
Dispense di Fisica Quantistica

FEDERICO MANZONI

Indice

1	La crisi della fisica classica	3
1.1	Il problema del corpo nero	3
1.2	L'instabilità degli atomi classici	5
1.3	L'effetto fotoelettrico	6
1.4	L'esperimento di Frank-Hertz	6
1.5	L'esperimento di Stern e Gerlach	7
1.6	L'esperimento di Davisson e Germer	8
1.7	L'effetto Compton	9
2	Formalismo generale e arsenale matematico della MQ	11
2.1	Brevi richiami matematici	11
2.1.1	Spazi vettoriali, spazi di Hilbert e prodotto scalare	11
2.1.2	Operatori (generalità)	11
2.1.3	Operatori hermitiani	12
2.1.4	Operatori unitari	13
2.1.5	Diagonalizzazione simultanea di operatori hermitiani	14
2.1.6	Integrale di Lebesgue e trasformata di Fourier	15
2.2	Formalismo generale	16
2.2.1	Formalismo di Dirac	16
2.2.2	Principio di sovrapposizione e collasso della funzione d'onda	17
2.2.3	Osservabili quantistiche e misura di osservabili	17
2.2.4	Interpretazione probabilistica della meccanica quantistica	18
2.2.5	Quantizzazione canonica alla Dirac	20
2.2.6	Operatore impulso e suoi autostati	21
2.2.7	Principio di indeterminazione di Heisenberg	23
2.2.8	Pacchetto di minima indeterminazione	24
2.2.9	Limite classico della Meccanica Quantistica	24
2.2.10	Stati puri e miscele statistiche	25
3	Stati quantistici, loro evoluzione e simmetrie in MQ	26
3.1	Operatore di traslazione spaziale e temporale	26
3.2	L'equazione di Schrödinger: stati stazionari e non	27
3.3	Teorema di Ehrenfest	29
3.4	Rappresentazione di Heisenberg	29
3.5	Equazione di continuità per la probabilità	30
3.6	Principio variazionale di Schrödinger	31
3.7	Limite classico dell'equazione di Schrödinger	31
3.8	Simmetrie in Meccanica Quantistica	32
4	Sistemi unidimensionali	33
4.1	L'operatore di parità	33
4.2	Studio qualitativo delle soluzioni unidimensionali dell'equazione di Schrödinger	34
4.3	La particella libera	35

4.4	Potenziali costanti a tratti	36
4.4.1	La buca di potenziale finita ed infinita	36
4.4.2	Il gradino e la barriera di potenziale	39
4.5	Moto in campo uniforme conservativo e potenziale lineare	41
4.6	L'oscillatore armonico	42
4.6.1	Gli stati coerenti	45
4.6.2	L'oscillatore asimmetrico	46
5	Teoria del momento angolare	47
5.1	Metodo algebrico	47
5.2	Metodo differenziale	49
5.3	Il momento angolare di spin	50
5.4	Rappresentazione matriciale del momento angolare	50
5.5	Composizione dei momenti angolari	52
5.6	Rotazioni ed operatore di rotazione	55
5.7	Operatori tensoriali e teorema di Wigner-Eckart	56
6	Sistemi multidimensionali	58
6.1	Hamiltoniane separabili	58
6.2	Potenziali centrali ed equazione radiale	58
6.3	L'oscillatore armonico in 2 e 3 dimensioni	60
6.3.1	Oscillatore anisotropo	62
6.4	L'atomo di idrogeno	62
6.5	La degenerazione accidentale	65
7	Particelle identiche	66
7.1	L'esempio dell'atomo di He	68
8	Teoria delle perturbazioni e metodo variazionale	70
8.1	Teoria indipendente dal tempo non degenera	70
8.2	Teoria indipendente dal tempo degenera	72
8.3	Teoria dipendente dal tempo e transizioni	74
8.4	Metodo variazionale	79
9	Appendice	80
9.1	Teorema di convoluzione	80
9.2	Proprietà dei commutatori	80
9.3	La delta di Dirac	81
9.4	Le funzioni di Airy	82
9.5	I polinomi di Hermite	82
9.6	Le armoniche sferiche	83
9.7	Notazione sugli operatori	84

30 ottobre 2019

1 La crisi della fisica classica

La Fisica Classica è quella branca della fisica che studia i sistemi fisici che si muovono a velocità ordinarie andandone a determinare le caratteristiche macroscopiche; sviluppata prevalentemente da Newton, Galilei, Lagrangia, Hamilton, Carnot, Lord Kelvin, Huygens, Fresnel, Fermat, Ampère, Faraday, Maxwell e Boltzmann si occupa di studiare dalla meccanica all'elettromagnetismo passando per la termodinamica e l'ottica geometrico-fisica e concludendo con la meccanica statistica classica. Agli albori del '900 erano però parecchie le casistiche alle quali le applicazioni delle leggi fisiche fino ad allora conosciute risultavano in disaccordo con i fatti sperimentali, sia dal punto di vista puramente osservativo sia dal punto di vista concettuale. La prima crepa nella struttura della fisica classica è stato l'avvento della relatività prima ristretta e poi generale ma in questo testo ci concentreremo sulle problematiche che portarono allo sviluppo della fisica dei quanti (e non dei guanti).

Soffermiamoci su alcuni dei fatti sperimentali più importanti che sancirono il malfunzionamento della Fisica Classica; vedremo nel dettaglio:

- Il problema del corpo nero;
- L'instabilità degli atomi classici;
- L'effetto fotoelettrico
- L'esperimento di Frank-Hertz;
- L'esperimento di Stern e Gerlach
- L'esperimento di Davisson e Germer;
- L'effetto Compton.

1.1 Il problema del corpo nero

Consideriamo una radiazione elettromagnetica chiusa in una scatola finita con un piccolo forellino (di modo che la radiazione possa uscire), immaginiamo che il corpo sia perfettamente assorbente e che riemetta tutta la radiazione con cui viene investito (un corpo nero). Classicamente la soluzione del problema di determinare la densità di energia per unità di frequenza

portava alla seguente formula (derivante dal teorema di equipartizione e dal conteggio dei gradi di libertà del sistema):

$$dA = \frac{\omega^2 T k_b}{\pi^2 c^3} d\omega \quad (1)$$

E' evidente come tale formlazione fosse in dissacordo con il fatto sperimentale dato dalla legge di Stefan-Boltzmann $A(T) = \sigma T^4$ secondo la quale l'energia totale emessa dal corpo è proporzionale alla quarta potenza della temperatura. La contraddizione viene dal fatto che integrando la densità di energia su tutte le frequenze, l'integrale diverge (catastrofe ultravioletta).

L'andamento sperimetale osservato è riportato di seguito.

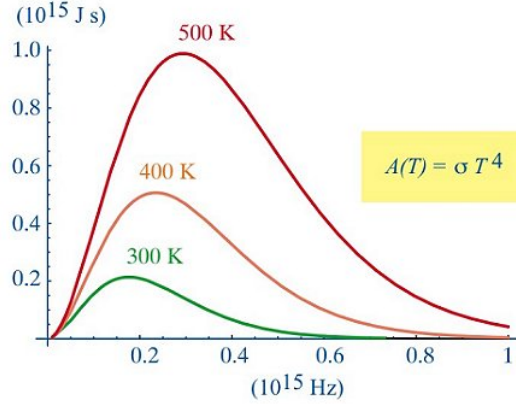


Figura 1: Andamento dell'energia irradiata in funzione della lunghezza d'onda.

Come si vede dalla figura per frequenze basse si ha un andamento ω^2 mentre a frequenze alte decresce come $e^{-\omega}$; Planck cercò una possibile forma funzionale interpolando tra i due andamenti ed ottenne la legge che porta il suo nome

$$dA = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_b T}} - 1} \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} d\omega. \quad (2)$$

Tale funzione riproduce gli andamenti richiesti e se integrata su tutte le frequenze restituisce la legge di Stefan-Boltzmann; definendo $\theta = \frac{\hbar\omega}{k_b T}$ otteniamo

$$dA = \frac{1}{e^\theta - 1} \frac{(k_b T)^4 \theta^3}{\pi^2 c^3 \hbar^3} d\theta; \quad (3)$$

nel limite di basse frequenze o alte temperature dallo sviluppo dell'esponenziale si ottiene

$$dA = \frac{(k_b T)^4 \theta^2}{\pi^2 c^3 \hbar^3} d\theta = \frac{k_b T \omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega, \quad (4)$$

nel limite di alte frequenze o basse temperature otteniamo

$$dA = \frac{(k_b T)^4 \theta^3}{\pi^2 c^3 \hbar^3 e^\theta} d\theta = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\frac{\hbar\omega}{k_b T}} d\omega. \quad (5)$$

Inoltre, integrando la (3) su tutte le frequenze otteniamo

$$A = \int_0^\infty \frac{1}{e^\theta - 1} \frac{(k_b T)^4 \theta^3}{\pi^2 c^3 \hbar^3} d\theta = \frac{(k_b T)^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\theta^3}{e^\theta - 1} d\theta = \frac{k_b^4 \pi^2}{15 c^3 \hbar^3} T^4 = \sigma T^4, \quad (6)$$

in cui si è utilizzato $\int_0^\infty \frac{\theta^3}{e^\theta - 1} d\theta = \frac{\pi^4}{15}$.

L'idea rivoluzionaria nella legge di Planck sta nel fatto che l'energia del campo elettromagnetico viene pesata come se trasportasse dei pacchetti di energia $\hbar\omega$; nonostante questo Planck non credeva nella natura quantizzata della luce ma pensava fosse un'architettura matematica per descrivere un fenomeno fisico.

1.2 L'instabilità degli atomi classici

Il buon Rutherford aveva mostrato come gli atomi fossero fatti da un nucleo positivo e da particelle negative che gli orbitano attorno; si era pensato che gli atomi potessero essere dei sistemi planetari in miniatura ma tale conclusione portava ad un irreversibile ed intrinseca instabilità. Una particella carica che accelera emette radiazione e man mano che la emette perde parte della sua energia, nel caso atomico se le particelle negative orbitanti perdessero energia per bremsstrahlung (simparico termine che vuol dire "radiazione da frenamento") finirebbero per cadere sul nucleo positivo e l'atomo finirebbe per scomparire. Tramite le leggi dell'elettromagnetismo classico possiamo valutare quanto tempo questo processo impiegherebbe per distruggere un atomo ed il risultato è che in $10^{-11} s$ l'atomo finirebbe con lo sparire.

La potenza irradiata da un elettrone in moto accelerato è data dalla legge di Larmor $\frac{dE}{dt} = -\frac{2e^2 a^2}{3c^3}$ con e la carica dell'elettrone e a il modulo dell'accelerazione pari ad $\frac{e^2}{m_e r^2}$ (da $F = m_e a$). Dal teorema del viriale, sappiamo che $E = -\frac{e^2}{2r}$; scrivendo $\frac{dE}{dt}$ come $\frac{dE}{dr} \frac{dr}{dt}$ otteniamo

$$\frac{dE}{dt} = \frac{e^2}{2r^2} \frac{dr}{dt} = -\frac{2e^6}{3c^3 m_e^2 r^4} \Rightarrow r^2 dr = -\frac{4e^4}{3c^3 m_e^2} dt. \quad (7)$$

Integrando la (7) tra il raggio del atomo a zero e tra zero al tempo impiegato per perdere tutta l'energia otteniamo

$$\int_R^0 r^2 dr = \int_0^T -\frac{4e^4}{3c^3 m_e^2} dt \Rightarrow -\frac{R^3}{3} = -\frac{4e^4}{3c^3 m_e^2} T \Rightarrow T = \frac{R^3 c^3 m_e^2}{4e^4} \simeq 10^{-11} s. \quad (8)$$

E' evidente l'assurdità.

1.3 L'effetto fotoelettrico

L'effetto fotoelettrico (che valse ad Einstein il premio Nobel...) fu osservato per la prima volta da Von Lenard fisico tedesco Nobel per gli studi sui raggi catodici. Durante uno dei suoi esperimenti decise di bombardare con della radiazione elettromagnetica un metallo e quello che si aspettava accadere (da leggi classiche) sono le seguenti considerazioni:

- Variando l'intensità luminosa, il metallo avrebbe dovuto espellere elettroni più energetici;
- Variando la frequenza della radiazione non sarebbe dovuto accadere nulla da annotare;
- L'elettrone avrebbe dovuto assorbire tutta la radiazione fino a che non fosse stato sufficientemente energetico da essere espulso dalla superficie del metallo.

Quello che Von Lenard osservò fu invece completamente diverso:

- Variando l'intensità luminosa venivano espulsi un numero diverso di elettroni;
- Variando la frequenza della radiazione, il metallo espelleva elettroni più energetici;
- Gli elettroni assorbivano solo la radiazione con un'energia almeno tale da farli saltare fuori dal metallo a riposo (energia cinetica degli elettroni nulla).

La spiegazione di tali fenomeni venne data da Albert Einstein che ipotizzò, riprendendo i lavori di Planck sul corpo nero, che la radiazione elettromagnetica fosse composta da pacchetti di energia detti "fotoni" e che la loro energia fosse $E = h\nu$.

Questa visione comporta quindi che:

- Più luminosità vuol dire solo più fotoni e quindi più pacchetti in grado di colpire un elettrone;
- Variare la frequenza comporta variare l'energia dei singoli fotoni che colpiscono il metallo e quindi elettroni più energetici;
- Si trattava di un effetto a soglia. Se la radiazione non è abbastanza energetica viene ignorata; è possibile assorbire solo radiazione con un'energia tale da far almeno espellere l'elettrone a riposo (energia cinetica dell'elettrone nulla).

1.4 L'esperimento di Frank-Hertz

In questo esperimento un bulbo in vetro fu riempito di un gas (ad esempio mercurio) e fu generato del vuoto spinto all'interno per far sì che il bulbo fosse riempito solo di mercurio. Tramite calore furono prodotti elettroni da una piastrina metallica (per effetto termoionico) e vennero accelerati da una differenza di potenziale; venne misurata la corrente tramite un amperometro. Quello che Frank ed Hertz trovarono è riportato in figura assieme al setup sperimentale.

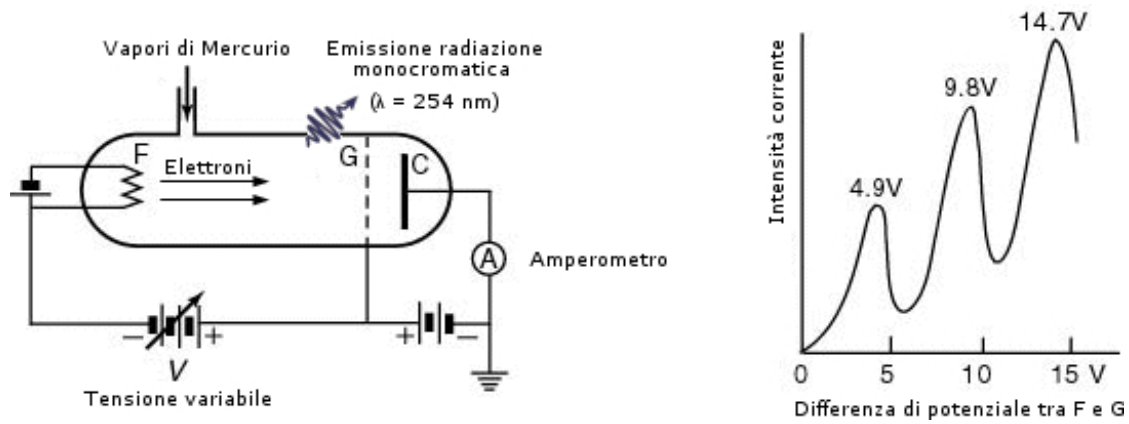


Figura 2: Apparato sperimentale di Frank ed Hertz a sinistra. A destra, intensità di corrente in funzione del voltaggio, notare "l'andamento a picco".

La spiegazione del grafico a destra risiede nel fatto che i livelli atomici dell'atomo di mercurio sono quantizzati (come tutti i livelli atomici) e l'energia richiesta per un elettrone legato all'atomo di Hg per transire dallo stato fondamentale atomico al primo stato eccitato è proprio $4,9 \text{ eV}$. Gli elettroni emessi dalla placchetta vengono accelerati; quando raggiungono un'energia pari a quella necessaria per transire da un livello ad un altro, scontrandosi con gli atomi di mercurio, cedono la loro energia agli elettroni legati agli atomi e transiscono da un'"orbita" ad un'altra. Una volta nel livello eccitato ritornano nel livello fondamentale emettendo una radiazione monocromatica con energia pari alla differenza tra i due livelli energetici in questione. Quest'esperimento fa capire come i livelli atomici non possano essere descritti tramite la Fisica Classica in quanto non ci sarebbe nessun motivo per cui gli atomi assorbano o emettano solo ad alcune energie (un problema simile è quello dello spettro dell'atomo di idrogeno).

1.5 L'esperimento di Stern e Gerlach

L'esperimento di Stern e Gerlach è volto allo studio del momento magnetico dell'elettrone; i due fecero passare un fascio di elettroni all'interno di un campo magnetico generato da un magnete sagomato. Ci si aspetterebbe che il fascio si divida in una molteplicità numerabile in quanto all'interno del campo magnetico elettroni con momenti magnetici diversi si comportano diversamente. Quello che fu osservato, invece, fu che il fascio iniziale si divideva sempre in due fasci e questo non è spiegabile dalla Fisica Classica. Il momento magnetico dell'elettrone è legato al suo momento angolare ℓ , e, secondo la Fisica Classica, il momento angolare può assumere tutti i valori con continuità; l'esperimento mostrò che il momento angolare dell'elettrone è quantizzato.

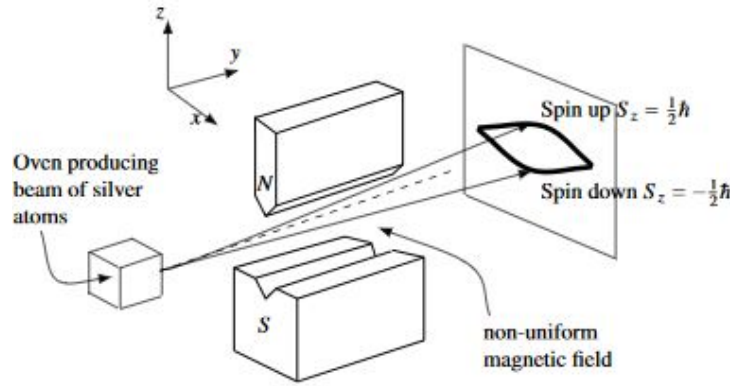


Figura 3: Esperimento di Stern e Gerlach; il momento angolare è elettronico quantizzato (sottomultiplo di \hbar).

Inoltre Stern e Gerlach, una volta diviso il fascio iniziale presero, ad esempio, il solo fascio con $S_z = \frac{\hbar}{2}$ e facendolo passare nuovamente nello stesso magnete orientato nello stesso modo ottennero un solo fascio in cui tutti gli elettroni avevano lo stesso S_z (come sembra ovvio). Facendo passare ora il fascio sopraccitato in un campo magnetico orientato lungo l'asse x , nulla vieta che il fascio in cui tutti gli elettroni hanno S_z uguale abbia elettroni con diverso momento angolare lungo x . Infatti Stern e Gerlach trovarono che facendo passare il fascio $S_z = \frac{\hbar}{2}$ in un campo lungo x questo si divideva in due $S_x = \frac{\hbar}{2}$ e $S_x = -\frac{\hbar}{2}$. Ora, ci aspetteremmo che, prendendo, ad esempio, il fascio $S_x = -\frac{\hbar}{2}$ e facendolo passare in un campo lungo z (come all'inizio) il risultato sia un solo fascio dato che entrambi i fasci $S_x = \frac{\hbar}{2}$ e $S_x = -\frac{\hbar}{2}$ provenivano dal fascio $S_z = \frac{\hbar}{2}$. Stern e Gerlach osservarono nuovamente due fasci uno con $S_z = \frac{\hbar}{2}$ e uno con $S_z = -\frac{\hbar}{2}$. Questo fenomeno prende il nome di rigenerazione degli stati quantistici. E' evidente che non esiste un analogo classico.

1.6 L'esperimento di Davisson e Germer

Più comunemente conosciuto come l'esperimento della doppia fenditura è molto simile ad un interferometro di Young ma con elettroni al posto della luce.

L'apparato consista in due schermi uno dietro l'altro, il primo con due fenditure ed il secondo un semplice schermo; se immaginiamo di lanciare degli elettroni contro lo schermo con le fenditure allora ci viene naturale pensare che l'elettrone possa passare o meno attraverso la fenditura e di trovare un accumulo di elettroni sul secondo schermo in corrispondenza delle due fenditure. Come al solito non si osservò quanto creduto.

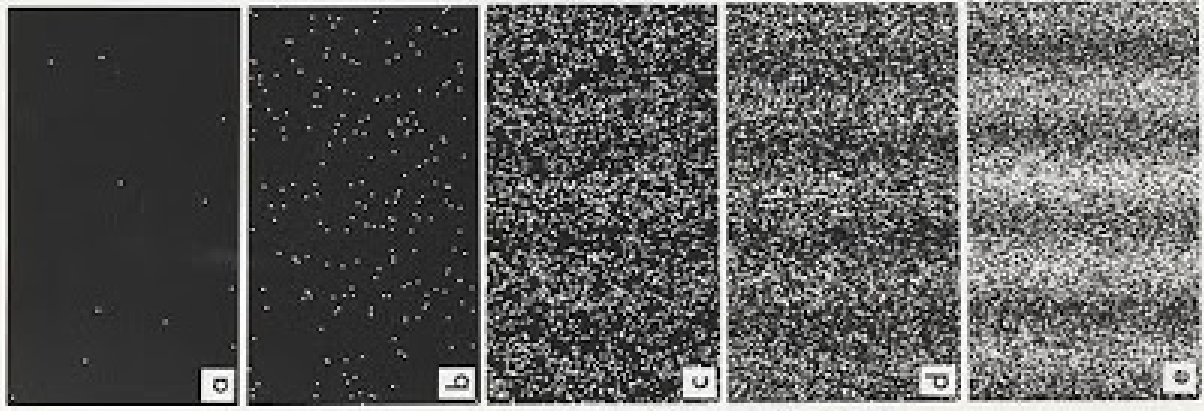


Figura 4: Pattern di interferenza elettronico; più elettroni vengono lanciati più il pattern è nitido.

Come mostra la figura sopra riportata, gli elettroni non si accumulano dietro le fenditure ma formano un pattern di interferenza come se avessimo inviato della radiazione elettromagnetica. Questo comportamento è alla base del dualismo onda-particella secondo cui le particelle e le onde non hanno una natura prefissata ma si comportano diversamente a seconda del caso specifico in cui vengono osservate.

Dall'esperimento della doppia fenditura il fisico De Broglie propose che ad ogni particella fosse associata un'onda di lunghezza d'onda pari a $\lambda = \frac{h}{p}$ in cui p indica l'impulso della particella; tale è l'ipotesi di De Broglie. Ultima annotazione, la forte analogia con l'ottica classica. L'interferenza tra due onde è studiata attraverso l'intensità della luce, partendo dal fatto che le equazioni di Maxwell sono lineari (vale il principio di sovrapposizione delle soluzioni)

$$E_T = E_1 + E_2 \Rightarrow I_T = \langle E_T^2 \rangle = \langle I_1 \rangle + \langle I_2 \rangle + 2\Re \langle E_1 \cdot E_2^* \rangle, \quad (9)$$

in cui E_1 ed E_2 sono i campi elettrici alla fenditura 1 e 2 (in generale complessi) ed il numero $2\Re \langle E_1 \cdot E_2^* \rangle$ è il termine di interferenza. Poiché potremmo definire delle grandezze analoghe ai campi elettrici 1 e 2 anche per gli elettroni (qualcosa legato alla probabilità che l'elettrone attraversi la prima o la seconda fenditura), chiamiamole ψ_1 e ψ_2 , si potrebbe sviluppare lo stesso calcolo dell'ottica classica per queste due grandezze ottenendo

$$\psi_T = \psi_1 + \psi_2 \Rightarrow I_T = \langle \psi_T^2 \rangle = \langle |\psi_1|^2 \rangle + \langle |\psi_2|^2 \rangle + 2\Re \langle \psi_1 \psi_2^* \rangle. \quad (10)$$

Da questa forte analogia tra campi elettrici (onde) e funzioni d'onda (le ψ) si sviluppò la meccanica ondulatoria, prima formulazione della meccanica quantistica, promossa da Schrödinger e culminata con la sua celebre equazione.

1.7 L'effetto Compton

L'esperimento della doppia fenditura mostra la natura ondulatoria degli elettroni; l'effetto Compton mostra, invece, la natura corpuscolare (fotonica) della luce. Compton mandò della radiazione elettromagnetica altamente energetica contro un elettrone fermo; chiamiamo k_μ^i il quadrimpulso iniziale del fotone, k_μ^f il quadrimpulso finale del fotone, p_μ^f il quadrimpulso finale dell'elettrone e θ l'angolo tra l'asse x e la direzione del fotone scatterato.

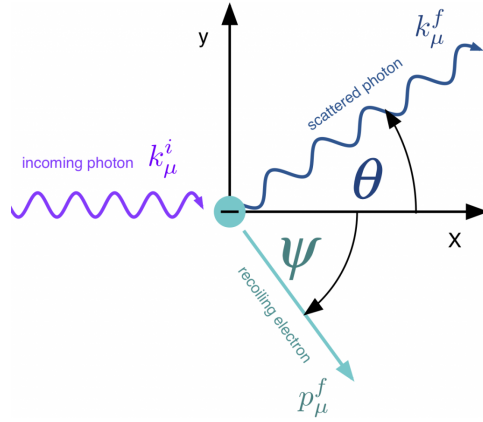


Figura 5: Schematizzazione dell'effetto Compton. Il fotone viene diffuso e cede parte della sua energia.

Dalla conservazione del quadrimpulso totale si ottiene, con noiosi quanto semplici passaggi algebrici (ricordando che energia ed impulso del fotone sono in generale $E = p = \frac{h\nu}{c}$) la seguente relazione

$$\Delta\lambda = \lambda_e(1 - \cos(\theta)), \quad (11)$$

in cui $\lambda_e = \frac{h}{m_e c}$ è detta lunghezza d'onda Compton dell'elettrone. E' interessante notare che

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \Rightarrow \lambda_e = \frac{h}{m_e c} = \frac{c}{\nu} \Rightarrow h\nu = m_e c^2. \quad (12)$$

La lunghezza Compton di una particella è equivalente alla lunghezza d'onda di una radiazione con energia pari all'energia a riposo della particella. La diffusione Compton (valsa a Compton il Nobel) mostra come la luce abbia una natura corpuscolare; scontrandosi contro l'elettrone, il fotone, cede parte della sua energia e viene diffuso.

La teoria che andremo a trattare non prevederà lo studio della meccanica quantistica relativistica ma solo dei findamenti della meccanica quantistica non relativistica.

2 Formalismo generale e arsenale matematico della MQ

Vedremo ora il formalismo generale della meccanica quantistica e le nozioni analitico-algebriche necessarie per affrontare i prossimi capitoli. In meccanica quantistica lo stato di un sistema è sempre descritto tramite un vettore di stato immerso in uno spazio, in generale, infinito-dimensionale. Grande importanza hanno gli spazi L^p (in particolar modo L^2) e, più in generale, gli spazi di Hilbert, gli operatori lineari che agiscono in questi spazi con particolare attenzione agli operatori hermitiani ed unitari e alla nozione di commutatore. Dal punto di vista analitico è importante conoscere gli spazi di misura, l'integrale e la misura di Lebesgue e la trasformata di Fourier.

2.1 Brevi richiami matematici

2.1.1 Spazi vettoriali, spazi di Hilbert e prodotto scalare

Uno spazio vettoriale è una struttura algebrica composta da un campo (ad esempio \mathfrak{R} o \mathfrak{C}) un insieme di vettori e due operazioni (somma tra vettori e moltiplicazione per un elemento del campo). Tra gli spazi vettoriali si differenziano gli spazi di Hilbert, spazi vettoriali in cui è possibile definire una norma derivante da un prodotto scalare; questi spazi possono essere finito o infinito dimensionali (come gli spazi L^p). Gli spazi L^p sono spazi di misura in cui le funzioni misurabili facenti parte di tale spazio verificano la condizione

$$\int_{\omega} |f(\mathbf{x})|^p < \infty. \quad (13)$$

Per la meccanica dei quanti il più importante spazio infinito-dimensionale è lo spazio L^2 essendo l'unico spazio L^p a possedere una struttura hilbertiana; l'importanza di tale spazio sarà più chiara proseguendo.

Ricordiamo brevemente le proprietà del prodotto scalare:

- Bilinearità
- $(\phi, \phi) \geq 0$;
- $(\phi, \psi)^* = (\psi, \phi)$.

Quindi il prodotto scalare (o prodotto hermitiano standard) è una forma bilineare, semidefinita positiva.

2.1.2 Operatori (generalità)

Un operatore è una trasformazione lineare tra vettori, $\phi = A\psi$, che associa ad un vettore un altro vettore. Come sappiamo ad ogni trasformazione lineare è possibile associare una matrice; perfino ad operatori che agiscono su spazi infinito-dimensionali (una "matrice" con infinite righe e colonne). Dato un operatore è importante sapere quali sono i vettori che vengono mandati in un multiplo di loro stessi, tale insieme di vettori è lo spettro dell'operatore; i vettori in questione

sono detti autovettori ed il numero che li moltiplica è detto autovalore. Sostanzialmente dato un operatore A è importante saper risolvere la sua equazione agli autovalori, ossia

$$A\phi = \lambda\phi, \quad (14)$$

in cui i vettori ϕ sono gli autovettori ed i numeri λ sono gli autovalori corrispondenti. In Meccanica Quantistica esiste una differenza tra autovalore e numero quantico, infatti il numero quantico è come un'etichetta dell'autovalore; se l'autovalore è una funzione univoca di una certa quantità allora si può scegliere quella quantità come etichetta dell'autovalore, ossia come numero quantico.

