

Meccanica Quantistica

Flaviano Morone

FLAVIANOMORONE-MECCANICAQUANTISTICA

Contents

1	Equazioni delle vibrazioni sonore	5
2	Teoria del corpo nero classico	9
3	Principio d'indeterminazione	15
3.0.1	Un teorema sulle osservabili compatibili	16
4	Regole di quantizzazione di Dirac	19
4.1	Operatore di Traslazione Infinitesima	21
4.2	Operatore di Evoluzione Temporale	22
4.2.1	Evolutione del pacchetto d'onda gaussiano	23
5	Equazione di continuità	25
5.1	Potenziale a gradino	26
6	Oscillatore armonico unidimensionale	29
6.1	Funzione d'onda dello stato fondamentale	33
7	Stati coerenti	37
8	Livelli di Landau	41
9	Momento Angolare	45
9.1	Proprietà di commutazione del momento angolare	47
9.2	Costruzione della funzione d'onda (Armonica Sferica)	51
9.3	Composizione dei momenti angolari	55
9.4	Regole di commutazione di vettori con il momento angolare	57
10	Spin	59
10.1	Sistemi di spin $\frac{1}{2}$	60
10.2	Analisi della precessione dello spin	63
10.3	Rappresentazione dell'operatore hamiltoniano nello spazio degli spin	66
10.4	Particelle identiche	67
10.4.1	Sistema di 2 bosoni di spin $s = 0$	69
10.4.2	Sistema di 3 bosoni di spin $s = 0$	70
10.4.3	Sistema di 2 fermioni di spin $s = \frac{1}{2}$	71
10.5	Due particelle identiche libere	73

11 Moto in un campo a simmetria centrale	75
11.1 Spettro degli autovalori dell'energia	75
11.1.1 Spettro discreto	75
11.1.2 Spettro continuo	76
11.2 Proprietà fondamentali dell'equazione di Schrödinger	77
11.2.1 Proprietà generali del moto unidimensionale	77
11.3 Moto in un campo a simmetria centrale (Atomo di Idrogeno)	77
11.3.1 Spettro e autofunzioni dell'atomo di idrogeno	83
11.4 Effetto Zeeman normale	88
11.5 Effetto Zeeman anomalo	89
12 Formulazione di Feynman e integrale sui cammini	93
12.1 Propagatore dell'equazione di Schrödinger	93
12.2 Derivazione dell'integrale sui cammini	96
12.3 Integrale sui cammini e limite classico	98
12.4 Limite semiclassico della meccanica quantistica	100
12.4.1 Equazione di Hamilton-Jacobi	100
12.4.2 Il limite semiclassico	103
Appendices	107
A Sulla condizione di trasversalità $\nabla \cdot \vec{A} = 0$	109
B Risoluzione dell'integrale $\int_0^\pi \sin \theta (\sin \theta)^{2\ell} d\theta$	111

Chapter 1

Equazioni delle vibrazioni sonore

Consideriamo una corda di N atomi interagenti di massa m che occupano all'equilibrio posizioni equispaziate, come mostrato in figura 1.1. Sia a il passo reticolare, cioè

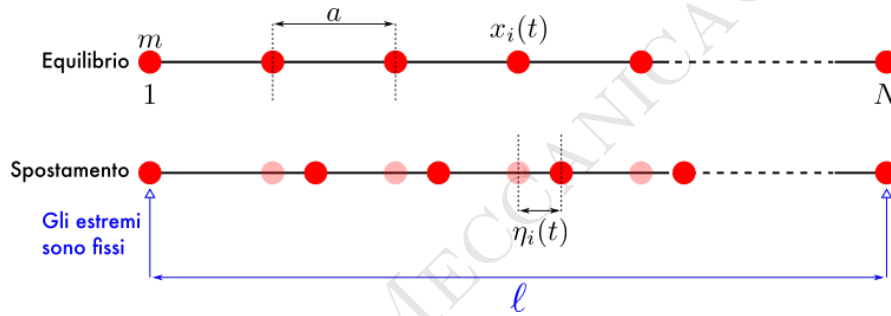


Figure 1.1: Corda di N atomi interagenti.

la distanza all'equilibrio tra due atomi successivi. Le coordinate canoniche dell' i -esimo atomo sono

$$\begin{aligned} x_i(t) &= ia + \eta_i(t) , \quad i = 1, \dots, N , \quad \dot{x}_i(t) = \dot{\eta}_i(t) , \\ p_i(t) &= m\dot{\eta}_i(t) , \end{aligned} \quad (1.1)$$

dove $\eta_i(t)$ è lo spostamento rispetto alla posizione di equilibrio. L'Hamiltoniano del sistema è

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + V(\eta_1, \dots, \eta_N) , \quad (1.2)$$

dove $V(\eta_1, \dots, \eta_N)$ è il potenziale di interazione tra gli atomi. Sviluppando il potenziale intorno alla posizione di equilibrio, corrispondente al minimo del potenziale, si ottiene:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \left. \frac{\partial^2 V}{\partial \eta_i \partial \eta_j} \right|_{\vec{\eta}=0} \eta_i \eta_j . \quad (1.3)$$

Assumiamo che l'interazione scemi abbastanza rapidamente con la distanza così da poter trascurare l'interazione di atomi che non sono primi vicini. Di conseguenza

possiamo scrivere l'hamiltoniano nella forma

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N \frac{k}{2} (\eta_{i+1} - \eta_i)^2, \quad (1.4)$$

dove k è una costante (quando è moltiplicata per a prende il nome di **costante di Young**, i.e. $Y = ka$). La Lagrangiana L del sistema è la trasformata di Legendre di H ed è data dall'espressione seguente:

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \dot{\eta}_i^2(t) - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} k (\eta_{i+1} - \eta_i)^2. \quad (1.5)$$

Il limite del continuo corrisponde a misurare il comportamento della corda vibrante a distanza molto più grande del passo reticolare, per cui possiamo porre

$$\begin{aligned} \eta_i(t) &= \eta(x, t), \\ \frac{m}{a} &= \mu \equiv \text{densità lineare di massa}, \\ ka &= Y \equiv \text{costante di Young}, \\ \frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{a} &= \frac{\partial \eta(x, t)}{\partial x}, \\ a \sum_i &= \int dx. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Nel limite del continuo possiamo scrivere la Lagrangiana come

$$L = \int \left[\frac{\mu}{2} \left(\frac{\partial \eta(x, t)}{\partial t} \right)^2 - \frac{Y}{2} \left(\frac{\partial \eta(x, t)}{\partial x} \right)^2 \right] dx, \quad (1.7)$$

dove $\eta(x, t)$ è un **campo scalare** che rappresenta la deformazione della corda.

Le equazioni del moto si ricavano dalle equazioni di Eulero-Lagrange:

$$\sum_{x_\nu=t,x} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \frac{\delta L}{\delta \left(\frac{\partial \eta}{\partial x_\nu} \right)} - \frac{\delta L}{\delta \eta} = 0, \quad (1.8)$$

da cui otteniamo l'equazione delle onde

$$\boxed{\frac{1}{v_s^2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} = 0}, \quad (1.9)$$

dove $v_s = Y/\mu$ è la **velocità del suono**.

Consideriamo una soluzione armonica del tipo

$$\eta(x, t) = h_q(t) e^{iqx}. \quad (1.10)$$

La condizione cui deve soddisfare $h_q(t)$ è

$$\frac{1}{v_s^2} \frac{\partial^2 h_q(t)}{\partial t^2} + q^2 h_q(t) = 0, \quad (1.11)$$

cioè

$$\frac{\partial^2 h_q(t)}{\partial t^2} + \omega_q^2 h_q(t) = 0 , \quad (1.12)$$

dove ω_q , detta **frequenza** (angolare), è data da

$$\omega_q = |v_s q| . \quad (1.13)$$

La soluzione dell'equazione differenziale (1.12) è

$$h_q(t) = h_q^+(0)e^{-i\omega_q t} + h_q^-(0)e^{i\omega_q t} , \quad (1.14)$$

per cui la soluzione $\eta(x, t)$ diventa

$$\eta(x, t) = h_q^+(0)e^{i(qx - \omega_q t)} + h_q^-(0)e^{i(qx + \omega_q t)} , \quad (1.15)$$

che rappresenta la somma di un'onda progressiva e un'onda regressiva.

Una proprietà importante dell'equazione delle onde (1.9) è di essere un'equazione lineare in η . Questo vuol dire che se η_1 e η_2 sono due soluzioni, allora la somma $C_1\eta_1 + C_2\eta_2$ è ancora soluzione. Così se h_{q_1} e h_{q_2} sono due soluzioni, anche la loro somma è soluzione. In generale, la somma arbitraria di soluzioni di questo tipo è ancora soluzione; poi, essendo q un parametro reale, possiamo definire una soluzione che sia l'integrale su q di soluzioni armoniche, ovvero sia

$$\eta(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} [h_q^+ e^{i(qx - \omega_q t)} + h_q^- e^{i(qx + \omega_q t)}] . \quad (1.16)$$

Consideriamo ora nell'integrale tutti i termini che corrispondono alla stessa frequenza, cioè tutti i termini della forma

$$\eta_q(x, t) = (h_q^+ e^{iqx} + h_{-q}^- e^{-iqx}) e^{-i\omega_q t} + (h_{-q}^+ e^{-iqx} + h_q^- e^{iqx}) e^{i\omega_q t} . \quad (1.17)$$

Poiché lo spostamento deve essere una quantità reale, avremo

$$\eta_q(x, t) = \eta_q^*(x, t) = (h_q^{+*} e^{-iqx} + h_{-q}^{-*} e^{iqx}) e^{i\omega_q t} + (h_{-q}^{+*} e^{iqx} + h_q^{-*} e^{-iqx}) e^{-i\omega_q t} , \quad (1.18)$$

da cui ricaviamo le relazioni

$$\begin{aligned} h_q^+ &= h_{-q}^{+*} , \\ h_q^- &= h_{-q}^{-*} . \end{aligned} \quad (1.19)$$

Le condizioni al contorno sono:

$$\eta_q(0, t) = \eta_q(\ell, t) = 0 , \quad (1.20)$$

perché gli estremi sono fissi (vedi figura 1.1). Di conseguenza avremo

$$(h_q^+ + h_{-q}^-) e^{-i\omega_q t} + (h_{-q}^+ + h_q^-) e^{i\omega_q t} = 0 , \quad (1.21)$$

e poiché questa condizione deve essere vera ad ogni tempo avremo

$$\begin{aligned} h_q^+ &= -h_{-q}^- , \\ h_{-q}^+ &= -h_q^- , \end{aligned} \quad (1.22)$$

da cui otteniamo

$$\eta_q(x, t) = h_q^+(e^{iqx} - e^{-iqx})e^{-i\omega_q t} + h_{-q}^+(e^{-iqx} - e^{iqx})e^{i\omega_q t} . \quad (1.23)$$

Ponendo

$$h_q^+ = |h_q^+|e^{i\phi_q} , \quad (1.24)$$

possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \eta_q(x, t) &= |h_q^+| [(e^{iqx} - e^{-iqx})e^{i(\phi_q - \omega_q t)} + (e^{-iqx} - e^{iqx})e^{-i(\phi_q - \omega_q t)}] = \\ &= |h_q^+|(e^{iqx} - e^{-iqx})[e^{i(\phi_q - \omega_q t)} - e^{-i(\phi_q - \omega_q t)}] = \\ &= A_q \sin(qx) \sin(\omega_q t - \phi_q) . \end{aligned} \quad (1.25)$$

Imponendo la condizione al bordo $\eta_q(\ell, t) = 0$ otteniamo $\sin(q\ell) = 0$, per cui i valori ammessi di q sono

$$q = \frac{n\pi}{\ell} , \quad n = 0, 1, \dots . \quad (1.26)$$

In conclusione, la soluzione si può scrivere come

$$\boxed{\eta_q(x, t) = A_q \sin\left(\frac{n\pi x}{\ell}\right) \sin(\omega_q t - \phi_q)} . \quad (1.27)$$

Chapter 2

Teoria del corpo nero classico

Consideriamo una scatola cubica di lato L con pareti perfettamente riflettenti. Ci chiediamo in che modo si propagano le onde elettromagnetiche all'interno. Iniziamo la discussione scrivendo l'equazione delle onde elettromagnetiche nel vuoto

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \vec{A} = 0, \quad (2.1)$$

nella gauge trasversa

$$\begin{aligned} \phi &= 0, \\ \nabla \cdot \vec{A} &= 0, \quad \text{condizione di trasversalita',} \end{aligned} \quad (2.2)$$

dove ϕ e \vec{A} sono, rispettivamente, il potenziale scalare e il potenziale vettore del campo elettromagnetico, e c l'intensità della velocità della luce nel vuoto. (Vedi anche la discussione nell'Appendice A su come ricavare la gauge trasversa dalla gauge di Lorenz $\partial_\mu A^\mu = 0$).

Poiché le equazioni (2.1) sono lineari, qualunque combinazione di due soluzioni \vec{A}_1 e \vec{A}_2

$$\vec{A} = C_1 \vec{A}_1 + C_2 \vec{A}_2 \quad (2.3)$$

è ancora soluzione.

