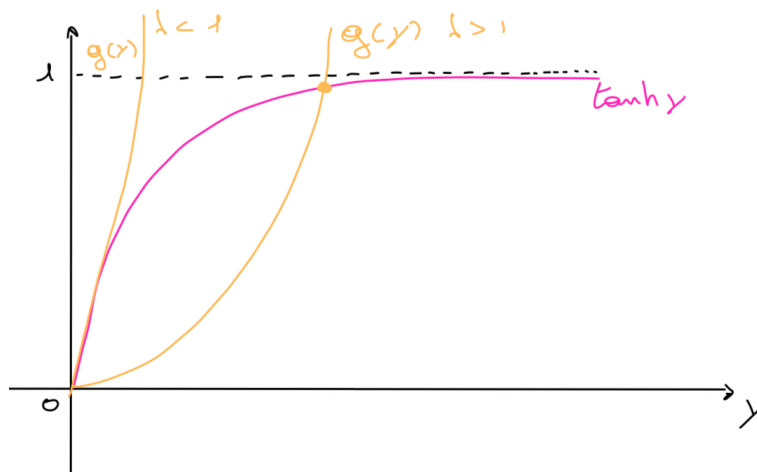
Passiamo al caso dispari:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_I(x) = -e^{kx} & x < -a \\ \Psi_{II}(x) = A \sinh(kx) & -a < x < a \\ \Psi_{III}(x) = e^{-kx} & x > a \end{cases}$$

ripetendo lo stesso procedimento del caso pari arriviamo a:

$$\tanh(ka) = \left[\frac{\lambda}{ka} - 1 \right]^{-1} \equiv g(y)$$

Graficando le funzioni troviamo:

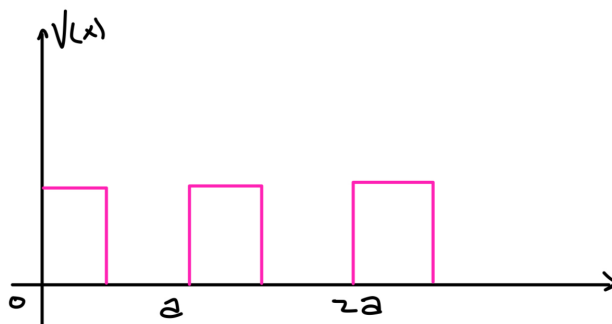


e in questo caso troviamo uno stato legato solo se $\lambda > 1$.

14.1.5 Potenziali periodici, Teorema di Bloch e pettine di Dirac

Consideriamo un potenziale del tipo

$$V(x) = V(x + a)$$



Possiamo enunciare e dimostrare un teorema comodo in situazioni come queste:

Teorema di Bloch Per la funzione d'onda $u(x)$ si ha:

$$u(x) = e^{-ifa} u(x + a) \quad \text{con} \quad f \in \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right] \quad (14.1.5)$$

Una piccola nota. Generalmente $f \in \mathbb{R}$, ma essendo con un potenziale periodico non è restrittivo mettersi in quell'intervallo che in genere è chiamato **prima zona di Brillouin**.

Dimostrazione (Ometto i cappellini sugli operatori) Ho

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

e conosco anche l'operatore di traslazione D , la cui azione su una funzione d'onda è definita come:

$$D(u(x)) = u(x + a) \quad (14.1.6)$$

e posso provare a vedere cosa succede applicando D all'hamiltoniana:

$$\begin{aligned} D(H(x)) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d(x+a)^2} + V(x+a) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \\ &= H(x) \end{aligned}$$

quindi H è invariante per D e come abbiamo imparato nel capitolo delle simmetrie possiamo scrivere

$$[D, H] = 0$$

e per questo motivo posso dire che gli autostati di H sono anche autostati di D (la dimostrazione è banale):

$$Hu = Eu$$

$$Du = \lambda u$$

la seconda equazione agli autovalori ci dice

$$Du = u(x+a) = \lambda u(x)$$

in cui λ è indipendente da x . Per concludere la dimostrazione dobbiamo imporre però che

$$|\lambda| \leq 1$$

poiché così può diventare solo una fase del tipo

$$\lambda = e^{ifa} \quad f \in \mathbb{R}$$

ma vediamo meglio. Il caso facile è quando abbiamo il caso libero in cui $V(x) = 0 \quad \forall x$ per cui si può notare che abbiamo come soluzione l'equazione d'onda di particella libera

$$u(x) \sim e^{ikx} \quad \text{con} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

quindi abbiamo

$$u(x+a) = e^{ik(x+a)} = e^{ikx} e^{ika} = e^{ika} u(x)$$

e quindi in questo caso abbiamo

$$f = k$$

nota inoltre che vale

$$|u(x+a)|^2 = |u(x)|^2$$

Nel caso generale in cui $V(x) \neq 0$ la relazione tra f e k è complicata. Banalmente per un solido (modellizzato come un reticolo) abbiamo una frontiera ad un certo punto e in questo caso il teorema 14.1.5 non vale. Però potremmo salvarci mettendo una condizione al contorno