Può capitare che l'equazione (14) ammetta più di una soluzione per un dato λ , in questo caso si parla di degenerazione su λ e l'insieme di autovettori per cui la (14) è soddisfatta con lo stesso λ genera uno sottospazio di dimensione pari al numero di autovettori degeneri, detto autospazio di λ . Lo spettro di un operatore (l'insieme degli autovalori) può essere discreto o continuo. In meccanica quantistica supporremo sempre che l'insieme di autovettori sia sempre un insieme completo, ossia una buona base per descrivere tutto lo spazio in cui si sta lavorando. Grande importanza in meccanica quantistica rivestono due tipi di operatori gli operatori hermitiani e gli operatori unitari. Per cominciare, definiamo operatore aggiunto (o dagato) l'operatore tale che sia soddisfatta la seguente uguaglianza

$$(\phi, A\psi) = (A^\dagger\phi, \psi), \quad (15)$$

in cui A^\dagger è l'operatore aggiunto di A . A questo punto, si definisce operatore hermitiano (o autoaggiunto) un operatore per cui $A^\dagger = A$, inoltre si definisce operatore antihermitiano un operatore per cui $-A^\dagger = A$. Sottolineiamo che l'operazione di aggiunta consiste nel fare la trasposta coniugata dell'operatore (in generale gli operatori sono matrici con elementi complessi). È importante rimarcare però come le definizioni, da un punto di vista più rigoroso, di operatore hermitiano e trasposta coniugata non siano esattamente uguali a quelle di operatore autoaggiunto e aggiunta in quanto si differenziano rispetto alla densità o meno del dominio di applicazione dell'operatore (noi non ci porremo questo problema). Passiamo alla definizione di operatore unitario; si dice unitario quell'operatore per cui $AA^\dagger = \mathcal{I} \Rightarrow A^\dagger = A^{-1}$. Studieremo più nel dettaglio questi due tipologie di operatori nei prossimi paragrafi; definiamo ora il commutatore di due operatori:

$$[A, B] = AB - BA \quad (16)$$

Due operatori si diranno commutanti se il loro commutatore è nullo, viceversa saranno non commutanti se il loro commutatore è non nullo; in generale l'algebra degli operatori è un'algebra non commutativa, sarà quindi di grande interesse trovare operatori commutanti. Definiamo anche l'anticommutatore come $(A, B) = AB + BA$. Le proprietà più importanti dei commutatori sono inserite nell'appendice.

2.1.3 Operatori hermitiani

Da questo paragrafo sarà adoperato il formalismo di Dirac, consultare paragrafo 2.2.1. Abbiamo visto che un operatore si dice hermitiano se la sua aggiunta corrisponde all'operatore di partenza; questi operatori hanno importanti caratteristiche che li rendono fondamentali per la meccanica

quantistica. Consideriamo l'equazione agli autovalori di un operatore hermitiano e l'equazione coniugata ossia (avendo reso gli autovettori ortonormali)

$$A|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle, \quad (17)$$

$$\langle\phi|A^\dagger = \langle\phi|\lambda^* \Rightarrow \langle\phi|A = \langle\phi|\lambda^*. \quad (18)$$

Proiettando la (17) sull'autobra $\langle\phi|$ e la (18) sull'autoket $|\phi\rangle$, sottraendo membro a membro otteniamo

$$0 = (\lambda - \lambda^*) \langle\phi|\phi\rangle \Rightarrow \lambda = \lambda^*. \quad (19)$$

Per cui gli autovalori di un operatore hermitiano sono tutti reali (l'ultima implicazione è data dalla generalità di ϕ). Inoltre, se prendiamo le due equazioni agli autovalori per due autovettori e quindi due autovalori diversi otteniamo

$$A|\phi\rangle = \lambda_{phi}|\phi\rangle, \quad (20)$$

$$\langle\psi|A^\dagger = \langle\psi|\lambda_{psi}^* \Rightarrow \langle\psi|A = \langle\psi|\lambda_{psi}^* \Rightarrow \langle\psi|A = \langle\psi|\lambda_{psi}. \quad (21)$$

L'ultima implicazione è data dal teorema appena dimostrato. Proiettando la (20) sull'autobra $\langle\psi|$ e la (21) sull'autoket $|\phi\rangle$, otteniamo

$$\langle\psi|A|\phi\rangle = \lambda_{phi} \langle\psi|\phi\rangle, \quad (22)$$

$$\langle\psi|A|\phi\rangle = \lambda_{psi} \langle\psi|\phi\rangle. \quad (23)$$

Sottraendo membro a membro otteniamo

$$0 = (\lambda_{phi} - \lambda_{psi}) \langle\psi|\phi\rangle \Rightarrow \langle\psi|\phi\rangle = 0; \quad (24)$$

quindi autovettori appartenenti ad autovalori diversi sono ortogonali. Possiamo quindi enunciare il seguente:

Teorema 1 Teorema spettrale

Un operatore hermitiano possiede sempre e solo autovalori reali e autovettori appartenenti ad autovalori diversi sono ortogonali e quindi utilizzabili come base.

Ricordiamo, inoltre, che dato un operatore antihermitiano, la moltiplicazione per l'unità immaginaria lo rende hermitiano e viceversa.

2.1.4 Operatori unitari

Gli operatori unitari sono definiti come quegli operatori per cui l'aggiunta coincide con l'inversa dell'operatore di partenza ($OO^\dagger = OO^{-1} = \mathcal{I}$); da questa proprietà segue che il determinante di queste trasformazioni è pari a ± 1 . La proprietà più importante di un operatore unitario è quella di poter essere scritto sempre come esponenziale di una matrice antihermitiana

$$U(a) = e^{iaA}, \quad (25)$$

in cui A è un operatore hermitiano.

Il calcolo esplicito di una generica funzione di matrice può essere fatto in due modi:

- Tramite sviluppo di Taylor formale sostituendo al posto della variabile la matrice in questione;
- Tramite il teorema di Caley-Hamilton.

E' importante capire quando un operatore risulti invariante sotto una trasformazione unitaria, ossia, $UOU^\dagger = O$; con O generico operatore. A tale scopo sviluppiamo con Taylor, immaginando una trasformazione con a infinitesimo, la relazione (25) e applichiamo la trasformazione sopra citata

$$(\mathcal{I} + iaA)O(\mathcal{I} - iaA) = O' \Rightarrow O - iaOA + iaAO = O' \Rightarrow O - O' = ia[O, A], \quad (26)$$

in cui si è trascurato l'infinitesimo a^2 . La matrice all'esponente della (25) è detto generatore della trasformazione, quindi:

Teorema 2 Teorema di invarianza

L'operatore O risulta invariante sotto la trasformazione unitaria (19) se e solo se risulta essere nullo il suo commutatore col generatore della trasformazione.

2.1.5 Diagonalizzazione simultanea di operatori hermitiani

In meccanica quantistica, come si vedrà, è fondamentale trovare insiemi di operatori hermitiani che commutano tra loro; questo implica che è possibile diagonalizzarli simultaneamente e quindi trovare una base comune per descrivere lo stato del sistema. Immaginiamo di avere una base simultanea $|\lambda, \mu\rangle$, abbiamo quindi

$$A|\lambda, \mu\rangle = \lambda|\lambda, \mu\rangle, \quad (27)$$

e

$$B|\lambda, \mu\rangle = \mu|\lambda, \mu\rangle, \quad (28)$$

da cui

$$[A, B]|\lambda, \mu\rangle = (AB - BA)|\lambda, \mu\rangle = (\lambda\mu - \mu\lambda)|\lambda, \mu\rangle = 0. \quad (29)$$

Questo implica, data la generalità del ket scelto, che il commutatore deve essere nullo.

Immaginiamo di avere due operatori A e B per cui il loro commutatore sia nullo e consideriamo una base $|\lambda\rangle$ per cui si abbia

$$A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle. \quad (30)$$

Calcoliamo allora l'azione dell'operatore BA su tale base

$$BA|\lambda\rangle = \lambda B|\lambda\rangle \Rightarrow AB|\lambda\rangle = \lambda B|\lambda\rangle, \quad (31)$$

in cui l'implicazione è data dall'ipotesi di commutatore nullo. La (31) ci dice che il vettore $B|\lambda\rangle$ è autovettore di A ; a questo punto abbiamo due casi:

- Lo spettro di A è non degenere; quindi il vettore $B|\lambda\rangle$ deve essere un multiplo di $|\lambda\rangle$ per cui $B|\lambda\rangle = \mu|\lambda\rangle$.

- Lo spettro di A è degenere in λ ; quindi il vettore $B|\lambda\rangle$ appartiene al sottospazio di degenerazione di λ , per cui essendo l'operatore B hermitiano e quindi diagonalizzabile, segue che all'interno dell'autospazio di λ è sempre possibile trovare dei vettori che sono autovettori di B ed, inoltre, questi possono sempre essere scritti come combinazione lineare della base dell'autospazio (gli autovettori di A con degenerazione su λ dato che A è hermitiano (**Teorema 1**)).

Abbiamo quindi dimostrato il seguente:

Teorema 3 Teorema di commutazione

Due operatori hermitiani sono simultaneamente diagonalizzabili se e solo se il loro commutatore è nullo.

E' possibile dimostrare dal **Teorema 3** il seguente:

Teorema 4 Teorema di degenerazione

Se due operatori hermitiani B_1 e B_2 commutano con un terzo operatore hermitiano A ma non tra loro allora lo spettro del terzo operatore è degenere.

Infatti, se A avesse spettro non degenere seguirebbe che la base di autovettori di A , in virtù dei commutatori nulli, sarebbe una base simultanea per tutti e tre gli operatori, contro l'ipotesi che gli operatori B non commutano tra loro.

2.1.6 Integrale di Lebesgue e trasformata di Fourier

L'integrale di Lebesgue è una generalizzazione dell'integrale classico di Riemann, tramite questo tipo di integrale è possibile integrare funzioni non integrabili secondo Riemann. il concetto fondamentale nella teoria di Lebesgue è quella di misura di un insieme; se ci mettiamo nello spazio tridimensionale la misura naturale sarà il volume, per cui tutto ciò che non ha un volume può essere considerato di misura nulla. Il concetto appena esposto è generale e vale dallo spazio unidimensionale a quello n -dimensionale. In definitiva l'integrale di Lebesgue integra per classi di equivalenza, se una funzione è non nulla solo in insiemi di misura nulla (si dice nulla quai ovunque) allora è a tutti gli effetti la funzione identicamente nulla.

Uno strumento matematico particolarmente potente è la trasformata di Fourier; è una trasformata integrale utile nella risoluzione delle equazioni differenziali soprattutto per via del teorema di convoluzione (consultare l'appendice). Inoltre, permette di scrivere una funzione dipendente da una variabile nel dominio di un'altra, e per fare ciò decompone la funzione nella base delle funzioni esponenziali con un prodotto scalare. La definizione della trasformata è la seguente:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x} \tag{32}$$

mentre per l'antitrasformata:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{k} \tag{33}$$

La proprietà più rimarchevole della F-trasformata sta nel fatto che se una certa funzione ha una grandezza caratteristica nello spazio delle \mathbf{x} la grandezza caratteristica della funzione trasformata nello spazio di Fourier (spazio dei \mathbf{k}) sarà proporzionale all'inverso della grandezza caratteristica nello spazio delle \mathbf{x} .

2.2 Formalismo generale

In meccanica quantistica non è possibile definire lo spazio delle fasi del sistema, per via di una imprecisione dettata dalla natura stessa; questo vuol dire che non è possibile seguire l'evoluzione del sistema quantistico in modo deterministico, ma che è necessario sviluppare una teoria che tenga conto della natura intrinsecamente probabilistica dell'universo e che sia in grado, comunque, di essere precisa nelle sue previsioni. La nuova teoria fisica è stata messa alla prova innumerevoli volte e ogni volta ha risposto correttamente alle domande che ci siamo posti. I campi applicativi e le verifiche sperimentali della quantomeccanica sono molteplici; spaziano dalla struttura degli atomi, molecole e solidi, allo studio dei fenomeni ottici con utilizzo di LASER, alle applicazioni in campo elettronico e medicale fino alla comprensione dei misteri più reconditi dell'universo quali "perché le cose hanno massa?" o "cosa è successo i primi 10^{-35} s di vita dell'universo?".

2.2.1 Formalismo di Dirac

Incoinciamo a calarci nel formalismo della meccanica quantistica, per prima cosa vedremo il formalismo bra e ket di Dirac. Abbiamo detto che in meccanica quantistica lo stato di un sistema è descritto da un vettore, questi vettori nel formalismo di Dirac sono indicati come vettori ket $|\cdot\rangle$. Poiché ad ogni vettore di uno spazio è possibile associare una forma lineare appartenente allo spazio duale dello spazio considerato, associamo ad un generico ket il rispettivo bra in modo tale che risulti verificata la relazione $\langle a|b\rangle = (a, b)$. In sostanza i ket sono i vettori dello spazio mentre i bra sono i dello spazio duale e l'associazione di un ket con il rispettivo bra è data tramite il prodotto scalare richiedendo che la forma lineare applicata al nostro ket restituisca il prodotto scalare tra i due vettori.

Nella notazione di Dirac il simbolo $\langle a|b\rangle$ si comporta a tutti gli effetti come un prodotto scalare per cui

$$\langle a|A|b\rangle^* = (a, Ab)^* = (Ab, a) = (b, A^\dagger a) = \langle b|A^\dagger|a\rangle, \quad (34)$$

in cui si sono utilizzate le proprietà del prodotto scalare e la definizione di aggiunto.

Quanto mostrato vale anche per un ket o un bra, ossia si ha $A|a\rangle = \langle a|A^\dagger$ e $\langle a|A = A^\dagger|a\rangle$. I vettori bra e ket possono essere visti come rispettivamente vettori riga e vettori colonna ed il passaggio da un ket ad un bra avviene coniugando i coefficienti che li moltiplicano e viceversa

$$|a\rangle = \sum_k c_k |k\rangle \Rightarrow \langle a| = \sum_k \langle k|c_k^*. \quad (35)$$

2.2.2 Principio di sovrapposizione e collasso della funzione d'onda

Come ripetuto più volte, in meccanica dei quanti lo stato è descritto da un vettore ket di stato che, per postulato, racchiude tutte le proprietà e caratteristiche del sistema. In generale tale ket potrà essere una combinazione lineare di ket di base di qualche operatore, ossia una sovrapposizione di più ket, come in (35). Si potrebbe pensare che questo significhi che il comportamento del sistema sia una sorta di via di mezzo dei possibili comportamenti descritti dai singoli ket di base, ma non è così; nell'atto di misurare una quantità fisica osservabile del nostro sistema troviamo un valore preciso non un insieme di valori. La sovrapposizione di questi ket di base si manifesta, quindi, nella possibilità di misurare il valore della grandezza fisica legato al k -esimo ket di base, di modo che si abbia una probabilità di ottenere un certo valore della grandezza che si misura (come vedremo in seguito, tale probabilità è data dal modulo quadro del coefficiente davanti al k -esimo ket di base), ma si misurerà un solo valore soltanto. Il sistema vive quindi in una sorta di stasi, è allo stesso tempo il ket di base $|k = 1 \rangle$, il ket $|k = 2 \rangle$ e via di seguito e nel momento della misura della grandezza, il sistema "sceglie" come manifestarsi; questo collasso del ket di stato verso un singolo ket di base non è casuale ma come detto segue una distribuzione di probabilità secondo la quale ad ogni ket di base è associata una precisa probabilità di manifestarsi nella misura.

Il processo fenomenologico appena descritto prende il nome di collasso della funzione d'onda; in cui per funzione d'onda si intende la proiezione (mediante prodotto scalare) del ket di stato sugli autobra della posizione $\langle x|$ (così otteniamo la funzione d'onda nella rappresentazione della posizione). La funzione d'onda possiede, come il ket di stato, tutte le caratteristiche importanti del sistema. In generale se proiettiamo il ket di stato sugli autobra $\langle o|$ di un dato operatore O otteniamo la funzione d'onda nella rappresentazione dell'operatore O

$$|a \rangle = \sum_k c_k |k \rangle \Rightarrow \langle o|a \rangle = \sum_k c_k \langle o|k \rangle = \psi(o). \quad (36)$$

La funzione d'onda è anche detta ampiezza di probabilità.

2.2.3 Osservabili quantistiche e misura di osservabili

Ci domandiamo che proprietà debba avere un determinato operatore per essere un'osservabile quantistica. Per prima cosa notiamo che nel momento della misura i valori che andiamo ad osservare sono reali e non complessi. Definiamo il valore medio di un operatore sullo stato quantistico nel seguente modo

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \phi|A|\phi \rangle}{\langle \phi|\phi \rangle}. \quad (37)$$

Inoltre definiamo la varianza dell'operatore A come

$$\sigma_A = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2; \quad (38)$$

se il ket è normalizzato allora $\langle \phi|\phi \rangle = 1$ Affinche il valor medio risulti reale dobbiamo richiedere che $\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$ quindi

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \phi|A|\phi \rangle}{\langle \phi|\phi \rangle} = \langle A \rangle^* = \frac{\langle \phi|A|\phi \rangle^*}{\langle \phi|\phi \rangle^*} \Rightarrow \frac{\langle \phi|A|\phi \rangle}{\langle \phi|\phi \rangle} = \frac{\langle \phi|A^\dagger|\phi \rangle}{\langle \phi|\phi \rangle} \Rightarrow A = A^\dagger. \quad (39)$$

In cui si sono utilizzate le proprietà del prodotto scalare, la definizione di aggiunto e l'equazione (34).

L'equazione (39) implica che un'operatore per poter essere un'osservabile quantistica deve essere hermitiano; questo ci consola dato che gli operatori hermitiani hanno solo autovalori reali e come vedremo gli autovalori di un operatore osservabile fisica sono gli unici valori che una misura di quell'osservabile può dare. Supponiamo che il nostro sistema quantistico sia un autostato dell'operatore A , ossia che il sistema sia descritto da un ket che è autoket di A e che tale ket sia normalizzato. Dalla (37) otteniamo

$$\langle A \rangle = \langle \phi | A | \phi \rangle = \phi, \quad (40)$$

dato che A agisce sul suo autostato di autovalore ϕ .

Calcoliamo ora la varianza di A

$$\langle A^2 \rangle = \langle \phi | A^2 | \phi \rangle = \langle \phi | A A | \phi \rangle = \phi \langle \phi | A | \phi \rangle = \phi^2, \quad (41)$$

da cui

$$\sigma_A = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \phi^2 - \phi^2 = 0. \quad (42)$$

Intendendo la varianza di A come nel senso della teoria delle probabilità, il fatto che questa sia nulla indica che con certezza una misura di A su un suo autostato restituisce sempre il corrispettivo autovalore.

2.2.4 Interpretazione probabilistica della meccanica quantistica

Nel precedente paragrafo abbiamo iniziato a vedere come la teoria delle probabilità e la meccanica quantistica siano legate; cerchiamo di capire quale sia l'interpretazione probabilistica della quantomeccanica.

Abbiamo detto che in meccanica dei quanti l'insieme degli autovettori di un operatore è sempre supposto come una base completa per lo spazio in cui si lavora, per cui possiamo sempre scomporre i generici ket sulla base di autoket (i ket sono supposti ortonormalizzati)

$$|\phi\rangle = \sum_k c_K |\lambda_k\rangle + \int_C c(k) |k\rangle dk, \quad (43)$$

in cui la somma è fatta sulla parte discreta dello spettro e l'integrale sulla parte continua, inoltre supponiamo che le due parti dello spettro siano separate.

Per ottenere i coefficienti c_K proiettiamo su un altro autobra discreto $\langle \lambda_i |$

$$\langle \lambda_i | \phi \rangle = \sum_k c_K \langle \lambda_i | \lambda_k \rangle = \sum_k c_k \delta_{ik} = c_i. \quad (44)$$

Cerchiamo, ora, i coefficienti $c(k)$: proiettiamo su un autobra appartenente alla parte continua dello spettro, $\langle k' |$:

$$\langle k' | \phi \rangle = \int_C c(k) \langle k' | k \rangle \quad (45)$$

L'equazione (45) presenta un problema di normalizzazione in quanto, per le proprietà dell'integrale di Lebesgue, se $\langle k' | k \rangle$ fosse una funzione non nulla solo nel punto $k' = k$ l'integrale

sarebbe identicamente nullo (il punto ha misura nulla sulla retta). E' necessario quindi andare a cercare tra le funzioni generalizzate o distribuzioni; ci occorre una "funzione" che sia nulla ovunque tranne in un punto in cui assume il valore ∞ in modo tale che l'integrale (45) risulti finito. Dirac introdusse a tale scopo la distribuzione delta, approfondita in appendice; grazie alla delta otteniamo

$$\langle k' | \phi \rangle = \int_{\mathcal{C}} c(k) \langle k' | k \rangle dk = \int_{\mathcal{C}} c(k) \delta(k' - k) dk = c(k'). \quad (46)$$

Mettendo assieme la (43), (44) e la (46) otteniamo (scrivendo prima il ket e poi il coefficiente)

$$|\phi \rangle = \sum_k |\lambda_k \rangle \langle \lambda_k | \phi \rangle + \int_{\mathcal{C}} |k \rangle \langle k | \phi \rangle dk, \quad (47)$$

data la generalità del ket $|\phi \rangle$, otteniamo una relazione operatoriale; una buffa e non intuitiva forma dell'identità

$$\mathcal{I} = \sum_k |\lambda_k \rangle \langle \lambda_k | + \int_{\mathcal{C}} |k \rangle \langle k | dk. \quad (48)$$

L'operatore $|\cdot \rangle \langle \cdot |$ rappresenta l'operatore di proiezione; proietta un generico ket lungo la direzione del ket $|\cdot \rangle$; evidentemente la somma di tutti gli operatori di proiezione sui vettori di base restituisce l'identità.

Riprendiamo la definizione di valor medio di un'osservabile (che abbia, in generale, spettro discreto e continuo) data dalla (37) ed inseriamo la forma (48) dell'identità tra l'operatore ed il ket $|\phi \rangle$

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \phi | A | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left(\langle \phi | A \left(\sum_k |\lambda_k \rangle \langle \lambda_k | + \int_{\mathcal{C}} |k \rangle \langle k | dk \right) | \phi \rangle \right), \quad (49)$$

ma ora A agisce su suoi autoket (discreti o continui) e ci restituisce il corrispondente autovalore

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left(\sum_k \lambda_k \langle \phi | \lambda_k \rangle \langle \lambda_k | \phi \rangle + \int_{\mathcal{C}} k \langle \phi | k \rangle \langle k | \phi \rangle dk \right) \quad (50)$$

Utilizzando le proprietà del prodotto scalare, otteniamo

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left(\sum_k \lambda_k |\langle \lambda_k | \phi \rangle|^2 + \int_{\mathcal{C}} k |\langle k | \phi \rangle|^2 dk \right). \quad (51)$$

L'equazione appena trovata rende manifesta l'interpretazione probabilistica della meccanica quantistica: poichè il valor medio è calcolato come la somma delle possibili realizzazioni della grandezza in esame moltiplicate per le rispettive probabilità, risulta evidente come una misura della grandezza A possa restituire solo gli autvalori (discreti o/e continui) dell'operatore considerato. Inoltre la probabilità di ottenere dalla misura l'autovalore λ_k è data, in base alla (51) da $|\langle \lambda_k | \phi \rangle|^2$; analogamente gli autovalori k sono distribuiti secondo la densità di probabilità $|\langle k | \phi \rangle|^2$.

E' da sottolineare che le probabilità di ottenere un certo autovalore sono legate quindi al modulo quadro della funzione d'onda; è così evidente l'importanza delle richieste che gli operatori siano hermitiani (per via dei loro autovalori tutti reali) e che le funzioni d'onda siano appartenenti ad L^2 (per essere integrabili e dare una probabilità).

Per ricapitolare, in meccanica quantistica gli unici valori misurabili sono l'insieme degli autovalori dell'operatore hermitiano che rappresenta l'osservabile fisica e questi possibili valori hanno una probabilità di essere misurati pari al modulo quadro della funzione d'onda; $|\langle \lambda_k | \phi \rangle|^2$ nel caso discreto e $|\langle k | \phi \rangle|^2$ nel caso continuo.

2.2.5 Quantizzazione canonica alla Dirac

La meccanica quantistica non dà una via unica o una regola per la scrittura delle grandezze fisiche come operatori quantistici. Un modo è passare per la cosiddetta quantizzazione canonica o "alla Dirac" e storicamente fu il primo metodo ad essere utilizzato per costruire la meccanica quantistica; il termine canonico si riferisce a una certa struttura della teoria classica chiamata struttura simplettica (o canonica) che è preservata nella teoria quantistica. Tale metodo consiste nel trasformare una grandezza fisica classica in una grandezza fisica quantistica semplicemente attraverso un'operazione di riscrittura delle variabili in termini di operatori; assegnando, quindi, alla grandezza classica lo status di operatore (hermitiano affinché sia un osservabile).

Nella meccanica classica lo stato di un sistema fisico è specificato una volta che siano specificati i valori assunti dalle variabili dinamiche che sono le coordinate q i momenti p . La struttura canonica della meccanica classica consiste nelle parentesi di Poisson, $\{x, p\}$, fra queste variabili. Dirac, notando le enormi somiglianze tra le proprietà dei commutatori e delle parentesi di Poisson, postulò che i commutatori di due operatori quantistici fossero proporzionali alle rispettive parentesi di Poisson

$$[A, B] = i\hbar\{a, b\}, \quad (52)$$

in cui A e B sono gli operatori quantistici e a e b le rispettive grandezze classiche.

L'unità immaginaria è dovuta al fatto che il commutatore di due operatori hermitiani è antihermitiano (mostrato in appendice) mentre le parentesi di Poisson di due operatori hermitiani sono hermitiane; la costante di Planck tagliata è inserita per questioni dimensionali, infatti le dimensioni del commutatore di A e B sono $[A][B]$ mentre quelle delle parentesi di Poisson sono date da $\frac{[a][b]}{[q][p]}$ ed avendo $[q][p]$ le dimensioni di un'azione, necessitiamo di una costante con tali dimensioni quale la costante di Planck di valore pari a $1,054\ 571\ 72610^{-34}$ Js = $6,582\ 119\ 2810^{-16}$ eVs.

L'equazione (52) può essere vista come una forma del principio di corrispondenza tra meccanica classica e quantistica ossia i risultati della meccanica quantistica devono ridursi a quelli della meccanica classica nelle situazioni in cui l'interpretazione classica può essere considerata valida. Infatti quando la costante di Planck tende a zero (nella formulazione mediante integrali di cammino la meccanica quantistica tende alla meccanica classica nel limite di $\hbar \rightarrow 0$) i commutatori delle grandezze diventano identicamente nulli e come vedremo questo comporta che le grandezze in esame sono simultaneamente osservabili con precisione legata solo a quella degli strumenti di misura come la teoria classica prevede.

2.2.6 Operatore impulso e suoi autostati

Nel precedente paragrafo abbiamo visto che la quantizzazione canonica richiede che il commutatore di due operatori quantistici sia proporzionale alle parentesi di Poisson delle due grandezze; in particolare sappiamo che le parentesi di Poisson tra le coordinate e gli impulsi coniugati sono le seguenti

$$\{q_i, p_j\} = \sum_k \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial q_k} - \frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} = \delta_{ij}, \quad (53)$$

e dalla (52) otteniamo quindi:

$$[Q_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (54)$$

E' necessario quindi trovare un operatore che soddisfi le regole di commutazione appena espresse, così da poterlo identificare con l'operatore di impulso. Nella rappresentazione delle coordinate, ossia nella rappresentazione in cui l'operatore posizione è diagonale ed agisce su suoi autostati come $X|x\rangle = x|x\rangle$, possiamo identificare l'operatore di impulso come $-i\hbar\frac{\partial}{\partial X}$ infatti

$$[X, \frac{\partial}{\partial X}] = \left(\left(X \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial X} X \right) \psi(x) \right) = x\psi'(x) - \frac{\partial}{\partial X} x\psi = \left(x\psi'(x) - 1 - x\psi'(x) \right) = -1, \quad (55)$$

quindi $[X, -i\hbar\frac{\partial}{\partial X}] = i\hbar$ come volevasi mostrare.

Dalle proprietà dei commutatori sappiamo che una funzione di un operatore commuta sempre con l'operatore stesso, per cui se al posto di $-i\hbar\frac{\partial}{\partial X}$ definissimo l'operatore impulso come $-i\hbar\frac{\partial}{\partial X} + f(X)$ otterremmo lo stesso il commutatore (55) richiesto. Possiamo però prendere la funzione $f(X)$ identicamente nulla trasformando l'operatore impulso tramite una trasformazione unitaria U . Le trasformazioni unitarie non cambiano la fisica; trasformando i ket come $|\phi\rangle' = U|\phi\rangle$ e gli operatori come $O' = UOU^\dagger$ otteniamo:

$$\langle \phi | \phi \rangle' = \langle \phi | U^\dagger U | \phi \rangle = \langle \phi | \phi \rangle; \quad (56)$$

$$\langle \phi | O' | \phi \rangle' = \langle \phi | U^\dagger U O U^\dagger U | \phi \rangle = \langle \phi | O | \phi \rangle; \quad (57)$$

$$O' | \phi \rangle' = \phi | \phi \rangle' \Rightarrow U O U^\dagger U | \phi \rangle = \phi U | \phi \rangle \Rightarrow O | \phi \rangle = \phi | \phi \rangle, \quad (58)$$

nell'ultima implicazione abbiamo moltiplicato da sinistra per U^\dagger .

Le equazioni (56), (57) e (58) ci dicono che trasformando ket e operatori mediante un operatore unitario, la norma, il valor medio e lo spettro rimangono inalterate; le trasformazioni unitarie non cambiano la fisica. Possiamo quindi sempre trovare una trasformazione unitaria che ci restituisca l'operatore impulso nella forma $-i\hbar\frac{\partial}{\partial X}$.

Determinata la forma dell'operatore impulso cerchiamo i suoi autostati; l'equazione agli autovalori per l'operatore di impulso è data da

$$P|p\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial X}|p\rangle = p|p\rangle, \quad (59)$$

proiettando l'equazione (59) su un generico autostato dell'operatore posizione otteniamo l'equazione differenziale seguente

$$\langle x | -i\hbar \frac{\partial}{\partial X} | p \rangle = \langle x | p \rangle \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | p \rangle = p \langle x | p \rangle \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{ip}{\hbar} \psi(x). \quad (60)$$

La soluzione è data da $\langle x | p \rangle = \psi(x) = Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}$ con A costante di normalizzazione da ricercare; inoltre p deve essere reale e non complesso perchè altrimenti darebbe luogo ad una funzione d'onda contenente un esponenziale reale che non tende a zero all'infinito; p è anche continuo. Per determinare il valore di A dobbiamo tener conto che essendo p continuo bisogna normalizzare nel senso della delta di Dirac, $\langle p_1 | p_2 \rangle = \delta(p_1 - p_2)$

$$\langle p_1 | p_2 \rangle = \int_{\mathcal{R}} \langle p_1 | x \rangle \langle x | p_2 \rangle dx = \int_{\mathcal{R}} A^* e^{-\frac{ip_1 x}{\hbar}} A e^{\frac{ip_2 x}{\hbar}} dx = |A|^2 \int_{\mathcal{R}} e^{\frac{-i(p_1 - p_2)x}{\hbar}} dx, \quad (61)$$

avendo inserito l'identità. Notiamo che l'ultima scrittura rappresenta una delta di Dirac, nello specifico la delta $2\pi\delta(\frac{p_1 - p_2}{\hbar}) = 2\pi\hbar\delta(p_1 - p_2)$, da cui otteniamo

$$\delta(p_1 - p_2) = \langle p_1 | p_2 \rangle = |A|^2 \int_{\mathcal{R}} e^{\frac{-i(p_1 - p_2)x}{\hbar}} dx = 2\pi\hbar\delta(p_1 - p_2) \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (62)$$

In definitiva gli autostati dell'impulso sono dati da

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}, \quad (63)$$

ed i suoi autovalori sono tutti i numeri reali.