In una dimensione, $D = 1$, la soluzione deve essere tale che il campo \vec{A} dipenda solo dalle variabili

$$\begin{cases} x_+ = x - ct, \\ x_- = x + ct. \end{cases} \quad \text{in } 1D \quad (2.4)$$

In 3 dimensioni la propagazione avviene lungo la direzione definita dal **vettore d'onda**

$$\vec{k} = k \hat{k} \quad \text{vettore d'onda.} \quad (2.5)$$

Le **onde piane** sono soluzioni di questo tipo, cioè della forma

$$A_i(\vec{x}, t) = A_i(\vec{k}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}, \quad (2.6)$$

dove l'ampiezza $A_i(\vec{k}, t)$ soddisfa l'equazione

$$\begin{aligned} \frac{d^2 A_i(\vec{k}, t)}{dt^2} + \omega^2(|k|) A_i(\vec{k}, t) &= 0, \\ \omega^2(|k|) &= c^2 |k|^2, \end{aligned} \quad (2.7)$$

che ha come soluzione

$$A_i(\vec{k}, t) = A_i^+(\vec{k})e^{-i\omega t} + A_i^-(\vec{k})e^{i\omega t}, \quad (2.8)$$

da cui otteniamo

$$A_i(\vec{x}, t) = A_i^+(\vec{k})e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)} + A_i^-(\vec{k})e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}+\omega t)}, \quad i = x, y, z. \quad (2.9)$$

La condizione di trasversalità $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ è equivalente a

$$\vec{k} \cdot \vec{A} = 0, \quad (2.10)$$

che esprime l'ortogonalità (i.e. trasversalità) tra il vettore d'onda e il potenziale vettore. Possiamo, quindi, decomporre \vec{A} lungo le due direzioni ortogonali a \vec{k} , che chiamiamo $\hat{e}^{(1)}(\vec{k})$, $\hat{e}^{(2)}(\vec{k})$, ottenendo così

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \left[A_1^\pm \hat{e}^{(1)}(\vec{k}) + A_2^\pm \hat{e}^{(2)}(\vec{k}) \right] e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} \mp \omega t)}. \quad (2.11)$$

Condizioni al bordo

Tornando alla nostra scatola cubica, cerchiamo ora le condizioni al bordo interno della scatola imponendo che all'esterno ci sia il vuoto, cioè che il campo elettromagnetico sia nullo ovunque fuori dalla scatola, come illustrato in figura 2.1. Prendendo una superficie come in figura e usando l'equazione di Maxwell che col-

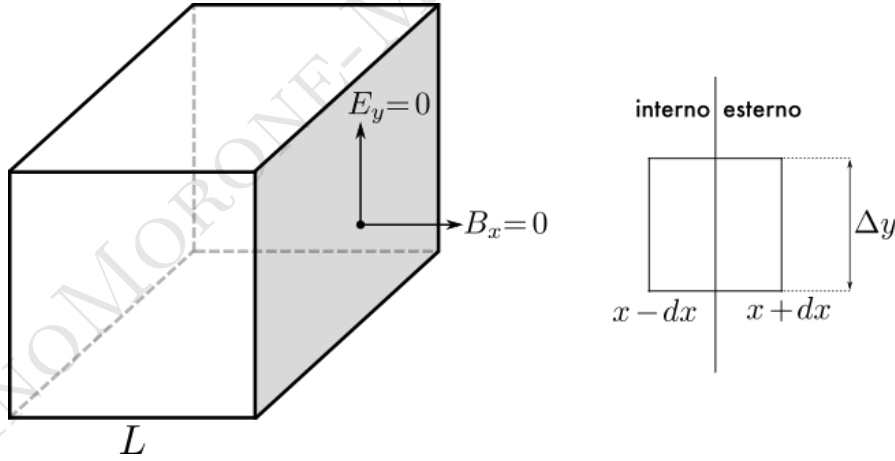


Figure 2.1: Stilizazione del corpo nero nella forma di una scatola cubica contenente radiazione elettromagnetica al suo interno. All'esterno della scatola la radiazione del corpo nero è assente (le pareti interne sono perfettamente riflettenti), cioè il campo elettromagnetico è nullo ovunque fuori dalla scatola.

lega il rotore del campo elettrico alla derivata temporale del campo magnetico possiamo scrivere

$$\int (\nabla \times \vec{E}) \cdot \hat{n} d\sigma = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int \vec{B} \cdot \hat{n} d\sigma \xrightarrow{dx \rightarrow 0} 0. \quad (2.12)$$

Usando il teorema del rotore e trascurando infinitesimi $O(dx)$ troviamo

$$0 = \int (\nabla \times \vec{E}) \cdot \hat{n} \, d\sigma = \int \vec{E} \cdot d\hat{\ell} = [E_y(x+dx) - E_y(x-dx)]\Delta y, \quad (2.13)$$

e poiché il campo elettrico all'esterno è nullo deduciamo che la componente del campo elettrico parallela alla parete della scatola deve annullarsi al bordo.

D'altra parte, usando il fatto che il campo magnetico è un campo a divergenza nulla, ricaviamo anche che

$$0 = \int (\nabla \cdot \vec{B}) \, dx = \int \frac{\partial B_x}{\partial x} dx = B_x(x+dx) - B_x(x-dx), \quad (2.14)$$

e poiché il campo magnetico è nullo all'esterno ne consegue che la componente del campo magnetico ortogonale alla parete della scatola deve annullarsi al bordo.

Una soluzione che soddisfa queste condizioni è della forma

$$A_i(\vec{x}, t) = Q_i(\vec{s}, t)\Psi_i(\vec{s}, \vec{x}), \quad (2.15)$$

dove

$$\vec{s} = \frac{L}{\pi} \vec{k}, \quad s_{x,y,z} = 1, 2, 3, \dots \quad (2.16)$$

Ad esempio

$$A_x(\vec{x}, t) = Q_x(\vec{s}, t)\Psi_x(\vec{s}, \vec{x}) = Q_x(\vec{s}, t) \cos\left(\frac{\pi s_x x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi s_y y}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi s_z z}{L}\right). \quad (2.17)$$

La soluzione descritta dall'equazione (2.15) deve soddisfare l'equazione

$$\frac{d^2}{dt^2} Q_{x,y,z}(\vec{s}, t) + \omega_s^2 Q_{x,y,z} = 0, \quad \omega_s = \frac{c\pi}{L} |s|, \quad (2.18)$$

e la condizione di trasversalità $\vec{k} \cdot \vec{Q} = 0$, per cui \vec{Q} può essere decomposto nelle due direzioni ortogonali a \vec{s} , che indichiamo con $\hat{e}^{(1)}(\vec{s})$, $\hat{e}^{(2)}(\vec{s})$, come segue

$$\vec{Q} = Q_1 \hat{e}^{(1)}(\vec{s}) + Q_2 \hat{e}^{(2)}(\vec{s}), \quad (2.19)$$

dove $Q_{1,2}$ risolvono l'equazione

$$\frac{d^2}{dt^2} Q_{1,2}(\vec{s}, t) + \omega_s^2 Q_{1,2} = 0. \quad (2.20)$$

La soluzione che contiene tutte le armoniche permesse è data dalla somma delle soluzioni descritte dall'equazione (2.15) e ha la forma

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{s}} \vec{Q}(\vec{s}, t) \vec{\Psi}(\vec{s}, \vec{x}). \quad (2.21)$$

Energia del corpo nero

Dall'espressione dell'hamiltoniana H del campo elettromagnetico

$$H = \int_{\text{scatola}} \frac{E^2 + B^2}{8\pi} d^3x , \quad (2.22)$$

e dall'ortogonalità delle funzioni Ψ si ricava la seguente espressione per H :

$$H = \frac{L^3}{64\pi c^2} \sum_{\vec{s}} \left[\dot{Q}_1^2 + \dot{Q}_2^2 + \omega_s^2 (Q_1 + Q_2)^2 \right] , \quad (2.23)$$

cioè l'hamiltoniana di un sistema di oscillatori armonici, tanti quanti sono i vettori d'onda $\times 2$, dove il fattore 2 conta le due possibili polarizzazioni del campo elettromagnetico.

Contiamo ora i gradi di libertà ΔN che ci sono in un intervallo di frequenze comprese fra ω e $\omega + \Delta\omega$, che possiamo scrivere come

$$\Delta N = 2\Delta s_x \Delta s_y \Delta s_z = \left(\frac{L}{\pi} \right)^3 2\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z . \quad (2.24)$$

Nel limite di vettori d'onda sempre più densi possiamo passare al limite del continuo e scrivere

$$\Delta N \rightarrow dN = 2 \left(\frac{L}{\pi} \right)^3 d^3k , \quad (2.25)$$

dove le componenti del vettore \vec{k} sono tutte positive. Poiché vogliamo considerare anche quelle negative dobbiamo dividere per un fattore 8 il lato destra della precedente equazione. Passando alle coordinate sferiche avremo quindi

$$dN = 2 \left(\frac{L}{\pi} \right)^3 \frac{4\pi k^2 dk}{8} = \frac{L^3}{\pi^2} k^2 dk , \quad (2.26)$$

e usando $k = \omega/c$ ricaviamo dN in funzione della frequenza

$$dN = \frac{L^3}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega . \quad (2.27)$$

Dal teorema di equipartizione dell'energia sappiamo che l'energia si può scrivere nella forma

$$E = \frac{f}{2} k_B T , \quad (2.28)$$

dove f è il numero di gradi di libertà quadratici che appaiono nell'hamiltoniana e k_B è la costante di Boltzmann. Ora, per ogni vettore d'onda abbiamo $f = 2$ (2 polarizzazioni = 2 gradi di libertà) e quindi possiamo scrivere

$$dE = k_B T dN = k_B T \frac{L^3}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega . \quad (2.29)$$

Introducendo la densità di energia $du = dE/L^3$ otteniamo la seguente espressione per du :

$$du = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega , \quad (2.30)$$

che **diverge se integriamo su tutte le frequenze**:

$$U = \int du = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega = \infty . \quad (2.31)$$

Questa divergenza segnala l'inadeguatezza della teoria elettrodinamica classica (i.e. non quantistica) nel descrivere lo spettro ultravioletto di un corpo nero (cioè la regione di alte frequenze).

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

Chapter 3

Principio d'indeterminazione

Dati due operatori hermitiani A e B (con $A = A^\dagger$ e $B = B^\dagger$) definiamo l'operatore di dispersione

$$\begin{aligned}\Delta A &= A - \langle A \rangle = A - \langle \psi | A | \psi \rangle , \\ \Delta B &= B - \langle B \rangle = B - \langle \psi | B | \psi \rangle .\end{aligned}\tag{3.1}$$

Vogliamo dimostrare la seguente relazione di **indeterminazione**

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{|\langle [A, B] \rangle|^2}{4} ,\tag{3.2}$$

o equivalentemente

$$\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta B)^2 | \psi \rangle \geq \frac{|\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|^2}{4} .\tag{3.3}$$

Osserviamo dapprima che il valore di aspettazione di un operatore hermitiano O è reale, infatti

$$\langle \psi | O | \psi \rangle = \langle \psi | O^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | O | \psi \rangle^* \rightarrow \text{Im}[\langle \psi | O | \psi \rangle] = 0 ,\tag{3.4}$$

mentre il valore di aspettazione di un di un operatore antihermitiano è immaginario puro

$$\langle \psi | O | \psi \rangle = \langle \psi | O^\dagger | \psi \rangle^* = -\langle \psi | O | \psi \rangle^* \rightarrow \text{Re}[\langle \psi | O | \psi \rangle] = 0 .\tag{3.5}$$

Usando la disuguaglianza di Schwarz

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 ,\tag{3.6}$$

e definendo

$$\begin{aligned}|\alpha\rangle &= \Delta A |\psi\rangle , \\ |\beta\rangle &= \Delta B |\psi\rangle ,\end{aligned}\tag{3.7}$$

possiamo scrivere

$$\langle \psi | \Delta A^\dagger \Delta A | \psi \rangle \langle \psi | \Delta B^\dagger \Delta B | \psi \rangle \geq |\langle \psi | \Delta A^\dagger \Delta B | \psi \rangle|^2 ,\tag{3.8}$$

e poiché ΔA e ΔB sono hermitiani troviamo

$$\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta B)^2 | \psi \rangle \geq |\langle \psi | \Delta A \Delta B | \psi \rangle|^2 .\tag{3.9}$$

Il prodotto $\Delta A \Delta B$ si può scrivere come la somma di commutatore e anticommutatore di ΔA e ΔB :

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2}[\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2}\{\Delta A, \Delta B\} , \quad (3.10)$$

dove il commutatore è antihermitiano:

$$[\Delta A, \Delta B]^\dagger = -[\Delta A, \Delta B] , \quad (3.11)$$

mentre l'anticommutatore è hermitiano

$$\{\Delta A, \Delta B\}^\dagger = \{\Delta A, \Delta B\} . \quad (3.12)$$

Di conseguenza possiamo scrivere

$$|\langle \psi | \Delta A \Delta B | \psi \rangle|^2 = \text{RE}^2 + \text{IM}^2 \geq \text{IM}^2 , \quad (3.13)$$

dove

$$i\text{IM} = \frac{1}{2} \langle \psi | [\Delta A, \Delta B] | \psi \rangle . \quad (3.14)$$

Osservando infine che

$$[\Delta A, \Delta B] = [A - \langle A \rangle I, B - \langle B \rangle I] = [A, B] , \quad (3.15)$$

possiamo concludere la dimostrazione con la disuguaglianza seguente

$$\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta B)^2 | \psi \rangle \geq |\langle \psi | \Delta A \Delta B | \psi \rangle|^2 \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [\Delta A, \Delta B] | \psi \rangle|^2 . \quad (3.16)$$

3.0.1 Un teorema sulle osservabili compatibili

Dimostriamo ora un teorema sulle osservabili compatibili (due osservabili si dicono compatibili se commutano l'una con l'altra).

Teorema. Se O_1 e O_2 sono due osservabili compatibili, allora hanno autostati in comune.