$$x + Na = x \quad \text{se} \quad N \gg 1$$

così abbiamo

$$u(x + Na) = u(x)$$

$$\implies e^{ifNa} = 1$$

$$\implies f = \frac{2\pi n}{Na} \quad \text{con} \quad n \in \mathbb{Z}$$

La dimostrazione finisce sostanzialmente qua. ■

Operatore di traslazione

Vediamo meglio qualche caratteristica dell'operatore D . Come prima cosa possiamo vedere che non è hermitiano, infatti dovremmo verificare che

$$\int dx \Psi^*(O\Psi) = \int dx (O\Psi)\Psi^*$$

ma nel nostro caso:

$$\begin{aligned} \int dx u^*(Du) &= \int dx u^*(x)u(x+a) \\ \int dx (Du(x))^*u(x) &= \int dx u^*(x+a)u(x) \end{aligned}$$

quindi D non è hermitiano, infatti, $\lambda \notin \mathbb{R}$. Possiamo anche vedere che l'assunzione $|\lambda| \leq 1$ che abbiamo fatto non è così assurda perché infatti

$$\begin{aligned} Du(x) &= \lambda u(x) \\ \int dx |Du(x)|^2 &\equiv \int dx |u(x+a)|^2 = 1 \\ \int dx |Du(x)|^2 &= \int dx |\lambda u(x)|^2 \\ \Rightarrow 1 &= |\lambda|^2 \int dx |u(x)|^2 \\ \Rightarrow |\lambda|^2 &= 1 \end{aligned}$$

Pettine di Dirac, modello di Kroning-Penney

Per una trattazione formale vedi l'appendice D di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.mq2.

Prendiamo un potenziale del tipo

$$V(x) = \sum_{j=0}^{N-1} \alpha \delta(x - ja) \quad (14.1.7)$$

ossia abbiamo un potenziale deltiforme che si ripete periodicamente, rappresentato nella figura 14.1, e la costante α è positiva e mi da un indicazione sull'altezza del potenziale.

Voglio trovare la funzione d'onda

$$u(x) = \begin{cases} u_I(x) & 0 < x < a \\ u_{II}(x) & a < x < 2a \\ \dots & \\ u_N(x) & (N-1)a < x < Na \end{cases}$$

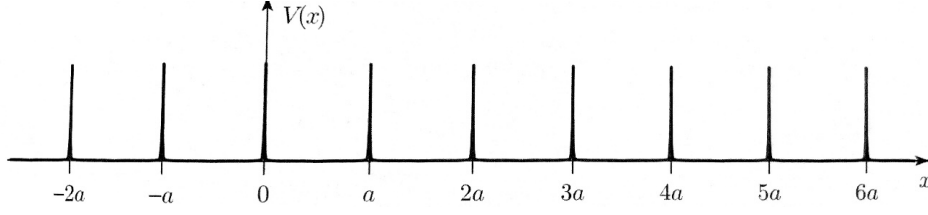


Figura 14.1: Potenziale periodico

ma posso notare che tra una δ e l'altra ho $V(x) = 0$ e quindi la soluzione dell'equazione di Schrodinger è la solita

$$u_I(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad 0 < x < a$$

ma a questo punto posso utilizzare il teorema di Bloch 14.1.5 e scrivere la funzione d'onda nella regione a sinistra di I:

$$u_{II}(x) = e^{-ifa} u_I(x+a) = e^{-ifa} [A \sin k(x+a) + B \cos k(x+a)]$$

ma come ben so per determinare le costanti A e B e le condizioni su k devo imporre le condizioni di raccordo. Faccio prima un attimo i conti

$$\begin{aligned} u_I(0) &= B \\ u'_I(x) &= kA \cos kx - kB \sin kx \\ u'_I(0) &= kA \\ u_{II}(0) &= e^{-ifa} [A \sin(ka) + B \cos(ka)] \\ u'_{II}(x) &= e^{-ifa} [kA \cos k(x+a) - kB \sin k(x+a)] \\ u'_{II}(0) &= e^{-ifa} [kA \cos(ka) - kB \sin(ka)] \end{aligned}$$

ora impongo le uguaglianze. Prima quella sulle funzioni d'onda

$$\begin{aligned} u_I(0) = u_{II}(0) &\implies B = e^{-ifa} [A \sin(ka) + B \cos(ka)] \\ \implies A \sin(ka) &= B(e^{ifa} - \cos(ka)) \\ \implies A &= B \frac{e^{ifa} - \cos(ka)}{\sin(ka)} \end{aligned}$$

Imponiamo la condizione sulla derivata, che attenzione, non è la solita continuità, ma in presenza di potenziali deltiformi (vedi l'esercitazione corrispon-

dente) diventa (il segno è cambiato perché sono picchi e non buche):