Determinati gli autostati dell'impulso ci domandiamo che forma abbiano le funzioni d'onda nella rappresentazione delle coordinate e dell'impulso; dato un generico ket $|\phi\rangle$ proiettiamolo su un autostato della posizione

$$\langle x | \phi \rangle = \int_{\mathcal{R}} \langle x | p \rangle \langle p | \phi \rangle dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathcal{R}} \phi(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp = \phi(x). \quad (64)$$

Proiettando invece il ket $|\phi\rangle$ su un autostato dell'impulso otteniamo

$$\langle p | \phi \rangle = \int_{\mathcal{R}} \langle p | x \rangle \langle x | \phi \rangle dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathcal{R}} \phi(x) e^{\frac{-ipx}{\hbar}} dx = \phi(p). \quad (65)$$

Le equazioni (64) e (65) ci dicono quindi che per conoscere la funzione d'onda in una rappresentazione dobbiamo fare la trasformata di Fourier (o l'antitrasformata) della funzione d'onda nella rappresentazione della variabile coniugata; nello specifico, quindi, la funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate e quella nella rappresentazione del impulso sono una coppia di trasformate di Fourier.

2.2.7 Principio di indeterminazione di Heisenberg

Nel paragrafo precedente abbiamo visto che le funzioni d'onda di due variabili coniugate sono legate da una trasformata di Fourier e per le proprietà delle trasformate ci aspettiamo che la varianza (ossia la grandezza caratteristica) della funzione d'onda nello spazio di una variabile sarà inversamente proporzionale alla varianza nello spazio della variabile coniugata. Quanto detto significa che la dispersione di una grandezza fisica quantistica è inversamente proporzionale alla dispersione della sua grandezza quantistica coniugata. Dato che la dispersione quantifica la precisione della misura di una grandezza osservabile, questo vuol dire che conoscere molto precisamente una grandezza comporta la pessima precisione nella misura della grandezza coniugata e quindi che le grandezze non possono essere osservate entrambe con precisione piccola a piacere. Per quantificare quanto accennato partiamo dalla disuguaglianza di Schwarz, ossia che il prodotto scalare di due vettori è sempre maggiore uguale del modulo quadro di del prodotto scalare dei due vettori

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq | \langle \alpha | \beta \rangle |^2, \quad (66)$$

a questo punto costruiamo due operatori hermitiani

$$\Delta A = A - \langle A \rangle, \quad \Delta B = B - \langle B \rangle, \quad (67)$$

e i due ket

$$|\alpha \rangle = \Delta A |\psi \rangle, \quad |\beta \rangle = \Delta B |\psi \rangle. \quad (68)$$

Inserendoli nella (66) si ha

$$\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta B)^2 | \psi \rangle \geq | \langle \psi | \Delta A \Delta B | \psi \rangle |^2, \quad (69)$$

data la generalità del ket $|\psi \rangle$ possiamo ottenere una relazione operatoriale e potendo esprimere $\Delta A \Delta B$ come $\frac{[A, B]}{2} + \frac{\{A, B\}}{2}$ (il commutatore e l'anticommutatore degli operatori ΔA e ΔB sono uguali al commutatore e l'anticommutatore degli operatori A e B) otteniamo

$$\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta B)^2 | \psi \rangle \geq \frac{| \langle \psi | [A, B] | \psi \rangle |^2}{4} + \frac{| \langle \psi | \{A, B\} | \psi \rangle |^2}{4} \quad (70)$$

in cui il doppio prodotto $\frac{\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle \langle \psi | \{A, B\} | \psi \rangle}{2}$ deve essere nullo: il valor medio del commutatore è immaginario puro e quello dell'anticommutatore è reale puro. L'unica soluzione è che il termine del doppio prodotto sia nullo perchè il modulo quadro di un valor medio, in questo caso dell'operatore $\Delta A \Delta B$, non può essere immaginario.

Eliminando dalla (70) il generico ket $|\psi \rangle$ e omettendo il termine contenente l'anticommutatore (otteniamo solo una disuguaglianza ancora verificata) otteniamo il principio di indeterminazione di Heisenberg

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{|[A, B]|^2}{4} \Rightarrow \Delta A \Delta B \geq \frac{|[A, B]|}{2}. \quad (71)$$

Il principio di Heisenberg ci dice che esiste un limite inferiore intrinseco della natura che non ci permette di conoscere con precisione piccola a piacere due osservabili incompatibili (ossia con commutatore non nullo) e coniugate; tale principio vale per misure successive e quantifica quanto una misura della grandezza A interferisca con la successiva misura della grandezza B . Il principio di indeterminazione di Heisenberg si riferisce quindi all'impossibilità sperimentale

di specificare con precisione arbitraria i valori di due grandezze incompatibili e coniugate effettuando misure successive su di un singolo sistema fisico

Esiste, tuttavia, anche un'indeterminazione puramente statistica per cui il prodotto delle deviazioni standard di due osservabili (non necessariamente coniugate) ha un limite intrinseco dato dalla disuguaglianza di Robertson

$$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{|\langle \psi [A, B] \psi \rangle|}{2}, \quad (72)$$

in cui il commutatore va valutato su uno specifico ket $|\psi\rangle$.

Tornando alla disuguaglianza (71) ed utilizzando la relazione di commutazione fondamentale (54) otteniamo

$$\Delta Q_i \Delta P_j \geq \frac{|[Q_i, P_j]|}{2} = \frac{\hbar \delta_{ij}}{2}, \quad (73)$$

questo significa che posizione ed impulso sullo stesso asse non possono essere misurate con precisione infinitamente piccola ma che si avrà sempre un'imprecisione dell'ordine della costante di Planck; d'altro canto è possibile misurare con precisione voluta posizione ed impulso su assi diversi dato che essi sono gdl diversi sono indipendenti.

2.2.8 Pacchetto di minima indeterminazione

Nel precedente paragrafo abbiamo visto che vale la disuguaglianza (73); se il modulo quadro della funzione d'onda di una particella è una gaussiana allora su questo stato quantistico la (73) verifica l'uguaglianza e per tanto il pacchetto d'onda gaussiano è detto pacchetto di minima indeterminazione; mostriamolo. Prendiamo una funzione d'onda il cui modulo quadro sia una gaussiana

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}. \quad (74)$$

Calcoliamo $(\Delta x)^2$, ossia la varianza nello spazio delle x ; essendo il modulo quadro della funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate una gaussiana troviamo immediatamente che $(\Delta x)^2 = \sigma^2$. Per il calcolo della varianza nello spazio degli impulsi dovremmo, in primis, trasformare tramite la (65) la funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate nella funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi e successivamente calcolare gli integrali relativi ai valori medi di p e p^2 . In definitiva si ottiene $(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$; quindi

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \sigma^2 \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} = \frac{\hbar^2}{4} \Rightarrow (\Delta x)(\Delta p) = \frac{\hbar}{2}. \quad (75)$$

2.2.9 Limite classico della Meccanica Quantistica

La Meccanica Quantistica contiene in sé la Meccanica Classica per cui la teoria quantistica deve tendere come caso limite alla teoria classica. Il modo in cui questo tendere avviene può essere dedotto come analogia con l'Ottica fisica e l'Ottica geometrica. Nella prima l'onda elettromagnetica è descritta in termini dei campi elettrici e magnetici che soddisfano le equazioni lineari di Maxwell, nella seconda l'onda percorre dei percorsi ben precisi (i raggi). L'analogia è evidente considerando che in Meccanica Classica la particella descrive una traiettoria precisa

mentre in Meccanica Quantistica non esiste la traiettoria e la posizione segue una distribuzione di probabilità che soddisfa un'equazione lineare (l'equazione di Schrödinger).

Il passaggio tra l'Ottica Fisica a quella geometrica è fatto supponendo di scrivere una qualunque componente u del campo come $u = ae^{i\phi}$ e mandando la fase all'infinito (in modulo). Per analogia supponiamo che nel limite classico la Meccanica Quantistica abbia funzioni d'onda della forma $\psi = be^{i\alpha}$ con α grande in modulo. Poichè in Meccanica Classica la traiettoria della particella è determinata dal dover minimizzare l'azione S e poichè in Ottica Geometrica la traiettoria del raggio di luce è determinata dal principio di Fermat, secondo il quale la differenza tra le fasi iniziale e finale del raggio deve essere minima, possiamo supporre che α sia proporzionale all'azione meccanica S , ossia $\alpha = \frac{S}{\hbar}$. La costante \hbar è la costante di Planck ed è inserita perchè essendo α adimensionale la costante di proporzionalità deve avere le dimensioni di una azione. A questo punto abbiamo

$$\psi(x, t) = b(x, t)e^{\frac{iS(x, t)}{\hbar}}, \quad (76)$$

poichè α deve essere grande, \hbar deve tendere a zero; il limite della Meccanica Quantistica è formalmente dato da

$$\hbar \rightarrow 0. \quad (77)$$

2.2.10 Stati puri e miscele statistiche

In questo paragrafo cercheremo di capire la differenza tra stato puro e miscela statistica.

Uno stato puro (detto anche sovrapposizione coerente) è uno stato che è autostato di qualche operatore hermitiano; quindi esiste, almeno in linea di principio, un'osservabile (corrispondente proprio a quell'operatore hermitiano) la cui misura sul sistema darebbe luogo ad esiti non aleatori, nel senso che darebbe come risultato certo l'autovalore corrispondente all'autostato dell'operatore hermitiano. Al contrario uno stato di miscela statistica non corrisponde all'autostato di un operatore hermitiano, che rappresenterebbe l'osservabile fisica, e l'applicazione di quest'ultimo non dà un risultato univoco ma una distribuzione di probabilità, usata per descrivere un ensemble di sistemi di cui non si conosce lo stato singolarmente. In entrambi i casi possiamo usare per descrivere il sistema l'operatore di densità definito come

$$\Xi = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (78)$$

in cui gli $|\psi_i\rangle$ sono gli stati che compongono la sovrapposizione e le p_i sono le probabilità che il sistema si trovi nello stato i -esimo. In sostanza l'operatore (78) è la somma pesata dei proiettori corrispondenti agli stati $|\psi_i\rangle$ con le relative probabilità p_i . l'operatore (78) può essere rappresentato, scelta una base ortonormale $|v_n\rangle$, tramite una matrice, detta matrice di densità, i cui elementi sono

$$\Xi_{nm} = \sum_i p_i \langle v_n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | v_m \rangle. \quad (79)$$

3 Stati quantistici, loro evoluzione e simmetrie in MQ

Come ripetuto più volte lo stato di un sistema quantistico è descritto da un vettore, un ket di stato. Dato che quello che interessa non è il vettore di stato in se ma il modulo del coefficiente complesso davanti al n-esimo ket di base (di cui il ket di stato è combinazione), allora questo significa che un fattore di fase o una costante moltiplicativa davanti al ket di stato non cambia nulla. Poichè fase e costante moltiplicherebbero il ket di stato, moltiplicherebbero anche tutti i ket di base non alterando i valori medi o la probabilità di ottenere una data misura in quanto il modulo di una fase è unitario e nel valutare il valor medio si semplificherebbe mentre la costante richiederebbe solo una normalizzazione diversa. Evidentemente e radicalmente diverso è il caso di una costante o fase relativa tra due ket di base, in quanto questo cambia valori medi e probabilità. Quanto detto fa capire come l'importante sia la direzione di un dato ket di stato. In questo capitolo ci concentreremo sull'evoluzione degli stati quantistici approfondendo le rappresentazioni di Schrödinger e di Heisenberg.

3.1 Operatore di traslazione spaziale e temporale

Per capire come evolvono gli stati quantistici dobbiamo ricavare la forma degli operatori di traslazione spaziale e temporale; richiediamo che essi siano lineari e sotto una traslazione la norma di due vettori non cambi

$$' \langle \psi | \phi \rangle ' = \langle \psi | O^\dagger O | \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle \Rightarrow O^\dagger O = \mathcal{I}, \quad (80)$$

in cui $' \langle \cdot | \cdot \rangle '$ indica il vettore traslato; quindi gli operatori cercati sono unitari. Come sappiamo gli operatori unitari possono essere scritti come esponenziale di una matrice antihermitiana; indicando con $T(\cdot)$ gli operatori di traslazione

$$T(a) = e^{iaA}, \quad (81)$$

$$T(t) = e^{itB}, \quad (82)$$

in cui dobbiamo determinare gli operatori hermitiani A e B . A tale scopo ci rifacciamo alla fisica classica: in meccanica classica vige il teorema di Noether che ci assicura che se la hamiltoniana del sistema è invariante sotto un gruppo di trasformazioni allora il generatore del gruppo è una quantità conservata. Poichè un'invarianza per traslazioni spaziali comporta la conservazione dell'impulso e un'invarianza per traslazioni temporali comporta la conservazione dell'energia concludiamo che il generatore delle traslazioni spaziali è l'impulso mentre quello delle traslazioni temporali è l'energia. Pertanto avremo $T(a) = e^{iaP}$ e $T(t) = e^{itH}$; in questo modo però gli argomenti degli esponenziali non sono adimensionali e tali vanno resi; avendo i prodotti aP e tH le dimensioni di un'azione dividiamo per $-\hbar$ ottenendo gli operatori cercati:

$$T(a) = e^{\frac{-iaP}{\hbar}}; \quad (83)$$

$$T(t) = e^{\frac{-itH}{\hbar}}. \quad (84)$$

Il metodo esposto è poco rigoroso ma più concettuale; con il metodo degli operatori infinitesimali, più rigoroso ma meno concettuale, si arriva al medesimo risultato; esponiamo tale metodo per l'operatore di traslazione spaziale poichè è analogo per l'operatore di traslazione temporale. Essendo $T(a)$ unitario è quindi esprimibile come esponenziale di una matrice antihermitiana, come in (81), ed il suo sviluppo di Taylor al primo ordine (per da infinitesimo) è:

$$T(da) = \mathcal{I} + idaA \quad (85)$$

Trasformando l'operatore posizione con la trasformazione infinitesima (85) otteniamo

$$X_{da} = (\mathcal{I} - idaA)X(\mathcal{I} + idaA) = X - idaAX + idaXA = X - ida[A, X] = X + da, \quad (86)$$

in cui è stato trascurato il termine infinitesimo del secondo ordine e l'ultima eguaglianza è dovuta al fatto che dopo una traslazione infinitesima ci aspettiamo che l'operatore sia se stesso traslato di da . Affinche l'ultima uguaglianza (86) sia verificata, il commutatore tra $[A, X]$ deve valere i , quindi

$$[A, X] = i \Rightarrow [X, A] = -i \Rightarrow A = -\frac{P}{\hbar}, \quad (87)$$

e quindi abbiamo che $T(da) = \mathcal{I} - \frac{idaP}{\hbar}$; se applichiamo infinite volte una traslazione infinitesima otteniamo una traslazione finita

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathcal{I} - \frac{iaP}{N\hbar} \right)^N = e^{-\frac{iaP}{\hbar}}. \quad (88)$$

In maniera analoga si ottiene l'operatore di traslazione temporale $T(t) = e^{-\frac{itH}{\hbar}}$.

3.2 L'equazione di Schrödinger: stati stazionari e non

Consideriamo un ket al quale applichiamo l'operatore di traslazione temporale infinitesimo

$$|\phi \rangle_{dt} = T(dt)|\phi \rangle = \left(\mathcal{I} - \frac{iHdt}{\hbar} \right) |\phi \rangle = |\phi \rangle - \frac{iHdt}{\hbar} |\phi \rangle, \quad (89)$$

da cui otteniamo

$$i\hbar \frac{|\phi \rangle_{dt} - |\phi \rangle}{dt} = i\hbar \frac{\partial |\phi \rangle}{\partial t} = H|\phi \rangle. \quad (90)$$

L'equazione (90) è l'equazione di Schrödinger nella rappresentazione ket e bra di Dirac; nella sua formulazione originale, nella formulazione della meccanica ondulatoria, l'equazione di Schrödinger appare come

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H\psi(x, t). \quad (91)$$

Quest'equazione (in entrambe le formulazioni) descrive l'evoluzione degli stati quantistici nel tempo, è un'equazione alle derivate parziali lineare del primo ordine a coefficienti costanti e complessi; la soluzione sembra semplice, infatti

$$|\psi, t \rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\psi \rangle, \quad (92)$$

l'insidia è nascosta nel fatto che l'esponenziale nella (92) è un esponenziale di matrice, che in generale non è facilmente maneggiabile. Dobbiamo trovare un modo di risolvere l'equazione (91) che non coinvolga direttamente l'esponenziale di matrice. Ipotizziamo che il ket all'istante zero sia un autostato della hamiltoniana normalizzato, $|\psi\rangle = |E\rangle$, in questo caso la soluzione (92) ci fornisce

$$|E\rangle_t = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|E\rangle = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}|E\rangle; \quad (93)$$

notiamo che il ket $|E\rangle$ viene solo ruotato. Avendo $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ modulo unitario, la probabilità di trovarsi nello stato $|E\rangle$ non cambia nel tempo ed inoltre, essendo E un numero si ha

$$\langle E, t|O|E, t\rangle = \langle E|e^{\frac{iEt}{\hbar}}Oe^{-\frac{iEt}{\hbar}}|E\rangle = \langle E|O|E\rangle. \quad (94)$$

In definitiva, su di uno stato che è autostato della hamiltoniana le probabilità e i valori medi degli operatori non dipendono dal tempo e quindi questi stati sono detti stati stazionari; un autostato di H resterà sempre un autostato H .

Consideriamo ora il caso in cui lo stato iniziale normalizzato è una sovrapposizione di autostati della hamiltoniana

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |E_n\rangle, \quad (95)$$

in cui gli $|E_n\rangle$ sono gli autostati di H . La soluzione (92) fornisce quindi

$$|\psi, t\rangle = e^{\frac{iHt}{\hbar}} \sum_n c_n |E_n\rangle = \sum_n e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} c_n |E_n\rangle. \quad (96)$$

La (96) ci fa capire che se un ket non è autostato di H non lo sarà mai; le probabilità di trovarsi nell' n -esimo autostato di H in questo caso si modificano nel tempo perchè sono presenti dei termini di fase relativi tra gli autostati $|E_n\rangle$. Il valor medio di un operatore indipendente dal tempo su questo stato è in generale dipendente dal tempo, infatti

$$\langle \psi, t|O|\psi, t\rangle = \langle \psi|e^{\frac{iHt}{\hbar}}Oe^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\psi\rangle. \quad (97)$$

Nel caso in cui l'operatore O e H commutino allora nella (97) possiamo scambiare l'ordine degli operatori $e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ e O e semplificando otteniamo che $\langle \psi, t|O|\psi, t\rangle = \langle \psi|O|\psi\rangle$.

In definitiva se si vuole risolvere l'equazione di Schrödinger è necessario e sufficiente risolvere l'equazione agli autovalori dell'operatore hamiltoniano

$$H|E\rangle = E|E\rangle, \quad (98)$$

poichè una volta determinato lo spettro di H la soluzione della (91) è espressa dalla (93) o dalla (96). La (98) è detta equazione di Schrödinger indipendente dal tempo.

L'equazione (91) può essere scritta anche nella sua forma coniugata

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} = H\psi^*(x, t), \quad (99)$$

e generalizzata a più dimensioni spaziali

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H\psi(\vec{r}, t). \quad (100)$$

3.3 Teorema di Ehrenfest

Nel paragrafo precedente abbiamo visto che su uno stato stazionario il valore medio di un operatore indipendente dal tempo è indipendente dal tempo e che su uno stato che è combinazione di autostati di H il valor medio di un operatore indipendente dal tempo è indipendente dal tempo se e solo se il commutatore tra H e l'operatore in questione è nullo. Vogliamo ora capire come evolve nel tempo il valor medio di un operatore in generale.

Consideriamo il valor medio calcolato su stati ortonormali che evolvono nel tempo e deriviamolo rispetto al tempo

$$\begin{aligned}
 \frac{d \langle \psi, t | O | \psi, t \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} [\langle \psi | e^{\frac{iHt}{\hbar}} O e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | \psi \rangle] = \\
 &= \langle \psi | \frac{iH}{\hbar} e^{\frac{iHt}{\hbar}} O e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | \psi \rangle + \langle \psi | e^{\frac{iHt}{\hbar}} O - \frac{iH}{\hbar} e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | \psi \rangle + \langle \psi | e^{\frac{iHt}{\hbar}} \frac{\partial O}{\partial t} e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | \psi \rangle = \\
 &= \langle \psi, t | \frac{iH}{\hbar} O | \psi, t \rangle + \langle \psi, t | O \frac{-iH}{\hbar} | \psi, t \rangle + \langle \psi, t | \frac{\partial O}{\partial t} | \psi, t \rangle = \\
 &= \langle \psi, t | \frac{\partial O}{\partial t} | \psi, t \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi, t | [O, H] | \psi, t \rangle .
 \end{aligned} \tag{101}$$

La (101), con un rapido sguardo alla (52), è identica alle equazioni del moto della meccanica hamiltoniana; essa è detta teorema di Ehrenfest e ci dice che i valori medi degli operatori quantistici evolvono nel tempo seguendo le leggi della meccanica classica. Se considerassimo come operatori la posizione e l'impulso otterremmo

$$\begin{aligned}
 \frac{d \langle X \rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \langle [X, H] \rangle \Rightarrow \frac{d \langle X \rangle}{dt} = \langle \frac{\partial H}{\partial P} \rangle, \\
 \frac{d \langle P \rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \langle [P, H] \rangle \Rightarrow \frac{d \langle P \rangle}{dt} = - \langle \frac{\partial H}{\partial X} \rangle .
 \end{aligned} \tag{102}$$

Le (102) sono le equazioni di Hamilton valide per i valori medi degli operatori quantistici; le implicazioni sono dovute alla quantizzazione alla Dirac.

Nella nostra formulazione il teorema di Ehrenfest è diretta conseguenza dell'equazione di Schrödinger che è stata praticamente data come postulato (siamo partiti dal cercare l'operatore di traslazione temporale che è stato trovato cercando un'analogia con la meccanica classica); avremmo potuto dare come postulato il teorema di Ehrenfest (preso per analogia con la meccanica classica) e derivare l'equazione di Schrödinger. Questo non univocità della teoria è frutto del secondo teorema di incompletezza di Gödel, secondo cui una teoria matematica coerente (in questo caso la meccanica quantistica) che sia abbastanza espressiva da contenere l'aritmetica non è in grado di dimostrare la sua stessa coerenza; ossia bisogna partire da dei postulati.

3.4 Rappresentazione di Heisenberg

Quanto visto fino ad ora sull'evoluzione temporale degli stati quantistici prevede che il ket di stato evolva nel tempo e che gli operatori quantistici che siano osservabili fisiche non evolvano nel tempo (il teorema di Ehrenfest parla di valori medi di operatori non di operatori). Tale schema è detto rappresentazione di Schrödinger ma non è l'unica possibile. Sappiamo che una trasformazione unitaria non cambia la fisica, quindi potremmo trasformare ket e operatori

mediante l'aggiunto dell'operatore di traslazione temporale, $T^\dagger(t) = e^{\frac{i\hbar H}{\hbar}}$.

Con questa trasformazione passiamo dalla rappresentazione di Schrödinger alla rappresentazione di Heisenberg nella quale ad evolvere nel tempo non è il ket di stato ma gli operatori quantistici; in questa rappresentazione il teorema espresso dalla (101) assume la forma

$$\frac{dO}{dt} = \frac{\partial O}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[O, H], \quad (103)$$

essendo il ket di stato ininfluenza nell'evoluzione temporale.

La (103) è detta equazione di Heisenberg e mette decisamente più in luce la corrispondenza formale tra Meccanica Quantistica e Classica.

3.5 Equazione di continuità per la probabilità

Dall'equazione di Schrödinger discende un'equazione di continuità per la probabilità. Consideriamo la densità di probabilità $\rho(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$ e deriviamola rispetto al tempo, utilizziamo l'equazione di Schrödinger e la sua coniugata ottenendo

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \\ &= \psi \left(\frac{H\psi^*}{-i\hbar} \right) + \psi^* \left(\frac{H\psi}{i\hbar} \right) = \frac{1}{i\hbar} (-\psi H\psi^* + \psi^* H\psi) \Rightarrow \\ &\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0, \end{aligned} \quad (104)$$

a patto di identificare la funzione \vec{J} , detta densità di corrente di densità probabilità, con la soluzione dell'equazione differenziale

$$\nabla \cdot \vec{J} = \frac{1}{i\hbar} (-\psi H\psi^* + \psi^* H\psi). \quad (105)$$

Nel caso in cui la hamiltoniana può essere scritta come $H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$ otteniamo dalla (105)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{J} &= \frac{1}{i\hbar} \left[-\psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi^* + \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi \right] = \\ &= \frac{\hbar}{2im} [\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi] = \nabla \cdot \frac{\hbar}{2im} [\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi] \Rightarrow \vec{J} = \frac{\hbar}{2im} [\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi], \end{aligned} \quad (106)$$

quindi sostituendo nella (104) otteniamo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \frac{\hbar}{2im} [\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi] = 0. \quad (107)$$

3.6 Principio variazionale di Schrödinger

Così come le equazioni di Hamilton o di Eulero-Lagrangia anche l'equazione di Schrödinger può essere derivata partendo da un principio variazionale. Consideriamo il seguente funzionale

$$\int \psi^*(H - E)\psi dq. \quad (108)$$

Essendo ψ in generale complessa possiamo variare indipendentemente ψ^* o ψ , imponendo che la variazione prima della (108) sia nulla otteniamo che

$$\delta \int \psi^*(H - E)\psi dq = 0 \Rightarrow \int \delta\psi^*(H - E)\psi dq = 0, \quad (109)$$

da cui dovendo essere nullo per ogni $\delta\psi^*$ arbitrario risulta

$$H\psi = E\psi. \quad (110)$$

La differenza nel variare ψ rispetto a ψ^* è di ottenere l'equazione coniugata della (110) ossia

$$H\psi^* = E\psi^*. \quad (111)$$

La (110) e la (111) sono l'equazione di Schrödinger indipendente da tempo e la sua coniugata.

3.7 Limite classico dell'equazione di Schrödinger

Consideriamo l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo per una funzione d'onda nel limite classico (la (76) in 3 dimensioni con la richiesta (77))

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H\psi(\vec{r}, t) \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(b(\vec{r}, t) e^{\frac{iS(\vec{r}, t)}{\hbar}} \right) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) b(\vec{r}, t) e^{\frac{iS(\vec{r}, t)}{\hbar}}, \quad (112)$$

da cui otteniamo

$$i\hbar \left[\frac{\partial b}{\partial t} e^{\frac{iS}{\hbar}} + \frac{i}{\hbar} b e^{\frac{iS}{\hbar}} \frac{\partial S}{\partial t} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[b \nabla^2 e^{\frac{iS}{\hbar}} + e^{\frac{iS}{\hbar}} \nabla^2 b + 2 \nabla e^{\frac{iS}{\hbar}} \cdot \nabla b \right] + V b e^{\frac{iS}{\hbar}}, \quad (113)$$

in cui si è adoperata l'identità $\nabla^2 fg = f \nabla^2 g + g \nabla^2 f + 2 \nabla g \cdot \nabla f$ (dimostralo ciappuuu). Abbiamo che

$$\begin{aligned} 2 \nabla e^{\frac{iS}{\hbar}} \cdot \nabla b &= \frac{2i}{\hbar} e^{\frac{iS}{\hbar}} \nabla S \cdot \nabla b, \\ b \nabla^2 e^{\frac{iS}{\hbar}} &= b \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) e^{\frac{iS}{\hbar}} = \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} b e^{\frac{iS}{\hbar}} |\nabla S|^2 + \frac{i}{\hbar} b e^{\frac{iS}{\hbar}} \nabla^2 S, \end{aligned} \quad (114)$$

avendo notato che

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{\frac{iS}{\hbar}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} e^{\frac{iS}{\hbar}} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{i}{\hbar} e^{\frac{iS}{\hbar}} \frac{\partial S}{\partial x} \right) = -\frac{1}{\hbar^2} e^{\frac{iS}{\hbar}} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \frac{i}{\hbar} e^{\frac{iS}{\hbar}} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}, \quad (115)$$

e che la (115) è analoga per y e z .
In definitiva otteniamo

$$\begin{aligned}
& i\hbar \left[\frac{\partial b}{\partial t} e^{\frac{iS}{\hbar}} + \frac{i}{\hbar} b e^{\frac{iS}{\hbar}} \frac{\partial S}{\partial t} \right] = \\
& = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{\hbar^2} b e^{\frac{iS}{\hbar}} |\nabla S|^2 + \frac{i}{\hbar} b e^{\frac{iS}{\hbar}} \nabla^2 S + e^{\frac{iS}{\hbar}} \nabla^2 b + \frac{2i}{\hbar} e^{\frac{iS}{\hbar}} \nabla S \cdot \nabla b \right] + V b e^{\frac{iS}{\hbar}} \Rightarrow \\
& \left[i\hbar \frac{\partial b}{\partial t} - b \frac{\partial S}{\partial t} \right] = \frac{1}{2m} \left[b |\nabla S|^2 - i\hbar b \nabla^2 S - \hbar^2 \nabla^2 b + 2i\hbar \nabla S \cdot \nabla b \right] + V b.
\end{aligned} \tag{116}$$

Utilizzando il limite (77) si ottiene

$$-b \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} b |\nabla S|^2 + V b \Rightarrow \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2m} + V = 0. \tag{117}$$

La (117) è l'equazione di Hamilton-Jacobi e l'equazione di Schrödinger tende a quest'ultima nel limite classico espresso dalla condizione (77).

3.8 Simmetrie in Meccanica Quantistica

Poichè un sistema quantistico è descritto dall'operatore hamiltoniano, se il sistema è invariante sotto una data trasformazione allora la hamiltoniana del sistema deve commutare, stando al teorema di invarianza, col generatore della trasformazione. In definitiva se il sistema possiede una simmetria deve esistere un operatore con cui la hamiltoniana commuti e se quest'operatore è indipendente dal tempo allora esso è una quantità conservata durante l'evoluzione del sistema ed inoltre è possibile trovare una base che diagonalizzi simultaneamente H e l'operatore in questione. Fondamentale è il fatto che se il gruppo di invarianza (ad esempio le traslazioni o le rotazioni) è non abeliano ossia i suoi generatori non commutano, allora la hamiltoniana ha spettro degenere.