Consideriamo due casi separatamente:

1. O_1 ha **autovalori non degeneri**. Sia $|a\rangle$ un autostato di O_1 con autovalore a

$$O_1 |a\rangle = a |a\rangle . \quad (3.17)$$

Calcolando

$$O_1 O_2 |a\rangle = O_2 O_1 |a\rangle = O_2 a |a\rangle = a O_2 |a\rangle , \quad (3.18)$$

deduciamo che $O_2 |a\rangle$ è un autostato di O_1 con autovalore a e, poiché a è non degenero, otteniamo

$$O_2 |a\rangle \propto |a\rangle \rightarrow O_2 |a\rangle = b |a\rangle , \quad (3.19)$$

cioè $|a\rangle$ è un autostato di O_2 .

2. O_1 ha **autovalori degeneri**. Sia $|a\rangle$ un autostato di O_1 con autovalore a

$$O_1|a\rangle = a|a\rangle . \quad (3.20)$$

Decomponiamo $|a\rangle$ nella base di autostati di O_2 :

$$|a\rangle = \sum_i c_i |b_i\rangle \quad \text{con} \quad O_2|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle . \quad (3.21)$$

D'altra parte possiamo scrivere

$$(O_1 - a)|a\rangle = 0 = (O_1 - a) \sum_i c_i |b_i\rangle = \sum_i c_i (O_1 - a)|b_i\rangle . \quad (3.22)$$

Abbiamo due possibilità

$$\begin{aligned} 1) \quad & c_i = 0 \quad \forall i ; \\ 2) \quad & (O_1 - a)|b_i\rangle = 0 . \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ma se prendiamo $|a\rangle$ diverso dal ket nullo avremo

$$c_i = 0 , \quad (3.24)$$

e allora

$$(O_1 - a)|b_i\rangle = 0 \rightarrow O_1|b_i\rangle = a|b_i\rangle , \quad (3.25)$$

cioè $|b_i\rangle$ sono autostati simultanei di O_1 e O_2 .

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

Chapter 4

Regole di quantizzazione di Dirac

Partiamo dalla definizione di parentesi di Poisson di due grandezze $u(q, p)$ e $v(q, p)$ funzioni delle coordinate generalizzate q e dei loro momenti coniugati p :

$$\{u, v\} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial v}{\partial q_i} \right). \quad (4.1)$$

Vale la seguente proprietà

$$\{u_1 u_2, v\} = u_1 \{u_2, v\} + \{u_1, v\} u_2. \quad (4.2)$$

Calcoliamo ora $\{u_1 u_2, v_1 v_2\}$:

$$\begin{aligned} \{u_1 u_2, v_1 v_2\} &= u_1 \{u_2, v_1 v_2\} + \{u_1, v_1 v_2\} u_2 = \\ &= u_1 v_1 \{u_2, v_2\} + u_1 \{u_2, v_1\} v_2 + v_1 \{u_1, v_2\} u_2 + \{u_1, v_1\} v_2 u_2 = \\ &= v_1 \{u_1 u_2, v_2\} + \{u_1 u_2, v_1\} v_2 = \\ &= v_1 u_1 \{u_2, v_2\} + v_1 \{u_1, v_2\} u_2 + u_1 \{u_2, v_1\} v_2 + \{u_1, v_1\} u_2 v_2, \end{aligned} \quad (4.3)$$

da cui ricaviamo

$$(u_1 v_1 - v_1 u_1) \{u_2, v_2\} + \{u_1, v_1\} (v_2 u_2 - u_2 v_2) = 0, \quad (4.4)$$

che possiamo anche scrivere come

$$[u_1, v_1] \{u_2, v_2\} = \{u_1, v_1\} [u_2, v_2]. \quad (4.5)$$

Per essere soddisfatta, questa equazione esige che

$$[u, v] = K \{u, v\}, \quad (4.6)$$

e, poiché $[u, v]$ è antihermitiano e $\{u, v\}$ hermitiano, deve essere vero che

$$[u, v] = iK \{u, v\}, \quad (4.7)$$

dove K (che è reale) ha le dimensioni di un'azione. É naturale quindi porre

$$\boxed{[u, v] = i\hbar \{u, v\}}. \quad (4.8)$$

Quindi, per passare dal classico al quantistico occorre sostituire le parentesi di Poisson con i **commutatori**, ovverosia

$$\{u, v\} \rightarrow \frac{[u, v]}{i\hbar} . \quad (4.9)$$

Calcoliamo ora

$$\begin{aligned} \langle q | \left[\hat{q}, \frac{\hat{d}}{dq} \right] | \psi \rangle &= \left(q \frac{d}{dq} - \frac{d}{dq} q \right) \psi(q) = \\ &= q \frac{d}{dq} \psi(q) - \psi(q) - q \frac{d}{dq} \psi(q) = -\psi(q) = -\langle q | \psi \rangle , \end{aligned} \quad (4.10)$$

per cui avremo

$$\left[\hat{q}, \frac{\hat{d}}{dq} \right] = -1 . \quad (4.11)$$

Ma

$$[q, p] = i\hbar \{q, p\} = i\hbar , \quad (4.12)$$

e

$$\left[\hat{q}, -i\hbar \frac{\hat{d}}{dq} \right] = i\hbar . \quad (4.13)$$

Quindi \hat{p} e $-i\hbar \frac{\hat{d}}{dq}$ soddisfano le stesse regole di commutazione. Di conseguenza, devono essere uguali a meno di una funzione di \hat{q} :

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\hat{d}}{dq} + f(\hat{q}) . \quad (4.14)$$

Ma essendo $f(\hat{q})$ una quantità non misurabile (la non misurabilità è una conseguenza dell'arbitrarietà nella sua definizione) deve valere la relazione seguente

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar \frac{\hat{d}}{dq}} . \quad (4.15)$$

Diamo un senso ora alla scrittura

$$\frac{\hat{d}}{dx} | \psi \rangle . \quad (4.16)$$

Definiamo

$$\langle x | \frac{\hat{d}}{dx} | \psi \rangle = \frac{d}{dx} \psi(x) , \quad (4.17)$$

e

$$\langle x' | \frac{\hat{d}}{dx} | \psi \rangle = \frac{d}{dx} \delta(x - x') = -\frac{d}{dx'} \delta(x - x') . \quad (4.18)$$

Consideriamo la quantità

$$\begin{aligned} \langle \phi | \frac{\hat{d}}{dx} | \psi \rangle &= \int \langle \phi | y \rangle \langle y | \frac{\hat{d}}{dx} | \psi \rangle dy = \int \phi^*(y) \frac{d}{dy} \psi(y) dy = \\ &= \int \langle \phi | \frac{\hat{d}}{dx} | y \rangle \langle y | \psi \rangle dy = \int \left(\frac{d\phi}{dy} \right)^* \psi(y) dy = - \int \phi^* \frac{d\psi}{dy} dy \end{aligned}, \quad (4.19)$$

dove l'ultimo passaggio si ottiene dopo un'integrazione per parti. Possiamo quindi scrivere la seguente corrispondenza duale

$$\frac{\hat{d}}{dx} | \psi \rangle \xrightarrow{\text{CD}} - \langle \frac{\hat{d}}{dx} \psi |, \quad (4.20)$$

cioè

$$\langle \phi | \frac{\hat{d}}{dx} | \psi \rangle = - \langle \psi | \frac{\hat{d}}{dx} | \phi \rangle^*, \quad (4.21)$$

da cui prediamo atto che $\frac{\hat{d}}{dx}$ è antihermitiano.

4.1 Operatore di Traslazione Infinitesima

Le proprietà che richiediamo all'operatore di traslazione (infinitesima) \hat{T} sono:

1. $T^\dagger T = T T^\dagger = I$, cioè T conserva la norma;
2. $T(-\delta x) = T^{-1}(\delta x)$;
3. linearità;
4. che si riduca all'identità per $\delta x \rightarrow 0$.

Scrivendo \hat{T} nella forma

$$\hat{T} = \hat{I} - i\delta x \hat{G}, \quad (4.22)$$

avremo

$$T^\dagger T = (I + i\delta x G^\dagger)(I - i\delta x G) = I + i\delta x(G^\dagger - G) + O(\delta x^2). \quad (4.23)$$

Se $G = G^\dagger$, cioè G è hermitiano, allora l'operatore T definito nell'equazione (4.22) soddisfa tutte le proprietà.

Ora definiamo l'azione di T su $|x\rangle$ come

$$T(\delta x)|x\rangle = (I - i\delta x G)|x\rangle = |x + \delta x\rangle, \quad (4.24)$$

e su $|\psi\rangle$ come

$$T(\delta x)|\psi\rangle = T(\delta x) \int |\psi\rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int |x + dx\rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int |x\rangle \langle x - \delta x | \psi \rangle dx, \quad (4.25)$$

da cui ricaviamo che

$$\begin{aligned}\hat{T}\psi(x) &= \psi(x - dx) = \psi(x) - \frac{d}{dx}\psi(x)\delta x + O(\delta x^2) , \\ \hat{T}\psi(x) &= (I - i\delta x G)\psi(x) = \psi(x) - iG\psi(x)\delta x ,\end{aligned}\quad (4.26)$$

e quindi

$$i\hat{G} = \frac{\hat{d}}{dx} = \frac{i}{\hbar}\hat{p} , \quad (4.27)$$

per cui il **generatore** \hat{G} delle traslazioni è proprio l'**impulso**:

$$\hat{G} = \frac{\hat{p}}{\hbar} . \quad (4.28)$$

Possiamo costruire una traslazione finita componendo traslazioni infinitesime nel modo seguente. Definiamo

$$\Delta x = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \delta x N , \quad (4.29)$$

e imponiamo che sia una quantità finita. Allora avremo

$$\hat{T}(\Delta x)|\psi\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i\hat{p}\Delta x}{\hbar N} \right)^N |\psi\rangle = e^{-i\hat{p}\Delta x/\hbar} |\psi\rangle . \quad (4.30)$$

4.2 Operatore di Evoluzione Temporale

Analogamente all'operatore di traslazione possiamo scrivere l'operatore di evoluzione temporale come

$$\hat{U}(\Delta t) = e^{-i\hat{O}\Delta t} , \quad \Delta t = t - t_0 . \quad (4.31)$$

Calcoliamo ora il valor medio di un operatore \hat{f} sullo stato $|\psi\rangle_t$:

$$\bar{f}(t) = {}_t\langle\psi|f|\psi\rangle_t = {}_{t_0}\langle\psi|e^{iO(t-t_0)} f e^{-iO(t-t_0)} \hat{f}|\psi\rangle_{t_0} . \quad (4.32)$$

Prendendo la derivata temporale di $\bar{f}(t)$ otteniamo

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\bar{f}(t) &= {}_{t_0}\langle\psi|e^{iO(t-t_0)} iO f e^{-iO(t-t_0)} + e^{iO(t-t_0)} f (-iO) e^{-iO(t-t_0)} \hat{f}|\psi\rangle_{t_0} = \\ &= {}_t\langle\psi|iO f|\psi\rangle_t + {}_t\langle\psi|f(-iO)|\psi\rangle_t = i {}_t\langle\psi|[O, f]|\psi\rangle_t .\end{aligned}\quad (4.33)$$

D'altra parte sappiamo che

$$\frac{d}{dt}\bar{f}(t) = \{H, f\} = \frac{i}{\hbar}[H, f] = i[O, f] , \quad (4.34)$$

da cui deduciamo che

$$\hat{O} = \frac{\hat{H}}{\hbar} , \quad (4.35)$$

cioè il generatore \hat{O} dell'evoluzione temporale è l'hamiltoniana \hat{H} . L'operatore di evoluzione temporale finito definito nell'equazione (4.31) è quindi dato da

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)} . \quad (4.36)$$

4.2.1 Evoluzione del pacchetto d'onda gaussiano

Consideriamo la funzione d'onda $\psi(x)$ a un certo istante $t = 0$ data da

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\Delta x^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\Delta x^2}\right). \quad (4.37)$$

Lo stato al tempo t generico sarà

$$|\psi\rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle e^{-iE(p)t/\hbar} \langle p|\psi\rangle. \quad (4.38)$$

La probabilità di trovare la particella con impulso p è

$$dP = |e^{-iE(p)t/\hbar} \langle p|\psi\rangle|^2 dp = |\langle p|\psi\rangle|^2 dp, \quad (4.39)$$

che è indipendente dal tempo.

Calcoliamo ora l'evoluzione temporale del pacchetto d'onda, cioè la funzione d'onda $\psi(x, t)$:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \langle x|\psi\rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|p\rangle e^{-iE(p)t/\hbar} \langle p|\psi\rangle dp = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{1}{2\pi\Delta p^2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar} e^{-ip^2 t/2m\hbar} e^{-p^2/4\Delta p^2} dp = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{4\Delta x^2}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\left(\frac{\Delta x^2}{\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right)p^2 + \frac{px}{\hbar}\right] dp = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{2\Delta x^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \left(\frac{\pi}{\frac{\Delta x^2}{\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{x^2}{\hbar^2} \frac{1}{4\left(\frac{\Delta x^2}{\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right)}\right] = \\ &= \mathcal{N} \exp\left(-\frac{x^2}{4\Delta x^2 + 2it\hbar/m}\right) = \mathcal{N} \exp\left[\frac{-x^2(4\Delta x^2 - 2it\hbar/m)}{(4\Delta x^2)^2 + (2t\hbar/m)^2}\right], \end{aligned} \quad (4.40)$$

avendo usato il fatto che

$$\Delta x^2 \Delta p^2 = \frac{\hbar^2}{4} \rightarrow \Delta p^2 = \frac{\hbar^2}{4\Delta x^2}. \quad (4.41)$$

Il modulo quadro della funzione d'onda vale

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= |\mathcal{N}|^2 \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{x^2 4\Delta x^2}{(4\Delta x^2)^2 + (2t\hbar/m)^2}\right] = |\mathcal{N}|^2 \exp\left\{-\frac{1}{2} \frac{4x^2 \Delta x^2}{(4\Delta x^2)^2 \left[1 + \left(\frac{2t\hbar}{4m\Delta x^2}\right)^2\right]}\right\} = \\ &= |\mathcal{N}|^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2} \frac{1}{4\Delta x^2 + \frac{t^2 \hbar^2}{4m^2 \Delta x^2}}\right) = |\mathcal{N}|^2 \exp\left[-\frac{x^2}{2\Delta x^2(t)}\right], \end{aligned} \quad (4.42)$$

dove

$$\boxed{\Delta x^2(t) = \Delta x^2 + \frac{t^2 \hbar^2}{4m^2 \Delta x^2}}, \quad (4.43)$$

cioè la **gaussiana aumenta di ampiezza**, come illustrato in figura 4.1.