$$\begin{aligned}\Delta(u'(0)) &= \frac{2m\alpha}{\hbar^2} u_I(0) \\ kA - e^{-ifa} [kA \cos(ka) - kB \sin(ka)] &= \frac{2m\alpha}{\hbar^2} B \\ kA \left(1 - e^{-ifa} \cos(ka)\right) &= B \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - k \sin(ka) e^{-ifa}\right) \\ \text{sostituendo la condizione trovata sulla continuità delle } u & \\ kB \frac{e^{ifa} - \cos(ka)}{\sin(ka)} \left(1 - e^{-ifa} \cos(ka)\right) &= B \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - k \sin(ka) e^{-ifa}\right) \\ \left(e^{ifa} - \cos(ka)\right) \left(1 - e^{-ifa} \cos(ka)\right) &= \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - k \sin(ka) e^{-ifa}\right) \frac{\sin(ka)}{k} \\ e^{ifa} - \cos(ka) - \cos(ka) + e^{-ifa} \cos^2(ka) &= \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ka) - \sin^2(ka) e^{-ifa} \\ e^{ifa} - 2 \cos(ka) + e^{-ifa} \left(\cos^2(ka) + \sin^2(ka)\right) &= \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ka) \\ e^{ifa} - 2 \cos(ka) + e^{-ifa} &= \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ka) \\ 2 \cos(fa) - 2 \cos(ka) &= \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ka) \\ \cos(fa) = \cos(ka) + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ka) &\end{aligned}$$

Possiamo porre

$$z \equiv ka \quad ; \quad \beta \equiv \frac{m\alpha a}{\hbar^2}$$

in questo modo otteniamo il membro di sinistra l'ultima riga che diventa

$$f(z) = \cos z + \beta \frac{\sin z}{z} \quad (14.1.8)$$

che possiamo graficare nel grafico 14.2. Chiaramente il grafico di $f(z)$ va un po' dove vuole, ma possiamo evidenziare alcune zone in cui la funzione è compresa tra -1 e $+1$, che sono le uniche zone in cui ci sono soluzioni possibili poiché dobbiamo ricordare che abbiamo

$$\cos(fa) = f(z)$$

e abbiamo soluzioni solo se

$$-1 \leq \cos(fa) \leq 1$$

per cui otteniamo soluzioni solo in alcuni intervalli di z .

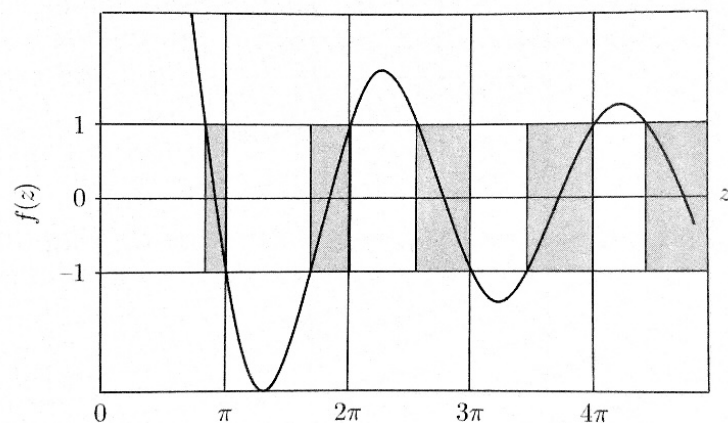


Figura 14.2: Struttura a bande a fissato β

Considera però che queste **bande** in realtà non sono zone continue, ma sono singole linee affiancate, ma ricorda anche che, come già visto nella dimostrazione del teorema di Bloch

$$f = \frac{2\pi n}{Na} \quad n \in \mathbb{Z}$$

in cui N è un numero generalmente enorme e n un numero qualsiasi. Quindi in realtà nelle zone permesse dovremmo disegnare N bande distinte e individuare di conseguenza uno spettro discreto, ma appunto, essendo N enorme noi vediamo una situazione in cui qualsiasi valore nella banda energetica³ è possibile. Un'ultima osservazione è che ogni grafico lo si fa a fissato β e più $\beta \gg 1$ e più le bande permesse si restringono (perché la funzione $f(z)$ oscillante compie ampiezze più grandi) e ci avviciniamo ad avere uno spettro discreto.

L'importanza della struttura a bande risiede nella struttura della materia e in particolare nella classificazione di metalli, isolanti e semiconduttori.

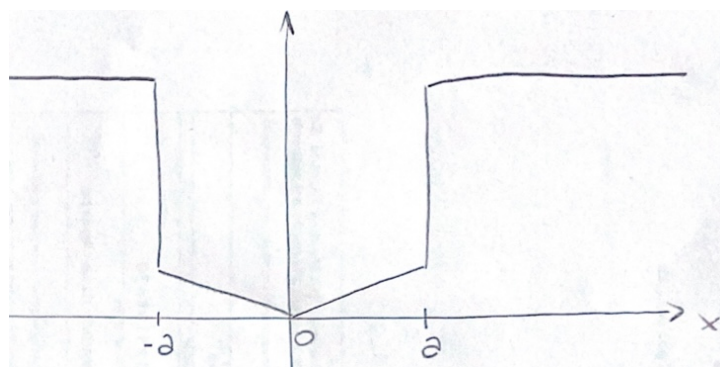
L'ultimo appunto di questa sezione è che il **modello di Kronig-Penney** è molto simile a quello visto, ma cambia solo che quel modello utilizzava un motivo rettangolare ripetuto. Lo vedrai nel corso di *Struttura della materia*.

³Banda energetica perché da queste bande tiriamo fuori condizioni su k che è direttamente legata con l'energia.