4 Sistemi unidimensionali

Nel capitolo seguente inizieremo lo studio dei sistemi quantistici unidimensionali cominciando dal definire un operatore particolarmente caro a tutta la Fisica Quantistica. Vedremo come risolvere l'equazione di Schrödinger nel caso della particella libera e di alcuni tipi potenziali particolarmente importanti che modellizzano una buona parte dei potenziali esistenti in natura. Per ultimo studieremo l'oscillatore armonico introducendo il metodo algebrico sviluppato prevalentemente da Dirac e Heisenberg.

4.1 L'operatore di parità

Definiamo l'operatore di parità \tilde{P} , come quel operatore che inverte gli assi cartesiani, ossia

$$\begin{aligned}x &\rightarrow -x, \\y &\rightarrow -y, \\z &\rightarrow -z.\end{aligned}\tag{118}$$

In forma polare l'operatore di parità agisce come

$$\begin{aligned}r &\rightarrow -r, \\ \theta &\rightarrow \pi - \theta, \\ \phi &\rightarrow \pi - \phi.\end{aligned}\tag{119}$$

L'operatore di parità esegue, in definitiva, una trasformazione da una terna destrorsa ad una sinistrorsa o vice versa.

Poichè applicare due volte l'operatore di parità equivale a tornare allo stato di partenza si ottiene l'equazione agli autovalori per \tilde{P}^2

$$\tilde{P}\tilde{P}\psi(x, y, z) = \tilde{P}\psi(-x, -y, -z) = \psi(x, y, z) \Rightarrow \tilde{P}^2\psi(x, y, z) = \psi(x, y, z).\tag{120}$$

Dalla (120) otteniamo che l'autovalore di \tilde{P}^2 è 1 e quindi gli autovalori di \tilde{P} sono ± 1 e quindi le sue autofunzioni sono le funzioni pari (con autovalore 1) e le funzioni dispari (con autovalore -1). Dato che gli autovalori di \tilde{P} sono ± 1 , l'operatore di parità è unitario e hermitiano (autovalori reali e determinante in modulo uguale ad 1).

L'operatore di parità è importante perchè se consideriamo un hamiltoniana unidimensionale della forma $H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + V(X)$ in cui il potenziale è simmetrico abbiamo

$$\begin{aligned}\tilde{P}H\psi(x) &= \tilde{P}\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + V(X)\right]\psi(x) = \frac{-\hbar^2}{2m}\psi''(-x) + V(X)\psi(-x), \\ H\tilde{P}\psi(x) &= \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + V(X)\right]\psi(-x) = \frac{-\hbar^2}{2m}\psi''(-x) + V(X)\psi(-x).\end{aligned}\tag{121}$$

Le (121) ci dicono che applicare $\tilde{P}H$ è uguale ad applicare $H\tilde{P}$ quindi la hamiltoniana e l'operatore di parità commutano e pertanto possono essere trovate autofunzioni simultanee; le autofunzioni di H , in questo caso, hanno parità ben definita.

L'operatore di parità è importante anche per sviluppi successivi della teoria quantistica, infatti si pensava che tutte le interazioni conservassero la parità, ossia avvenissero indipendentemente dal fatto che il sistema sia destrorso o sinistrorso. Nel 1956 Wu dimostrò sperimentalmente che le interazioni deboli (responsabili di alcuni decadimenti nucleari) non conservano la parità tramite il famoso esperimento del Cobalto 60. Le interazioni deboli distinguono tra sistemi destrorsi o sinistrorsi.

4.2 Studio qualitativo delle soluzioni unidimensionali dell'equazione di Schrödinger

Consideriamo l'equazione di Schrödinger nella seguente forma

$$\psi''(x) + \left(\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(X)) \right) \psi(x) = 0. \quad (122)$$

Ogni soluzione della (122) deve essere continua e con derivata prima continua (a meno di potenziali particolarmente patologici come ad esempio un potenziale a delta di Dirac).

Definiamo stato legato un qualunque stato quantistico la cui funzione d'onda soddisfi la seguente richiesta

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0, \quad (123)$$

ossia che la particella abbia probabilità nulla di essere trovata all'infinito, quindi è confinata in una regione di spazio finita, è legata. Le funzioni d'onda non soddisfacenti la (123) sono detti stati di diffusione e fanno parte della teoria dello scattering delle particelle.

Il potenziale che compare nella (122) avrà una determinata forma ed avrà un valore minimo e dei valori estremali (valori calcolati nella posizione $\pm\infty$) ed a seconda del valore di E (ossia degli autovalori del sistema) rispetto al potenziale possiamo capire quali stati sono legati e quali non lo sono. Se E fosse maggiore dei valori estremali del potenziale allora dalla (122) si avrebbe un'equazione del tipo

$$\psi''(x) + a\psi(x) = 0, \quad (124)$$

in cui $a > 0$; la (124) ammette soluzioni oscillanti che non soddisfano la richiesta (123). Se il potenziale fosse invece minore del valore minimo del potenziale, V_{min} , allora avremmo un'equazione del tipo

$$\psi''(x) + b\psi(x) = 0, \quad (125)$$

con $b < 0$ e quindi potremmo scrivere

$$\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} = -b. \quad (126)$$

Se la funzione $\psi(x)$ fosse positiva allora, stando alla (126), anche la sua derivata seconda lo sarebbe e quindi sarebbe una funzione convessa che in una delle due semirette divergerebbe (analogo risultato se invece $\psi(x)$ fosse negativa).

In definitiva abbiamo ottenuto i seguenti risultati:

- $E < V(\pm\infty) \Rightarrow$ stato legato
- $E > V_{min} \Rightarrow$ stato legato
- $E > V(\pm\infty) \Rightarrow$ stato di diffusione
- $E < V_{min} \Rightarrow$ stato di diffusione

Il valore di energia più basso per un sistema legato è detto energia di punto zero e la sua autofunzione, autofunzione di punto zero.

Le soluzioni che soddisfano la (123) possiedono uno spettro discreto, ed inoltre hanno la proprietà di non essere degeneri. Consideriamo due autofunzioni indipendenti tale che valga

$$\frac{\psi_1''(x)}{\psi_1(x)} = \frac{\psi_2''(x)}{\psi_2(x)} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(X)). \quad (127)$$

Il wronskjano delle soluzioni è allora $W(x) = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x)$, la cui derivata rispetto al tempo risulta essere

$$\begin{aligned} \frac{dW(x)}{dt} &= \psi_1'(x)\psi_2'(x) + \psi_1(x)\psi_2''(x) - \psi_2'(x)\psi_1'(x) + \psi_2(x)\psi_1''(x) = \\ &= \psi_1(x)\psi_2''(x) - \psi_2(x)\psi_1''(x) = \psi_1(x)\psi_2(x) \left(-\frac{\psi_1''(x)}{\psi_1(x)} + \frac{\psi_2''(x)}{\psi_2(x)} \right) = 0, \end{aligned} \quad (128)$$

il wronskjano è quindi costante nel tempo. Poichè il wronskjano calcolato a $x = \pm\infty$ è nullo allora, in virtù della (128), è nullo sempre;

$$\psi_1(x)\psi_2'(x) = \psi_2(x)\psi_1'(x) \Rightarrow \frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)} = \frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)} \Rightarrow \log(\psi_2) = \log(k\psi_1) \Rightarrow \psi_2(x) = k\psi_1(x), \quad (129)$$

in cui si è integrata l'equazione derivante dal wronskjano. La (129) è contro l'ipotesi che le due autofunzioni fossero indipendenti. La dimostrazione che una funzione di uno stato legato abbia spettro discreto è reperibile sui testi di analisi funzionale o di teoria degli operatori.

4.3 La particella libera

La particella libera non è soggetta a nessun potenziale per cui la sua hamiltoniana assume la forma

$$H = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (130)$$

ovviamente la particella libera non ammette stati legati.

La soluzione del problema è resa più semplice dal fatto che la Hamiltoniana commuta con l'operatore impulso, (H è funzione solo di P) per cui gli autostati dell'impulso sono anche autostati della hamiltoniana

$$\psi_{E,p}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \quad (131)$$

e gli autovalori si ottengono da

$$H\psi_{E,p}(x) = E\psi_{E,p}(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} = \frac{p^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}, \quad (132)$$

e quindi $E_P = \frac{p^2}{2m}$

Accenniamo solo che se la funzione d'onda nello spazio dell'impulso è una gaussiana allora l'evoluzione temporale della funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate è ancora una gaussiana ma la sua varianza risulta dipendente dal tempo

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar^2}{4\bar{p}^2} + \frac{\bar{p}^2}{m^2} t^2, \quad (133)$$

in cui \bar{p} è la media della funzione d'onda gaussiana nella rappresentazione dell'impulso. La (133) ci dice che la distribuzione di probabilità della coordinata della particella tende ad appiattirsi, quindi la particella tende a scappare all'infinito e la perdiamo di vista.

4.4 Potenziali costanti a tratti

Ci occupiamo ora di studiare alcuni sistemi quantistici con potenziali costanti a tratti. In generale in questi casi si deve risolvere l'equazione di Schrödinger in tutti gli intervalli dove il potenziale è costante e poi fare il bricolage con le soluzioni ottenute: si devono imporre la continuità della funzione e della derivata prima imponendo l'uguaglianza della funzione e della derivata prima nei punti in cui il potenziale è discontinuo.

4.4.1 La buca di potenziale finita ed infinita

I primi casi di cui ci occuperemo sono la buca infinita e quella finita. Cominciamo dal caso della buca a pareti infinite

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{se } x \notin [0, L] \\ 0 & \text{se } x \in [0, L] \end{cases} \quad (134)$$

il sistema ammette stati legati per tutte le energie $V_{min} < E < V(x = \pm\infty)$ e quindi per tutte le energie comprese tra 0 e ∞ . Per determinare lo spettro della particella confinata dobbiamo risolvere l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo associata al potenziale (134). Nella regione compresa tra 0 ed L abbiamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi, \quad (135)$$

in cui $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; per $x \notin (0, L)$ il potenziale infinito implica che la funzione d'onda deve annullarsi fuori dalla buca.

La soluzione della (135) è data da

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx). \quad (136)$$

Imponendo le condizioni al contorno (che ψ si annulli in 0 ed in L) si ottiene che

$$\psi(0) = 0 = A \Rightarrow A = 0 \quad (137)$$

e

$$\psi(L) = B \operatorname{sen}(kL) = 0 \Rightarrow k = \frac{n\pi}{L}, \quad (138)$$

in cui $n \in \mathcal{N} - \{0\}$ ed $A = 0$ per via della (137).

La funzione d'onda è quindi data da

$$\psi_n(x) = B \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad (139)$$

la costante B deve essere determinata imponendo la normalizzazione degli stati

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |B|^2 \int_0^L \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = \frac{L}{2} \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{L}}, \quad (140)$$

quindi

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad (141)$$

Eguagliando l'espressione per k^2 data dalla (138) con la sua definizione, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, otteniamo gli autovalori del sistema

$$\frac{n^2\pi^2}{L^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}. \quad (142)$$

Se la buca fosse simmetrica rispetto all'origine, ossia

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{se } x \notin \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right] \\ 0 & \text{se } x \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right] \end{cases}, \quad (143)$$

in virtù di quanto discusso nel paragrafo sull'operatore di parità le autofunzioni possono essere trovate tali da diagonalizzare simultaneamente \tilde{P} e H quindi

$$\begin{aligned} \psi_{2n}(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen}\left(\frac{2n\pi}{L}x\right) \Rightarrow E_{2n} = \frac{\hbar^2 (2n)^2 \pi^2}{2mL^2}, \\ \psi_{2n+1}(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen}\left(\frac{(2n+1)\pi}{L}x\right) \Rightarrow E_{2n+1} = \frac{\hbar^2 (2n+1)^2 \pi^2}{2mL^2}, \end{aligned} \quad (144)$$

che sono rispettivamente funzioni pari e dispari (con i rispettivi autovalori). Le funzioni (141) sono ancora autofunzioni della hamiltoniana ma non lo sono dell'operatore di parità.

Il caso della buca finita è più delicato in quanto tale sistema non ammette soluzioni per gli autovalori degli stati legati in forma chiusa. Il potenziale in questo caso è

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } x \notin \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right] \\ 0 & \text{se } x \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right] \end{cases}, \quad (145)$$

il sistema possiede stati legati per $E \in [0, V_0]$. Le equazioni di Schrödinger nelle tre regioni sono

$$\begin{aligned}
 \text{regione I} &\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} = (E - V_0)\psi_1 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} = K^2 \psi_1 \\
 \text{regione II} &\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} = E\psi_2 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} = -k^2 \psi_2 \\
 \text{regione III} &\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial x^2} = (E - V_0)\psi_3 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial x^2} = K^2 \psi_3,
 \end{aligned} \tag{146}$$

in cui si è posto $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e $K = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$; nella regione centrale la soluzione è oscillante mentre nelle altre regioni decresce esponenzialmente (la soluzione avrebbe anche dei termini che crescono esponenzialmente, ma le costanti davanti vengono poste uguali a zero perchè cerchiamo stati legati e quindi funzioni rispettanti la (123)). Questo vuol dire che la particella ha probabilità non nulla di trovarsi oltre le pareti della buca, ma questa probabilità decade esponenzialmente (come mostrato in Figura 6 nel caso di una buca a forma di parabola).

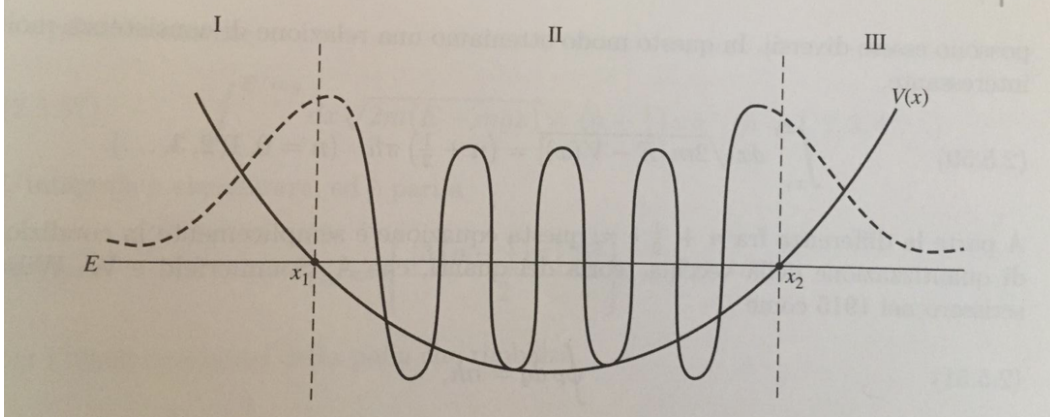


Figura 6: Andamento della funzione d'onda nel caso di una generica buca di potenziale (che deve essere studiata con metodi approssimativi); nel caso della buca (145) gli andamenti esponenziali sono più pronunciati.

Imponendo la continuità della soluzione totale e della sua derivata prima nei punti di discontinuità del potenziale si ottiene un sistema omogeneo da cui ricavare le costanti di integrazione non nulle; data l'omogeneità del sistema per avere soluzioni non banali dobbiamo porre il determinante della matrice dei coefficienti uguale a zero. Tale determinante conduce ad un'equazione che risolta fornisce gli autovalori del sistema, ma in generale questa equazione non è risolvibile in forma chiusa. Possiamo però dare un criterio per capire quante soluzioni ha l'equazione da cui determinare gli autovalori

$$(n-1)^2 < \frac{2mL^2V_0}{\pi^2\hbar^2} \leq n^2, \tag{147}$$

con $n \in \mathcal{N}$; se il potenziale soddisfa la (147) con un dato n allora esistono n autovalori energetici.

4.4.2 Il gradino e la barriera di potenziale

Vediamo ora il caso di due importanti tipi di potenziale che pur non ammettendo stati legati sono molto utili per modellare alcuni andamenti di potenziali reali (ad esempio coulombiano). Cominciamo col trattare il caso della barriera di potenziale

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0 & \text{se } x \in [0, L] \\ 0 & \text{se } x \notin [0, L] \end{cases}, \quad (148)$$

evidentemente il sistema non ammette stati legati in quanto E non può essere contemporaneamente maggiore e minore di zero.

In questo caso quindi non ci interessano gli autiovalori (che formano uno spettro continuo di energie dato che abbiamo solo stati di diffusione) ma i coefficienti di trasmissione e riflessione definiti come

$$\begin{aligned} T &= \frac{J^+(x > L)}{J^-(x < 0)}, \\ R &= \frac{J^-(x < 0)}{J^-(x < 0)}, \end{aligned} \quad (149)$$

in cui J^+ e J^- indicano le densità di corrente di densità di probabilità (nella casistica (105)) delle particelle che si muovono rispettivamente verso destra e verso sinistra (quelle che vanno avanti e quelle che vanno indietro) e vanno calcolate a partire dalle funzioni d'onda nelle regioni indicate dagli argomenti delle J . Ovviamente in caso di non assorbimento si deve avere $1 = T + R$.

A questo punto è necessario separare lo studio in due casi: le energie comprese tra 0 ed il massimo del potenziale e le energie maggiori del massimo del potenziale. Iniziamo con il caso $E \in [0, V_0]$ facendoci i soliti conti nel caso di potenziali costanti a tratti e calcolando le densità di corrente di densità di probabilità richieste si ottiene

$$\begin{aligned} T &= \frac{4}{4\cosh^2(KL) + \left(\beta - \frac{1}{\beta}\right)^2 \sinh^2(KL)}, \\ R &= \frac{\left(\beta + \frac{1}{\beta}\right)^2 \sinh^2(KL)}{4\cosh^2(KL) + \left(\beta - \frac{1}{\beta}\right)^2 \sinh^2(KL)}, \end{aligned} \quad (150)$$

in cui si è posto $\beta = \frac{K}{k}$, $K = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ e $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Il fatto che il coefficiente di trasmissione sia non nullo ci induce a pensare che i vincoli energetici della Meccanica Classica non siano sempre rispettati in Meccanica Quantistica. La particella pur avendo energia minore della barriera la ha una probabilità non nulla di attraversarla, tale fenomeno è detto effetto tunnel ed è alla base, tra le altre cose, del funzionamento delle stelle. Nelle stelle, ammassi gassosi creatosi per effetto dell'interazione gravitazionale sotto specifiche condizioni (il criterio di Jeans), della sequenza principale del diagramma HR vengono fusi assieme nuclei di idrogeno. I protoni più vengono avvicinati più risentono della repulsione coulombiana fino a quando sono tanto vicini da risentire della forza forte, schematizzabile come una buca di

potenziale. Secondo la statistica classica la probabilità che un protone abbia energia sufficiente per superare la barriera coulombiana è dell'ordine di 10^{-240} , praticamente impossibile eppure le stesse esistono. La soluzione sta nell'effetto tunnel, i protoni pur non avendo energia sufficiente superano la barriera e considerando il tunneling la probabilità che un protone superi la barriera è dell'ordine 10^{-20} che pur essendo piccola è sufficiente (data la moltitudine di protoni nelle stelle).

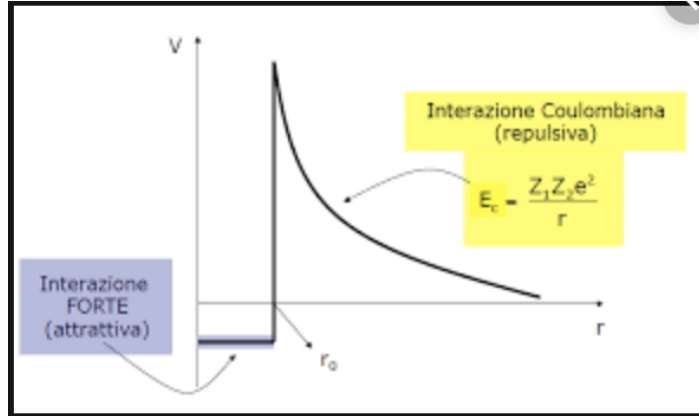


Figura 7: Schematizzazione del potenziale a cui sono soggetti i protoni nelle stelle, è necessario l'effetto tunnel per poter spiegare la fusione termonucleare stellare.

Il caso con energia maggiore di V_0 non sarà trattato in quanto il procedimento è del tutto analogo al caso già presentato.

Nel limite in cui la lunghezza L della barriera tenda all'infinito si ottiene il gradino di potenziale

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0 & \text{se } x \in [0, \infty] \\ 0 & \text{se } x < 0 \end{cases} . \quad (151)$$

In questo limite, nel caso di energie comprese tra 0 ed il massimo del potenziale, i coefficienti (150) tendono a

$$\begin{aligned} T &\rightarrow 0, \\ R &\rightarrow 1. \end{aligned} \quad (152)$$

Tutte le particelle colpiscono il gradino e tornano indietro.

Nel caso di energie maggiori di V_0 i coefficienti per il gradino sono

$$\begin{aligned} T &= \frac{(1 - \beta)^2}{(1 + \beta)^2}, \\ R &= \frac{4\beta}{(1 + \beta)^2}. \end{aligned} \quad (153)$$

Le (153) ci fanno capire che le particelle pur avendo energia maggiore del gradino hanno probabilità non nulla di essere riflesse.

Quanto visto in questo paragrafo sottolinea la differenza tra teoria quantistica e classica; gli effetti come il tunneling non presuppongono una non conservazione dell'energia in senso assoluto bensì sono legati al principio di indeterminazione di Heisenberg per l'energia ed il tempo $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$. Questa forma del principio di indeterminazione, la cui derivazione è dovuta alla teoria relativistica della meccanica quantistica, è sorprendente dato che in Meccanica Quantistica non Relativistica il tempo non viene trattato come un operatore. Il principio di Heisenberg in questo caso ci dice che è possibile violare la conservazione dell'energia di una certa quantità per un tempo che è inversamente proporzionale a questa quantità.

4.5 Moto in campo uniforme conservativo e potenziale lineare

Consideriamo il caso del moto in un campo uniforme conservativo $F = \nabla V(x)$; il potenziale potrà essere scritto come

$$V(x) = Fx, \quad (154)$$

in cui $x \in [0, \infty)$. Un potenziale più generale che comprende il potenziale (154) è il potenziale lineare

$$V(x) = F|x|. \quad (155)$$

Il potenziale (155) è simmetrico ($V(-x) = V(x)$) per cui possiamo studiarlo solo nella regione a x positivi. Per quanto detto nel paragrafo 4.1, le soluzioni dovranno essere funzioni pari e dispari. L'equazione di Schrödinger è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (Fx - E)\psi = 0, \quad (156)$$

Definiamo due parametri adimensionali che definiscono le scale di energia e lunghezza del sistema in esame

$$y = \frac{x}{x_0} = \frac{x(mF)^{\frac{1}{3}}}{\hbar^{\frac{2}{3}}}, \quad (157)$$

$$\epsilon = \frac{E}{E_0} = \frac{E}{Fx_0} = \frac{Em^{\frac{1}{3}}}{(\hbar F)^{\frac{2}{3}}}.$$

Notiamo che $\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{1}{x_0^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2}$. Inserendo le (157) nella (156) si ha

$$-\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} \frac{\partial^2 \psi_a}{\partial y^2} + (Fx_0 y - E_0 \epsilon)\psi_a = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - 2(y - \epsilon)\psi = 0. \quad (158)$$

Cambiando nuovamente variabile, $z = 2^{\frac{1}{3}}(y - \epsilon)$, si ha $\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} = 2^{\frac{2}{3}} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ e quindi la (158) diventa

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - z\psi = 0. \quad (159)$$

La (159) è l'equazione di Airy e la sua soluzione è una combinazione lineare delle funzioni di Airy $Ai(z)$ e $Bi(z)$ (discusse brevemente in appendice).

Notiamo che il sistema possiede stati legati (energie tra 0 ed ∞), per questi stati bisogna porre il coefficiente davanti a $Bi(z)$ nullo poichè tale funzione non soddisfa il limite (123). Dato che deve essere

$$\psi(-x) = \pm \psi(x) \quad (160)$$

si deve avere che

$$\begin{aligned}\psi(0) &= 0, \\ \psi'(0) &= 0.\end{aligned}\tag{161}$$

Per $x = 0$ si ha $y = 0$ e quindi $z = -2^{\frac{1}{3}}\epsilon$, da cui

$$\begin{aligned}Ai(z) &= 0 \Rightarrow \textit{dispari}, \\ Ai'(z) &= 0 \Rightarrow \textit{pari}.\end{aligned}\tag{162}$$

Le (162) restituiscono gli autovalori del sistema come gli zeri della funzione di Airy e della sua derivata, rispettivamente nel caso dispari e pari, infatti trovati gli z per cui ho uno zero determino ϵ e quindi E . Tornando al caso (154) essendo il potenziale finito solo per $x \geq 0$ sono ammesse solo le soluzioni dispari; la funzione d'onda deve annullarsi in $x = 0$ e quindi si ha solo la soluzione $Ai(z) = 0$.

Un' interessante applicazione di quanto visto è "la palla che rimbalza", un potenziale per questo sistema è il (154); interpretiamo x come l'altezza da suolo e $F = mg$ con g accelerazione di gravità. Questo caso è uno dei rari in cui la Meccanica Quantistica si manifesta su scala "macroscopica", il trucco è quello di avere una "palla" con massa molto piccola, ad esempio un neutrone. Facendo cadere un neutrone questo avrà solo alcune altezze possibili alle quali rimbalzare, date da

$$E = mgx \Rightarrow \frac{E}{E_0} = \frac{mgx}{E_0} \Rightarrow \epsilon = \frac{x}{x_0} \Rightarrow x = x_0\epsilon.\tag{163}$$

Tale fenomeno è stato osservato a Grenoble, in Francia.

4.6 L'oscillatore armonico

L'oscillatore armonico è uno dei sistemi più importanti della fisica, poichè molti fenomeni possono essere ricondotti all'oscillatore ed inoltre quanto che verrà presentato in questo capitolo è molto utile anche per sviluppi successivi come la quantizzazione del campo elettromagnetico che passa proprio per il formalismo dell'oscillatore armonico.

La hamiltoniana del sistema è

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2.\tag{164}$$

Invece di risolvere il problema differenziale, svilupperemo il metodo algebrico.

Definiamo due operatori: l'operatore di creazione, a^\dagger , e di distruzione, a

$$\begin{aligned}a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(X + \frac{iP}{m\omega} \right), \\ a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(X - \frac{iP}{m\omega} \right).\end{aligned}\tag{165}$$

Notiamo che gli operatori appena definiti non sono hermitiani ma che l'operatore $a^\dagger a$ lo è

$$(a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger a\tag{166}$$

e lo chiamiamo operatore numero, $N = a^\dagger a$. La hamiltoniana può essere riscritta come $H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$ infatti

$$\begin{aligned}
\hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) &= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\frac{m\omega}{2\hbar}\left(X - \frac{iP}{m\omega}\right)\left(X + \frac{iP}{m\omega}\right) + \frac{1}{2}\hbar\omega = \\
&= \frac{m\omega^2}{2}\left(X^2 + \frac{iXP}{m\omega} - \frac{iPX}{m\omega} + \frac{P^2}{m^2\omega^2}\right) + \frac{1}{2}\hbar\omega = \\
&= \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \frac{P^2}{2m} + \frac{i\omega}{2}[X, P] + \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \frac{P^2}{2m} - \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega = \\
&= \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \frac{P^2}{2m} + \frac{i\omega}{2}[X, P] + \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \frac{P^2}{2m}.
\end{aligned} \tag{167}$$

Le autofunzioni di N sono anche autofunzioni di H e gli autovalori energetici sono gli autovalori di N traslati e moltiplicati per una costante.

Calcoliamo preventivamente il commutatore $[a, a^\dagger]$, poichè ci sarà utile molte volte

$$\begin{aligned}
[a, a^\dagger] &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left[X + \frac{iP}{m\omega}, X - \frac{iP}{m\omega}\right] = \\
&= \frac{m\omega}{2\hbar}\left([X, X] - \left[X, \frac{iP}{m\omega}\right] + \left[\frac{iP}{m\omega}, X\right] - \left[\frac{iP}{m\omega}, \frac{iP}{m\omega}\right]\right) = \\
&= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(-\frac{i}{m\omega}[X, P] + \frac{i}{m\omega}[P, X]\right) = -\frac{i}{2\hbar}[X, P] = 1 \Rightarrow aa^\dagger - a^\dagger a = 1,
\end{aligned} \tag{168}$$

in cui si è sfruttata l'antisimmetria del commutatore e il commutatore fondamentale (54).