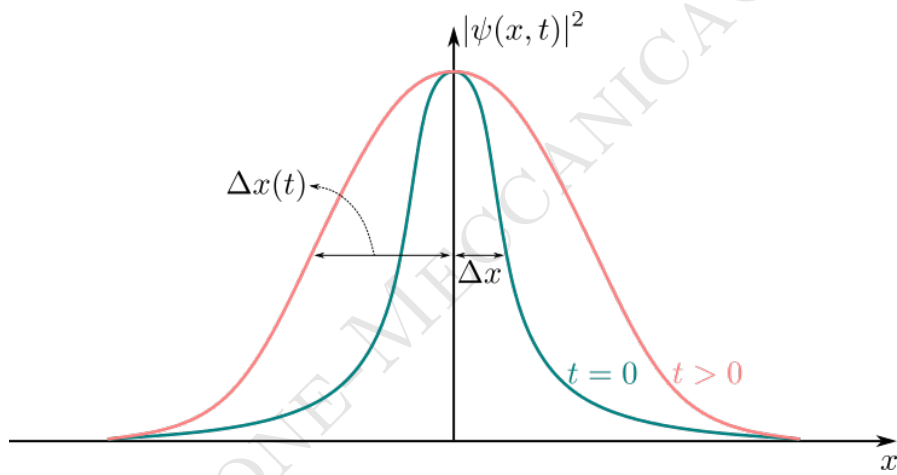


Figure 4.1: Evoluzione temporale di un pacchetto d'onda gaussiano.

Chapter 5

Equazione di continuità

Consideriamo l'equazione di Schrödinger in 3 dimensioni:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H\psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t). \quad (5.1)$$

Facendo il complesso coniugato troviamo

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi^*(\vec{r}, t). \quad (5.2)$$

Moltiplichiamo l'equazione (5.1) per ψ^* e l'equazione (5.2) per ψ .

$$\begin{aligned} i\hbar \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi &= \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi, \\ -i\hbar \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* &= \psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi^*, \end{aligned} \quad (5.3)$$

da cui sottraendo otteniamo

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi + \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*). \quad (5.4)$$

Calcoliamo il lato destro per la componente x :

$$\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi - \psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* \right) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \equiv -J_x, \quad (5.5)$$

dove abbiamo definito la componente J_x del vettore \vec{J} , che chiamiamo **flusso di probabilità**. Con questa definizione di \vec{J} possiamo scrivere

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi\psi^*) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2m}{i\hbar} \nabla \cdot \vec{J}. \quad (5.6)$$

Chiamando $\rho = \psi\psi^* = |\psi|^2$ la **densità di probabilità**, otteniamo

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \vec{J}}, \quad (5.7)$$

che prende il nome di **equazione di continuità**, giacché esprime matematicamente la conservazione della probabilità (analogamente all'equazione di continuità classica che esprime la conservazione della massa di un sistema chiuso).

5.1 Potenziale a gradino

Consideriamo il potenziale $U(x)$ in una dimensione definito come

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 & x \geq 0 \end{cases}, \quad (5.8)$$

con $U_0 > 0$, come mostrato in figura 5.1.

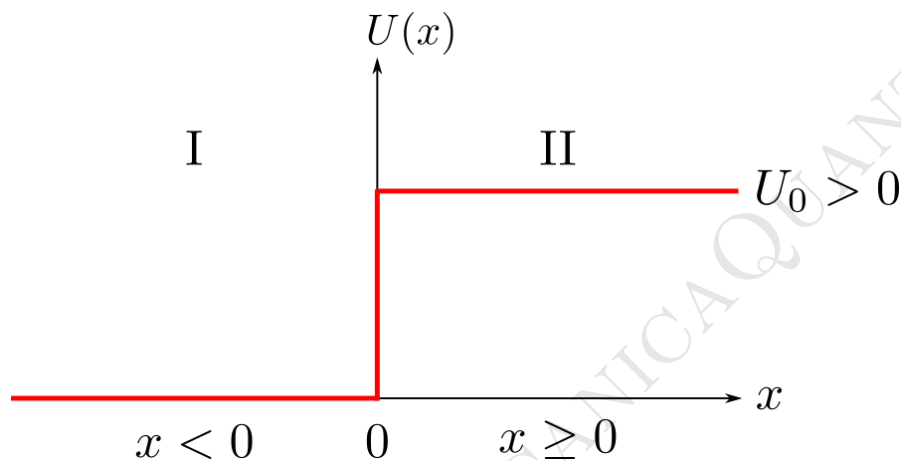


Figure 5.1: Potenziale a gradino

Analizziamo due casi.

1. Caso $E > U_0$.

Nella zona I l'hamiltoniana della particella è data da

$$H_I = \frac{p^2}{2m}. \quad (5.9)$$

L'equazione agli autovalori è

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi \rightarrow \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x), \quad (5.10)$$

dove k è dato da

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}. \quad (5.11)$$

La soluzione è

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + B^{-ikx}. \quad (5.12)$$

In generale, la funzione d'onda dipendente dal tempo è

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - Et/\hbar)} + Be^{-i(kx + Et/\hbar)}. \quad (5.13)$$

Nella zona II l'hamiltoniana è

$$H_{II} = \frac{p^2}{2m} + U_0, \quad (5.14)$$

e l'equazione agli autovalori è

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -k'^2\psi(x) , \quad (5.15)$$

dove k' è dato da

$$k'^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} . \quad (5.16)$$

La soluzione è

$$\psi(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} , \quad (5.17)$$

e quella dipendente dal tempo è

$$\psi(x, t) = Ce^{i(k'x - Et/\hbar)} + De^{-i(k'x + Et/\hbar)} . \quad (5.18)$$

Per la continuità della funzione d'onda in $x = 0$ e della sua derivata prima devono essere soddisfatte le condizioni seguenti

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi^I(0) = \psi^{II}(0) \\ \left. \frac{d}{dx}\psi^I(x) \right|_{x=0} = \left. \frac{d}{dx}\psi^{II}(x) \right|_{x=0} \end{array} \right. \quad (5.19)$$

Assumiamo ora che $D = 0$, cioè che la funzione d'onda si propaghi dalla zona I verso la zona II. In altre parole, assumiamo che la funzione d'onda nella regione II sia solo un'onda progressiva senza una componente regressiva. Avremo quindi

$$\left\{ \begin{array}{l} A + B = C \\ ik(A - B) = ik'C \end{array} \right. \rightarrow \frac{B}{A} = \frac{k' - k}{k' + k} , \quad C = \frac{2k'}{k' + k}A . \quad (5.20)$$

Calcoliamo la corrente nella zona I:

$$J_x = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{d}{dx}\psi - \psi \frac{d}{dx}\psi^* \right) , \quad (5.21)$$

dove prendiamo ψ della forma

$$\psi(x) = Ae^{i(kx - Et/\hbar)} , \quad (5.22)$$

cioè solo un'onda progressiva. Avremo

$$J_x = -\frac{i\hbar}{2m} \left(A^* e^{-i(kx - Et/\hbar)} A(ik) e^{i(kx - Et/\hbar)} + ikAe^{i(kx - Et/\hbar)} A^* e^{-i(kx - Et/\hbar)} \right) , \quad (5.23)$$

ovverosia

$$J_x^I = -\frac{i\hbar}{2m} |A|^2 2ik = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 = \frac{p}{m} |A|^2 = v|A|^2 \quad \text{nella zona I} , \quad (5.24)$$

dove v è la velocità della particella. Analogamente, nella zona II otteniamo

$$J_x^{II} = v'|C|^2 \quad \text{nella zona II} . \quad (5.25)$$

Definiamo il **coefficiente di trasmissione** come il rapporto tra J_x^{II} e J_x^{I} :

$$T = \frac{J_x^{\text{II}}}{J_x^{\text{I}}} = \frac{|C|^2 v'}{|A|^2 v} , \quad (5.26)$$

che può essere interpretato come la frazione di particelle che passa per unità di tempo dalla zona I alla zona II. In modo simile definiamo il coefficiente di riflessione R come

$$R = 1 - T , \quad (5.27)$$

che rappresenta la frazione di particelle che viene riflessa per unità di tempo dalla barriera di potenziale in $x = 0$.

2. Caso $E < U_0$.

Nella zona I la funzione d'onda è la stessa del caso precedente, cioè

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - Et/\hbar)} + Be^{-i(kx + Et/\hbar)} . \quad (5.28)$$

Nella zona II l'equazione agli autovalori è

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = k''^2 \psi(x) , \quad (5.29)$$

dove

$$k''^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} , \quad (5.30)$$

la cui soluzione è

$$\psi(x) = Ce^{-k''x} + De^{k''x} , \quad (5.31)$$

dove D deve essere nullo altrimenti $\psi(x)$ diverge all'infinito. Includendo la dipendenza dal tempo otteniamo

$$\psi(x) = Ce^{-k''x - iEt/\hbar} . \quad (5.32)$$

Richiedendo che la funzione d'onda e la sua derivata prima siano continue in $x = 0$ otteniamo un sistema di equazioni lineari per i coefficienti A, B, C :

$$\begin{cases} A + B = C \\ ik(A - B) = -k''C \end{cases} \rightarrow \frac{B}{A} = i \frac{k - k''}{k + k''} . \quad (5.33)$$

Calcolando le correnti nelle zone I e II troviamo

$$\begin{aligned} J_x^{\text{I}} &= |A|^2 v , \\ J_x^{\text{II}} &= -\frac{i\hbar}{2m} \left(|C|^2 (-k'') e^{-2k''x} + |C|^2 (k'') e^{-2k''x} \right) = 0 , \end{aligned} \quad (5.34)$$

per cui il coefficiente di trasmissione è nullo

$$T = \frac{J_x^{\text{II}}}{J_x^{\text{I}}} = 0 . \quad (5.35)$$

Eppure è importante notare che

$$\rho^{\text{II}} = |\psi^{\text{II}}(x, t)|^2 = |C|^2 e^{-2k''x} , \quad (5.36)$$

cioè otteniamo una densità di probabilità di trovare particelle nella zona II non nulla, mentre classicamente tale zona è vietata, i.e., fisicamente inaccessibile.

Chapter 6

Oscillatore armonico unidimensionale

L'hamiltoniano di un oscillatore armonico quantistico unidimensionale è

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} . \quad (6.1)$$

Definiamo l'operatore \hat{a} come

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega\hat{x} + i\hat{p}) , \quad (6.2)$$

e il suo hermitiano coniugato \hat{a}^\dagger :

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega\hat{x} - i\hat{p}) . \quad (6.3)$$

Calcolando il commutatore $[a, a^\dagger]$ otteniamo il risultato

$$[a, a^\dagger] = -\frac{i}{\hbar}[x, p] = 1 . \quad (6.4)$$

Calcoliamo ora il prodotto $a^\dagger a$:

$$a^\dagger a = \frac{1}{2m\omega\hbar}(m\omega x - ip)(m\omega x + ip) = \frac{1}{2m\omega\hbar}(m^2\omega^2 x^2 + p^2 + im\omega[x, p]) , \quad (6.5)$$

da cui ricaviamo

$$\hbar\omega a^\dagger a = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega i(i\hbar)}{2m} = H - \frac{\hbar\omega}{2} , \quad (6.6)$$

ovverosia

$$H = \hbar\omega \left(\omega a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) . \quad (6.7)$$

Definiamo l'**operatore numero** \hat{N} come

$$\hat{N} = a^\dagger a , \quad (6.8)$$

cosicché possiamo scrivere l'hamiltoniano come

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) . \quad (6.9)$$

Ora, poiché

$$[\hat{H}, \hat{N}] = 0 , \quad (6.10)$$

possiamo trovare un set completo di autostati simultanei di H e N . Calcoliamo a tal scopo i commutatori seguenti:

$$\begin{aligned} [N, a] &= [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a = -a , \\ [N, a^\dagger] &= [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger] a = a^\dagger . \end{aligned} \quad (6.11)$$

L'equazione agli autovalori per N è

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle , \quad (6.12)$$

e per \hat{H} è

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle , \quad (6.13)$$

per cui i livelli di energia E_n sono

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) . \quad (6.14)$$

Calcoliamo ora l'azione di \hat{N} su $\hat{a}|n\rangle$:

$$N\hat{a}|n\rangle = ([N, a] + aN)|n\rangle = (-a + aN)|n\rangle = -a|n\rangle + an|n\rangle = (n-1)a|n\rangle , \quad (6.15)$$

e quindi $\hat{a}|n\rangle$ è un autostato di \hat{N} con autovalore $n-1$. Di conseguenza $\hat{a}|n\rangle$ è proporzionale al ket $|n-1\rangle$, i.e.