14.1.6 Buca di potenziale con fondo inclinato

L'esercizio 6.2 di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. ES è molto simile a questo e lo fa con la teoria delle perturbazioni, quindi offre uno spunto interessante per risolvere problemi di questo tipo, ossia, problemi in cui c'è un potenziale ben noto che si sa risolvere, ma con un piccolo termine perturbativo. In alternativa vedi **appunti** di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Badger in cui lo risolve con le funzioni d'onda e introduce le funzioni di Airy (procedimento macchinoso e con le funzioni di Airy un po' buttate là a caso, quindi non troppo chiaro e giustificato). Il problema, come già detto, si può risolvere facilmente con la teoria delle perturbazioni, riporto in seguito il modo in cui l'ho risolto io.

Esercizio Si ha un potenziale del tipo:



$$V(x) = \begin{cases} \infty & |x| > a \\ \varepsilon x & 0 < x < a \\ -\varepsilon x & -a < x < 0 \end{cases} \quad (14.1.9)$$

Determinare i livelli energetici per $\varepsilon \ll 1$ fino all'ordine $o(\varepsilon)$.

Soluzione Questa è sostanzialmente una buca di potenziale infinita di larghezza $2a$ con una piccola perturbazione data da $V(x)$. Le autofunzioni e gli autovalori imperturbati li conosciamo:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8ma^2}$$

Dalla teoria delle perturbazioni sappiamo calcolarci il termine di correzione dei livelli energetici al primo ordine:

$$E_n^{(1)} = \left(\Psi_n^{(0)}, H_1 \Psi_n^{(0)} \right) \quad \text{con } H_1 = V(x) \quad (14.1.10)$$

Con conti non troppo complicati si arriva a dover risolvere l'integrale:

$$\frac{\varepsilon}{a} 2 \int_0^a dx x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \quad (14.1.11)$$

e dunque ottenendo il risultato (distinguendo il caso pari e dispari):

$$E_n^{(1)} = \frac{\varepsilon a}{2} \quad n \text{ pari} \quad (14.1.12)$$

$$E_n^{(1)} = \frac{\varepsilon a}{2} + 2 \frac{\varepsilon a}{n^2 \pi^2} \quad n \text{ dispari} \quad (14.1.13)$$

che è lo stesso che si otterrebbe con un metodo esatto.

Puoi controllare il risultato dell'integrale su Wolfram Alpha scrivendo:

`Divide[epsilon,a]*2Integrate[x*Power[(40)Sin[Divide[n pi x,2a]]^(41),2],{x,0,a}]`

14.2 Stati coerenti dell'oscillatore armonico

vedi **esercizio 14** di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Regis (analogamente **esercizio 3.42** di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.GR).

14.3 Potenziali tridimensionali

Sono diverse sottosezioni, vedi **appunti** di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Badger, l'intento è quello di fare un riassunto abbastanza completo degli argomenti trattati, ad eccezione della parte sulle funzioni di Bessel e di Newmann per cui rimando agli appunti Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Badger.

Consideriamo una forma generale per l'hamiltoniana in 3 dimensioni:

$$H = K + V = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + V \quad (14.3.1)$$

in cui però indichiamo

$$|\vec{p}|^2 = \sum_{i=1}^3 p_i^2 = -\hbar^2 \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \quad (14.3.2)$$

per cui l'equazione di Schrodinger è pari a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = H \Psi(\vec{x}, t) \quad (14.3.3)$$

e avendo il caso $V = V(\vec{x})$ possiamo separare la dipendenza temporale della funzione d'onda e trovare un insieme completo di stati stazionari tali che

$$\Psi_n(\vec{x}, t) = \Psi_n(\vec{x}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_n t\right\} \quad (14.3.4)$$

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n \quad (14.3.5)$$

per cui possiamo scrivere la soluzione generale come:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{x}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_n t\right\} \quad (14.3.6)$$

14.3.1 Buca cubica

consideriamo il potenziale:

$$V = V(\vec{x}) = \vec{V} \cdot \mathbb{1} = V_1 + V_2 + V_3 \quad (14.3.7)$$

con

$$V_i(\vec{x}) = \begin{cases} \infty & |x_i| > a \\ 0 & |x_i| < a \end{cases} \quad (14.3.8)$$

vogliamo trovare gli autostati e gli autovalori dell'energia.

Possiamo scrivere

$$H = \sum_{i=1}^3 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V_i \right) = \sum_{i=1}^3 H_i \quad (14.3.9)$$

e possiamo risolvere separatamente

$$H_i \Psi_{n_i}(x_i) = E_{n_i} \Psi_{n_i}(x_i) \quad (14.3.10)$$

separando le variabili. Per cui la funzione d'onda è

$$\Psi_n(\vec{x}) = \Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_2}(x_2) \Psi_{n_3}(x_3) \quad (14.3.11)$$