Gli operatori (165) fungono da operatori a abbassamento ed innalzamento: calcoliamo i commutatori seguenti

$$\begin{aligned}
[N, a] &= [a^\dagger a, a] = a^\dagger aa - aa^\dagger a = a^\dagger aa - (1 + a^\dagger a)a = -a \\
&\Rightarrow Na - aN = -a \Rightarrow Na = a(N - 1), \\
[N, a^\dagger] &= [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger aa^\dagger - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger(1 + a^\dagger a) - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger \\
&\Rightarrow Na^\dagger - a^\dagger N = a^\dagger \Rightarrow Na^\dagger = a^\dagger(N + 1),
\end{aligned} \tag{169}$$

in cui si è utilizzato il commutatore (168) nella forma $aa^\dagger = 1 + a^\dagger a$. Consideriamo i ket $a^\dagger|n\rangle$ e $a|n\rangle$ ed appliciamoci l'operatore numero, ricordando le (169)

$$\begin{aligned}
N(a^\dagger|n\rangle) &= a^\dagger(N + 1)|n\rangle = a^\dagger(n + 1)|n\rangle = (n + 1)(a^\dagger|n\rangle), \\
N(a|n\rangle) &= a(N - 1)|n\rangle = a(n - 1)|n\rangle = (n - 1)(a|n\rangle),
\end{aligned} \tag{170}$$

Le (170) ci dicono che i vettori $a^\dagger|n\rangle$ e $a|n\rangle$ sono autostati di N con autovalore rispettivamente $n + 1$ e $n - 1$, quindi gli operatori di creazione e distruzione agiscono sugli autostati di N come

$$\begin{aligned}
a^\dagger|n\rangle &= c_+|n + 1\rangle \Rightarrow \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|n\rangle + \langle n|a^\dagger a|n\rangle = 1 + n = |c_+|^2 \\
&\Rightarrow c_+ = \sqrt{n + 1} \Rightarrow a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n + 1}|n + 1\rangle, \\
a|n\rangle &= c_-|n - 1\rangle \Rightarrow \langle n|a^\dagger a|n\rangle = |c_-|^2 \\
&c_- = \sqrt{n} \Rightarrow a|n\rangle = \sqrt{n}|n - 1\rangle.
\end{aligned} \tag{171}$$

Mostriamo ora che l'operatore numero ha tutti autovalori positivi; consideriamo l'equazione agli autovalori per N

$$N|n\rangle = n|n\rangle \Rightarrow \langle n|N|n\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = |a|n\rangle|^2 = n \quad (172)$$

essendo il modulo quadro positivo si ha che tutti gli n devono essere positivi; inoltre sono superiormente illimitati, se esistesse uno stato su cui l'operatore di creazione restituisse zero si arriverebbe ad un risultato assurdo

$$a^\dagger|n_{max}\rangle = 0 \Rightarrow \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|n\rangle + \langle n|N|n\rangle = 1 + \langle N\rangle = 0 \Rightarrow \langle N\rangle = -1, \quad (173)$$

che è assurdo dato che il valor medio non può essere negativo se tutti gli autovalori sono positivi. Gli autovalori di N sono quindi tutti i numeri naturali e pertanto gli autovalori di H sono

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (174)$$

Le autofunzioni possono essere ottenute tramite l'azione degli operatori di creazione e distruzione, se applichiamo a allo stato di vuoto otteniamo

$$a|0\rangle = 0 \Rightarrow \langle x|a|0\rangle = 0. \quad (175)$$

Esplicitando l'operatore a si ottiene una equazione differenziale del primo ordine in $\langle x|0\rangle$ che è la funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate, $\psi_0(x)$. Una volta determinata $\psi_0(x)$ si possono determinare tutte le altre autofunzioni $\psi_n(x)$ applicando l'operatore di creazione alla funzione $\psi_{n-1}(x)$

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \langle x|a^\dagger|n-1\rangle. \quad (176)$$

Le autofunzioni dell'oscillatore armonico sono date da

$$\psi_n(\xi) = \frac{(m\omega)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}(\pi\hbar)^{\frac{1}{4}}}\mathcal{H}_n(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (177)$$

in cui $\mathcal{H}_n(\xi)$ è il polinomio di Hermite di grado n -esimo e come nel caso precedente si definisce una scala di lunghezza caratteristica del sistema, $\xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$; per passare da $\psi(\xi)$ a $\psi(x)$ basta sostituire la definizione di ξ . Le autofunzioni (177) hanno la parità dei polinomi di Hermite e quindi la parità di n . Nella notazione di Dirac gli autoket di H possono essere scitti come $|n\rangle$, ossia gli stessi di N .

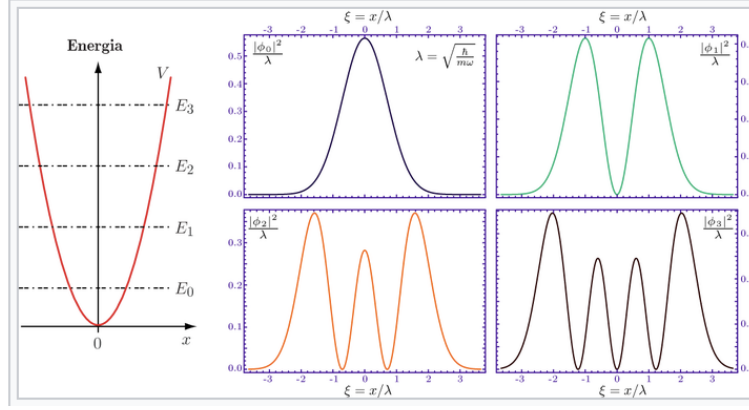


Figura 8: Energia e andamento dei primi quattro moduli quadri delle autofunzioni dell'oscillatore armonico unidimensionale, si definisce $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

4.6.1 Gli stati coerenti

Si definisce stato coerente $|C\rangle$ un autostato del operatore a ; scriviamolo come sovrapposizione degli autostati della hamiltoniana

$$|C\rangle = \sum_n c_n |n\rangle. \quad (178)$$

L'equazione agli autovalori per a , alla luce della (178), si scrive

$$a \sum_n c_n |n\rangle = C \sum_n c_n |n\rangle, \quad (179)$$

in cui C in generale è complesso. Dato che conosciamo l'azione dell'operatore a sugli autostati di H , abbiamo

$$\begin{aligned} \sum_n c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = C \sum_n c_n |n\rangle \Rightarrow \sum_n c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle = C \sum_n c_n |n\rangle \Rightarrow \\ \sum_n (c_{n+1} \sqrt{n+1} - C c_n) |n\rangle = 0, \end{aligned} \quad (180)$$

la (180) implica che

$$c_{n+1} \sqrt{n+1} - C c_n = 0 \Rightarrow c_{n+1} = \frac{C c_n}{\sqrt{n+1}}. \quad (181)$$

La (181) ha come soluzione

$$c_n = \frac{C^n}{\sqrt{n!}}; \quad (182)$$

per cui lo stato coerente diventa

$$|C\rangle = A \sum_n \frac{C^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (183)$$

in cui A è una costante di normalizzazione che può essere determinata imponendo che $\langle C|C \rangle = 1$

$$1 = |A|^2 \sum_n \frac{|C|^{2n}}{n!} \Rightarrow A = e^{-\frac{|C|^2}{2}}. \quad (184)$$

In definitiva

$$|C \rangle = e^{-\frac{|C|^2}{2}} \sum_n \frac{C^n}{\sqrt{n!}} |n \rangle. \quad (185)$$

La probabilità di ottenere un certo autovalore energetico è il modulo quadro del coefficiente n -esimo

$$P(E_n) = e^{-|C|^2} \frac{|C|^{2n}}{n!} \quad (186)$$

che è una poissoniana; il valor medio della hamiltoniana si può calcolare considerando che

$$\langle H \rangle = \hbar\omega \left(\langle N \rangle + \frac{1}{2} \right), \quad (187)$$

ed il valor medio di N è il valor medio di una poissoniana

$$\langle N \rangle = \sum_n n P(n) = \sum_n n e^{-|C|^2} \frac{|C|^{2n}}{n!} = |C|^2, \quad (188)$$

e quindi

$$\langle H \rangle = \hbar\omega \left(|C|^2 + \frac{1}{2} \right). \quad (189)$$

4.6.2 L'oscillatore asimmetrico

Nel caso in cui il potenziale sia della forma $\frac{1}{2}m\omega^2 X^2$ solo in una delle due semirette ed infinito nell'altra, la funzione d'onda del sistema deve annullarsi in zero. Le funzioni d'onda dell'oscillatore sono della forma (177) e possiedono una parità (ossia una simmetria) ben definita e le uniche che rispettano la richiesta di annullarsi sicuramente in zero sono quelle dispari; quindi il sistema in esame segue la medesima trattazione dell'oscillatore armonico ma le sue autofunzioni sono solo quelle con indice n dispari. Stessa cosa per gli autovalori, esistono solo quelli con n dispari.

5 Teoria del momento angolare

La teoria del momento angolare è una parte fondamentale della teoria quantistica, già nel 1913 Niels Bohr aveva capito che il momento angolare doveva essere quantizzato per rendere stabili gli atomi. Lo studio del momento angolare avviene tramite due metodi, quello algebrico e quello differenziale che portano a risultati differenti e l'unico modo per conciliarli è di ammettere l'esistenza del momento angolare intrinseco o di spin, che non possiede analogo classico.

Il momento angolare è definito classicamente come

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow L_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k, \quad (190)$$

in cui $L_1 = L_x, L_2 = L_y, L_3 = L_z$ ed in cui ϵ_{ijk} è il tensore di Tullio Levi-Civita (o tensore completamente antisimmetrico)

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{se } ijk \text{ permutazione pari di } 123 \\ -1 & \text{se } ijk \text{ permutazione dispari di } 123 \\ 0 & \text{se } ijk \text{ diverso da permutazione di } 123 \end{cases} . \quad (191)$$

Come il momento angolare classico è un vettore, l'operatore di momento angolare è, ovviamente, un operatore vettoriale.

5.1 Metodo algebrico

Il metodo algebrico parte dallo studio delle regole di commutazione del momento angolare, abbiamo

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \quad (192)$$

La dimostrazione, che passa per la sostituzione delle componenti di \vec{L} e per le proprietà del commutatore, è lunga, noiosa e non insegna nulla. (prova a farla ciappuuu, insegna a giocare con i commutatori). La (192) è la regola di commutazione di qualunque operatore vettoriale con il momento angolare.

Definiamo l'operatore di momento angolare quadro

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2. \quad (193)$$

Questo operatore commuta con tutte le componenti del momento angolare

$$[L^2, L_i] = 0, \quad (194)$$

infatti si ha, ad esempio per L_1

$$\begin{aligned} &= [L_1^2, L_1] + [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] = L_2[L_2, L_1] + [L_2, L_1]L_2 + L_3[L_3, L_1] + [L_3, L_1]L_3 = \\ &= L_2(i\hbar\epsilon_{213}L_3) + L_3(i\hbar\epsilon_{312}L_2) + (i\hbar\epsilon_{213}L_3)L_2 + (i\hbar\epsilon_{312}L_2)L_3 = 0, \end{aligned} \quad (195)$$

dato che $\epsilon_{213} = 1$ e $\epsilon_{312} = -1$.

Il commutatore (194) ci permette di trovare una base comune per L^2 ed una delle sue componenti, per convenzione si sceglie $L_3 = L_z$ e quindi l'asse z è detto asse di quantizzazione. Prima di procedere definiamo gli operatori di momento angolare adimensionali

$$K^2 = \frac{L^2}{\hbar^2}, \quad K_i = \frac{L_i}{\hbar}, \quad (196)$$

ovviamente il momento angolare adimensionale segue la stessa algebra del momento angolare (e quindi le stesse regole di commutazione ma adimensionali).

Immaginiamo di avere una base comune, $|\lambda, m\rangle$, per L^2 e L_z e per K^2 e K_z , le loro equazioni agli autovalori sono

$$\begin{aligned} L^2|\lambda, m\rangle &= \hbar^2\lambda|\lambda, m\rangle \Rightarrow K^2|\lambda, m\rangle = \lambda|\lambda, m\rangle, \\ L_z|\lambda, m\rangle &= \hbar m|\lambda, m\rangle \Rightarrow K_z|\lambda, m\rangle = m|\lambda, m\rangle, \end{aligned} \quad (197)$$

l'autovalore della componente lungo l'asse di quantizzazione, L_z , è spesso scritto anche come l_z , $m \equiv l_z$. Definiamo due nuovi operatori non hermitiani

$$K_{\pm} = K_1 \pm iK_2, \quad (198)$$

e ne calcoliamo i commutatori con K^2 e K_3 :

$$\begin{aligned} [K^2, K_+] &= [K^2, K_1 + iK_2] = 0, \\ [K^2, K_-] &= [K^2, K_1 - iK_2] = 0, \\ [K_3, K_+] &= [K_3, K_1 + iK_2] = [K_3, K_1] + i[K_3, K_2] = iK_2 + K_1 = K_+, \\ [K_3, K_-] &= [K_3, K_1 - iK_2] = [K_3, K_1] - i[K_3, K_2] = iK_2 - K_1 = -K_-. \end{aligned} \quad (199)$$

Grazie alle (199) possiamo scrivere

$$\begin{aligned} K^2(K_{\pm}|\lambda, m\rangle) &= K_{\pm}K^2|\lambda, m\rangle = \lambda K_{\pm}|\lambda, m\rangle, \\ K_3(K_+|\lambda, m\rangle) &= (K_+K_3 + K_+)|\lambda, m\rangle = (mK_+ + K_+)|\lambda, m\rangle = (m+1)K_+|\lambda, m\rangle, \\ K_3(K_-|\lambda, m\rangle) &= (K_-K_3 - K_-)|\lambda, m\rangle = (mK_- - K_-)|\lambda, m\rangle = (m-1)K_-|\lambda, m\rangle, \end{aligned} \quad (200)$$

ossia il vettore $K_{\pm}|\lambda, m\rangle$ è ancora autostato di K^2 con stesso autovalore ed ancora autostato di K_3 con autovalore rispettivamente $(m+1)$ e $(m-1)$; gli operatori K_{\pm} sono operatori di abbassamento per K_3 .

Calcoliamo gli operatori K_+K_- e K_-K_+ che ci saranno molto utili successivamente

$$\begin{aligned} K_+K_- &= (K_1 + iK_2)(K_1 - iK_2) = K_1^2 - iK_1K_2 + iK_2K_1 + K_2^2 = \\ &= K^2 - K_3^2 + i(K_2K_1 - K_1K_2) = K^2 - K_3^2 + i[K_2, K_1] = K^2 - K_3^2 + K_3, \\ K_-K_+ &= (K_1 - iK_2)(K_1 + iK_2) = K_1^2 + iK_1K_2 - iK_2K_1 + K_2^2 = \\ &= K^2 - K_3^2 - i(K_2K_1 - K_1K_2) = K^2 - K_3^2 - i[K_2, K_1] = K^2 - K_3^2 - K_3, \end{aligned} \quad (201)$$

infatti dalle (201) possiamo scrivere

$$\begin{aligned} |K_-|\lambda, m\rangle|^2 &= \langle \lambda, m|K_+K_-|\lambda, m\rangle = \langle \lambda, m|K^2 - K_3^2 + K_3|\lambda, m\rangle \\ &\Rightarrow \lambda - m^2 + m \geq 0, \\ |K_+|\lambda, m\rangle|^2 &= \langle \lambda, m|K_-K_+|\lambda, m\rangle = \langle \lambda, m|K^2 - K_3^2 - K_3|\lambda, m\rangle \\ &\Rightarrow \lambda - m^2 - m \geq 0. \end{aligned} \quad (202)$$

Le (202), fissato un λ , implicano che deve esistere un m minimo, m_{min} , e un m massimo, m_{max} ; combinando le due equazioni (202) ed eliminando il parametro si ottiene un'equazione di secondo grado la cui unica soluzione accettabile è

$$m_{max} = -m_{min}. \quad (203)$$

Ponendo $m_{max} = l$ si ha che l'intervallo $[m_{min}, m_{max}] = [-l, l]$ ha misura $2l$ che deve essere intera dato che tutti gli m si ottengono con passi di multipli dell'unità; quindi l avrà valori interi e seminteri a seconda che $2l$ sarà pari o dispari.

Inserendo $m_{max} = l$ nella seconda delle (202) presa con l'uguaglianza (o analogamente $m_{min} = -l$ nella prima delle (202) con l'uguaglianza) si ottiene

$$\lambda = l(l + 1). \quad (204)$$

Ci manca solo da specificare l'azione degli operatori di abbassamento ed innalzamento sui ket di base

$$\begin{aligned} K_-|\lambda, m\rangle &= c_-|\lambda, m-1\rangle \Rightarrow \langle \lambda, m|K_+K_-|\lambda, m\rangle = \langle \lambda, m|K^2 - K_3^2 + K_3|\lambda, m\rangle = \\ &= l(l+1) - m(m-1) = |c_-|^2|\lambda, m-1\rangle \Rightarrow c_- = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \\ K_+|\lambda, m\rangle &= c_+|\lambda, m+1\rangle \Rightarrow \langle \lambda, m|K_-K_+|\lambda, m\rangle = \langle \lambda, m|K^2 - K_3^2 - K_3|\lambda, m\rangle = \\ &= l(l+1) - m(m+1) = |c_+|^2|\lambda, m+1\rangle \Rightarrow c_+ = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \end{aligned} \quad (205)$$

A questo punto dobbiamo trasportare i risultati al caso degli operatori L^2 e L_z

$$\begin{aligned} L_-|\lambda, m\rangle &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}|\lambda, m-1\rangle, \\ L_+|\lambda, m\rangle &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}|\lambda, m+1\rangle, \\ L^2|\lambda, m\rangle &= \hbar^2l(l+1), \\ L_z|\lambda, m\rangle &= \hbar m. \end{aligned} \quad (206)$$

Ricapitolando, abbiamo ottenuto che il momento angolare può avere valori interi e seminteri e che il momento angolare si suddivide in multipletti di l , per ogni valore di l fissato m va da $-l$ a $+l$ a passi di 1 e quindi conta $2l + 1$ valori possibili. Ad esempio se $l = 3$ abbiamo un eptapletto, 7 valori possibili di m . Essendo il numero quantico l importante e non l'autovalore λ (che è una funzione univoca di l), possiamo scrivere la base del momento angolare come $|\lambda, m\rangle$. Il momento angolare agisce, quindi, in uno spazio a $2l + 1$ dimensioni.

5.2 Metodo differenziale

Il metodo differenziale parte dalla scrittura del momento angolare in Meccanica Classica, la (188), e sostituisce le grandezze con operatori. In questo procedimento l'impulso diventa un operatore differenziale e quindi ogni componente del momento angolare è un operatore differenziale cartesiano; poiché il problema è più facilmente risolvibile in coordinate sferiche si trasformano le derivate rispetto alla terna cartesiana in derivate rispetto alla terna sferica e si ottiene per L^2 e L_z

$$\begin{aligned} L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}, \\ L^2 &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cotang(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sen^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right), \end{aligned} \quad (207)$$

come potevamo immaginare non dipendono dalla coordinata radiale. L'autofunzione soluzione simultanea delle equazioni agli autovalori per gli operatori differenziali (207) sono le armoniche sferiche $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ discusse brevemente in appendice. Ovviamente esiste una correlazione univoca tra l'armonica sferica $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ ed il vettore $|l, m\rangle$

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) \equiv |l, m\rangle. \quad (208)$$

Dal metodo differenziale scaturisce che il momento angolare può avere solo valori interi (le armoniche sferiche dipendono da l e per definizione delle armoniche sferiche può essere solo intero); quindi abbiamo un "tipo" di momento angolare che non può essere dedotto partendo solo dalla Meccanica Classica. Il momento angolare con valori sia interi che seminteri è detto momento angolare di spin. Il momento angolare che assume solo valori interi è detto orbitale.

5.3 Il momento angolare di spin

Il momento angolare di spin è caratteristico della fisica quantistica ma le hamiltoniane della Meccanica Quantistica non dipendono dalla variabile di spin e quindi lo spin non scaturisce dai fondamenti della Meccanica Quantistica ed è quindi inserito "a forza" nel quadro della Meccanica Quantistica. Le autofunzioni del momento angolare di spin, che indicheremo con S , sono dette spinori; pochè il momento angolare di spin gisce in uno spazio a $2s + 1$ dimensioni avremmo $2s + 1$ vettori di base scrivibili come

$$\begin{aligned} |s, s\rangle &= \chi_{s,s} \\ |s, s-1\rangle &= \chi_{s,s-1} \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ |s, -s+1\rangle &= \chi_{s,-s+1} \\ |s, -s\rangle &= \chi_{s,-s} \end{aligned} \quad (209)$$

tale scrittura non deve confondere in quanto è la stessa del momento angolare orbitale e, più in generale, è la stessa per ogni tipo di momento angolare, semplicemente nel caso dello spin non possiamo usare le armoniche sferiche e quindi usiamo una autofunzione (che non conosciamo) per classificare gli stati di spin, $\chi_{l,m}$.

La funzione d'onda totale sarà un oggetto a $2s + 1$ componenti

$$\psi(\vec{r}) = \psi_s(\vec{r})\chi_{s,s} + \psi_{s-1}(\vec{r})\chi_{s,s-1} + \dots + \psi_{-s+1}(\vec{r})\chi_{s,-s+1} + \psi_{-s}(\vec{r})\chi_{s,-s}, \quad (210)$$

da cui ψ può essere considerato un vettore colonna le cui componenti sono le $\psi_s(\vec{r})$.

5.4 Rappresentazione matriciale del momento angolare

In questo capitolo vedremo come si costruisce la matrice che rappresenta il momento angolare, lo faremo nel caso di $l = \frac{1}{2}$, ma il procedimento è del tutto generale ed è valido per qualunque momento angolare e per qualunque valore l .

Si comincia considerando la base completa dello spazio $2l + 1$ dimensionale

$$\begin{aligned}
 & |l, l \rangle, \\
 & |l, l - 1 \rangle, \\
 & \quad \vdots \\
 & \quad \vdots \\
 & \quad \vdots \\
 & |l, -l + 1 \rangle, \\
 & |l, -l \rangle,
 \end{aligned} \tag{211}$$

che nel caso di $l = \frac{1}{2}$ diventa

$$\begin{aligned}
 & \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \\
 & \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle.
 \end{aligned} \tag{212}$$

A questo punto si vanno a calcolare le azioni delle tre componenti del momento angolare sui ket di base, ricordando che $L_x = \frac{L_+ + L_-}{2}$ e $L_y = \frac{L_+ - L_-}{2i}$ (ottenute risolvendo il per L_x e L_y il sistema formato da L_- e L_+)

$$\begin{aligned}
 L_z \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{2} \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle; \quad L_z \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{2} \hbar \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \\
 L_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= 0; \quad L_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2} + 1 \right)} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \\
 L_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - 1 \right)} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle; \quad L_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0,
 \end{aligned} \tag{213}$$

costruiamo le matrici associate ai tre operatori nelle (213); in generale gli elementi di matrice di un operatore si determinano come $\langle \lambda'_1, \dots, \lambda'_n | O | \lambda_1, \dots, \lambda_n \rangle$ e si inseriscono al proprio posto nella matrice, nel caso degli operatori nelle (213) si ottiene

$$L_z = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \hbar \end{bmatrix}; \quad L_+ = \begin{bmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad L_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{bmatrix}, \tag{214}$$

da cui le matrici per le tre componenti del momento angolare

$$L_z = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \hbar \end{bmatrix}; \quad L_x = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} \hbar \\ \frac{1}{2} \hbar & 0 \end{bmatrix}; \quad L_y = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2i} \hbar \\ -\frac{1}{2i} \hbar & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{i}{2} \hbar \\ \frac{i}{2} \hbar & 0 \end{bmatrix}, \tag{215}$$

che possono essere riscritte come

$$L_z = \frac{1}{2} \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}; \quad L_x = \frac{1}{2} \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad L_y = \frac{1}{2} \hbar \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \tag{216}$$

Le tre matrici che compaiono nelle (216) sono dette matrici di Pauli (a volte si definiscono le (215) direttamente come tali)

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}; \quad \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad (217)$$

le matrici di Pauli sono una base delle matrici 2×2 a traccia nulla ed insieme alla matrice identità formano una base per le matrici 2×2 ; inoltre soddisfano le seguenti proprietà:

- $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathcal{I}$;
- $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$;
- $\det(\sigma_i) = -1, \quad \text{Tr}(\sigma_i) = 0$;
- $\sigma_i, \sigma_j = 2\delta_{ij}\mathcal{I}$;
- autovalori ± 1 .

Le matrici di Pauli sono i generatori del gruppo $SU(2)$, il gruppo speciale unitario ossia il gruppo delle matrici 2×2 con determinante unitario. Il gruppo di dimensione maggiore, $SU(3)$ possiede come generatrici le matrici di Gell-Mann fondamentali nella descrizione della cromodinamica quantistica.

5.5 Composizione dei momenti angolari

Ora che abbiamo capito come il momento angolare si inquadra nella Meccanica Quantistica siamo pronti a cercare di capire come si combinano i momenti angolari; consideriamo il caso di due momenti angolari L ed S .

Per cominciare definiamo il momento angolare totale

$$J = L + S \Rightarrow J^2 = L^2 + S^2 + L \cdot S + S \cdot L = L^2 + S^2 + 2L \cdot S, \quad (218)$$

in cui l'ultima uguaglianza è dovuta al fatto che momenti angolari appartenenti a sistemi diversi commutano sempre.

Essendo J un momento angolare segue la stessa algebra del momento angolare ordinario, espressa dai commutatori (192) e (194), ma possiamo dire qualcosa di più, infatti

$$\begin{aligned} [J^2, L^2] &= [L^2, L^2] + [S^2, L^2] + 2[L \cdot S, L^2] = 0; \\ [J^2, S^2] &= [L^2, S^2] + [S^2, S^2] + 2[L \cdot S, S^2] = 0, \end{aligned} \quad (219)$$

le (219) seguono dal fatto che momenti angolari appartenenti a sistemi diversi commutano sempre e dal commutatore (194).

In definitiva abbiamo che:

$$\begin{aligned} [L^2, L_i] &= 0; \\ [S^2, S_i] &= 0; \\ [J^2, L^2] &= 0; \\ [J^2, S^2] &= 0; \\ [J^2, J_i] &= 0. \end{aligned} \quad (220)$$

Abbiamo quindi due basi possibili per descrivere la combinazione dei momenti angolari; la base che diagonalizza simultaneamente L^2, S^2, L_z, S_z ottenuta come prodotto tensoriale, delle singole basi che diagonalizzano L^2, L_z e S^2, S_z

$$|L^2, L_z, S^2, S_z \rangle = |L^2, L_z \rangle |S^2, S_z \rangle, \quad (221)$$

il numero di elementi della base $|L^2, S^2, L_z, S_z \rangle$ è il prodotto del numero di elementi delle basi $|L^2, L_z \rangle$ e $|S^2, S_z \rangle$ ossia $(2l+1)(2s+1)$, e la base che diagonalizza simultaneamente gli operatori J^2, J_z, L^2, S^2 ,

$$|J^2, J_z, L^2, S^2 \rangle. \quad (222)$$

Le due basi devono avere lo stesso numero di elementi e perchè questo accada gli autovalori del momento angolare totale, j (ricordiamo che j è il numero quantico e che $j(j+1)$ è l'autovalore), possono assumere solo i valori

$$|l-s| \leq j \leq l+s, \quad (223)$$

anche il momento angolare totale viene suddiviso in multipletti, questa volta di j , e quindi fissato un j che rispetti la (223) si hanno $2j+1$ valori di j_z . Se chiamiamo j_1, \dots, j_d i possibili valori di j compatibili con la (223) dati l ed s , normalmente si scrive

$$(2l+1) \otimes (2s+1) = (2j_1+1) \oplus \dots \oplus (2j_d+1), \quad (224)$$

il primo membro identifica lo spazio risultante in cui agisce il momento angolare totale come prodotto tensoriale dei singoli spazi in cui agivano i momenti angolari da combinare, mentre il secondo membro caratterizza lo spazio in cui agisce il momento angolare totale come somma diretta degli spazi in cui agiscono i singoli i multipletti di j (che indicano un ben preciso valore tra i possibili j_d).

Fondamentale per la costruzione delle autofunzione della forma (222) è il fatto che lungo l'asse di quantizzazione, per noi l'asse z , e fissati un l_z e un s_z si ha

$$j_{M,z} = l_z + s_z, \quad (225)$$

in cui $j_{M,z}$ è il massimo della componente lungo l'asse di quantizzazione; in modo analogo

$$j_{m,z} = -l_z - s_z, \quad (226)$$

in cui $j_{m,z}$ è il minimo della componente lungo l'asse di quantizzazione. Grazie alla (225) possiamo identificare subito il ket della base (222) relativo ad un determinato multipletto di j con componente lungo l'asse di quantizzazione massima in termini dei ket di base (221) e poi applicare l'operatore di abbassamento ai due membri, scritto come $J_- = L_- + S_-$ per determinare tutti i ket appartenenti allo stesso multipletto; analogamente dalla (226) possiamo identificare il ket della base (222) relativo ad un determinato multipletto di j con componente lungo l'asse di quantizzazione minima in termini dei ket di base (221) e poi applicare l'operatore di innalzamento ai due membri, scritto come $J_+ = L_+ + S_+$ per determinare tutti i ket appartenenti allo stesso multipletto. Per determinare i ket degli altri multipletti, si costruiscono i ket della base (222) come combinazione di quei ket nella forma (221) che restituiscono il giusto valore della componente lungo l'asse di quantizzazione ($j_z = l_z + s_z$) e vanno poi determinati i coefficienti imponendo che ket della base (222) differenti siano ortogonali. Le azioni degli operatori L_{\pm}, S_{\pm}

e J_{\pm} è data dalle prime due delle (206); i coefficienti delle combinazioni con cui si esprimono i ket da una base all'altra sono detti coefficienti di Clebsch-Gordon.

Vediamo un esempio concreto di combinazione. Poniamo $S = 1$ e $L = 2$; i possibili valori di j sono 1, 2 e 3, inoltre la dimensione dello spazio prodotto tensoriale è $(2l + 1)(2s + 1) = 15$ per cui possiamo scrivere

$$3 \times 5 = 3 + 5 + 7, \quad (227)$$

ci aspettiamo un tripletto, un pentupletto ed un eptapletto. Cominciamo dall'eptapletto: abbiamo che il ket della base (222) che rappresenta il massimo del multipletto è

$$|3, 3, 2, 1 \rangle = |2, 2, 1, 1 \rangle = |2, 2 \rangle |1, 1 \rangle, \quad (228)$$

dato che questo è l'unico ket della base (221) che restituisce $j_z = 3$; se ora applichiamo l'operatore di abbassamento possiamo ottenere tutti gli altri ket dell'eptapletto:

$$\begin{aligned} J_- |3, 3, 2, 1 \rangle &= (L_- + S_-) |2, 2 \rangle |1, 1 \rangle \\ \Rightarrow \sqrt{6} |3, 2, 2, 1 \rangle &= 2 |2, 1 \rangle |1, 1 \rangle + \sqrt{2} |2, 2 \rangle |1, 0 \rangle \\ \Rightarrow |3, 2, 2, 1 \rangle &= \frac{2}{\sqrt{6}} |2, 1 \rangle |1, 1 \rangle + \sqrt{\frac{2}{6}} |2, 2 \rangle |1, 0 \rangle \end{aligned} \quad (229)$$

Ricordiamo che l'operatore L_- agisce solo sui ket di L e che S_- agisce solo sui ket di S . Un buon check della correttezza del risultato è dato dal fatto che la somma dei moduli quadri dei ket deve restituire 1 (sono delle probabilità e la somma deve dare 1). Applicando ora gli operatori di abbassamento ai due membri dell'ultima riga della (229) otteniamo tutti i ket appartenenti all'eptapletto. Per determinare i ket del pentupletto partiamo dal fatto che esso può essere combinazione solo dei ket che restituiscono un valore di j_z pari a 2; scriviamo tutti i ket di L :

$$\begin{aligned} &|2, 2 \rangle; \\ &|2, 1 \rangle; \\ &|2, 0 \rangle; \\ &|2, -1 \rangle; \\ &|2, -2 \rangle; \end{aligned} \quad (230)$$

e di S

$$\begin{aligned} &|1, 1 \rangle; \\ &|1, 0 \rangle; \\ &|1, -1 \rangle. \end{aligned} \quad (231)$$

Le uniche combinazioni che restituiscono $j_z = 2$ sono $|2, 2 \rangle |1, 0 \rangle$ e $|2, 1 \rangle |1, 1 \rangle$ quindi

$$|2, 2, 2, 1 \rangle = a |2, 2 \rangle |1, 0 \rangle + b |2, 1 \rangle |1, 1 \rangle, \quad (232)$$

con a e b tali che il ket (232) risulti ortogonale agli altri ket con $j_z = 2$ (dato che esso è già automaticamente ortogonale ai ket con $j_z \neq 2$) ossia al ket (229). In generale perchè un vettore combinazione di due vettori sia ortogonale ad un vettore della stessa forma e che

sia combinazione degli stessi vettori è sufficiente scambiare i coefficienti della combinazione e mettere un segno meno, ossia

$$|2, 2, 2, 1 \rangle = \sqrt{\frac{2}{6}}|2, 2 \rangle |1, 0 \rangle - \frac{2}{\sqrt{6}}|2, 1 \rangle |1, 1 \rangle . \quad (233)$$

Applicando, ripetutamente, gli operatori di abbassamento ai due membri del ket (233) si ottengono, come in precedenza, tutti i ket del relativo multipletto, il pentupletto. Ci mancherebbe da determinare il tripletto, ancora una volta scriveremmo il ket $|3, 1, 2, 1 \rangle$ come combinazione lineare di ket della forma $|l, l_z \rangle |s, s_z \rangle$ che restituiscono il valore corretto di j_z , ossia 1.

$$|1, 1, 2, 1 \rangle = a|2, 1 \rangle |1, 0 \rangle + b|2, 2 \rangle |1, -1 \rangle + c|2, 0 \rangle |1, 1 \rangle . \quad (234)$$

La determinazione dei coefficienti è leggermente più complicata che nel caso precedente; il ket (234) deve essere ortogonale a tutti i ket con $j_z = 1$ e quindi ai ket $|3, 1, 2, 1 \rangle$ e $|2, 1, 2, 1 \rangle$, queste condizioni ci danno due equazioni per i coefficienti; la terza equazione necessaria è la condizione di normalizzazione $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1$. La soluzione delle tre equazioni restituisce i valori dei coefficiente e poi applicando gli operatori di abbassamento si determinano tutti gli altri ket del tripletto.