$$\hat{a}|n\rangle \propto |n-1\rangle . \quad (6.16)$$

Analogamente troviamo che

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle . \quad (6.17)$$

Calcoliamo la norma di $\hat{a}|n\rangle$:

$$\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \langle n|N|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n \geq 0 , \quad (6.18)$$

che ci dice che gli autovalori E_n hanno un limite inferiore: $E_n \geq E_0 = \hbar\omega/2$. Di conseguenza deve essere vero che

$$\hat{a}|0\rangle = 0 , \quad (6.19)$$

e quindi anche

$$a^\dagger a|0\rangle = 0 \rightarrow N|0\rangle = 0|0\rangle . \quad (6.20)$$

Inoltre, possiamo scrivere

$$\begin{aligned} a^\dagger|0\rangle &= \alpha|1\rangle , \\ a^\dagger|1\rangle &= \beta|2\rangle , \\ &\dots , \\ a^\dagger|n\rangle &= \eta|n+1\rangle . \end{aligned} \quad (6.21)$$

Dimostriamo ora la seguente uguaglianza:

$$[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1} . \quad (6.22)$$

Dim. Vale per $n = 1$. Infatti $[a, a^\dagger] = 1$. Supponiamo che valga per $n - 1$, i.e.

$$[a, (a^\dagger)^{n-1}] = (n-1)(a^\dagger)^{n-2} , \quad (6.23)$$

e dimostriamo che continua a essere valida per n . A tal scopo moltiplichiamo l'equazione precedente per a^\dagger :

$$\begin{aligned} a^\dagger a (a^\dagger)^{n-1} - (a^\dagger)^n a &= (n-1)(a^\dagger)^{n-1} , \\ \rightarrow ([a^\dagger, a] + a a^\dagger)(a^\dagger)^{n-1} - (a^\dagger)^n a &= (-1 + a a^\dagger)(a^\dagger)^{n-1} - (a^\dagger)^n a = \\ = -(a^\dagger)^{n-1} + a (a^\dagger)^n - (a^\dagger)^n a &= (n-1)(a^\dagger)^{n-1} , \\ \rightarrow [a, (a^\dagger)^n] &= n(a^\dagger)^{n-1} , \end{aligned} \quad (6.24)$$

C.V.D.

Ora dimostriamo che

$$[a^\dagger, a^n] = n a^{n-1} . \quad (6.25)$$

Dim. Sappiamo che

$$[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1} . \quad (6.26)$$

Prendiamo l'aggiunto di entrambi i membri

$$\begin{aligned} (a(a^\dagger)^n - (a^\dagger)^n a)^\dagger &= n((a^\dagger)^{n-1})^\dagger \\ \rightarrow ((a^\dagger)^n)^\dagger a^\dagger - a^\dagger ((a^\dagger)^n)^\dagger &= n a^{n-1} \\ \rightarrow a^n a^\dagger - a^\dagger a^n &= -[a^\dagger, a^n] = n a^{n-1} \\ \rightarrow [a^\dagger, a^n] &= -n a^{n-1} , \end{aligned} \quad (6.27)$$

C.V.D.

Ritorniamo ora all'espressione

$$(a^\dagger)^n|0\rangle = \alpha|n\rangle \rightarrow |\alpha|^2 \langle n|n\rangle = \langle 0|a^n (a^\dagger)^n|0\rangle . \quad (6.28)$$

Osservando che

$$a^n (a^\dagger)^n = a^{n-1} (a (a^\dagger)^n) = a^{n-1} ([a, (a^\dagger)^n] + (a^\dagger)^n a) = a^{n-1} n (a^\dagger)^{n-1} + a^{n-1} (a^\dagger)^n a , \quad (6.29)$$

ricaviamo che

$$\begin{aligned} \langle 0|a^{n-1}n(a^\dagger)^{n-1}|0\rangle + \langle 0|a^{n-1}(a^\dagger)^na|0\rangle &= |\alpha|^2\langle n|n\rangle \\ \rightarrow n\langle 0|a^{n-1}(a^\dagger)^{n-1}|0\rangle &= |\alpha|^2\langle n|n\rangle, \end{aligned} \quad (6.30)$$

cioè

$$|\alpha|^2\langle n|n\rangle = \langle 0|a^n(a^\dagger)^n|0\rangle = n\langle 0|a^{n-1}(a^\dagger)^{n-1}|0\rangle. \quad (6.31)$$

Iterando troviamo

$$|\alpha|^2\langle n|n\rangle = n!\langle 0|0\rangle, \quad (6.32)$$

e se $\langle 0|0\rangle = 1$, allora

$$\frac{|\alpha|^2}{n!}\langle n|n\rangle = 1, \quad (6.33)$$

per cui, se vogliamo autostati normalizzati a 1, dobbiamo imporre

$$\alpha = \sqrt{n!}. \quad (6.34)$$

Ricapitolando, abbiamo trovato il seguente risultato

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle}. \quad (6.35)$$

Determiniamo esplicitamente l'azione di a e a^\dagger sugli autostati $|n\rangle$. Sappiamo che

$$a|n\rangle = \alpha|n-1\rangle. \quad (6.36)$$

Inoltre, richiedendo che gli autostati $|n\rangle$ e $|n-1\rangle$ siano normalizzati, avremo

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = |\alpha|^2, \quad (6.37)$$

da cui troviamo

$$n = |\alpha|^2. \quad (6.38)$$

Prendendo α reale e positivo avremo che $\alpha = \sqrt{n}$; dunque

$$\boxed{a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle}. \quad (6.39)$$

Consideriamo ora $a^\dagger|n\rangle$. Sappiamo che

$$a^\dagger|n\rangle = \beta|n+1\rangle \rightarrow \langle n|aa^\dagger|n\rangle = |\beta|^2. \quad (6.40)$$

Usando il fatto che

$$aa^\dagger = [a, a^\dagger] + a^\dagger a, \quad (6.41)$$

otteniamo

$$\langle n|1 + a^\dagger a|n\rangle = \langle n|n\rangle + n\langle n|n\rangle = n + 1 = |\beta|^2. \quad (6.42)$$

Prendendo β reale e positivo troviamo

$$\beta = \sqrt{n+1}, \quad (6.43)$$

e quindi

$$\boxed{a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle}. \quad (6.44)$$

6.1 Funzione d'onda dello stato fondamentale

Introduciamo la quantità adimensionale ξ definita come

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x . \quad (6.45)$$

Sappiamo che

$$\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} ip = \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \frac{d}{dx} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{d\xi} , \quad (6.46)$$

da cui ricaviamo

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega x + ip) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) , \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) . \end{aligned} \quad (6.47)$$

La quantità

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \equiv x_0 \quad (6.48)$$

ha le dimensioni di una lunghezza e fissa la scala delle lunghezze dell'oscillatore. Di conseguenza ξ è una variabile adimensionale che possiamo scrivere come:

$$\xi = \frac{x}{x_0} . \quad (6.49)$$

La funzione d'onda dello stato fondamentale è

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle . \quad (6.50)$$

Calcoliamo la quantità $\langle x|a|0\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle x|a|0\rangle &= 0 = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \langle x|m\omega x + ip|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \langle x|m\omega x + i \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) |0\rangle \\ &\rightarrow \frac{d}{dx} \langle x|0\rangle = -\frac{m\omega x}{\hbar} \langle x|0\rangle , \end{aligned} \quad (6.51)$$

ovverosia

$$\frac{d}{dx} \psi_0(x) = -\frac{m\omega x}{\hbar} \psi_0(x) , \quad (6.52)$$

la cui soluzione è

$$\boxed{\psi_0(x) = \mathcal{N}_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)} , \quad (6.53)$$

che rappresenta la funzione d'onda dello stato fondamentale. Calcoliamo il valore di \mathcal{N}_0 che normalizza la funzione d'onda:

$$\langle 0|0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle 0|x\rangle \langle x|0\rangle dx = |\mathcal{N}_0|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = |\mathcal{N}_0|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1 . \quad (6.54)$$

Prendendo \mathcal{N}_0 reale troviamo

$$\mathcal{N}_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}, \quad (6.55)$$

per cui la funzione d'onda normalizzata è

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right). \quad (6.56)$$

In termini della variabile ξ la funzione d'onda si scrive come

$$\psi_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} e^{-\xi^2/2}. \quad (6.57)$$

Calcoliamo ora il valor medio di x^2

$$\bar{x}^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi_0(x)|^2 dx = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx = \frac{x_0^2}{2}. \quad (6.58)$$

Il valor medio di ξ^2 è

$$\bar{\xi}^2 = \frac{\bar{x}^2}{x_0^2} = \frac{1}{2}. \quad (6.59)$$

Le altre autofunzioni dell'energia si trovano risolvendo

$$\langle x|n\rangle = \langle x| \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle, \quad (6.60)$$

che in termini di ξ si scrive come

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \xi | \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^n \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right)^n |0\rangle = \frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right)^n \psi_0(\xi), \quad (6.61)$$

cioè

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right)^n \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} e^{-\xi^2/2}. \quad (6.62)$$

Calcolando le derivate otteniamo

$$\left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right)^n e^{-\xi^2/2} = \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right)^{n-1} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right) e^{-\xi^2/2} = \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right)^{n-1} (\xi + \xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (6.63)$$

da cui iterando troviamo la forma esplicita delle autofunzioni dell'energia, cioè **le funzioni d'onda dei livelli eccitati:**

$$\boxed{\psi_n(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}2^{n/2}\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/4} \mathcal{H}_n(\xi) e^{-\xi^2/2}}, \quad (6.64)$$

dove $\mathcal{H}_n(\xi)$ è il polinomio di Hermite di grado n , che è definito come

$$\mathcal{H}_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2}. \quad (6.65)$$

Ad esempio, i primi quattro polinomi di Hermite sono

$$\begin{aligned}H_0 &= 1 , \\H_1 &= 2\xi , \\H_2 &= 4\xi^2 - 2 , \\H_3 &= 8\xi^3 - 12\xi .\end{aligned}\tag{6.66}$$

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

Chapter 7

Stati coerenti

Consideriamo l'hamiltoniano di un oscillatore armonico

$$H = \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 \frac{x^2}{2}, \quad (7.1)$$

e cerchiamo gli autostati dell'operatore di distruzione \hat{a} :

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad (7.2)$$

dove λ è in generale un numero complesso. Esprimendo $|\lambda\rangle$ nella base degli autoket di H :

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0} c_n |n\rangle, \quad (7.3)$$

dove

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad (7.4)$$

e applicando \hat{a} avremo

$$a|\lambda\rangle = \sum_{n=0} c_n a|n\rangle = \sum_{n=1} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0} c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle = \lambda|\lambda\rangle = \lambda \sum_{n=0} c_n |n\rangle. \quad (7.5)$$

Moltiplicando scalarmente per $|k\rangle$ otteniamo

$$\sum_{n=0} c_{n+1} \sqrt{n+1} \langle k|n\rangle = \lambda \sum_{n=0} c_n \langle k|n\rangle, \quad (7.6)$$

da cui ricaviamo un'equazione iterativa per c_k :

$$c_{k+1} \sqrt{k+1} = \lambda c_k \rightarrow c_{k+1} = \frac{\lambda c_k}{\sqrt{k+1}}, \quad (7.7)$$

che possiamo risolvere per iterazione, appunto, partendo da c_0 :

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{\lambda c_0}{\sqrt{1}}, \\ c_2 &= \frac{\lambda c_1}{\sqrt{2}} = \frac{\lambda^2 c_0}{\sqrt{2 \cdot 1}}, \\ &\dots, \\ c_k &= \frac{\lambda^k c_0}{\sqrt{k!}}. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Inserendo l'espressione di c_k nell'equazione (7.3) otteniamo

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n c_0}{\sqrt{n!}} |n\rangle . \quad (7.9)$$

Imponendo la condizione di normalizzazione dello stato $|\lambda\rangle$ ricaviamo c_0 come segue

$$1 = \langle \lambda | \lambda \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2n} |c_0|^2}{n!} = |c_0|^2 e^{|\lambda|^2} \rightarrow |c_0|^2 = e^{-|\lambda|^2} , \quad (7.10)$$

da cui, scegliendo c_0 reale, otteniamo

$$c_0 = e^{-\frac{|\lambda|^2}{2}} . \quad (7.11)$$

Sostituendo l'espressione di c_0 nell'equazione (7.9) otteniamo quindi

$$\boxed{|\lambda\rangle = e^{-\frac{|\lambda|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle} . \quad (7.12)$$

Calcoliamo ora il valor medio dell'operatore numero \hat{N} sullo stato $|\lambda\rangle$:

$$\begin{aligned} \bar{n} \equiv \langle \lambda | N | \lambda \rangle &= e^{-|\lambda|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} n = e^{-|\lambda|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2n}}{(n-1)!} = e^{-|\lambda|^2} |\lambda|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} = \\ &= e^{-|\lambda|^2} |\lambda|^2 e^{|\lambda|^2} = |\lambda|^2 . \end{aligned} \quad (7.13)$$

Abbiamo quindi trovato che

$$\bar{n} = |\lambda|^2 . \quad (7.14)$$

A questo punto notiamo che il modulo quadro del coefficiente c_n nello sviluppo di $|\lambda\rangle$, che rappresenta la probabilità di misurare il livello di energia E_n , si può scrivere come

$$|c_n|^2 = P(E_n) = e^{-|\lambda|^2} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} = e^{-\bar{n}} \frac{\bar{n}^n}{n!} , \quad (7.15)$$

che riconosciamo come la **distribuzione di Poisson**. Il valor medio \bar{n}^2 è dato da

$$\bar{n}^2 \equiv \langle \lambda | N^2 | \lambda \rangle = e^{-|\lambda|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} n^2 = \bar{n} + \bar{n}^2 . \quad (7.16)$$