Possiamo anche controllare:

$$\begin{aligned} H\Psi_n(\vec{x}) &= \left(\sum_i H_i \right) \Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_2}(x_2) \Psi_{n_3}(x_3) \\ &= \Psi_{n_2}(x_2) \Psi_{n_3}(x_3) H_1 \Psi_{n_1}(x_1) + \\ &\quad + \Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_3}(x_3) H_2 \Psi_{n_2}(x_2) + \\ &\quad + \Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_2}(x_2) H_3 \Psi_{n_3}(x_3) \\ &= (E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3}) \Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_2}(x_2) \Psi_{n_3}(x_3) \\ &= E_{\vec{n}} \Psi_{\vec{n}}(\vec{x}) \end{aligned}$$

quindi siamo contenti. Notiamo anche che le soluzioni per $\Psi_{n_i}(x_i)$ sono le stesse soluzioni che troviamo per particella singola in una dimensione (vedi §2.3.2), quindi della forma:

$$\Psi_{n_i}(x_i) \begin{cases} A_{n_i} \cos(k_{n_i} x_i) & , \quad n_i \text{ pari} \\ B_{n_i} \sin(k_{n_i} x_i) & , \quad n_i \text{ dispari} \end{cases} \quad (14.3.12)$$

in cui abbiamo messo

$$k_{n_i} = \frac{n_i \pi}{2a} \quad ; \quad E_{n_i} = \frac{\hbar^2 k_{n_i}^2}{2m} \quad (14.3.13)$$

Abbiamo visto poco sopra che si ha

$$\vec{n} = \{n_1, n_2, n_3\} \quad (14.3.14)$$

quindi dotati di un'espressione per l'energia possiamo mettere tutto insieme ed esplicitare tutto il possibile per trovare:

$$E_{\vec{n}} = E_{n_1 n_2 n_3} = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} \quad (14.3.15)$$

$$= \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} |\vec{n}|^2 \quad (14.3.16)$$

$$= \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (14.3.17)$$

14.3.2 Buca a parallelepipedo

Non faccio i conti perché sostanzialmente basta mimare quello fatto per il problema cubico. In questo caso si ha un potenziale del tipo:

$$V = V(\vec{x}) = \vec{V} \cdot \mathbb{1} = V_1 + V_2 + V_3 \quad (14.3.18)$$

con

$$V_i(\vec{x}) = \begin{cases} \infty & |x_i| > a_i \\ 0 & |x_i| < a_i \end{cases} \quad (14.3.19)$$

e anche qua vogliamo trovare gli autostati e gli autovalori dell'energia.

14.3.3 Oscillatore cubico

Consideriamo il potenziale

$$V(\vec{x}) = \vec{V} \cdot \mathbb{1} = \sum_{i=1}^3 V_i(\vec{x}) \quad (14.3.20)$$

con

$$V_i(\vec{x}) = V_i(x_i) = \frac{1}{2} m \omega_i^2 x_i^2 \quad (14.3.21)$$

ed esattamente come nell'esempio di prima troviamo una soluzione fattorizzata del tipo:

$$H_i \Psi_{n_i}(x_i) = E_{n_i} \Psi_{n_i}(x_i) \quad (14.3.22)$$

$$\Psi_n(\vec{x}) = \Psi_{n_1}(x_1) \Psi_{n_2}(x_2) \Psi_{n_3}(x_3) \quad (14.3.23)$$

dove

$$H \Psi_{\vec{n}}(\vec{x}) = E_{\vec{n}} \Psi_{\vec{n}}(\vec{x}) \quad (14.3.24)$$

$$E_{\vec{n}} = \sum_{i=1}^3 E_{n_i} \quad (14.3.25)$$

con

$$E_{n_i} = \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \quad (14.3.26)$$

14.3.4 Potenziale radiale

vedi **appunti** di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Badger, ma fa banalmente un riassunto del capitolo §8 e in particolare fa vedere che forma deve avere l'operatore p_r affinché sia hermitiano. Tutto è presente nel capitolo già citato.

14.3.5 particella libera

Prendiamo un potenziale:

$$V(r) = 0 \quad (14.3.27)$$

e quindi

$$H_r = \frac{p_r^2}{2m} \quad (14.3.28)$$

determiniamo la forma degli autostati dell'energia.

Conviene usare

$$\chi_{nl}(r) = r R_{nl}(r) \quad (14.3.29)$$

per le stesse motivazioni del capitolo §8. L'equazione di Schrodinger è ora

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E \right) \chi_{nl} = 0 \quad (14.3.30)$$

Per valori generici di l abbiamo la barriera di potenziale centrifuga e per trovare una soluzione bisogna introdurre le funzioni di Bessel e di Newmann sferiche, ma per queste soluzioni rimando agli appunti Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante. Badger oppure ad un qualsiasi testo. Possiamo però vedere cosa otteniamo con $l = 0$:

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} = -k^2 \chi \quad (14.3.31)$$

con sempre

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad , \quad E > 0 \quad (14.3.32)$$

quindi le soluzioni sono:

$$\chi(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr) \quad (14.3.33)$$

Come abbiamo già visto, la condizione al contorno deve essere:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} \text{finita}$$

che implica

$$R_{nlm}(r) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} \text{finita}$$

questa condizione indica

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{A \sin(kr) + B \cos(kr)}{r} \right) = \frac{B}{r} = 0 \quad (14.3.34)$$

quindi

$$B = 0 \quad (14.3.35)$$

Quindi abbiamo solo la costante A .