Questo è il modo per costruire le autofunzioni della forma (222); invertendo le relazioni si determinano i ket della forma (221) come combinazioni di quelli della forma (222). Per fortuna i coefficienti sono tabulati nelle tavole di Clebsh-Gordon che permettono di scrivere una base come combinazione dell'altra. Le tavolo sono riportate in appendice e sono di semplice utilizzo e fanno risparmiare parecchio tempo.

5.6 Rotazioni ed operatore di rotazione

Le rotazioni, in tre dimensioni, sono descritte mediante il gruppo speciale ortogonale, $SO(3)$, che è un sottogruppo del gruppo ortogonale, $O(3)$. Le matrici appartenenti ad $O(3)$ hanno determinante in modulo unitario mentre il sottogruppo $SO(3)$ comprende solo le matrici di $O(3)$ con determinante uguale ad 1. Le rotazioni sono importanti nella fisica e ci consentono di capire se una quantità è scalare o vettoriale: uno scalare non cambia sotto rotazioni mentre un vettore viene ruotato. Poichè il gruppo $SO(3)$ è isomorfo al gruppo $SU(2)$ le rotazioni in 3 dimensioni possono essere descritte o con matrici appartenenti a $SO(3)$ o a $SU(2)$. Inoltre le rotazioni mantengono inalterate le distanze e sono quindi delle isometrie dello spazio euclideo.

Veniamo ora alla definizione dell'operatore quantistico di rotazione; dovendo mantenere invariate le distanze, deve mantenere invariati i prodotti scalari tra vettori e questo implica, come per l'operatore di traslazione, che l'operatore corrispondente alle rotazione sia unitario. Cerchiamo un operatore della forma

$$T(\theta) = e^{i\theta n \cdot A}, \quad (235)$$

in cui A deve essere hermitiano e n è il versore attorno al quale è eseguita la rotazione. Se applichiamo una rotazione infinitesima $d\theta$ all'operatore posizione in più dimensioni R , ci aspettiamo che questo si trasformi, in accordo con la regola della mano destra in

$$R + d\theta n \times R. \quad (236)$$

Applicando al operatore R una rotazione infinitesima ed imponendo l'uguaglianza con la (236) otteniamo

$$\begin{aligned} (\mathcal{I} - id\theta n \cdot A)R(\mathcal{I} + id\theta n \cdot A) &= R - id\theta n \cdot AR + id\theta Rn \cdot A = \\ &= R + id\theta[R, n \cdot A] = R + d\theta n \times R \Rightarrow +i[R, n \cdot A] = n \times R, \end{aligned} \quad (237)$$

che scritta per componenti diventa

$$i[R_i, n_j A_j] = in_j[R_i, A_j] = \epsilon_{ijk}n_j R_k \Rightarrow i[R_i, A_j] = \epsilon_{ijk}R_k. \quad (238)$$

Come accennato nel paragrafo 5.1 un generico operatore vettoriale O soddisfa le seguenti regole di commutazione con il momento angolare

$$[L_i, O_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}O_k, \quad (239)$$

quindi in base alla (239) possiamo identificare l'operatore A con l'operatore $-\frac{L}{\hbar}$. In definitiva abbiamo trovato che

$$T(\theta) = e^{-\frac{i\theta n \cdot L}{\hbar}}, \quad (240)$$

Grazie all'operatore (240) possiamo studiare un'interessante proprietà degli spinori sotto rotazioni; consideriamo un generico spinore e ruotiamolo di 2π attorno all'asse z

$$\chi' = R(2\pi)\chi = e^{-\frac{2i\pi L_z}{\hbar}}\chi = e^{-i\pi k}\chi, \quad (241)$$

in cui k è un numero dispari poichè si è supposto un spin scritto come $S_z = \frac{k}{2}\hbar$; in generale uno spinore ruotato di un angolo giro non restituisce lo spinore di partenza ma cambia di segno.

Dato l'operatore di rotazione $R(\theta)$ possiamo calcolare gli elementi di matrice dell'operatore di rotazione tra stati con diverso L_z ; gli elementi con diverso l sono banalmente zero poichè il vettore $T(\theta)|l, l_z\rangle$ è ancora autostato di L^2 infatti

$$L^2 T(\theta)|l, l_z\rangle = T(\theta)L^2|l, l_z\rangle = \hbar^2 l(l+1)T(\theta)|l, l_z\rangle. \quad (242)$$

Gli elementi di matrice dell'operatore di rotazione tra diversi l_z , ossia

$$\langle l, l'_z | T(\theta) | l, l_z \rangle, \quad (243)$$

sono detti funzioni di Wigner; in totale la matrice è $(2l+1) \times (2l+1)$ ed è chiamata rappresentazione irriducibile $(2l+1)$ dimensionale dell'operatore di rotazione. Una matrice generica rappresentante un generico operatore di rotazione nello spazio dei ket non necessariamente caratterizzati dallo stesso l può sempre, in un opportuna base, essere portata nella forma di matrice a blocchi in cui ogni blocco è una rappresentazione irriducibile $(2l+1)$ con l fissato.

5.7 Operatori tensoriali e teorema di Wigner-Eckart

In questa sezione discuteremo brevemente gli operatori tensoriali; il più semplice tipo di operatore tensoriale non banale è l'operatore vettoriale che è caratterizzato dalle seguenti regole di commutazione col momento angolare

$$[O_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}O_k, \quad (244)$$

in cui le O_i sono le componenti dell'operatore vettoriale O in questione. La generalizzazione del concetto di operatore vettoriale è, ovviamente, quella di operatore tensoriale; in generale un tensore è un ente geometrico $T_{i_1, \dots, i_n}^{j_1, \dots, j_m}$ con n indici covarianti e m controvarianti, il suo rango è la somma dei numeri n ed m . Il tensore in esame, $T_{i_1, \dots, i_n}^{j_1, \dots, j_m}$, trasforma sotto qualunque trasformazione di coordinate (rotazioni, traslazioni, etc etc) come il prodotto di n vettori covarianti (ossia con il prodotto di n matrici dirette di trasformazione) e m vettori controvarianti (ossia come il prodotto di m matrici inverse della trasformazione). Il più semplice esempio di operatore tensoriale è la diade, il prodotto tensoriale di due operatori vettoriali V e U

$$T_{ij} = U_i V_j, \quad (245)$$

ed ha 9 componenti. Ogni operatore tensoriale cartesiano può essere decomposto in più termini ognuno dei quali trasforma diversamente sotto rotazioni; nel caso della diade possiamo scrivere

$$T_{ij} = U_i V_j = \frac{U \cdot V}{3} \delta_{ij} + \frac{U_i V_j - V_i U_j}{2} + \left(\frac{U_i V_j + V_i U_j}{2} - \frac{U \cdot V}{3} \delta_{ij} \right). \quad (246)$$

Abbiamo decomposto il tensore in una parte invariante sotto rotazioni (la traccia), una parte che trasforma come un tensore antisimmetrico (il secondo termine) ed una che trasforma come un tensore simmetrico a traccia nulla (l'ultimo termine).

Esiste una rappresentazione in cui gli operatori tensoriali sono irriducibili, ossia non possono essere scomposti in diversi termini ognuno dei quali trasforma sotto rotazioni in modo diverso; questa rappresentazione è detta tensore sferico ed è intimamente legata alle armoniche sferiche

$$T_i^k = Y_i^k(V), \quad (247)$$

in cui la scrittura T_i^k indica la i -esima componente di un tensore di rango k , ed in cui Y_i^j è l'armonica sferica con $m = i$ e $l = k$ ed in cui si sostituisce alle funzioni degli angoli la loro scrittura in termini cartesiani (come si vede in Figura 16, ma al posto di $\frac{x}{r}, \frac{y}{r}$ e $\frac{z}{r}$ ci vanno rispettivamente V_x, V_y e V_z).

Un operatore tensoriale è caratterizzato dalle seguenti regole di commutazione

$$\begin{aligned} [L_z, T_i^k] &= \hbar i T_i^k; \\ [L_{\pm}, T_i^j] &= \hbar \sqrt{(k \mp i)(k \pm i + 1)} T_{i \pm 1}^k. \end{aligned} \quad (248)$$

Per gli operatori tensoriali vale un importante teorema

$$\langle q', l', l'_z | T_i^k | q, l, l_z \rangle = \langle l, k, l_z, i | l, k, l', l'_z \rangle \frac{\langle q', l' | T_i^k | q, l \rangle}{\sqrt{2l + 1}}, \quad (249)$$

detto teorema di Wigner-Eckart. Nel caso in cui si abbia $j = j'$ e $k = 1$ si ottiene il teorema di proiezione

$$\langle q', l, l'_z | T_i | q, l, l_z \rangle = \langle l, l'_z | L_i | l, l_z \rangle \frac{\langle q', l, l_z | T \cdot L | q, l, l_z \rangle}{\hbar^2 l(l + 1)}, \quad (250)$$

in pratica si proietta T lungo L e poi si orienta nella direzione di L_i . Il numero quantico q è un numero quantico generico.

6 Sistemi multidimensionali

In questo capitolo studieremo alcuni sistemi in 2 e 3 dimensioni, nello specifico vedremo l'oscillatore armonico e l'atomo di idrogeno, l'unico caso di fisica atomica risolvibile analiticamente.

6.1 Hamiltoniane separabili

In generale le hamiltoniane dei sistemi quantistici sono molto complicate, ma esiste una casistica che permette di semplificare notevolmente il problema: le hamiltoniane separabili. Un hamiltoniana separabile è un hamiltoniana che è somma di più termini che commutano tra loro (in sintesi è la somma di hamiltoniane che dipendono da operatori diversi, o commutanti)

$$H(x, y, \dots, z) = H_1(x) + H_2(y) + \dots + H_n(z). \quad (251)$$

Con questo tipo di hamiltoniane l'autofunzione totale è data dal prodotto delle autofunzioni delle singole hamiltoniane di cui la hamiltoniana totale è somma, ossia

$$H\psi(x, y, \dots, z) = E\psi(x, y, \dots, z) \quad (252)$$

in cui $\psi(x, y, \dots, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\dots\psi_n(z)$ ed in cui

$$\begin{aligned} H_1(x)\psi_1(x) &= E_1\psi_1(x), \\ H_2(y)\psi_2(y) &= E_2\psi_2(y), \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \\ H_n(z)\psi_n(z) &= E_n\psi_n(z). \end{aligned} \quad (253)$$

Se applichiamo $H(x, y, \dots, z)$ all'autofunzione totale $\psi(x, y, \dots, z)$ otteniamo

$$\begin{aligned} H\psi &= \\ &= (H_1 + H_2 + \dots + H_n)(\psi_1\psi_2\dots\psi_n) = \\ &= H_1\psi_1\psi_2\dots\psi_n + H_2\psi_1\psi_2\dots\psi_n + \dots + H_n\psi_1\psi_2\dots\psi_n = \\ &= E_1\psi_1\psi_2\dots\psi_n + E_2\psi_1\psi_2\dots\psi_n + \dots + E_n\psi_1\psi_2\dots\psi_n = \\ &= E\psi \end{aligned} \quad (254)$$

dato che H_1 agisce solo su ψ_1 e così via.

In definitiva data un hamiltoniana separabile la funzione d'onda totale è il prodotto delle singole funzioni d'onda e l'autovalore totale è la somma dei singoli autovalori.

6.2 Potenziali centrali ed equazione radiale

Tra tutti i possibili potenziali alcuni particolarmente importanti sono i potenziali centrali, ossia quei potenziali che dipendono solo dal modulo della distanza da un determinato punto dello spazio detto centro della forza. I potenziali centrali che studieremo sono il potenziale armonico

(andamento come R^2) ed il potenziale coulombiano (andamento come $\frac{1}{R}$).

Hamiltoniane che possiedono parte potenziale espressa da un potenziale centrale sono dette hamiltoniane centrali e poichè la parte cinetica dipende da P^2 (uno scalare) e la parte potenziale dipende solo dal modulo di R (anch'esso uno scalare) le hamiltoniane centrali commutano, in $3D$, con gli operatori L^2 e L_z e in $2D$ con l'operatore L_z ; cerchiamo di capirne meglio il perchè. Una hamiltoniana di un sistema tridimensionale la cui parte potenziale dipende dal modulo della distanza possiede una simmetria sferica poichè non dipende nè da θ nè da ϕ e quindi deve commutare con gli operatori di momento angolare L^2 e L_z (ossia essere invariante per rotazioni tridimensionali, possiede la simmetria $SO(3)$). Nel caso bidimensionale abbiamo un solo angolo e la simmetria non è sferica ma circolare e quindi H deve commutare con l'operatore che genera la rotazione attorno all'asse di simmetria, L_z (possiede la simmetria $SO(2)$). Dato che i generatori delle rotazioni sono le componenti del momento angolare e dato che questi non commutano ci aspettiamo una degenerazione nei livelli della hamiltoniana e ci aspettiamo quindi una non dipendenza dall'autovalore di L_z , ossia l_z .

Date queste simmetrie, le equazioni di Schrödinger per hamiltoniane centrali in 2 e 3 dimensioni è più facilmente risolvibile in coordinate sferiche o circolari; il laplaciano in queste coordinate è dato da

$$\begin{aligned}\nabla_{3D}^2 &= \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cotang(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sen^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right), \\ \nabla_{2D}^2 &= \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}.\end{aligned}\tag{255}$$

Con una rapida occhiata alle (255) notiamo che la parte angolare del laplaciano in 2 e 3 dimensioni è proporzionale rispettivamente a L_z^2 e L^2 ; possiamo pertanto riscrivere le equazioni di Schrödinger indipendenti dal tempo come

$$\begin{aligned}3D &\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{L^2}{2mR^2} + V(R) - E \right] \psi(R, \theta, \phi) = 0, \\ 2D &\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{L_z^2}{2mR^2} + V(R) - E \right] \psi(R, \phi) = 0.\end{aligned}\tag{256}$$

In entrambi i casi è possibile trovare una soluzione a variabili separabili in cui la parte angolare sarà rispettivamente l'autofunzione di L^2 o di L_z : nel caso tridimensionale possiamo trovare una soluzione del tipo $\psi(r, \theta, \phi) = F(R)Y(\theta, \phi)$, mentre nel caso bidimensionale del tipo $\psi(R, \phi) = G(r)\Phi(\phi)$. Inserendo le due soluzioni a variabili separabili nelle (256) e, ricordando che la parte angolare dell'operatore agisce solo sulla parte angolare dell'autofunzione totale restituendo l'autovalore corrispondente, possiamo semplificare la parte angolare dell'autofunzione totale ψ ottenendo le equazioni che risolte restituiscono la parte radiale della soluzione

$$\begin{aligned}3D &\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mR^2} + V(R) - E \right] F(R) = 0, \\ 2D &\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{\hbar^2 l_z^2}{2mr^2} + V(R) - E \right] G(R) = 0.\end{aligned}\tag{257}$$

A questo punto si definiscono due funzioni radiali ausiliarie in termini delle quali si scrivono $F(R)$ e $G(R)$

$$\begin{aligned} 3D &\Rightarrow F(R) = \frac{f(R)}{R}, \\ 2D &\Rightarrow G(R) = \frac{g(R)}{\sqrt{R}}, \end{aligned} \quad (258)$$

sostituendo nelle (257) otteniamo, dopo noiosi e lunghi conti

$$\begin{aligned} 3D &\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 f(R)}{\partial R^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mR^2} + V(R) \right) f(R) = E f(R), \\ 2D &\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 g(R)}{\partial R^2} + \left(\frac{\hbar^2 (4l_z^2 + 1)}{8mR^2} + V(R) \right) g(R) = E g(R). \end{aligned} \quad (259)$$

Le equazioni (259) hanno la struttura di equazioni di Schrödinger unidimensionali con un potenziale efficace e sono dette equazioni radiali. In definitiva un sistema con un potenziale centrale in 3 dimensioni ammette autofunzioni date dal prodotto delle armoniche sferiche con una funzione radiale $F(R)$ determinabile a partire dalla prima delle (259), mentre un sistema bidimensionale centrale ammette una scomposizione dell'autofunzioni come prodotto della parte dipendente solo da ϕ delle armoniche sferiche (la parte autofunzione di L_z) e la funzione radiale $G(R)$ determinabile tramite la seconda delle (259). Le autofunzioni nella forma polare sferica diagonalizzano simultaneamente gli operatori H , L^2 e L_z , mentre quelle nella forma polare circolare diagonalizzano simultaneamente gli operatori H e L_z .

6.3 L'oscillatore armonico in 2 e 3 dimensioni

Cominciamo dallo studio dell'oscillatore armonico, la hamiltoniana nel caso di 3 dimensioni è

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 R^2 = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{P_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 Y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 Z^2, \quad (260)$$

in cui le frequenze di oscillazione sono le stesse lungo i tre assi, questo tipo di oscillatore è detto isotropo.

L'equazione di Schrödinger per questo sistema è $H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ in cui l'autofunzione può essere trovata come prodotto di tre autofunzioni dell'oscillatore armonico unidimensionale e l'autovalore è la somma di tre autovalori dell'oscillatore unidimensionale

$$\begin{aligned} \psi_n(\vec{r}) &= \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z), \\ E_n = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} &= \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_z + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right), \end{aligned} \quad (261)$$

in cui $n = n_x + n_y + n_z$. Nella notazione di dirac gli stati sono esprimibili come $|n_x, n_y, n_z\rangle$. Gli stati sono, come ci aspettavamo degeneri, però sono degeneri sia in l_z che in l il che è inaspettato; abbiamo una degenerazione rispetto ad l che è detta "accidentale" perchè totalmente inaspettata. La degenerazione dei livelli è data da

$$d = \frac{(n+2)(n+1)}{2}. \quad (262)$$

Nel caso bidimensionale si procede nello stesso modo (cambia solo che non si ha la parte dipendente da Z nella hamoltoniana) e si ottiene

$$\begin{aligned} \psi_n(\vec{r}) &= \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y), \\ E_n = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} &= \hbar\omega\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(n_y + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(n + 1\right), \end{aligned} \quad (263)$$

La degenerazione dei livelli energetici è

$$d = n + 1, \quad (264)$$

e ancora una volta abbiamo una degenerazione in l non aspettata. In questo caso gli autoket in notazione di Dirac sono esprimibili come $|n_x, n_y\rangle$.

La generalizzazione degli operatori di creazione e distruzione al caso multidimensionale è ovvio, si avranno vari operatori a e a^\dagger uno per ogni grado di libertà del sistema.

Fino ad ora non abbiamo minimamente sfruttato le simmetrie del problema ed abbiamo trovato delle autofunzioni che diagonalizzano solo H ; il problema dell'oscillatore armonico in 2 e 3 dimensioni può essere risolto anche in coordinate polari andando a risolvere le (259) in cui il potenziale $V(R)$ è quello armonico. In questo modo otteniamo delle funzioni d'onda che sono il prodotto di una parte radiale (la soluzione delle (259)) e di una parte angolare e che diagonalizzano gli operatori H , L^2 e L_z nel caso a 3 dimensioni e gli operatori H e L_z nel caso bidimensionale. Gli autoket in forma polare in notazione di Dirac si scrivono $|n, l, l_z\rangle$ nel caso tridimensionale e $|n, l_z\rangle$ nel caso a 2 dimensioni. Fissato un $n = n_x + n_y + n_z$ (la somma dei numeri quantici delle autofunzioni cartesiane) si devono avere lo stesso numero di elementi nella base cartesiana e polare, quindi le due basi devono essere in corrispondenza biunivoca.

Le autofunzioni che descrivono stessi stati devono avere parità uguale e poichè le autofunzioni cartesiane hanno la parità di n mentre quelle polari, del caso tridimensionale, la parità di l , concludiamo che n e l devono essere entrambi pari o dispari. Nel caso bidimensionale la parità delle funzioni polari circolari è espressa dal numero quantico l_z e per tanto l_z e n devono avere la stessa parità; sia nel caso bidimensionale che tridimensionale ci sono, però, delle condizioni in più sui numeri quantici polari. Riassumendo

$$\begin{aligned} 2D &\Rightarrow n \text{ e } l_z \text{ stessa parità con } -n \leq l_z \leq n, \\ 3D &\Rightarrow n \text{ e } l \text{ stessa parità con } 0 \leq l \leq n. \end{aligned} \quad (265)$$

Ad esempio, nel caso tridimensionale in cui $n = 2$ si hanno i seguenti autoket cartesiani

$$|2, 0, 0\rangle; |0, 2, 0\rangle; |0, 0, 2\rangle; |1, 1, 0\rangle; |1, 0, 1\rangle; |0, 1, 1\rangle. \quad (266)$$

I possibili autoket polari sferici devono avere l pari e quindi $l = 0$ e $l = 2$

$$|2, 2, 2\rangle; |2, 2, 1\rangle; |2, 2, 0\rangle; |2, 2, -1\rangle; |2, 2, -2\rangle; |0, 0, 0\rangle. \quad (267)$$

Nel caso bidimensionale in cui $n = 2$ si hanno i seguenti autoket cartesiani

$$|2, 0\rangle; |0, 2\rangle; |1, 1\rangle. \quad (268)$$

I possibili autoket polari circolari devono avere l_z pari e quindi $l_z = -2$ e $l_z = 2$

$$|2, 2\rangle; |2, 0\rangle; |2, -2\rangle. \quad (269)$$

6.3.1 Oscillatore anisotropo

Esiste un caso leggermente più complicato, l'oscillatore anisotropo, in cui le frequenze di oscillazione lungo gli assi sono diverse. In questo caso la trattazione è del tutto analoga l'unica cosa che cambia è che essendo diverse le frequenze gli autovalori cambiano

$$\begin{aligned} 2D &\Rightarrow \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2}\right), \\ 3D &\Rightarrow \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z \left(n_z + \frac{1}{2}\right), \end{aligned} \quad (270)$$

e la degenerazione viene rimossa.

6.4 L'atomo di idrogeno

Un altro sistema importante risolvibile analiticamente è l'atomo di idrogeno, un sistema composto da un protone ed un elettrone. Nel capitolo introduttivo abbiamo visto che la visione classica degli atomi è fallimentare, la meccanica quantistica risolve il problema grazie al principio di indeterminazione secondo il quale più viene precisata la posizione dell'elettrone e più è indeterminato l'impulso; questa indeterminazione fa sì che pur emettendo energia l'elettrone non collassi sul nucleo. La hamiltoniana di questo sistema è, nel sistema in cui $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 1$

$$H = \frac{P_p^2}{2m_p} + \frac{P_e^2}{2m_e} - \frac{ze^2}{|R_p - R_e|} = -\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{ze^2}{|R_p - R_e|}, \quad (271)$$

i laplaciani sono fatti rispetto alle coordinate del protone e dell'elettrone, R_p e R_e sono le distanze del protone ed elettrone. La hamiltoniana (271) è un pò più generale di quella dell'atomo di idrogeno, descrive infatti in atomo con z protoni ed un elettrone, un idrogenoide. Spostandosi nel sistema del centro di massa la hamiltoniana (271) si separa nel moto del centro di massa (particella libera di massa uguale alla somma delle masse) e nel moto di una particella soggetta alla stessa hamiltoniana iniziale ma con massa pari alla massa ridotta (potremmo chiamarla particella ridotta)

$$H = \frac{P_{cm}^2}{2M} + \frac{P_R^2}{2\mu} - \frac{ze^2}{R} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{cm}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_R^2 - \frac{ze^2}{R} = H_{cm} + H_r, \quad (272)$$

in cui $M = m_p + m_e$, $\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e}$, $R = |R_p - R_e|$ ed P_{cm} è l'impulso del centro di massa; con H_{cm} denotiamo la hamiltoniana del centro di massa mentre con H_r la hamiltoniana della particella ridotta. La hamiltoniana nella forma (272) ammette un'autofunzione come prodotto delle autofunzioni che soddisfano rispettivamente l'equazione di Schrödinger per la hamiltoniana del centro di massa e per la hamiltoniana della particella ridotta; gli autovalori totali saranno la somma dei singoli autovalori dei singoli pezzi della hamiltoniana totale.

L'autofunzione per la particella libera è triviale

$$\psi_{cm}(R_{cm}) = \frac{1}{\sqrt[3]{2\pi\hbar}} e^{\frac{iP_{cm} \cdot R_{cm}}{\hbar}}, \quad (273)$$

in cui R_{cm} è la coordinata coniugata all'impulso P_{cm} ; gli autovalori sono dati da $\frac{P_{cm}^2}{2M}$ ed appartengono ad uno spettro discreto e pertanto shifta tutti gli autovalori della stessa quantità.

Il problema si riduce a risolvere l'equazione di Schrödinger associata alla hamiltoniana ridotta H_r ; il potenziale coulombiano è un potenziale centrale per cui la soluzione può essere trovata come prodotto tra una parte radiale soddisfacente la prima delle (259), in cui $V(R)$ è il potenziale coulombiano, ed una parte angolare (le armoniche sferiche); quindi dobbiamo risolvere la prima delle (259).

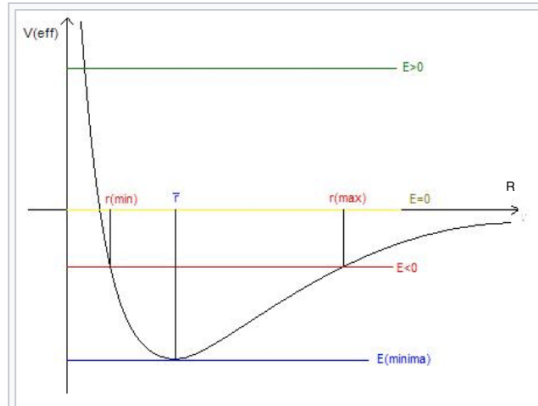


Figura 9: Potenziale efficace per l'atomo idrogenoide con z protoni $V(R)_{eff} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R^2} - \frac{ze^2}{R}$. Il primo termine, quello centrifugo è repulsivo, mentre il termine coulombiano è attrattivo.

Il metodo risolutivo della prima delle (259) passa per cercare una soluzione in serie di potenze generalizzata e nel farlo si trova che il numero quantico n va da 0 ad ∞ e che l va da 0 a $n - 1$, su m non abbiamo restrizioni se non le solite, ricapitolando:

$$\begin{aligned} n &\in [0, \infty); \\ l &\in [0, n - 1]; \\ m &\in [-l, l]. \end{aligned} \quad (274)$$

Le autofunzioni dell'atomo di idrogeno nella notazione di Dirac sono scritte come $|n, l, m \rangle$; il numero n è detto numero quantico principale ed indica l'orbitale in cui si trova l'elettrone, il numero quantico l è detto numero quantico angolare primario e m numero quantico angolare secondario. Abbiamo parlato di orbitale e non di orbita, i due concetti sono decisamente differenti: l'orbita, intesa come un'orbita classica, fu la soluzione del modello atomico di Bohr, che ebbe l'intuizione di quantizzare il momento angolare (lo fece in modo più semplicistico di quanto è stato esposto, per cui il suo modello non era corretto) ma che comunque immaginò che gli elettroni fossero sistemati su orbite precise; il concetto di orbitale è, invece, proprio della MQ, ed è definito come quella regione di spazio che ha il 90% di probabilità di avere l'elettrone al suo interno. Per una trattazione più rigorosa alla soluzione del problema differenziale rimandiamo al testo "Physics of atoms and molecules" di Bransden. Gli autovalori del atomo di idrogeno sono dati da

$$\frac{1}{2} \mu c^2 \frac{z^2 \alpha^2}{n^2}, \quad (275)$$

in cui c è la velocità della luce nel vuoto e $\alpha = \frac{1}{137}$ è la costante di struttura fine; costante fondamentale per la struttura atomica, rappresenta anche la costante di accoppiamento dell'interazione elettromagnetica. Gli autovalori (275) vanno shiftati di una quantità pari a $\frac{P_{cm}^2 2M}{}$. La degenerazione dei livelli energetici è data da

$$d = \sum_{l=0}^{l=n-1} (2l + 1) = n^2, \quad (276)$$

anche in questo caso abbiamo una degenerazione "accidentale" in l , ci saremmo aspettati la degenerazione in m , ma non in l . Per concludere discutiamo brevemente alcune proprietà delle autofunzioni dell'idrogeno; poichè il modul quadro dell'autofunzione è la densità di probabilità di trovare l'elettrone in un elemento infinitesimo di volume abbiamo che la probabilità di trovare l'elettrone nel volume finito v è

$$P(v) = \int_v |\psi_{n,l,m}|^2 dv = \int_v |F_{n,l}(R)Y(\theta, \phi)_{l,m}|^2 R^2 dR d\Omega, \quad (277)$$

in cui Ω è l'angolo solido; chiedendosi quale sia la probabilità di trovare l'elettrone ad una distanza R dobbiamo marginalizzare (integrare) sull'intero angolo solido ottenendo

$$P(R) = \int_0^R |F_{n,l}(R)|^2 R^2 dR, \quad (278)$$

per cui la densità di probabilità radiale è in realtà $R^2|F(R)|^2$. Riportiamo le prime 6 densità di probabilità radiali.