Vediamo ora come evolve nel tempo lo stato $|\lambda\rangle$:

$$|\lambda\rangle_t = e^{-iHt/\hbar} |\lambda\rangle = e^{-\frac{|\lambda|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} |n\rangle . \quad (7.17)$$

Eliminando il fattore di fase comune a tutte le autofunzioni dell'energia otteniamo

$$|\lambda\rangle_t = e^{-\frac{|\lambda|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega n t} |n\rangle = e^{-\frac{|\lambda|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-\frac{|\lambda|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda(t)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle , \quad (7.18)$$

dove abbiamo posto

$$\lambda(t) = \lambda e^{-i\omega t} . \quad (7.19)$$

Cerchiamo ora l'autofunzione associata allo stato $|\lambda\rangle$ partendo dall'espressione seguente:

$$\langle x|a|\lambda\rangle = \lambda\langle x|\lambda\rangle = \lambda\psi_\lambda(x) , \quad (7.20)$$

dove il lato sinistro si puo' scrivere come

$$\langle x|a|\lambda\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\langle x|(m\omega x + ip)|\lambda\rangle = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x} \right] \psi_\lambda(x) . \quad (7.21)$$

Introducendo la variabile ξ definita come

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{x}{x_0} = x\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} , \\ \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{m\omega}{\hbar}\frac{\partial}{\partial \xi} , \end{aligned} \quad (7.22)$$

possiamo riscrivere l'equazione (7.20) come

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \psi_\lambda(\xi) = \lambda\psi_\lambda(\xi) , \quad (7.23)$$

che ammette come soluzione la funzione

$$\psi_\lambda(\xi) = \mathcal{N}e^{-A\xi^2+B\xi} , \quad (7.24)$$

dove \mathcal{N} è un fattore di normalizzazione. Derivando rispetto a ξ e usando l'equazione (7.23) possiamo ricavare le costanti A e B :

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi_\lambda(\xi)}{\partial\xi} &= (\mathcal{N}e^{-A\xi^2+B\xi})(-2A\xi + B) = \sqrt{2}\lambda\psi_\lambda(\xi) - \xi\psi_\lambda(\xi) = \\ &= (\mathcal{N}e^{-A\xi^2+B\xi})(-\xi + \sqrt{2}\lambda) , \end{aligned} \quad (7.25)$$

da cui otteniamo $A = 1/2$ e $B = \sqrt{2}\lambda$. Riscriviamo, dunque, la soluzione $\psi_\lambda(\xi)$ nell'equazione (7.24) sostituendo ad A e B i valori appena trovati:

$$\psi_\lambda(\xi) = \mathcal{N}e^{-\xi^2/2+\sqrt{2}\lambda\xi} . \quad (7.26)$$

Imponendo la condizione di normalizzazione otteniamo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_\lambda(\xi)|^2 d\xi = |\mathcal{N}|^2 \int e^{-\xi^2+\sqrt{2}\xi(\lambda+\lambda^*)} d\xi = |\mathcal{N}|^2 \sqrt{\pi} e^{-[\text{Re}(\lambda)]^2} = 1 , \quad (7.27)$$

da cui troviamo il valore di \mathcal{N} (che possiamo scegliere reale):

$$\mathcal{N} = \left(\frac{1}{\pi} \right)^{1/4} e^{[\text{Re}(\lambda)]^2/2} . \quad (7.28)$$

Ponendo

$$\lambda = \lambda_0 e^{i\delta}, \quad \lambda_0 \in \mathbb{R}, \quad (7.29)$$

otteniamo

$$\psi_\lambda(\xi) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} e^{[\text{Re}(\lambda)]^2/2} e^{-\xi^2/2 + \sqrt{2}\xi\lambda_0(\cos\delta + i\sin\delta)}. \quad (7.30)$$

Facendo l'evoluzione temporale abbiamo trovato l'equazione (7.19) che manda λ in $\lambda \rightarrow \lambda e^{-i\omega t}$, cioè

$$\lambda \rightarrow \lambda_0 e^{i(\delta - \omega t)} \equiv \lambda_0 e^{i\delta(t)}, \quad (7.31)$$

per cui possiamo scrivere l'autofunzione $\psi_\lambda(\xi, t)$ dipendente dal tempo nella forma seguente

$$\psi_\lambda(\xi) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} e^{\lambda_0^2 \cos^2[\delta(t)]/2} e^{-\xi^2/2 + \sqrt{2}\xi\lambda_0[\cos\delta(t) + i\sin\delta(t)]}. \quad (7.32)$$

Calcolando ora il valor medio di \hat{x} , questo vale

$${}_t\langle \lambda | x | \lambda \rangle_t = \frac{x_0}{\sqrt{2}} [\lambda(t) + \lambda^*(t)] = \sqrt{2}x_0 \cos\delta(t) = \sqrt{2}x_0 \cos(\delta - \omega t). \quad (7.33)$$

Questo risultato è interpretabile osservando che la gaussiana (il pacchetto d'onda) rimane sempre uguale e oscilla (così come oscilla il valor medio di \hat{x} su questo stato) avanti e indietro con frequenza ω e periodo $T = 2\pi/\omega$. Abbiamo costruito quindi un pacchetto d'onda che rimbalza avanti e indietro senza che la sua forma si allarghi. In altre parole, dalla sovrapposizione di autostati dell'energia, abbiamo costruito uno stato che mima al meglio l'oscillatore classico e, per questo motivo, viene chiamato **stato coerente**.

Chapter 8

Livelli di Landau

Consideriamo una particella immersa in un campo magnetico \vec{H} diretto lungo l'asse z e costante

$$\vec{H} = (0, 0, H) , \quad (8.1)$$

e scegliamo il potenziale vettore \vec{A} nella forma

$$\vec{A} = (-Hy, 0, 0) , \quad (8.2)$$

cosicché $\nabla \times \vec{A} = \vec{H}$:

$$\begin{aligned} (\nabla \times \vec{A})_x &= (\partial_y A_z - \partial_z A_y) = H_x = 0 , \\ (\nabla \times \vec{A})_y &= (\partial_z A_x - \partial_x A_z) = H_y = 0 , \\ (\nabla \times \vec{A})_z &= (\partial_x A_y - \partial_y A_x) = H_z = H . \end{aligned} \quad (8.3)$$

L'hamiltoniano della particella sarà

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A}/c)^2}{2m} = \frac{(p_x + eHy/c)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} , \quad (8.4)$$

e non contiene le variabili x e z , che sono quindi **cicliche**. Di conseguenza p_x e p_z sono **costanti del moto** e assumono tutti i possibili valori da $-\infty$ a $+\infty$. Conformemente a ciò scriviamo la funzione d'onda nella forma

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)} \chi(y) . \quad (8.5)$$

Inoltre, poiché $A_z = 0$, allora p_z coincide con la quantità di moto ordinaria:

$$p_z = mv_z . \quad (8.6)$$

Quindi la velocità della particella lungo la direzione del campo può avere un valore arbitrario. Si può dire che il **moto lungo il campo non viene quantizzato**.

Scriviamo l'equazione agli autovalori:

$$\hat{H}\psi = E\psi . \quad (8.7)$$

Avremo

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{p}_z^2}{2m}\psi &= \frac{p_z^2}{2m}\psi, \\
\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\psi &= \frac{p_x^2}{2m}\psi, \\
\frac{\hat{p}_y^2}{2m}\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)}\chi''(y), \\
\left(\frac{eH}{mc}\right)\hat{p}_x y \psi &= \left(\frac{eH}{mc}\right)p_x y \psi,
\end{aligned} \tag{8.8}$$

e quindi

$$\frac{p_x^2}{2m}\psi + \left(\frac{eH}{mc}\right)\hat{p}_x y \psi + \frac{(eHy/c)^2}{2m}\psi - \frac{\hbar^2}{2m}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)}\chi''(y) + \frac{p_z^2}{2m}\psi = E\psi, \tag{8.9}$$

da cui ricaviamo l'equazione per $\chi(y)$

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''(y) + \frac{1}{2m}\left[p_x^2 + p_z^2 + \frac{2eH}{c}p_x y + \left(\frac{eHy}{c}\right)^2\right]\chi(y) &= E\chi(y), \\
\chi''(y) - \frac{1}{\hbar^2}\left[p_x^2 + p_z^2 + \frac{2eH}{c}p_x y + \left(\frac{eHy}{c}\right)^2\right]\chi(y) &= -\frac{2mE}{\hbar^2}\chi(y), \\
\chi''(y) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \frac{p_z^2}{2m} - \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}\left(\frac{eH}{c}\right)^2 y^2 + \frac{eH}{mc}p_x y\right)\right]\chi(y) &= 0, \\
\chi''(y) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \frac{p_z^2}{2m} - \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}\left(\frac{eH}{c}\right)^2 y^2 - \frac{|e|H}{mc}p_x y\right)\right]\chi(y) &= 0, \\
\chi''(y) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \frac{p_z^2}{2m} - \left(\frac{1}{2}m\omega_H^2 y^2 - \omega_H p_x y + \frac{p_x^2}{2m}\right)\right]\chi(y) &= 0, \\
\chi''(y) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \frac{p_z^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega_H^2(y - y_0)^2\right]\chi(y) &= 0,
\end{aligned} \tag{8.10}$$

che è l'equazione di un **oscillatore armonico lineare** con frequenza ω_H e posizione di equilibrio y_0 dati da

$$\omega_H = \frac{|e|H}{mc}, \quad y_0 = \frac{p_x c}{|e|H}. \tag{8.11}$$

Di conseguenza, i **livelli di energia** si possono scrivere come

$$\left(E - \frac{p_z^2}{2m}\right) = \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2}\right) \rightarrow \boxed{E_n = \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m}}. \tag{8.12}$$

Osserviamo che la grandezza p_x non è contenuta nell'espressione di E_n e, poiché p_x prende una serie continua di valori, i **livelli energetici sono degeneri con molteplicità continua**. La molteplicità della degenerazione diventa finita se il

moto nel piano (x, y) è confinato in un'area $S = L_x L_y$ grande ma finita. Infatti, il numero di valori diversi di p_x nell'intervallo Δp_x sarà dato da

$$e_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2 \rightarrow p = \frac{n\pi\hbar}{L} \rightarrow \Delta n = \frac{1}{2} \frac{\Delta p_x L_x}{\pi\hbar}, \quad (8.13)$$

dove il fattore 2 a denominatore è dovuto al fatto che l'impulso può essere positivo e negativo. Usando la definizione di y_0 e il fatto che $0 < y_0 < L_y$ otteniamo

$$0 < \frac{p_x c}{|e|H} < L_y, \quad (8.14)$$

per cui l'intero range di valori di Δp_x di p_x si può scrivere come

$$\Delta p_x = \frac{L_y |e|H}{c}, \quad (8.15)$$

da cui ricaviamo Δn

$$\Delta n = \frac{L_x L_y |e|H}{2\pi\hbar c} = \frac{S |e|H}{2\pi\hbar c}, \quad (8.16)$$

che rappresenta il numero possibile di valori di p_x per dati n e p_z ed è, evidentemente, un numero finito.

Se la regione del moto è limitata anche lungo l'asse z dalla lunghezza L_z , il numero di valori di p_z nell'intervallo Δp_z è $\frac{\Delta p_z L_z}{2\pi\hbar}$, per cui, per un dato n , la degenerazione del livello E_n sarà

$$\Delta n = \frac{V |e|H}{4\pi^2 \hbar^2 c} \Delta p_z, \quad (8.17)$$

dove $V = L_x L_y L_z$ è il volume in cui è confinato il moto della particella.

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

Chapter 9

Momento Angolare

Consideriamo la funzione d'onda $\psi(x)$ in una dimensione e calcoliamone la variazione $\psi(x + dx)$ a fronte di una variazione infinitesima del suo argomento $x \rightarrow x + \delta x$, i.e.

$$\psi(x + dx) = \psi(x) + \frac{d}{dx}\psi(x)\delta x + O(\delta x^2). \quad (9.1)$$

Osservando che l'operatore impulso \hat{p} è legato alla derivata rispetto a x dalla corrispondenza

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \rightarrow \frac{d}{dx} = \frac{i}{\hbar} \hat{p}, \quad (9.2)$$

possiamo riscrivere l'equazione (9.1) come

$$\psi(x + dx) = \psi(x) + \frac{i}{\hbar} \delta x \hat{p} \psi(x) + O(\delta x^2). \quad (9.3)$$

Analogamente in 3 dimensioni avremo

$$\psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{r} \cdot \hat{p} \psi(\vec{r}) + O(\delta\vec{r}^2). \quad (9.4)$$

Guardiamo ora la figura (9.1). Se $\delta\vec{\omega}$ è il vettore di una rotazione infinitesima diretto lungo l'asse rispetto al quale avviene la rotazione, allora la variazione del raggio vettore \vec{r} della particella $\delta\vec{r}$ sarà

$$\delta\vec{r} = \delta\vec{\omega} \times \vec{r}. \quad (9.5)$$

Sostituendo l'espressione precedente di $\delta\vec{r}$ nell'equazione (9.4) otteniamo

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) &= \psi(\vec{r}) + \frac{i}{\hbar} (\delta\vec{\omega} \times \vec{r}) \cdot \hat{p} \psi(\vec{r}) + O(\delta\vec{r}^2) = \\ &= \psi(\vec{r}) + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\omega} \cdot (\vec{r} \times \hat{p}) \psi(\vec{r}) + O(\delta\vec{r}^2) = \\ &= \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\omega} \cdot \hat{L} \right) \psi(\vec{r}) + O(\delta\vec{r}^2), \end{aligned} \quad (9.6)$$

dove \hat{L} è l'operatore del **momento angolare**:

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}. \quad (9.7)$$

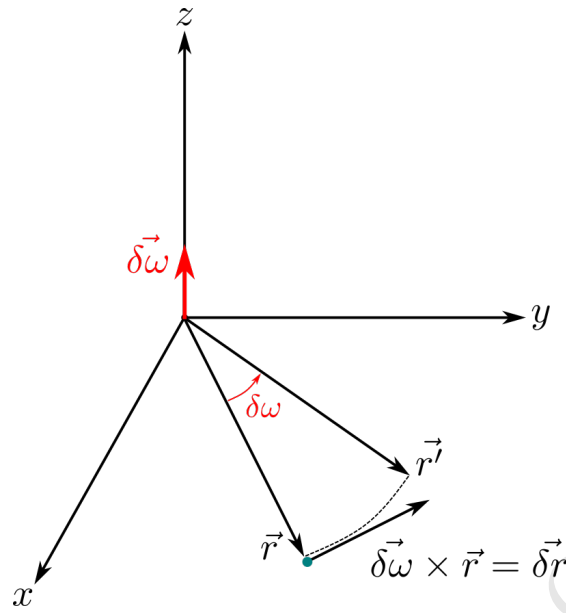


Figure 9.1: Direzione e intensità del vettore di rotazione infinitesima $\delta\vec{\omega}$.