In aula sono stati fatti anche: **buca sferica infinita, finita** e i suoi **stati legati**, ma anche per questi problemi sono necessarie le funzioni di Bessel Newmann e per questo rimando agli appunti Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Badger.

14.4 Revision

In aula oltre questi argomenti sono stati svolti anche esercizi in preparazione all'esame, non ne riporto perché sono riparabili ovunque, soprattutto in Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Regis, Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Badger o Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.ES.

Appendici

Appendice A

Proprietà dei polinomi di Hermite

Facciamo in questa appendice una rapida carrellata sui **polinomi di Hermite**:

- sono un'insieme di polinomi ortogonali in $L^2(-\infty, +\infty)$ ¹
- **Funzione generatrice**

$$S(z, \xi) = e^{-z^2+2z\xi} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi) \quad (\text{A.0.1})$$

e quindi

$$H_n(\xi) = \left. \frac{\partial^n S}{\partial z^n} \right|_{z=0}$$

è una cosa da verificare ma lo riesci a fare con i punti sotto.

- trovi la **formula per la derivata** di $H(\xi)$ la trovi guardando l'uguaglianza $\frac{\partial S}{\partial \xi} = 2zS$, esplicitando tutto e cambiando un indice (notando che H'_0 è una costante) arrivi a

$$H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) \quad (\text{A.0.2})$$

- valutando l'equazione $\frac{\partial S}{\partial z} = 2(\xi - z)S$ esplicitando tutto e cambiando un'indice arrivi alla **relazione di ricorrenza**

$$H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0 \quad (\text{A.0.3})$$

¹se così non fosse, basandosi su Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.mq2 le autofunzioni dell'Hamiltoniana non sarebbero funzioni al quadrato sommabili e quindi i suoi autovalori, le energie dell'oscillatore armonico, sarebbero in uno spettro continuo.

- ora puoi verificare che $S(z, \xi)$ è la giusta funzione generatrice dei polinomi di Hermite trovando la giusta edo. Deriva due volte la relazione di ricorrenza, usa la formula per la derivata per avere tutti gli H con $n-1$, sostituendo tutto (nella derivata seconda della relazione di ricorrenza) trovi la giusta edo

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0 \quad (\text{A.0.4})$$

- la **formula di Rodriguez** mi dice

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \implies H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi) \quad (\text{A.0.5})$$

la puoi dimostrare scrivendo la definizione $H_n(\xi) = \left. \frac{\partial^n S}{\partial z^n} \right|_{z=0}$ esplicitare la $S(z, \xi) = e^{-z^2+2z\xi}$, completare il quadrato all'esponente e fare i conti (comparirà un $z - \xi$ nell'esponentiale, basta fare un cambio di variabile).

A.1 Verifica ortogonalità

Vogliamo verificare

$$(H_n, H_m) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) = h_n \delta_{n,m}$$

per questo definiamo

$$I(z_1, z_2) = \sum_{m,n \geq 0} \frac{z_1^n}{n!} \frac{z_2^m}{m!} (H_n, H_m)$$

in cui inseriamo la definizione di funzione generatrice [A.0.1](#)

$$\begin{aligned} &= \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{z_1^n}{n!} \frac{z_2^m}{m!} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} e^{-z_1^2+2z_1\xi} e^{-z_2^2+2z_2\xi} \\ &= e^{-z_1^2-z_2^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\{-\xi^2 + 2(z_1 + z_2)\xi\} \end{aligned}$$

completiamo il quadrato $= -\left(\xi - (z_1 + z_2)\right)^2 + (z_1 + z_2)^2$

$$= e^{-z_1^2} e^{-z_2^2} e^{(z_1+z_2)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left\{-\left(\xi - (z_1 + z_2)\right)^2\right\} \quad (\text{A.1.1})$$

$$= \sqrt{\pi} e^{2z_1 z_2} \quad (\text{A.1.2})$$

$$= \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2z_1 z_2)^n}{n!} \quad (\text{A.1.3})$$

l'utilità di questo conto è che vale

$$I(z_1, z_2) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{z_1^n}{n!} \frac{z_2^m}{m!} (H_n, H_m)$$

e ci si aspetta che

$$(H_n, H_m) = h_n \delta_{n,m}$$

se nel risultato di $I(z_1, z_2)$ inseriamo i risultati:

$$\begin{aligned} (H_n, H_m) = 0 &\implies I(z_1, z_2) = 0 \\ (H_n, H_n) = h_n &\implies I(z_1, z_2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_1^n}{n!} \frac{z_2^n}{n!} h_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z_1 z_2)^n}{(n!)^2} h_n \end{aligned}$$

confrontandolo con il risultato trovato [A.1.3](#)

$$\sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} 2^n \frac{(z_1 z_2)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z_1 z_2)^n}{(n!)^2} h_n$$

si trova come atteso

$$h_n = \sqrt{\pi} n! 2^n \tag{A.1.4}$$

Appendice B

Proprietà armoniche sferiche

Noi nel capitolo sul momento angolare non lo abbiamo fatto ma le armoniche sferiche si sarebbero potute ottenere risolvendo congiuntamente le equazioni differenziali:

$$\frac{1}{\hbar^2} L^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (\text{B.0.1})$$

$$\frac{1}{\hbar} L_z Y_l^m(\theta, \phi) = m Y_l^m(\theta, \phi) \quad (\text{B.0.2})$$

Vediamo alcune proprietà fondamentali di Y . Essendo L^2, L_z un ICOC allora le armoniche sferiche sono un insieme ON e completo.