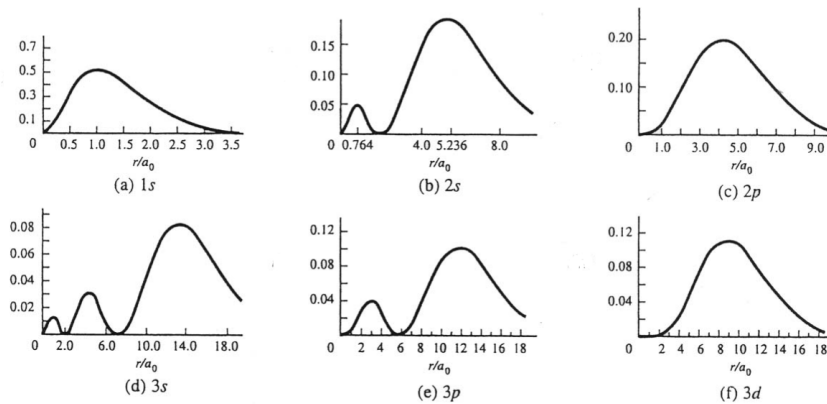


Figura 10: Densità di probabilità radiali, l'asse radiale è normalizzato al raggio di Bohr per $n = 0$, a_0 ; sull'asse delle y abbiamo la quantità $R^2|F(R)|^2$.

Nei grafici soprastanto compare un parametro importante, il raggio di Bohr n -esimo $a_n = \frac{n^2 \hbar}{m_e c \alpha}$, il cui valore è dell'ordine dell' Angstrom. il raggio di Bohr viene fuori dal modello atomico di Bohr ed è il raggio delle orbite di questo modello atomico; la sua importanza è notevole anche nel modello atomico della Meccanica Quantistica in quanto quando il numero quantico l è il massimo possibile per quel orbitale, ossia $l = n - 1$ con n fissato, il picco della distribuzione di

probabilità radiale si ha proprio ad una distanza dal nucleo pari al raggio di Bohr corrispondente al n del orbitale considerato, ossia a a_n . In conclusione possiamo affermare che il raggio tipico degli atomi si aggira intorno a qualche raggio di Bohr.

La distribuzione angolare di probabilità si ottiene marginalizzando sulla parte radiale (integrando tra 0 ed ∞ sulle coordinate radiali).

Importante in fisica atomica sono i valori medi delle potenze di R , i. quanto entrano in parecchi calcoli di quantità interessanti; diamo senza dimostrazione le così dette relazioni di Kramers, delle relazioni ricorsive per determinare i valori medi le potenze di R

$$\frac{k+1}{n^2} \langle R^k \rangle - a_0(2k+1) \langle R^{k-1} \rangle + \frac{a_0^2 k [(2l+1)^2 - k^2]}{4} \langle R^{k-2} \rangle = 0, \quad (279)$$

in cui $k \in \mathcal{Z}$, per determinare i valori medi bisogna partire da $k = 0$ ottenendo

$$\langle R \rangle = \frac{1}{a_0 n^2}. \quad (280)$$

Fino a qui non si è tenuto conto dello spin dell'elettrone che non entra, come sappiamo, direttamente nella hamiltoniana e che quindi va inserito a forza. Tenendo conto di questo la degenerazione diventa $2n^2$.

6.5 La degenerazione accidentale

In questo capitolo tratteremo meglio, seppur brevemente, la degenerazione accidentale, sia nel caso dell'oscillatore armonico sia nel caso dell'atomo di idrogeno. Sappiamo che quando troviamo una degenerazione ci deve essere una qualche quantità conservata dal sistema. Cominciamo col dire che i potenziali armonico e del tipo coulombiano sono gli unici che danno origine ad orbite chiuse ellittiche; quello coulombiano possiede come centro della forza uno dei due fuochi dell'ellisse mentre per quello armonico il centro della forza coincide con il centro dell'ellisse.

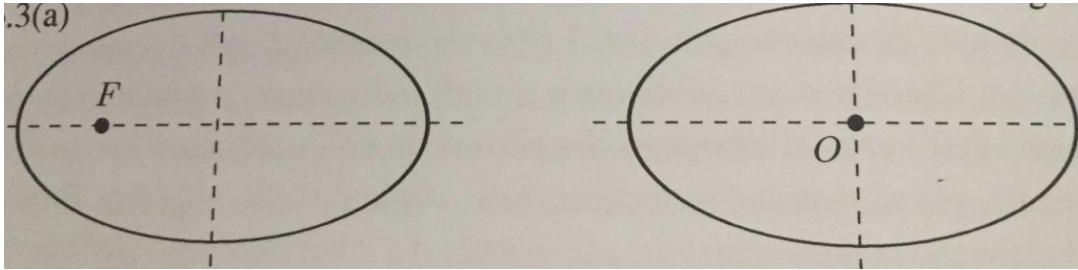


Figura 11: Orbite generate dai potenziali armonico (a destra) e coulombiano (a sinistra). Il caso armonico è maggiormente simmetrico.

La maggior simmetria del potenziale armonico fa sì che in questo caso sia conservato un tensore di rango 2, mentre nel caso del potenziale coulombiano si conserva un tensore di rango 1 detto vettore di Runge-Lenz-Laplace.

$$\begin{aligned} \text{armonico} &\Rightarrow T_{ij} = \frac{P_i P_j}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 R_i R_j, \\ \text{coulombiano} &\Rightarrow M = \frac{P \times L - L \times P}{2} - \frac{\mu e^2 R}{|R|}. \end{aligned} \quad (281)$$

Concentriamoci sul caso del potenziale coulombiano, si può mostrare che

$$\begin{aligned} [M, H] &= 0, \\ [M_i, L_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}M_k, \\ [M_i, M_j] &= -i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \frac{2H}{\mu}. \end{aligned} \quad (282)$$

La prima delle (282) ci dice che M è una quantità conservata, inoltre come si vede dalle ultime due delle (282), assieme alle regole di commutazione del momento angolare, gli operatori L ed M non formano un'algebra chiusa (compare l'operatore H); definendo l'operatore $Q = \sqrt{-\frac{\mu}{2E}}M$ si ottengono i seguenti commutatori

$$\begin{aligned} [Q_i, L_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}Q_k, \\ [Q_i, Q_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}L_k. \end{aligned} \quad (283)$$

che, assieme alle regole di commutazione del momento angolare, generano un'algebra chiusa e risultano essere i generatori della simmetria $SO(4)$, le rotazioni in 4 dimensioni. In definitiva l'atomo di idrogeno possiede la bizzarra simmetria delle rotazioni quadridimensionali. Quanto detto presuppone di considerare specifici stati legati in cui gli autovalori siano negativi, con questa ipotesi abbiamo potuto sostituire H con E nell'ultima delle (283) ottenendo un'algebra chiusa.

7 Particelle identiche

Le particelle identiche sono un concetto fondamentale in MQ; in generale due particelle si dicono identiche quando hanno le stesse caratteristiche (massa, carica, spin, etc etc). In Meccanica Classica grazie alla possibilità di definire una traiettoria è sempre possibile distinguere due particelle identiche; in Meccanica Quantistica il concetto di traiettoria non ha alcun senso e pertanto due particelle identiche sono anche indistinguibili. Il fatto che due particelle identiche siano indistinguibili prende il nome di principio di indistinguibilità.

Definiamo un nuovo operatore, l'operatore di scambio, \mathcal{S} , la cui azione è quella di scambiare due particelle qualunque del sistema

$$\mathcal{S}_{i,j}|a, b, \dots, i, j, \dots \rangle = |a, b, \dots, j, i, \dots \rangle. \quad (284)$$

Poichè l'azione ripetuta due volte di questo operatore deve restituire lo stato di partenza abbiamo che gli autovalori di \mathcal{S} sono ± 1 , pertanto esso è un operatore unitario. Essendo gli autovalori ± 1 gli autostati dell'operatore di scambio sono ket che per scambio di due particelle qualunque sono uguali a se stessi o meno se stessi

$$\mathcal{S}\psi = \pm\psi. \quad (285)$$

Le autofunzioni con autovalore positivo sono detti stati simmetrici mentre quelle con autovalore negativo stati antisimmetrici; questo implica che non tutti gli operatori hermitiani sono osservabili fisici per il sistema di più particelle identiche, ma lo saranno solo quelli che lasciano inalterata

la parità di scambio del sistema. Poichè l'energia del sistema deve essere un'osservabile fisica si deve avere che H sia invariante sotto la trasformazione \mathcal{S}

$$\mathcal{S}H\mathcal{S}^\dagger = H \Rightarrow [H, \mathcal{S}] = 0 \quad (286)$$

pertanto è sempre possibile trovare una base per H che sia anche base di \mathcal{S} , ossia una base che abbia parità definita sotto scambio di particelle. Quanto detto fino ad ora non comporta che gli unici stati realizzabili in un sistema di più particelle identiche siano solo quelli con parità positiva (simmetrici) o quelli con parità negativa (antisimmetrici), questa conclusione trova la sua formulazione rigorosa nella meccanica quantistica relativistica nella quale si può dimostrare anche che i sistemi a parità positiva devono essere bosoni (quindi particelle con spin intero e seguire la statistica di Bose-Einstein) e che quelli a parità negativa devono essere fermioni (quindi particelle a spin semintero e seguire quindi la statistica di Fermi-Dirac); tale teorema è detto teorema di spin-statistica. Un altro modo, meno rigoroso, di mostrare che possono esistere solo stati pari o dispari è considerare la hamiltoniana dell'atomo di elio senza considerare il termine di interazione elettrone elettrone, ossia

$$H_{elio} = \frac{P_{p1}^2}{2m_p} + \frac{P_{p2}^2}{2m_p} - \frac{2e^2}{|R_p - R_{e1}|} - \frac{2e^2}{|R_p - R_{e2}|} = H_1 + H_2. \quad (287)$$

Questa hamiltoniana è la somma di due hamiltoniane dell'atomo di idrogeno e quindi una possibile soluzione dell'equazione di Schrödinger associata alla hamiltoniana totale è data dal prodotto di due autofunzioni dell'idrogeno, ad esempio

$$\psi_\alpha(R_1, R_2) = \psi_{1,0,0}(R_1)\psi_{2,0,0}(R_2), \quad (288)$$

in cui α è il set totale di numeri quantici.

Se ora misurassimo la posizione dell'elettrone 2 (applicando l'operatore posizione R_2 all'autofunzione del sistema) otterremmo che l'elettrone si trova nell'orbitale $n = 2$; se applichiamo l'operatore di scambio al ket (288) otteniamo

$$\mathcal{S}\psi_\alpha(R_1, R_2) = \psi_{2,0,0}(R_1)\psi_{1,0,0}(R_2) \quad (289)$$

e se ora rimisuriamo la posizione dell'elettrone 2 lo troviamo nell'orbitale $n = 1$; questo processo in linea di principio ci consentirebbe di distinguere le due particelle identiche il che è impossibile per via del principio di indistinguibilità.

Dalla (286) abbiamo anche che se un sistema ha una parità di scambio definita (simmetrico o antisimmetrico) tale parità sarà conservata per sempre dal sistema; per tanto bosoni rimangono bosoni e fermioni rimangono fermioni.

Un modo possibile per ottenere autofunzioni simmetriche o antisimmetriche ed dato rispettivamente dal permanente e dal determinante della matrice di Slater. Per costruire la matrice di Slater di un sistema a N particelle non interagenti identiche si mettono per righe le autofunzioni con stesso set di numeri quantici ma per particelle diverse e per colonne le autofunzioni con diverso set di numeri quantici ma per stessa particella (è equivalente traporre righe con colonne).

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \psi_{\alpha_1}(R_1, s_1) & \cdots & \psi_{\alpha_1}(R_N, s_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\alpha_N}(R_1, s_1) & \cdots & \psi_{\alpha_N}(R_N, s_N) \end{bmatrix}, \quad (290)$$

in cui $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ sono i set di numeri quantici che comprendono i numeri quantici di spin e s_1, \dots, s_n sono le variabili di spin. Come abbiamo detto il determinante di questa matrice restituisce una funzione antisimmetrica mentre il permanente restituisce una funzione simmetrica. Essendo il determinante nullo se due righe della matrice sono uguali dobbiamo supporre che due particelle fermioniche non possono avere stesso set di numeri quantici, questa assunzione prende il nome di principio di esclusione di Pauli. Per costruire tutte le autofunzioni possibili per il sistema bisogna trovare tutte le combinazioni di parte spaziale e parte spinoriale che non annullano il determinante. Per quanto riguarda gli stati bosonici, il permanente non è mai nullo anche se due righe sono uguali.

In generale la matrice di Slater è per un sistema di N particelle è $N \times N$ per cui al crescere del numero di particelle diventa sempre più complicato calcolare il determinante di Slater. La simmettrizzazione e l'antisimmettrizzazione, nei casi con poche particelle, possono essere fatti "ad occhio", come vedremo nel prossimo paragrafo.

7.1 L'esempio dell'atomo di He

Consideriamo la hamiltoniana (287) l'autofunzione totale sarà il prodotto di una parte spaziale, ottenuta come prodotto di due autofunzioni dell'atomo di idrogeno, ed una parte spinoriale. Cominciamo dalla parte spaziale; la soluzione possibile è

$$\psi(R_1, R_2) = \psi_{n,l,m}(R_1)\psi_{n',l',m'}(R_2), \quad (291)$$

ma questa soluzione non è nè simmetrica nè antisimmetrica; dobbiamo simmetrizzare e antisimmetrizzare, per cui sommiamo e sottraiamo la stessa quantità (291) ma con particelle scambiate e normalizziamo

$$\psi_{\pm}(R_1, R_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{n,l,m}(R_1)\psi_{n',l',m'}(R_2) \pm \psi_{n,l,m}(R_2)\psi_{n',l',m'}(R_1) \right). \quad (292)$$

La (292) con $+$ è pari sotto operatore di scambio mentre la (292) col $-$ è dispari sotto operatore di scambio.

Consideriamo ora la parte spinoriale. Abbiamo due fermioni di spin $\frac{1}{2}$ per cui il momento angolare totale è dato da $j = 0, 1$; abbiamo dunque un singoletto di spin ed un tripletto di spin. I possibili modi in cui due elettroni possono disporre le proprie proiezioni spin sono quattro

$$\begin{aligned} \chi(s_1, s_2)_{++} &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2, \\ \chi(s_1, s_2)_{--} &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2, \\ \chi(s_1, s_2)_{+-} &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2, \\ \chi(s_1, s_2)_{-+} &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2. \end{aligned} \quad (293)$$

Notiamo che il terzo ed il quarto spinore totale non hanno parità ben definita sotto scambio delle due particelle per cui li sommiamo e sottraiamo (normalizzando) ed otteniamo per le quattro

autofunzioni spinoriali

$$\begin{aligned}
\chi(s_1, s_2)_{++} &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2, \\
\chi(s_1, s_2)_{--} &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2, \\
\chi(s_1, s_2)_{+---+} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 + \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right), \\
\chi(s_1, s_2)_{+----+} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right).
\end{aligned} \tag{294}$$

In definitiva abbiamo tre autofunzioni simmetriche (il tripletto $j = 1$) e una autofunzione antisimmetrica (il singoletto $j = 0$).

Poichè l'autofunzione totale deve essere antisimmetrica abbiamo più scelte: possiamo prendere la parte spaziale simmetrica e la parte spinoriale antisimmetrica (il singoletto) oppure la parte spaziale antisimmetrica e parte spinoriale simmetrica (il tripletto) in definitiva

$$\begin{aligned}
\Psi_{para}(R_1, s_1, R_2, s_2) &= \psi_+ \chi(s_1, s_2)_{j=0}, \\
\Psi_{orto}(R_1, s_1, R_2, s_2) &= \psi_- \chi(s_1, s_2)_{j=1}.
\end{aligned} \tag{295}$$

in cui $\chi(s_1, s_2)_{j=0}$ è una autofunzioni spinoriali del singoletto (è una sola) e $\chi(s_1, s_2)_{j=1}$ è una delle tre autofunzioni spinoriali del tripletto. Le autofunzioni con parte spinoriali di singoletto formano il paraelio mentre quelle con parte spinoriale di tripletto ortoelio.

8 Teoria delle perturbazioni e metodo variazionale

In questo capitolo studieremo alcuni metodi approssimativi; poichè in generale le hamiltoniane dei sistemi quantistici non sono risolubili analiticamente è necessario avere a disposizione dei metodi per trovare soluzioni approssimate, in cui si suppone che la hamiltoniana totale sia data dalla somma di una hamiltoniana risolubile analiticamente, detta hamiltoniana imperturbata, ed una perturbazione regolata da un parametro detto perturbativo. Tali metodi sono molto utili poichè normalmente i termini di interazione nelle hamiltoniane possono essere trattati (quasi sempre) con queste procedure.

8.1 Teoria indipendente dal tempo non degenere

Supponiamo di poter scrivere la hamiltoniana di un sistema quantistico come

$$H = H_0 + kV, \quad (296)$$

senza dipendenza dal tempo. Il termine H_0 è la hamiltoniana imperturbata i cui autoket sono immaginati ortonormalizzati, V è la perturbazione e k è il parametro perturbativo che in genere deve essere piccolo nel senso che specificheremo più avanti.

L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per un autoket energetico i -esimo non degenere della hamiltoniana totale ha la forma

$$H|E^i\rangle = H_0|E^i\rangle + kV|E^i\rangle = E^i|E^i\rangle. \quad (297)$$

L'idea è quella di sviluppare l'autoket e l'autovalore in serie di potenze di k ; è ovvio che tanto più il parametro perturbativo sarà minore di 1 tanto più ci si potrà fermare ad un ordine di sviluppo più basso

$$\begin{aligned} E^i &= \sum_n k^n E_n^i; \\ |E^i\rangle &= \sum_n k^n |E_n^i\rangle, \end{aligned} \quad (298)$$

in cui E_n^i indica l' i -esimo autovalore di ordine di approssimazione n , analogamente per $|E_n^i\rangle$. Inserendo le (298) nell'equazione (297) otteniamo

$$\left(H_0 + kV\right) \left(\sum_n k^n |E_n^i\rangle\right) = \left(\sum_n k^n E_n^i\right) \left(\sum_n k^n |E_n^i\rangle\right), \quad (299)$$

a questo punto si procede equagliando i termini uguali dello sviluppo, ossia se si equagliano i termini in cui compare la terza potenza di k si otterranno le correzioni al terzo ordine e così via. Ad esempio se considerassimo l'ordine zero dello sviluppo otterremmo

$$H_0|E_0^i\rangle = E_0^i|E_0^i\rangle, \quad (300)$$

che altro non è che l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per la hamiltoniana imperturbata, in sostanza l'ordine zero della teoria delle perturbazioni consiste nel far finta che la perturbazione non esista.

Eguagliando i termini del primo ordine otteniamo (ricordando che kV è un termoni di ordine 1)

$$H_0 k |E_1^i\rangle + kV |E_0^i\rangle = kE_0^i |E_1^i\rangle + kE_1^i |E_0^i\rangle \Rightarrow H_0 |E_1^i\rangle + V |E_0^i\rangle = E_0^i |E_1^i\rangle + E_1^i |E_0^i\rangle. \quad (301)$$

Il trucco per ottenere le correzioni all'energia dello stato i -esimo sta nel proiettare l'equazione risultante dall'uguaglianza delle potenze di k sull'autobra corrispondente all'autoket di ordine zero che compare nell'equazione stessa (quindi sul autobra $\langle E_0^i |$), mentre per ottenere le correzioni all'autofunzione dello stato i -esimo bisogna proiettare su tutti gli autobra di ordine zero i cui corrispondenti autoket non compaiono nell'equazione (ossia proiettare su $\langle E_0^h |$ con $h \neq i$); facciamolo nel caso dell'equazione (301).

Cominciamo con le correzioni all'energia

$$\begin{aligned} & \langle E_0^i | H_0 | E_1^i \rangle + \langle E_0^i | V | E_0^i \rangle = \langle E_0^i | E_0^i | E_1^i \rangle + \langle E_0^i | E_1^i | E_0^i \rangle \\ \Rightarrow E_0^i \langle E_0^i | E_1^i \rangle + \langle E_0^i | V | E_0^i \rangle &= E_0^i \langle E_0^i | E_1^i \rangle + E_1^i \langle E_0^i | E_0^i \rangle \\ & \Rightarrow \langle E_0^i | V | E_0^i \rangle = +E_1^i \langle E_0^i | E_0^i \rangle \Rightarrow E_1^i = V_{i_0 i_0}. \end{aligned} \quad (302)$$

La correzione al primo ordine all'energia di un certo stato consiste, quindi, nel valutare la perturbazione tra le autofunzioni di ordine zero corrispondenti allo stesso stato; l'energia totale si scive, secondo la prima delle (298), come

$$E^i = E_0^i + kE_1^i = E_0^i + kV_{i_0 i_0}. \quad (303)$$

Dalla (303) siamo in grado di capire cosa vuol dire che k deve essere piccolo; se la correzione all'energia imperturbata E_0^i è più grande della differenza tra due livelli energetici della hamiltoniana imperturbata non si può nemmeno più parlare di correzione e la teoria perturbativa inizia a fallire. Il parametro k deve essere piccolo nel senso che deve rendere le correzioni delle effettive correzioni (quindi possiamo dire che deve essere molto più piccolo della tipica scala di energie del sistema in esame.)

Partendo sempre dalla (301) e proiettando su di un autobra $\langle E_0^h |$ con $h \neq i$ otteniamo

$$\begin{aligned} & \langle E_0^h | H_0 | E_1^i \rangle + \langle E_0^h | V | E_0^i \rangle = \langle E_0^h | E_0^i | E_1^i \rangle + \langle E_0^h | E_1^i | E_0^i \rangle \\ \Rightarrow E_0^h \langle E_0^h | E_1^i \rangle + \langle E_0^h | V | E_0^i \rangle &= E_0^i \langle E_0^h | E_1^i \rangle + E_1^i \langle E_0^h | E_0^i \rangle \\ & \Rightarrow \langle E_0^h | E_1^i \rangle = \frac{\langle E_0^h | V | E_0^i \rangle}{E_0^i - E_0^h}, \end{aligned} \quad (304)$$

per cui conosciamo tutte le proiezioni dell'autoket cercato su tutti gli autobra di ordine zero con indice diverso. Poichè l'autoket $|E_1^i\rangle$ può essere scritto come la somma di tutte le proiezioni su tutti gli autobra di ordine zero con indice diverso, nella direzione dell'autobra su cui proiettiamo, ossia

$$|E_1^i\rangle = \sum_{h \neq i} \langle E_0^h | E_1^i \rangle |E_0^h\rangle, \quad (305)$$

inserendo le (304) nella (305) otteniamo la correzione al primo ordine dell'autoket i -esimo

$$|E_1^i\rangle = \sum_{h \neq i} \frac{\langle E_0^h | V | E_0^i \rangle}{E_0^i - E_0^h} |E_0^h\rangle. \quad (306)$$

Le approssimazioni successive si ottengono, allo stesso modo, equagliando i termini di secondo, terzo, ..., n -esimo ordine nell'equazione (299) e proiettando poi come abbiamo visto. E' evidente come al crescere dell'ordine di approssimazione i conti da fare diventano sempre più complicati; in questo senso è essenziale che il parametro perturbativo sia di molto minore di 1, così da permetterci di troncare le serie (298) il prima possibile.

8.2 Teoria indipendente dal tempo degenera

Il caso degenera è, nello svolgimento, praticamente uguale a quello non degenera ma non nei risultati. Consideriamo sempre l'equazione (296) ma questa volta consideriamo un autostato della hamiltoniana imperturbata degenera con degenerazione q , $|E_0^i \rangle_q$, (ho q autostati con stesso autovalore).

Gli sviluppi in serie dell'autovalore e dell'autoket sono

$$E^i = \sum_n k^n E_n^i; \quad (307)$$

$$|E^i \rangle = \sum_q c_q |E_0^i \rangle_q + \sum_{n>0} k^n |E_n^i \rangle,$$

il secondo sviluppo è dovuto al fatto che quando il parametro perturbativo tende a zero, e quindi $H \rightarrow H_0$, l'autostato i -esimo deve appartenere al sottospazio di degenerazione generato dai $|E_0^i \rangle_q$. Inserendo gli sviluppi (307) nell'equazione (297) otteniamo

$$\left(H_0 + kV \right) \left(\sum_q c_q |E_0^i \rangle_q + \sum_{n>0} k^n |E_n^i \rangle \right) = \left(\sum_n k^n E_n^i \right) \left(\sum_q c_q |E_0^i \rangle_q + \sum_{n>0} k^n |E_n^i \rangle \right), \quad (308)$$

da qui, equagliando i termini di ordine uguale in k possiamo ottenere le correzioni a tutti gli ordini, esattamente come nel caso non degenera. Noi ci concentreremo sulle correzioni al primo ordine ma facendo un pò di conti si possono trovare anche gli altri ordini. Dalla (308), prendendo il primo ordine otteniamo

$$H_0 |E_1^i \rangle + V \sum_q c_q |E_0^i \rangle_q = E_0^i |E_1^i \rangle + E_1^i \sum_q c_q |E_0^i \rangle_q, \quad (309)$$

a questo punto se vogliamo la correzione al primo ordine dell'energia dobbiamo proiettare sull'autobra di ordine zero corrispondente autoket di ordine zero che compare in (309), ma poichè questi sono degeneri proiettiamo, per mantenere la generalità, su un autobra corrispondente ad un autoket appartenente alla base del sottospazio di degenerazione (${}_h \langle E_0^i |$)

$$\begin{aligned} {}_h \langle E_0^i | H_0 |E_1^i \rangle + {}_h \langle E_0^i | V \sum_q c_q |E_0^i \rangle_q &= E_0^i {}_h \langle E_0^i | E_1^i \rangle + E_1^i \sum_q c_q {}_h \langle E_0^i | E_0^i \rangle_q = \\ &= E_0^i {}_h \langle E_0^i | E_1^i \rangle + \sum_q c_q {}_h \langle E_0^i | V |E_0^i \rangle_q = E_0^i {}_h \langle E_0^i | E_1^i \rangle + E_1^i \sum_q c_q \delta_{h,q} = \\ &= E_1^i c_h = \sum_q c_q {}_h \langle E_0^i | V |E_0^i \rangle_q. \end{aligned} \quad (310)$$

L'ultima riga della (310) è un'equazione agli autovalori che risolta ci restituisce le correzioni cercate; in definitiva abbiamo una matrice, detta matrice della perturbazione, di ordine $q \times q$ (ossia di ordine pari alla degenerazione dell'autostato imperturbato) ed i suoi elementi sono il potenziale valutato tra tutti gli autoket di ordine zero. Diagonalizzando la matrice della perturbazione, ci restituisce le correzioni per gli autovalori. Vediamo un piccolo esempio, che chiarisce il concetto; immaginiamo di avere un autoket imperturbato con degenerazione 2, allora la matrice sarà 2×2 ed i suoi elementi saranno

$$\begin{bmatrix} \langle E_0^i | V | E_0^i \rangle_1 & \langle E_0^i | V | E_0^i \rangle_2 \\ \langle E_0^i | V | E_0^i \rangle_1 & \langle E_0^i | V | E_0^i \rangle_2 \end{bmatrix}, \quad (311)$$

diagonalizzata avrà la forma

$$\begin{bmatrix} E_1^1 & 0 \\ 0 & E_1^2 \end{bmatrix}. \quad (312)$$

Gli autovalori E_1^1 ed E_1^2 sono le correzioni al primo ordine ai due autovalori degeneri della hamiltoniana imperturbata

$$E^1 = E_0 + kE_1^1, \quad E^2 = E_0 + kE_1^2. \quad (313)$$

In generale se gli autovalori della matrice della perturbazione sono tutti distinti allora la degenerazione iniziale è totalmente rimossa, in caso contrario è parzialmente rimossa.

Le correzioni agli autoket si ottengono proiettando la (309) su un autobra di ordine zero corrispondente ad un autoket differente da quelli che compaiono nell'equazione (307); poiché questo autobra potrà essere degenero, sarà della forma ${}_l \langle E_0^h |$. Dall'equazione (309) abbiamo

$$\begin{aligned} {}_l \langle E_0^h | H_0 | E_1^i \rangle + {}_l \langle E_0^h | V \sum_q c_q | E_0^i \rangle_q &= E_0^i {}_l \langle E_0^h | E_1^i \rangle + E_1^i \sum_q c_q {}_l \langle E_0^h | E_0^i \rangle_q = \\ &= E_0^i {}_l \langle E_0^h | E_1^i \rangle + \sum_q c_q {}_l \langle E_0^h | V | E_0^i \rangle_q = E_0^i {}_l \langle E_0^h | E_1^i \rangle = \\ &\Rightarrow {}_l \langle E_0^h | E_1^i \rangle = \sum_q \frac{c_q {}_l \langle E_0^h | V | E_0^i \rangle_q}{E_0^i - E_0^h}. \end{aligned} \quad (314)$$

la (314) ci dà tutte le proiezioni dell'autoket i -esimo al primo ordine su tutti gli autobra h con degenerazione l ; dato che, come il caso non degenero, possiamo scrivere

$$|E_1^i \rangle = \sum_{h \neq i} \sum_l {}_l \langle E_0^h | E_1^i \rangle |E_0^h \rangle, \quad (315)$$

da cui inserendo le (314) nella (315) otteniamo

$$|E_1^i \rangle = \sum_{h \neq i} \sum_l \sum_q \frac{c_q {}_l \langle E_0^h | V | E_0^i \rangle_q}{E_0^i - E_0^h} |E_0^h \rangle. \quad (316)$$

la (316) è la correzione al primo ordine all'autoket $|E_0^i \rangle$.

8.3 Teoria dipendente dal tempo e transizioni

Consideriamo ora il caso in cui la hamiltoniana totale dipenda dal tempo e possa essere scritta come

$$H(t) = H_0 + kV(t), \quad (317)$$

in cui la perturbazione dipende dal tempo.