Ponendo $\delta\vec{\omega} = \delta\omega\vec{n}$, avremo

$$\psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \left[1 + \frac{i}{\hbar} \delta\omega (\vec{n} \cdot \vec{L}) \right] \psi(\vec{r}) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\omega \hat{O} \right) \psi(\vec{r}), \quad (9.8)$$

dove $\hat{O} = \vec{n} \cdot \vec{L}$. Ora passiamo ad una rotazione finita come limite di infinite rotazioni infinitesime. In altre parole, facciamo una rotazione di un angolo ω con

$$\omega = \lim_{\delta\omega \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \delta\omega N. \quad (9.9)$$

Procedendo in questo modo otteniamo il seguente risultato

$$\begin{aligned} \psi' &= \underbrace{\left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\omega \hat{O} \right) \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\omega \hat{O} \right) \dots \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\omega \hat{O} \right)}_N \psi(\vec{r}) = \\ &= \left(1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\omega}{N} \hat{O} \right)^N \psi(\vec{r}) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} e^{i\omega \hat{O} / \hbar} \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{\omega} \cdot \vec{L} / \hbar} \psi(\vec{r}) \end{aligned} \quad (9.10)$$

dove $e^{i\vec{\omega} \cdot \vec{L} / \hbar}$ è proprio l'**operatore di rotazione** e \vec{L} , il momento angolare, è il **generatore della rotazione**. In forma differenziale il momento angolare si scrive come

$$\boxed{\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = \hat{r} \times (-i\hbar\nabla) = -i\hbar(\hat{r} \times \nabla)}. \quad (9.11)$$

Definiamo anche il momento angolare ridotto ℓ come il momento angolare misurato in unità di \hbar , i.e.

$$\hat{\ell} = \frac{\hat{L}}{\hbar}. \quad (9.12)$$

9.1 Proprietà di commutazione del momento angolare

Calcoliamo il commutatore della componente ℓ_x del momento angolare con l'operatore di posizione:

$$\begin{aligned} [\ell_x, x] &= \frac{1}{\hbar}[yp_z - zp_y, x] = \frac{1}{\hbar}([yp_z, x] - [zp_y, x]) = 0, \\ [\ell_x, y] &= \frac{1}{\hbar}[yp_z - zp_y, y] = \frac{1}{\hbar}([yp_z, y] - [zp_y, y]) = \frac{1}{\hbar}(i\hbar z) = iz, \\ [\ell_x, z] &= \frac{1}{\hbar}[yp_z - zp_y, z] = \frac{1}{\hbar}([yp_z, z] - [zp_y, z]) = \frac{1}{\hbar}y(-i\hbar) = -iy. \end{aligned} \quad (9.13)$$

In generale avremo

$$\boxed{[\ell_i, r_j] = i\epsilon_{ijk}r_k}, \quad (9.14)$$

dove ϵ_{ijk} è il tensore completamente antisimmetrico definito come

$$\epsilon_{ijk} = (-1)^{\#(123 \rightarrow ijk)}, \quad (9.15)$$

dove $\#(123 \rightarrow ijk)$ è il numero minimo di trasposizioni necessario per riordinare la tripletta 123 nella sequenza ijk . Ad esempio $\#(123 \rightarrow 123) = 0$ e $\#(123 \rightarrow 213) = 1$, per cui $\epsilon_{123} = 1$ e $\epsilon_{213} = -1$, e così via.

Calcoliamo ora il commutatore della componente ℓ_x del momento angolare con l'operatore impulso:

$$\begin{aligned} [\ell_x, p_x] &= \frac{1}{\hbar}[yp_z - zp_y, p_x] = \frac{1}{\hbar}([yp_z, p_x] - [zp_y, p_x]) = 0, \\ [\ell_x, p_y] &= \frac{1}{\hbar}[yp_z - zp_y, p_y] = \frac{1}{\hbar}([yp_z, p_y] - [zp_y, p_y]) = \frac{1}{\hbar}p_z(i\hbar) = ip_z, \\ [\ell_x, p_z] &= \frac{1}{\hbar}[yp_z - zp_y, p_z] = \frac{1}{\hbar}([yp_z, p_z] - [zp_y, p_z]) = \frac{1}{\hbar}p_y(-i\hbar) = -ip_y. \end{aligned} \quad (9.16)$$

In generale, avremo

$$\boxed{[\ell_i, p_j] = i\epsilon_{ijk}p_k}. \quad (9.17)$$

Analogamente troviamo

$$\boxed{[\ell_i, l_j] = i\epsilon_{ijk}l_k}. \quad (9.18)$$

Consideriamo ora l'operatore $\hat{\ell}^2$, definito come

$$\ell^2 = \ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2. \quad (9.19)$$

Quest'operatore commuta con ℓ_x, ℓ_y, ℓ_z :

$$[\ell^2, \ell_x] = 0, \quad [\ell^2, \ell_y] = 0, \quad [\ell^2, \ell_z] = 0. \quad (9.20)$$

Dimostriamolo, ad esempio, calcolando $[\ell^2, \ell_z]$:

$$\begin{aligned} [\ell_x^2, \ell_z] &= \ell_x[\ell_x, \ell_z] + [\ell_x, \ell_z]\ell_x = -i\ell_x\ell_y - i\ell_y\ell_x = -i(\ell_x\ell_y + \ell_y\ell_x), \\ [\ell_y^2, \ell_z] &= \ell_y[\ell_y, \ell_z] + [\ell_y, \ell_z]\ell_y = i\ell_y\ell_x + i\ell_x\ell_y = i(\ell_y\ell_x + \ell_x\ell_y), \\ [\ell_z^2, \ell_z] &= \ell_z[\ell_z, \ell_z] + [\ell_z, \ell_z]\ell_z = 0, \end{aligned} \quad (9.21)$$

da cui, sommando, otteniamo $[\ell^2, l_z] = 0$. Le relazioni di commutazione descritte dalle equazioni (9.20) ci dicono che il quadrato del momento angolare (i.e. il suo valore assoluto) può avere valori determinati **contemporaneamente** con una delle sue componenti.

È utile usare al posto di l_x e l_y le loro combinazioni complesse

$$l_+ = l_x + il_y, \quad l_- = l_x - il_y, \quad (9.22)$$

per le quali valgono le seguenti regole di commutazione:

$$\begin{aligned} [l_+, l_-] &= [l_x + il_y, l_x - il_y] = [l_x, l_x] - i[l_x, l_y] + i[l_y, l_x] + [l_y, l_y] = \\ &= l_z - i[l_x, l_y] = l_z + l_z = 2l_z, \\ [l_z, l_+] &= [l_z, l_x + il_y] = [l_z, l_x] + i[l_z, l_y] = il_y - i[l_y, l_z] = il_y + l_x = l_+, \\ [l_z, l_-] &= [l_z, l_x - il_y] = [l_z, l_x] - i[l_z, l_y] = il_y + i[l_y, l_z] = il_y - l_x = -l_-. \end{aligned} \quad (9.23)$$

Calcoliamo ora i prodotti l_-l_+ e l_+l_- :

$$\begin{aligned} l_-l_+ &= (l_x - il_y)(l_x + il_y) = l_x^2 + il_xl_y - il_yl_x + l_y^2 = \\ &= l_x^2 + l_y^2 + i[l_x, l_y] = l_x^2 + l_y^2 - l_z = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 - l_z - l_z^2 = \\ &= l^2 - l_z(1 + l_z), \\ l_+l_- &= (l_x + il_y)(l_x - il_y) = l_x^2 - il_xl_y + il_yl_x + l_y^2 = l_x^2 + l_y^2 + i[l_y, l_x] = \\ &= l_x^2 + l_y^2 - i[l_x, l_y] = l_x^2 + l_y^2 + l_z = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 + l_z - l_z^2 = \\ &= l^2 - l_z(l_z - 1). \end{aligned} \quad (9.24)$$

Ricapitolando, abbiamo trovato

$$\begin{aligned} [\ell^2, l_i] &= 0, \\ [l_+, l_-] &= 2l_z, \\ [l_z, l_\pm] &= \pm l_\pm, \\ l_-l_+ &= l^2 - l_z(l_z + 1), \\ l_+l_- &= l^2 - l_z(l_z - 1). \end{aligned} \quad (9.25)$$

A questo punto calcoliamo il valor medio di $\hat{\ell}^2$ su uno stato $|\psi\rangle$ qualunque:

$$\langle \psi | \ell^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2 | \psi \rangle \geq \langle \psi | \ell_z^2 | \psi \rangle. \quad (9.26)$$

Quindi, se $\langle \psi | \ell^2 | \psi \rangle$ è finito, sicuramente $\langle \psi | \ell_z^2 | \psi \rangle$ è limitato superiormente. Sappiamo che $\hat{\ell}^2$ e \hat{l}_z commutano, per cui hanno autostati simultanei, che indichiamo con $|“\ell^2”, l_z\rangle$, tali che

$$\begin{aligned} \hat{\ell}^2 |“\ell^2”, l_z\rangle &= “\ell^2” |“\ell^2”, l_z\rangle, \\ \hat{l}_z |“\ell^2”, l_z\rangle &= l_z |“\ell^2”, l_z\rangle. \end{aligned} \quad (9.27)$$

Consideriamo ora lo stato $|\psi\rangle = \hat{l}_+ |“\ell^2”, l_z\rangle$ e vediamo come agisce $\hat{\ell}^2$ su $|\psi\rangle$:

$$\hat{\ell}^2 |\psi\rangle = \hat{\ell}^2 \hat{l}_+ |“\ell^2”, l_z\rangle = \hat{l}_+ \hat{\ell}^2 |“\ell^2”, l_z\rangle = \hat{l}_+ “\ell^2” |“\ell^2”, l_z\rangle = “\ell^2” |\psi\rangle. \quad (9.28)$$

Ma allora $|\psi\rangle$ è un autostato di $\hat{\ell}^2$ con autovalore “ ℓ^2 ”.

Vediamo come agisce $\hat{\ell}_z$ su $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_z|\psi\rangle &= \hat{\ell}_z\hat{\ell}_+|“\ell^2”, l_z\rangle = \left([\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_+] + \hat{\ell}_+\hat{\ell}_z\right)|“\ell^2”, l_z\rangle = \left(\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_+\hat{\ell}_z\right)|“\ell^2”, l_z\rangle = \\ &= \hat{\ell}_+|“\ell^2”, l_z\rangle + l_z\hat{\ell}_+|“\ell^2”, l_z\rangle = |\psi\rangle + l_z|\psi\rangle = (l_z + 1)|\psi\rangle.\end{aligned}\tag{9.29}$$

Quindi $|\psi\rangle$ è un autostato di $\hat{\ell}_z$ con autovalore $l_z + 1$, e dunque abbiamo trovato un autostato simultaneo di $\hat{\ell}^2$ e $\hat{\ell}_z$. Analogamente, considerando lo stato $|\phi\rangle = \hat{\ell}_-|“\ell^2”, l_z\rangle$ avremo

$$\hat{\ell}_z|\phi\rangle = (l_z - 1)|\phi\rangle.\tag{9.30}$$

D'altra parte, è anche vero che

$$\hat{\ell}_z|“\ell^2”, l_z + 1\rangle = (l_z + 1)|“\ell^2”, l_z + 1\rangle.\tag{9.31}$$

Quindi deve esserci una relazione tra $|\psi\rangle$ e $|“\ell^2”, l_z + 1\rangle$ e precisamente

$$|\psi\rangle = \hat{\ell}_+|“\ell^2”, l_z\rangle \propto |“\ell^2”, l_z + 1\rangle,\tag{9.32}$$

così come una relazione tra $|\phi\rangle$ e $|“\ell^2”, l_z - 1\rangle$:

$$|\phi\rangle = \hat{\ell}_-|“\ell^2”, l_z\rangle \propto |“\ell^2”, l_z - 1\rangle.\tag{9.33}$$

Inoltre, poiché $\hat{\ell}_z$ è limitato superiormente, deve esistere un valore massimo M tale che

$$\boxed{\hat{\ell}_+|“\ell^2”, M\rangle = 0}.\tag{9.34}$$

Ma allora

$$\hat{\ell}_-\hat{\ell}_+|“\ell^2”, M\rangle = 0 \rightarrow \left[\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z(\hat{\ell}_z + 1)\right]|“\ell^2”, M\rangle = 0 = [“\ell^2” - M(M + 1)]|“\ell^2”, M\rangle.\tag{9.35}$$

Da quest'ultima relazione possiamo ricavare finalmente l'autovalore “ ℓ^2 ”, cioè

$$“\ell^2” = M(M + 1).\tag{9.36}$$

Inoltre, deve necessariamente esistere anche un valore minimo di l_z per il fatto che $\langle\psi|\ell^2|\psi\rangle$ è finito, e precisamente questo vuol dire che

$$\boxed{\hat{\ell}_-|“\ell^2”, m\rangle = 0},\tag{9.37}$$

ma allora

$$\hat{\ell}_+\hat{\ell}_-|“\ell^2”, m\rangle = 0 \rightarrow \left[\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z(\hat{\ell}_z - 1)\right]|“\ell^2”, m\rangle = 0 = [“\ell^2” - m(m - 1)]|“\ell^2”, m\rangle,\tag{9.38}$$

ovverosia

$$“\ell^2” = m(m - 1),\tag{9.39}$$

da cui ricaviamo che

$$\boxed{m = -M}.\tag{9.40}$$

In sintesi, i possibili autovalori **interi** sono

$$\begin{array}{ccc}
 M & \text{"}\ell^2\text{"} & \ell_z \\
 0 & 0 & 0 \\
 \\
 1 & 2 & \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases} \\
 \\
 2 & 6 & \begin{cases} 2 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{cases} \\
 \dots, & &
 \end{array} \tag{9.41}$$

cioè

$$-M \leq \ell_z \leq M, \tag{9.42}$$

dove M è l'autovalore massimo di $\hat{\ell}_z$.