- **Ortonormalità**

$$(Y_l^m, Y_{l'}^{m'}) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

- **Completezza**

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \phi) Y_l^m(\theta', \phi') = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\phi - \phi')$$

dunque $\forall f(\theta, \phi) \in L^2(S^2)$

$$f(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm}^{(f)} Y_l^m(\theta, \phi)$$
$$c_{lm}^{(f)} = (Y_l^m, f)$$

La forma esplicita delle armoniche sferiche coinvolge i polinomi di Legendre, che sono un insieme di polinomi ortogonali sull'intervallo $[-1, 1]$, definiti ad esempio dalla loro formula di Rodriguez:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l \quad (\text{B.0.3})$$

per inserire anche la dipendenza da m si definiscono le funzioni di Legendre associate:

$$P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^m P_l(x) \quad (\text{B.0.4})$$

$$P_l^{-m} = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x) \quad (\text{B.0.5})$$

Nota se $|m| > l$ allora $P_l^m(x) = P_l^{-m} = 0$ come dovrebbe essere (un polinomio di grado l derivato $|m| > l$ volte fa 0).

Arriviamo dunque alla definizione completa delle armoniche sferiche:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta) \quad (\text{B.0.6})$$

Appendice C

Formule utili

Fonti di questo *formulario*: questi stessi appunti, Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Regis e Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.ES.

Argomenti generali

$$\text{Particella libera} \quad \Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(k)t)} \quad , \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad , \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}, t)$$

$$\vec{J}(\vec{r}, t) \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^* \right) \quad \text{Densità di corrente di probabilità}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad \text{equazione di continuità}$$

Oscillatore armonico¹

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} n! 2^n}} H_n(\alpha x) \exp\left\{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right\}$$

$$H_n \text{ polinomi di Hermite} \quad , \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$H_0(\xi) = 1 \quad , \quad H_1(\xi) = 2\xi \quad , \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \quad , \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \quad , \quad H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$$

¹Definizioni prese da Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Regis

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad , \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega x + ip) \quad , \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

$$a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega x - ip) \quad , \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

con più gradi di libertà valgono:

$$[a_k, a_j] = [a_k^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad , \quad [a_k, a_j^\dagger] = \delta_{k,j}$$

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad , \quad H = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^\dagger - a) \quad , \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a)$$

Buca di potenziale infinita di larghezza a

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad , \quad k_n = \frac{n\pi}{a} \quad , \quad E_n = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}$$

Momenti angolari

Utile la tabella [7.1](#).

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$$

Relazione utile: $e^{i\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{1} \cos n + i(\hat{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}) \sin n$, con $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$

in cui indico $\mathbf{n}$ come un generico vettore (direzione, verso e modulo), ad esempio $\frac{\mu_B}{2}t\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)$, con n indico solamente il modulo, nell'esempio $\frac{\mu_B}{2}t$, mentre con $\hat{n}$ indico il versore che mi indica la direzione e verso del vettore, nell'esempio $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)$.

$$\chi_+^z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \chi_-^z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \chi_\pm^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \chi_\pm^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
L_x &= i\hbar \left[\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi \cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] , & L_y &= -i\hbar \left[\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi \cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \\
L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} , & L_{\pm} &= \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \\
L^2 &= -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle , & J_z |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle \\
J_{\pm} &= J_x \pm iJ_y , & J_{\pm} |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle
\end{aligned}$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi , \quad y = r \sin \theta \sin \phi , \quad z = r \cos \theta$$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta)$$

$$\text{Polinomi di Legendre} \quad P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l$$

$$\text{Polinomi associati di Legendre} \quad P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x)$$

$$Y_l^0(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) , \quad P_0(x) = 1 , \quad P_1(x) = x , \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} , \quad Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta , \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) , \quad Y_2^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^{\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$$

Data una particella con momento magnetico $\mu = \gamma S$ (γ =rapporto giro-magnetico) se immersa in campo magnetico B , l'energia associata è

$$H = -\mu \cdot B = -\gamma S \cdot B$$

Problemi centrali

Equazione radiale di Schrodinger

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \varphi(r) + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) \varphi(r) = E \varphi(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \varphi(r) + V(r) \varphi(r) = E \varphi(r)$$

Equazione radiale ridotta di Schrodinger

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi(r) = 0$$

Nota: $\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)$

Atomo d'idrogenoRaggio di Bohr: $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$.