Supponiamo che inizialmente il sistema sia in un autostato della hamiltoniana imperturbata e scriviamolo come sovrapposizione di tutti gli autoket della hamoltoniana imperturbata

$$|\psi, 0 \rangle = |E_i \rangle = \sum_j a_j |E_j \rangle, \quad (318)$$

in cui si ha che $a_j = \delta_{ji}$. Il fatto che la hamiltoniana totale dipenda dal tempo fa sì che l'evoluzione nel tempo del autoket (318) avverrà sia tramite la normale evoluzione "alla Schrödinger" sia tramite l'evoluzione dei coefficienti a_j , ossia

$$|\psi, t \rangle = \sum_j a_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} |E_j \rangle. \quad (319)$$

Inseriamo la (319) nell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo e massaggiamo

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \sum_j a_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} |E_j \rangle}{\partial t} &= (H_0 + kV(t)) \sum_j a_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} |E_j \rangle \Rightarrow \\ i\hbar \left(\sum_j \dot{a}_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} |E_j \rangle - \frac{i}{\hbar} \sum_j E_j a_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} |E_j \rangle \right) &= \\ = \sum_j E_j a_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} |E_j \rangle + k \sum_j a_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} V(t) |E_j \rangle \Rightarrow \\ i\hbar \sum_j \dot{a}_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} |E_j \rangle &= k \sum_j a_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} V(t) |E_j \rangle, \end{aligned} \quad (320)$$

a questo punto proiettiamo tutto su un altro autobra della hamiltoniana imperturbata, $\langle E_q |$ (immaginiamo gli autostati di H_0 ortonormalizzati)

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_j \dot{a}_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} \langle E_q | E_j \rangle &= k \sum_j a_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} \langle E_q | V(t) | E_j \rangle \Rightarrow \\ i\hbar \dot{a}_q(t) e^{-\frac{iE_q t}{\hbar}} &= k \sum_j a_j(t) e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} \langle E_q | V(t) | E_j \rangle \Rightarrow \\ \dot{a}_q(t) &= \frac{k \sum_j a_j(t) e^{-\frac{i(E_j - E_q)t}{\hbar}} \langle E_q | V(t) | E_j \rangle}{i\hbar} \\ \Rightarrow \dot{a}_q(t) &= \frac{k \sum_j a_j(t) e^{i\omega_{qj} t} \langle E_q | V(t) | E_j \rangle}{i\hbar}, \end{aligned} \quad (321)$$

in cui $\omega_{qj} = \frac{E_q - E_j}{\hbar}$.

Quanto fatto fino a qui è privo di approssimazioni; ora però scriviamo il coefficiente $a_j(t)$ e la

sua derivata temporale come serie di potenze del parametro perturbativo

$$a_j(t) = \sum_n k^n a_j^{(n)}(t), \quad \dot{a}_j(t) = \sum_n k^n \dot{a}_j^{(n)}(t); \quad (322)$$

inserendo le (322) nella (321) otteniamo

$$\sum_n k^n \dot{a}_q^{(n)}(t) = \frac{k \sum_j (\sum_n k^n a_j^{(n)}(t)) e^{i\omega_{qj}t} \langle E_q | V(t) | E_j \rangle}{i\hbar}. \quad (323)$$

Dalla (323), eguagliando gli ordini uguali di k otteniamo il valore del coefficiente all'ordine voluto; se eguagliamo l'ordine zero otteniamo

$$\dot{a}_q^{(0)}(t) = 0 \Rightarrow a_q^{(0)}(t) = cost, \quad (324)$$

quindi il coefficiente all'ordine zero è indipendente dal tempo come ci aspettavamo dato che per $k = 0$ la perturbazione è "spenta". Eguagliando i termini di primo ordine otteniamo

$$k \dot{a}_q^{(1)}(t) = \frac{k \sum_{j_1} a_{j_1}^{(0)}(t_1) e^{i\omega_{qj_1}t} \langle E_q | V(t_1) | E_{j_1} \rangle}{i\hbar} \Rightarrow a_q^{(1)}(t) = \int_0^t \frac{\sum_{j_1} a_{j_1}^{(0)} e^{i\omega_{qj_1}t_1} V_{qj_1}(t_1)}{i\hbar} dt_1, \quad (325)$$

in cui $V_{qj_1}(t_1) = \langle E_q | V(t_1) | E_{j_1} \rangle$; ricordando lo sviluppo (318) e quindi che $a_j^{(0)} = \delta_{ji}$ si ha

$$a_q^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \sum_{j_1} \delta_{j_1 i} e^{i\omega_{qj_1}t_1} V_{qj_1}(t_1) dt_1 = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{qi}t_1} V_{qi}(t_1) dt_1, \quad (326)$$

questo è il coefficiente cercato al secondo ordine; gli altri ordini si trovano in modo analogo ed ogni volta bisogna sostituire il valore del coefficiente precedente.

Il coefficiente all'ordine n è dato da

$$a_q^{(n)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^n} \sum_{j_n, j_{n-1}, \dots, j_3, j_2} \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} e^{i\omega_{qj_n}t_1} e^{i\omega_{j_n j_{n-1}}t_2} \dots e^{i\omega_{j_2 i}t_n} \cdot V_{qj_n}(t_1) V_{j_n j_{n-1}}(t_2) \dots V_{j_2 i}(t_n) dt_1 dt_2 \dots dt_n. \quad (327)$$

Notiamo che i tempi $t_n, t_{n-1}, \dots, t_1, t$ sono ordinati in senso decrescente, ossia

$$0 \leq t_n \leq t_{n-1} \leq \dots \leq t_1 \leq t, \quad (328)$$

per cui, per ordinare gli integrandi nella (327), possiamo sfruttare il prodotto tempo-ordinato (o T-prodotto), un operatore appartenente alla classe degli operatori di ordinamento (il loro utilizzo è quello di ordinare in base ad una data "indicazione") che ordina i propri argomenti in senso decrescente con l'istante t in cui sono calcolati; la (327) può essere riscritta tramite il T-prodotto (notando che a partire dalla (328) il termine $V_{qj_n}(t_1) V_{j_n j_{n-1}}(t_2) \dots V_{j_2 i}(t_n)$ è già ordinato in senso decrescente col tempo), come

$$a_q^{(n)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^n} \sum_{j_n, j_{n-1}, \dots, j_3, j_2} \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} e^{i\omega_{qj_n}t_1} e^{i\omega_{j_n j_{n-1}}t_2} \dots e^{i\omega_{j_2 i}t_n} \cdot T[V_{qj_n}(t_1) V_{j_n j_{n-1}}(t_2) \dots V_{j_2 i}(t_n)] dt_1 dt_2 \dots dt_n. \quad (329)$$

Poichè il T-prodotto risulta simmetrico per scambio di qualunque coppia dei suoi argomenti possiamo sostituire alle variabili t_n, t_{n-1}, \dots, t_1 la sola variabile t pagando il pegno di dividere per $n!$; questo procedimento si visualizza bene nel caso dell'equazione per il coefficiente del secondo ordine

$$a_q^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_{j_2} \int_0^t \int_0^{t_1} e^{i\omega_{qj_2}t_1} e^{i\omega_{j_2i}t_2} T[V_{qj_2}(t_1)V_{j_2i}(t_2)] dt_1 dt_2, \quad (330)$$

integrare prima in t_2 e poi in t_1 significa che t_1 va da 0 a t mentre t_2 va da 0 a t_1 , se invece integriamo prima in t_1 e poi in t_2 vuol dire che t_2 va da 0 a t mentre t_1 va da 0 a t_2 e dato che il T-prodotto è simmetrico sotto scambio di due dei suoi argomenti abbiamo che i due modi di fare l'integrale (integrare prima su una variabile e poi sull'altra e viceversa) deve dare lo stesso risultato che sarà la metà dell'integrale in cui l'estremo superiore di ogni integrale è t

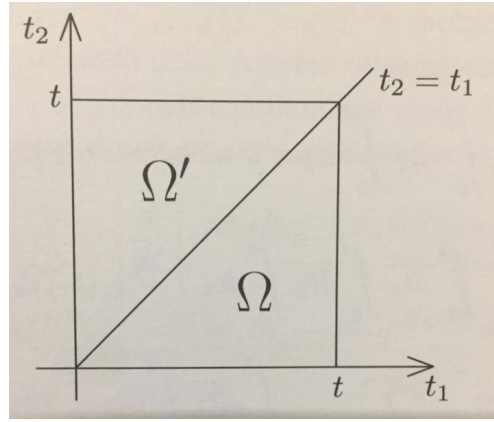


Figura 12: Domini di integrazione per l'integrale nella (330), il dominio Ω rappresenta l'integrazione prima su t_2 e poi su t_1 mentre il dominio Ω' rappresenta l'integrazione prima su t_1 e poi su t_2 . Entrambi i domini sono la metà del dominio rettangolare rappresentante l'integrazione di t_1 e t_2 da 0 a t .

Con questo "trucco di magia" possiamo scrivere l'equazione (329) come

$$a_q^{(n)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^n n!} \sum_{j_n, j_{n-1}, \dots, j_3, j_2} \int_0^t \int_0^t \dots \int_0^t e^{i\omega_{qj_n}t_1} e^{i\omega_{j_n j_{n-1}}t_2} \dots e^{i\omega_{j_2 i}t_n} \cdot T[V_{qj_n}(t_1)V_{j_n j_{n-1}}(t_2) \dots V_{j_2 i}(t_n)] dt_1 dt_2 \dots dt_n. \quad (331)$$

Ricordando il primo sviluppo in (322) abbiamo che

$$a_q(t) = \sum_n k^n \frac{1}{(i\hbar)^n n!} \sum_{j_n, j_{n-1}, \dots, j_3, j_2} \int_0^t \int_0^t \dots \int_0^t e^{i\omega_{qj_n}t_1} e^{i\omega_{j_n j_{n-1}}t_2} \dots e^{i\omega_{j_2 i}t_n} \cdot T[V_{qj_n}(t_1)V_{j_n j_{n-1}}(t_2) \dots V_{j_2 i}(t_n)] dt_1 dt_2 \dots dt_n, \quad (332)$$

l'espressione (332) può essere scritta in una forma più compatta

$$a_q(t) = \left\langle E_q \left| T \left[\exp \left(\frac{k}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{qi}V(t')} dt' \right) \right] \right| E_i \right\rangle. \quad (333)$$

Il coefficiente $a_q(t)$ è anche uguale, guardando la (319), a $\langle E_q | \psi, t \rangle = e^{\frac{iE_q t}{\hbar}}$ e quindi

$$a_q(t) = \langle E_q | e^{\frac{iE_q t}{\hbar}} U(t) | \psi, 0 \rangle = \langle E_q | e^{\frac{iE_q t}{\hbar}} U(t) | E_i \rangle, \quad (334)$$

in cui l'ultima eguaglianza è dovuta alla (318) ed in cui $U(t)$ è l'operatore di evoluzione temporale; dal confronto tra la (333) e la (334) possiamo dire che l'operatore $T \left[\exp \left(\frac{k}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{qi}} V(t') dt' \right) \right]$ è, apparte un fattore di fase globale, l'operatore di evoluzione temporale del sistema, quindi

$$|\psi, t \rangle = T \left[\exp \left(\frac{k}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{qi}} V(t') dt' \right) \right] |\psi, 0 \rangle \quad (335)$$

Dai risultati ottenuti vediamo come una perturbazione dipendente dal tempo possa far fare dei salti quantici tra diversi livelli al sistema su cui agisce (questi salti sono dette transizioni); ogni ordine del coefficiente rappresenta una transizione (nel senso che il modulo quadro del coefficiente è la probabilità che questa avvenga) dallo stato iniziale $|E_i \rangle$ allo stato finale $|E_q \rangle$ ma di "tipologia" diversa. Il coefficiente al primo ordine rappresenta una transizione diretta dallo stato $|E_i \rangle$ allo stato $|E_q \rangle$, il coefficiente al secondo ordine rappresenta una transizione che parte dallo stato $|E_i \rangle$ passa per lo stato $|E_{j_2} \rangle$ per arrivare allo stato finale $|E_q \rangle$, in generale il coefficiente all'ordine n -esimo rappresenta una transizione che parte da $|E_i \rangle$ passa, nell'ordine, per gli stati $|E_{j_2} \rangle, |E_{j_3} \rangle, \dots, |E_{j_{n-1}} \rangle, |E_{j_n} \rangle$ per arrivare allo stato finale $|E_q \rangle$.

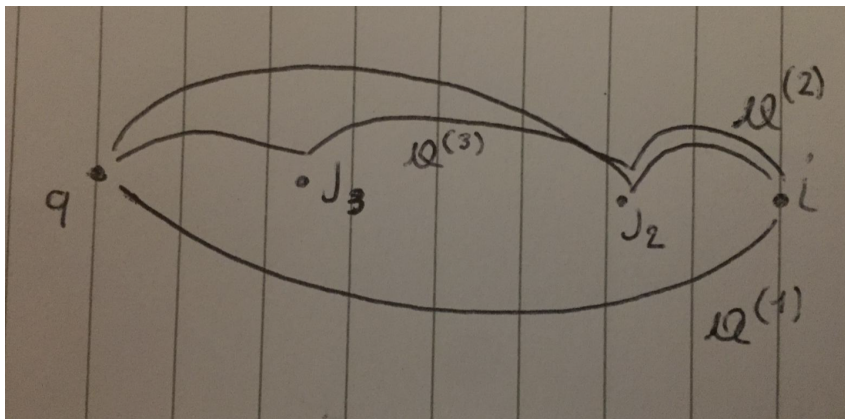


Figura 13: Transizioni dal livello i al livello q , ci sono degli stati virtuali j_n .

Gli stati di mezzo tra lo stato iniziale $|E_i \rangle$ e lo stato finale $|E_q \rangle$ sono detti stati virtuali, la cosa curiosa è che questi stati non devono per forza essere stati esistenti per il sistema (da qui il nome virtuali).

A questo punto siamo interessati alla probabilità che si abbia una transizione dallo stato iniziale $|E_i \rangle$ allo stato finale $|E_q \rangle$; la probabilità in funzione nel tempo sarà il modulo quadro del coefficiente davanti al ket $|E_q \rangle$, ossia proprio di $a_q(t)$

$$P_{iq}(t) = |a_q(t)|^2 = \left| \sum_n k^n a_q^{(n)}(t) \right|^2. \quad (336)$$

Se il parametro perturbativo è molto minore di 1, possiamo fermare lo sviluppo al primo ordine ottenendo per la probabilità di transizione

$$P_{iq}(t) = k^2 |a_q^{(1)}|^2. \quad (337)$$

Considerando l'equazione (326) per il coefficiente al primo ordine ed una perturbazione che si accende ad un certo istante $t = 0$ ed è costante V_0 nel intervallo di tempo $(0, T)$ otteniamo

$$a_q^{(1)}(t) = \frac{\langle E_q | V_0 | E_i \rangle}{i\hbar} \int_0^T e^{\frac{i\omega_{qi}t}{\hbar}} dt = \frac{\langle E_q | V_0 | E_i \rangle}{E_i - E_q} \left[e^{\frac{i(E_q - E_i)T}{\hbar}} - 1 \right], \quad (338)$$

il cui modulo quadro, e quindi la probabilità, è

$$\begin{aligned} P_{iq}(t) &= \frac{k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2}{|E_q - E_i|^2} \left| \left[e^{\frac{i(E_q - E_i)T}{\hbar}} - 1 \right] \right|^2 = \\ &= \frac{k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2}{|E_q - E_i|^2} \left[e^{\frac{i(E_q - E_i)T}{\hbar}} - 1 \right] \left[e^{-\frac{i(E_q - E_i)T}{\hbar}} - 1 \right] = \\ &= \frac{k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2}{|E_q - E_i|^2} \left(2 - 2\cos\left(\frac{(E_q - E_i)T}{\hbar}\right) \right) = \\ &= \frac{k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2}{|E_q - E_i|^2} 4\sin^2\left(\frac{(E_q - E_i)T}{2\hbar}\right) = \\ &= \frac{k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2 \sin^2(\omega T)}{\hbar^2 \omega^2}, \end{aligned} \quad (339)$$

in cui si è usata la formula di bisezione del seno e definito $\omega = \frac{E_q - E_i}{2\hbar}$. La probabilità è proporzionale al modulo quadro dell'elemento di matrice della perturbazione corrispondente alla transizione in esame.

Se la transizione avviene con esatta conservazione dell'energia, $E_i = E_q$ allora dobbiamo prendere il limite per ω che tende a zero

$$P_{iq}^{(E_q=E_i)}(t) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2 \sin^2(\omega T)}{\hbar^2 \omega^2} = \frac{k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2 T^2}{\hbar^2}, \quad (340)$$

quindi la probabilità (al primo ordine) è quadratica nella durata T della perturbazione. Introduciamo il rate di transizione ossia la probabilità per unità di tempo

$$R_{iq} = \frac{dP_{iq}}{dT}, \quad (341)$$

per cui

$$R_{iq}^{E_q=E_i} = \frac{dP_{iq}^{(E_q=E_i)}}{dT} = \frac{2k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2 T}{\hbar^2}, \quad (342)$$

Se la transizione avviene tra livelli energetici con energia circa uguale, $E_i \approx E_q$, per determinare la probabilità totale di transizione dobbiamo sommare tutte le probabilità relative alla singola transizione possibile

$$P_{iq}^{(TOT)} = \sum_q P_{iq}^{(E_i \approx E_q)} = \sum_q k^2 |a_q^{(1)}(t)|^2, \quad (343)$$

questa somma può essere sostituita con un integrale sull'energia a patto che le differenze dei livelli energetici siano infinitesime (molto piccole)

$$P_{iq}^{(TOT)} \approx \int \frac{\pi T k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2 \sin^2(\omega T)}{\hbar^2 \pi T \omega^2} \rho(E_q) dE_q. \quad (344)$$

Nella (344) è stata introdotta la densità degli stati $\rho(E_q)$, essa conta il numero di stati del sistema con energia compresa tra E_q ed $E_q + dE_q$.

Poichè il tempo di azione della perturbazione è generalmente molto più grande del tempo in cui avviene la transizione possiamo mandare all'infinito il tempo T , in questo limite il termine $\frac{\sin^2(\omega T)}{\pi T \omega^2}$ si comporta come la $\delta(\omega)$

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} P_{iq}^{(TOT)} &\approx \int \frac{\pi T k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2}{\hbar^2} \delta(\omega) \rho(E_q) dE_q = \\ &= \int \frac{\pi T 2k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2}{\hbar} \delta(E_q - E_i) \rho(E_q) dE_q, \end{aligned} \quad (345)$$

da cui il rate

$$R_{iq}^{(E_q \approx E_i)} = \frac{dP_{iq}^{(TOT)}}{dT} = \int \frac{\pi 2k^2 |\langle E_q | V_0 | E_i \rangle|^2}{\hbar} \delta(E_q - E_i) \rho(E_q) dE_q. \quad (346)$$

La (346) (o anche la (345)) è detta regola d'oro di Fermi (anche se il primo a derivarla fu Dirac...) è rappresenta il rate di transizione, questo è proporzionale al modulo quadro dell'elemento di matrice e dipende dallo spazio delle fasi del sistema quantistico; ovviamente un sistema quantistico non ha spazio delle fasi, si intende che è proporzionale alla densità degli stati che è assimilabile ad uno spazio delle fasi nel senso statistico del termine (intendendo gli ensemble) dato che conta gli stati del sistema con energia compresa tra due estremi infinitesimamente vicini.

La regola d'oro ci dice anche che se un elemento di matrice della perturbazione tra due stati i e q è nullo allora la transizione è impossibile; non bisogna però pensare che sia impossibile in assoluto, infatti la (345) esprime la probabilità al primo ordine e quindi la transizione in esame sarà impossibile al primo ordine in teoria delle perturbazioni. Considerando gli altri ordini può essere che una transizione che è impossibile al primo ordine abbia probabilità di avvenire, ovviamente se la teoria perturbativa funziona bene le probabilità agli ordini successivi saranno trascurabili. In generale questi elementi di matrice sono difficili da calcolare per cui sulla base di questioni di simmetria del sistema o della perturbazione si possono determinare delle condizioni che rendono non nulli gli elementi di matrice, queste condizioni (in genere sui numeri quantici dello stato di arrivo e di partenza) sono dette regole di transizione.

8.4 Metodo variazionale

Il metodo variazionale è un metodo approssimato molto utile nello studiare l'energia di punto zero di un sistema quantistico. Data una hamiltoniana H con autovalori E_n e autostati $|E_n\rangle$,

il suo valor medio sullo stato generico normalizzato $|\psi\rangle$ è

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_n \langle \psi | H | E_n \rangle \langle E_n | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | E_n \rangle \langle E_n | \psi \rangle E_n \\ &\geq \sum_n \langle \psi | E_n \rangle \langle E_n | \psi \rangle E_0 = E_0 \Rightarrow \langle \psi | H | \psi \rangle \geq E_0. \end{aligned} \quad (347)$$

Quindi il valore medio della hamiltoniana su di un generico stato è sempre maggiore o uguale al autovalore corrispondente allo stato energetico fondamentale del sistema; si può sfruttare questa disuguaglianza per stimare l'energia fondamentale del sistema. Costruendo un ket di prova con alcuni parametri variazionali si valuta il valor medio di H su questo ket in funzione dei parametri scelti e poi si minimizza rispetto ai suddetti parametri; il minimo del valor medio rispetto a tutti i parametri variazionali scelti restituisce la miglior stima di E_0 .

Un esempio di applicazione è la stima dell'energia fondamentale dell'atomo di Elio.

9 Appendice

9.1 Teorema di convoluzione

In matematica, il teorema di convoluzione afferma che sotto opportune condizioni (le funzioni devono essere appartenenti a L^1) la trasformata di Laplace, così come la trasformata di Fourier della convoluzione di due funzioni è il prodotto delle trasformate delle funzioni stesse.

Ricordiamo la convoluzione di due funzioni

$$(f * g)(x) = \int_{\mathfrak{R}} f(x-y)g(y) dy, \quad (348)$$

quindi secondo il teorema di convoluzione

$$\mathfrak{F}(f * g) = \mathfrak{F}(f)\mathfrak{F}(g). \quad (349)$$

In cui indichiamo con $\mathfrak{F}(f)$ la trasformata di Fourier della funzione $f(x)$.

9.2 Proprietà dei commutatori

Il commutatore soddisfa le seguenti proprietà

- Bilinearità;
- $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$ e $[A + C, B] = [A, B] + [C, B]$
- $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ e $[AC, B] = A[C, B] + [A, B]C$;
- identità di Jacobi (è nulla la somma dei commutatori tra un operatore e il commutatore degli altri due, permutati ciclicamente):

$$[A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [B, [C, A]] = 0; \quad (350)$$

- Antisimmetria: $[A, B] = -[B, A]$;
- Un operatore commuta con ogni funzione di se stesso: $[A, f(A)] = 0$.

Mostriamo che il commutatore di due operatori hermitiani è antihermitiano

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = BA - AB = [B, A] = -[A, B]. \quad (351)$$

9.3 La delta di Dirac

La delta di Dirac è una funzione generalizzata che assume il valore infinito in un solo punto e zero altrove:

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \neq x_0 \\ \infty & \text{se } x = x_0 \end{cases}. \quad (352)$$

Introdotta dal fisico, Nobel nel 1933, Paul Adrien Maurice Dirac per questioni di normalizzazione delle funzioni d'onda dello spettro continuo. La delta può essere definita come il limite di una gaussiana la cui varianza tende a zero; intuitivamente se la varianza tende a zero la gaussiana si stringe sempre più e diventa infinitamente alta in un solo punto (la media della gaussiana); la delta può anche essere definita come la derivata della funzione gradino di Heaviside. Quanto detto richiederebbe una dimostrazione rigorosa che passa per il mostrare che le due distribuzioni sopraindicate rispettino la proprietà fondamentale della delta di Dirac

$$\int_{\mathcal{R}} f(x)\delta(x - x_0) dx = f(x_0). \quad (353)$$

La delta di Dirac possiede anche una rappresentazione integrale, considerando le proprietà della trasformata di Fourier esposte nel paragrafo 2.1.6, la trasformata della delta deve essere una funzione con grandezza caratteristica infinitamente grande (la delta ha grandezza infinitamente piccola; un punto) quindi

$$\mathfrak{F}(\delta(x)) = \int \delta(x)e^{ikx} dx = 1, \quad (354)$$

da cui antitrasformando otteniamo:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int 1e^{-ikx} dk. \quad (355)$$

La delta di Dirac gode delle seguenti proprietà

- riscalamento: $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$;
- parità: $\delta(x) = \delta(-x)$;
- Prodotto per una funzione $f(x) \in C^\infty$: $f(x)\delta(x - x_0) = f(x_0)\delta(x - x_0)$;
- Composizione: $\delta(f(x)) = \sum_k \frac{\delta(x-x_k)}{|f'(x_k)|}$;
- Proprietà fondamentale espressa dalla (353)

9.4 Le funzioni di Airy

Le funzioni di Airy sono due funzioni speciali, per valori reali si ha

$$\begin{aligned} Ai(x) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{t^3}{3} + xt\right) dt, \\ Bi(x) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[e^{-\frac{t^3}{3} + xt} + \sin\left(\frac{t^3}{3} + xt\right) \right] dt. \end{aligned} \quad (356)$$

Gli andamenti delle funzioni sono riportati in figura

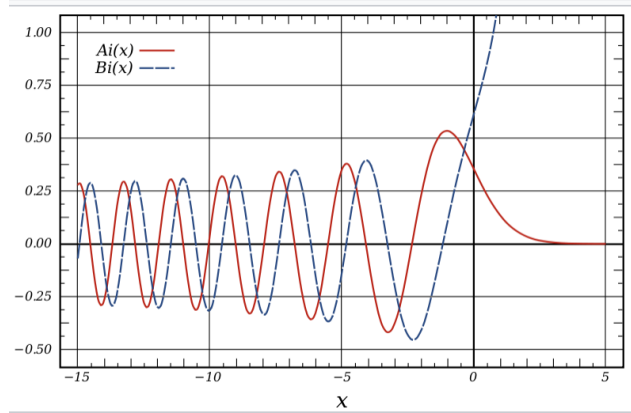


Figura 14: Funzioni di Airy, la $Bi(x)$ non può descrivere stati legati.

Riportiamo alcuni zeri della funzione di $Ai(x)$ e di $Ai(x)'$ rispettivamente:

$$\begin{aligned} x &= -1.019, -3.249, -4.820; \\ x &= -2.338, 4.088, -5.521. \end{aligned} \quad (357)$$

9.5 I polinomi di Hermite

In matematica e fisica, i polinomi di Hermite sono una sequenza polinomiale utilizzata in vari settori della fisica. Riportiamo i primi 5 polinomi di Hermite

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0(x) &= 1, \\ \mathcal{H}_1(x) &= 2x, \\ \mathcal{H}_2(x) &= 4x^2 - 2, \\ \mathcal{H}_3(x) &= 8x^3 - 12x, \\ \mathcal{H}_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12, \\ \mathcal{H}_5(x) &= 32x^5 - 160x^3 + 120x. \end{aligned} \quad (358)$$

I polinomi di Hermite soddisfano l'equazione di Hermite

$$\frac{d^2 \mathcal{H}_n(x)}{dx^2} - 2x \frac{d \mathcal{H}_n(x)}{dx} + 2n \mathcal{H}_n(x) = 0 \quad (359)$$

I polinomi di Hermite sotto parità trasformano come $(-1)^n H_n(x)$; quindi i polinomi di Hermite hanno la parità di n .

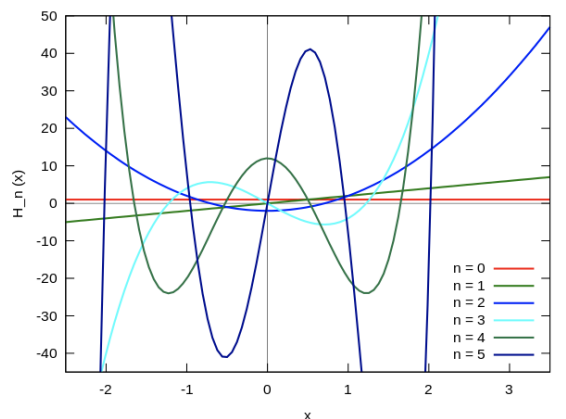


Figura 15: Primi 5 polinomi di Hermite.

9.6 Le armoniche sferiche

Le armoniche sferiche sono funzioni soluzioni dell'equazione di Legendre

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cotang(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\text{sen}^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) Y(\theta, \phi) = l(l+1) Y(\theta, \phi). \quad (360)$$

Le armoniche sferiche possono essere scritte in forma separata

$$Y_{l,l_z}(\theta, \phi) = K \Theta(\theta) f(\phi) = K \Theta(\theta) e^{i\Phi(\phi)}, \quad (361)$$

in cui K è una costante di normalizzazione, $\Phi(\phi) = l_z \phi$ e di cui la parte $f(\phi)$ è l'autofunzione solo di L_z . Le armoniche sferiche sono l'analogo delle armoniche di Fourier, ogni funzione di θ e ϕ è sempre scomponibile come combinazione delle armoniche sferiche. Le armoniche sferiche trasformano sotto parità come $(-1)^l Y_{l,m}(\theta, \phi)$; quindi le armoniche sferiche hanno la parità di l . Riportiamo le prime armoniche sferiche

Armoniche sferiche con $l = 0$

$$Y_0^0(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}}$$

Armoniche sferiche con $l = 1$

$$Y_1^{-1}(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot e^{-i\varphi} \cdot \sin \theta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot \frac{(x - iy)}{r}$$

$$Y_1^0(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cdot \cos \theta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cdot \frac{z}{r}$$

$$Y_1^1(x) = \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot e^{i\varphi} \cdot \sin \theta = \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot \frac{(x + iy)}{r}$$

Armoniche sferiche con $l = 2$

$$Y_2^{-2}(x) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot e^{-2i\varphi} \cdot \sin^2 \theta = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \frac{(x^2 - 2ixy - y^2)}{r^2}$$

$$Y_2^{-1}(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot e^{-i\varphi} \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \frac{(xz - iyz)}{r^2}$$

$$Y_2^0(x) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \cdot (3 \cos^2 \theta - 1) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \cdot \frac{(-x^2 - y^2 + 2z^2)}{r^2}$$

$$Y_2^1(x) = \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot e^{i\varphi} \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta = \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \frac{(xz + iyz)}{r^2}$$

$$Y_2^2(x) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot e^{2i\varphi} \cdot \sin^2 \theta = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \frac{(x^2 + 2ixy - y^2)}{r^2}$$

Figura 16: Armoniche sferiche fino a $l = 2$.

9.7 Notazione sugli operatori

Gli operatori sono riportati con lettera maiuscola; gli operatori vettoriali non hanno freccette, non sono in grassetto perchè si presuppone che chi legga sappia distinguere quando un operatore deve essere vettoriale o scalare.