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{n^2} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} \left(\frac{2Z}{na_0} r \right)^l e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2Z}{na_0} r \right) Y_l^m(\theta, \phi)$$

Alcuni polinomi di Laguerre

$$L_0(x) = 1 \quad , \quad L_1(x) = -x+1 \quad , \quad L_2(x) = \frac{1}{2}x^2-2x+1 \quad , \quad L_3(x) = -\frac{1}{6}x^3+\frac{3}{2}x^2-3x+1$$

$$L_4(x) = \frac{1}{24}x^4-\frac{2}{3}x^3+3x^2-4x+1 \quad , \quad L_5(x) = -\frac{1}{120}x^5+\frac{5}{24}x^4-\frac{5}{3}x^3+5x^2-5x+1$$

Alcuni polinomi associati di Laguerre

$$L_0^0(x) = 1 \quad , \quad L_1^0(x) = -x+1 \quad , \quad L_2^0(x) = \frac{1}{2}x^2-2x+1$$

$$L_0^1(x) = 1 \quad , \quad L_1^1 = -x+2 \quad , \quad L_2^1(x) = \frac{1}{2}x^2-3x+3$$

$$L_0^2(x) = 1 \quad , \quad L_1^2(x) = -x+3 \quad , \quad L_2^2(x) = \frac{1}{2}x^2-4x+6$$

$$L_0^3(x) = 1 \quad , \quad L_1^3 = -x+4 \quad , \quad L_2^3(x) = \frac{1}{2}x^2-5x+10$$

Alcune funzioni d'onda radiali R_{nl} per l'idrogeno

$$R_{10} = 2a^{-3/2} \exp\left\{-\frac{r}{a}\right\}$$

$$\begin{aligned}
R_{20} &= \frac{1}{\sqrt{2}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r}{a} \right) \exp \left\{ -\frac{r}{2a} \right\} \quad , \quad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} a^{-3/2} \left(\frac{r}{a} \right) \exp \left\{ -\frac{r}{2a} \right\} \\
R_{30} &= \frac{2}{3\sqrt{3}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a} + \frac{2}{27} \left(\frac{r}{a} \right)^2 \right) \exp \left\{ -\frac{r}{3a} \right\} \\
R_{31} &= \frac{8}{27\sqrt{6}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{r}{a} \right) \left(\frac{r}{a} \right) \exp \left\{ -\frac{r}{3a} \right\} \\
R_{32} &= \frac{4}{81\sqrt{30}} a^{-3/2} \left(\frac{r}{a} \right)^2 \exp \left\{ -\frac{r}{3a} \right\}
\end{aligned}$$

Autofunzioni dell'atomo d'idrogeno

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad , \quad \Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\Psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta \quad , \quad \Psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

Teoria delle perturbazioni

Il numero 0 nel prodotto scalare significa che è lo stato imperturbato ed H_1 è il termine perturbativo.

$$E_n^{(1)} = (\Psi_n^{(0)}, H_1 \Psi_n^{(0)}) \equiv \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \Psi_m^{(0)}$$

Appendice D

Esercizi consigliati

Oltre a tutti quelli di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.Regis, elenco in seguito una lista di esercizi (52) di Raccogli un fiore sulla Terra e muoverai la stella più distante.ES consigliati:

Cap. 1: 1.5

Cap. 2: 2.1, 2.2, 2.6, 2.17, 2.18, 2.19, 2.20, 2.21, 2.22

Cap. 3: 3.1, 3.2, 3.5, 3.6, 3.7, 3.8, 3.9, 3.15, 3.19, 3.20

Cap. 4: 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6, 4.7, 4.9

Cap. 5: 5.1, 5.2, 5.4, 5.5, 5.6, 5.7, 5.8, 5.9, 5.10, 5.11, 5.12, 5.13, 5.14,
5.15, 5.20

Cap. 6: 6.1, 6.2, 6.3, 6.10, 6.11, 6.12, 6.14, 6.15, 6.17, 6.21

Bibliografia

- [1] L. Magnea; *Appunti del corso*
- [2] M. Regis; *Esercitazioni Meccanica Quantistica*
- [3] S. D. Badger; *Appunti esercitazioni Meccanica Quantistica*
- [4] C. Rossetti; *Rudimenti di Meccanica Quantistica* .
- [5] D. Griffiths , D. Schroeter; *Introduzione alla meccanica quantistica 2° ed. italiana.*
- [6] L. Angelini; *Meccanica Quantistica problemi scelti*
- [7] L. D. Landau , E. M. Lifshits; *Fisica Teorica Vol. 1 - Meccanica*
- [8] L. D. Landau , E. M. Lifshits; *Fisica Teorica Vol. 3 - Meccanica Quantistica. Teoria non relativistica*
- [9] R. Feynman; *La fisica di Feynman, Vol. 3.*
- [10] E. Onofri , C. Destri; *Istituzioni di fisica teorica*
- [11] M. Billò; *Introduzione alla meccanica statistica*
- [12] G. Magnano; *Dispense di Meccanica Statistica Classica*
- [13] G. Magnano; *Dispense di Meccanica Hamiltoniana*
- [14] M. B. Barbaro, M. Frau, P. Gambino e S. Sciuto; *Metodi matematici della fisica, dispense del corso*
- [15] S. Sciuto; *Appunti dalle lezioni di Metodi Matematici della Fisica II, 1. Complementi sulle funzioni analitiche*
- [16] S. Sciuto; *Appunti dalle lezioni di Metodi Matematici della Fisica II, 2. Spazi di Hilbert e analisi funzionale*
- [17] S. Sciuto; *Meccanica Quantistica 2*
- [18] T. Lancaster, S. J. Blundell; *Quantum field theory for the gifted amateur*