Non è detto che M sia necessariamente intero. Infatti, dato lo stato $|\text{"}\ell^2\text{"}, m\rangle$ possiamo generare lo stato $|\text{"}\ell^2\text{"}, M\rangle$ applicando $\hat{\ell}_+$ un numero finito di volte e dunque troviamo che

$$\begin{aligned}
 \hat{\ell}_+ |\text{"}\ell^2\text{"}, m\rangle &= \alpha_1 |\text{"}\ell^2\text{"}, m+1\rangle, \\
 (\hat{\ell}_+)^2 |\text{"}\ell^2\text{"}, m\rangle &= \alpha_2 |\text{"}\ell^2\text{"}, m+2\rangle, \\
 &\dots \\
 (\hat{\ell}_+)^n |\text{"}\ell^2\text{"}, m\rangle &= \alpha_n |\text{"}\ell^2\text{"}, m+n\rangle = \alpha_n |\text{"}\ell^2\text{"}, M\rangle
 \end{aligned} \tag{9.43}$$

cioè

$$M = m + n \rightarrow M = \frac{n}{2}, \quad n = 1, 2, \dots, \tag{9.44}$$

cosicché se n è pari M è intero e se n è dispari M è semintero. Quindi, i possibili autovalori **seminteri** sono

$$\begin{array}{ccc}
 M & \text{"}\ell^2\text{"} & \ell_z \\
 1/2 & 3/4 & \begin{cases} 1/2 \\ -1/2 \end{cases} \\
 \\
 3/2 & 15/4 & \begin{cases} 3/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \\ -3/2 \end{cases} \\
 \dots, & &
 \end{array} \tag{9.45}$$

Tutti gli autovalori possibili di $\hat{\ell}_z$ dato M sono

$$\underbrace{-M, -M+1, \dots, 0, 1, \dots, M-1, M}_{2M+1}. \tag{9.46}$$

Di solito un autoket simultaneo di $\hat{\ell}^2$ e $\hat{\ell}_z$ si indica con $|M, \ell_z\rangle$, dove “ ℓ^2 ” = $M(M+1)$. Le equazioni agli autovalori fondamentali sono:

$$\begin{aligned}\hat{\ell}^2|M, \ell_z\rangle &= M(M+1)|M, \ell_z\rangle, \\ \hat{\ell}_z|M, \ell_z\rangle &= \ell_z|M, \ell_z\rangle, \quad \text{con } -M \leq \ell_z \leq M.\end{aligned}\tag{9.47}$$

Consideriamo ora l'azione di $\hat{\ell}_+$ sullo stato $|l, \ell_z\rangle$:

$$\hat{\ell}_+|l, \ell_z\rangle = \alpha|l, \ell_z + 1\rangle.\tag{9.48}$$

Poiché $(\hat{\ell}_+)^\dagger = \hat{\ell}_-$, possiamo scrivere

$$\begin{aligned}\langle l, \ell_z | (\hat{\ell}_+)^\dagger \hat{\ell}_+ |l, \ell_z\rangle &= |\alpha|^2 \langle l, \ell_z + 1 | l, \ell_z + 1\rangle = \langle l, \ell_z | \hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z(\hat{\ell}_z + 1) |l, \ell_z\rangle = \\ &= [\ell(\ell+1) - \ell_z(\ell_z+1)] \langle l, \ell_z | l, \ell_z\rangle,\end{aligned}\tag{9.49}$$

da cui, scegliendo α reale e positivo, otteniamo

$$\alpha = \sqrt{\ell(\ell+1) - \ell_z(\ell_z+1)}.\tag{9.50}$$

Riassumendo, l'azione di $\hat{\ell}_+$ ed $\hat{\ell}_-$ su $|l, \ell_z\rangle$ è

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{\ell}_+|l, \ell_z\rangle &= \sqrt{\ell(\ell+1) - \ell_z(\ell_z+1)}|l, \ell_z + 1\rangle \\ \hat{\ell}_-|l, \ell_z\rangle &= \sqrt{\ell(\ell+1) - \ell_z(\ell_z-1)}|l, \ell_z - 1\rangle\end{aligned}}.\tag{9.51}$$

9.2 Costruzione della funzione d'onda (Armonica Sferica)

Scriviamo l'espressione dell'operatore del momento angolare di una particella in coordinate sferiche¹

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_z &= -i \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \hat{\ell}_\pm &= e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{\ell}^2 &= - \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right].\end{aligned}\tag{9.53}$$

Dalle equazioni precedenti possiamo vedere che l'operatore del momento angolare agisce solo sulle variabili angolari θ e ϕ . Di conseguenza, la funzione d'onda sarà una funzione solo di queste variabili che indichiamo con

$$\langle \theta, \phi | l, \ell_z \rangle = Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \phi).\tag{9.54}$$

¹in coordinate cartesiane $\hat{\ell}_z$ si scrive come segue

$$\hat{\ell}_z = -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).\tag{9.52}$$

L'equazione agli autovalori per la componente $\hat{\ell}_z$ è

$$\langle \theta, \phi | \hat{\ell}_z | \ell, \ell_z \rangle = -i \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \phi) = \ell_z Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \phi) , \quad (9.55)$$

che ha come soluzione la funzione

$$Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \phi) = e^{i\ell_z \phi} \Theta_{\ell, \ell_z}(\theta) . \quad (9.56)$$

Ci resta da determinare la funzione $\Theta_{\ell, \ell_z}(\theta)$. Prima di fare cio, notiamo che non è possibile avere una funzione d'onda composta da un'armonica con valori di ℓ_z interi e un'armonica con valori di ℓ_z seminteri. Supponiamo, infatti, di avere

$$\psi = e^{i\phi} \Theta_{1,1}(\theta) + e^{i\phi/2} \Theta_{1/2,1/2}(\theta) . \quad (9.57)$$

Applicando una rotazione di 2π intorno all'asse z

$$\psi' = e^{i2\pi \hat{\ell}_z} \psi = e^{i(\phi+2\pi)} \Theta_{1,1}(\theta) + e^{i(\phi/2+\pi)} \Theta_{1/2,1/2}(\theta) = e^{i\phi} \Theta_{1,1}(\theta) - e^{i\phi/2} \Theta_{1/2,1/2}(\theta) , \quad (9.58)$$

otteniamo che la probabilità di trovare la particella nello stesso punto cambia. In generale, affinché Y_{ℓ, ℓ_z} sia univoca è necessario che essa sia periodica in ϕ con periodo 2π . Di conseguenza ℓ_z può assumere solo valori interi positivi e negativi (compreso lo zero).

Per determinare la funzione $\Theta_{\ell, \ell_z}(\theta)$ procediamo nel modo seguente. Prendiamo $\ell_z = \ell$, cioè uguale al suo valore massimo, e consideriamo la funzione d'onda $Y_{\ell, \ell}$:

$$Y_{\ell, \ell}(\theta, \phi) = e^{i\ell\phi} \Theta_{\ell, \ell}(\theta) . \quad (9.59)$$

Applicando $\hat{\ell}_+$ avremo

$$\hat{\ell}_+ Y_{\ell, \ell}(\theta, \phi) = \hat{\ell}_+ [e^{i\ell\phi} \Theta_{\ell, \ell}(\theta)] = 0 , \quad (9.60)$$

da cui, utilizzando l'espressione di $\hat{\ell}_+$ in coordinate sferiche, otteniamo

$$e^{i\ell\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} + i \text{ctg}(\theta) \frac{\partial}{\partial \phi} \right] e^{i\ell\phi} \Theta_{\ell, \ell}(\theta) = e^{i\ell\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} - \ell \text{ctg}(\theta) \frac{\partial}{\partial \phi} \right] e^{i\ell\phi} \Theta_{\ell, \ell}(\theta) = 0 , \quad (9.61)$$

e quindi

$$\left[\frac{\partial}{\partial \theta} - \ell \text{ctg}(\theta) \right] \Theta_{\ell, \ell}(\theta) = 0 \rightarrow \Theta_{\ell, \ell}(\theta) = \mathcal{N}(\sin \theta)^\ell , \quad (9.62)$$

come si verifica facilmente. Abbiamo dunque ottenuto

$$Y_{\ell, \ell}(\theta, \phi) = \mathcal{N} e^{i\ell\phi} (\sin \theta)^\ell . \quad (9.63)$$

La costante di normalizzazione si trova imponendo che $\langle \ell, \ell | \ell, \ell \rangle = 1$, i.e.

$$\langle \ell, \ell | \ell, \ell \rangle = 1 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\cos \theta Y_{\ell, \ell}^*(\theta, \phi) Y_{\ell, \ell}(\theta, \phi) . \quad (9.64)$$

La parte che dipende da ϕ si normalizza in modo che

$$|\mathcal{N}_\phi|^2 \int_0^{2\pi} e^{-i\ell\phi} e^{i\ell\phi} d\phi = |\mathcal{N}_\phi|^2 2\pi = 1, \quad (9.65)$$

per cui la funzione d'onda dipendente da ϕ normalizzata $\Phi_\ell(\phi)$ è

$$\Phi_\ell(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\ell\phi}, \quad (9.66)$$

ed è facile vedere che due Φ_{ℓ_z} con ℓ_z diverso sono ortogonali:

$$\langle \Phi_{\ell'_z} | \Phi_{\ell_z} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(\ell'_z - \ell_z)\phi} d\phi = \delta_{\ell'_z \ell_z}. \quad (9.67)$$

A questo punto ci resta da normalizzare solo la parte dipendente da θ :

$$|\mathcal{N}_\theta|^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta (\sin\theta)^\ell = |\mathcal{N}_\theta|^2 \int_{-1}^1 dt (1-t^2)^\ell = |\mathcal{N}_\theta|^2 \frac{2^{2\ell+1}\ell!}{(2\ell+1)!} = 1, \quad (9.68)$$

(nota: sostituendo $t \rightarrow 1-t$ il secondo membro si trasforma nell'integrale B di Eulero, che risolviamo esplicitamente nell'Appendice B), da cui ricaviamo

$$\mathcal{N}_\theta = \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2^{2\ell+1}\ell!}}. \quad (9.69)$$

La funzione d'onda $Y_{\ell,\ell}(\theta, \phi)$ normalizzata è quindi data da

$$Y_{\ell,\ell}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2^{2\ell}\ell!}} e^{i\ell\phi} (\sin\theta)^\ell. \quad (9.70)$$

Applicando in successione $\hat{\ell}_-$ otteniamo tutto il **multipletto**, e.g.

$$\hat{\ell}_- Y_{\ell,\ell}(\theta, \phi) = \sqrt{\ell(\ell+1) - \ell(\ell-1)} Y_{\ell,\ell-1}(\theta, \phi) = \sqrt{2\ell} Y_{\ell,\ell-1}(\theta, \phi). \quad (9.71)$$

Caso particolare

È possibile che una funzione d'onda $\psi(r, \theta, \phi)$ si fattorizzi in una parte dipendente solo da r e una funzione dipendente dalle variabili angolari θ e ϕ , i.e

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) f(\theta, \phi). \quad (9.72)$$

Si parla in questo caso di prodotto diretto delle funzioni R e f :

$$\psi = R(r) \otimes f(\theta, \phi). \quad (9.73)$$

Nell'applicazione degli operatori che agiscono solo sulle variabili angolari, la parte radiale può essere ignorata. Ad esempio

$$\hat{\ell}_+ \psi = R(r) \otimes (\hat{\ell}_+ f(\theta, \phi)). \quad (9.74)$$

Inoltre $f(\theta, \phi)$ può essere decomposta in armoniche sferiche

$$|f\rangle = \sum_{\ell, \ell_z} c_{\ell, \ell_z} |\ell, \ell_z\rangle, \quad (9.75)$$

dove i coefficienti c_{ℓ, ℓ_z} sono determinati da

$$c_{\ell, \ell_z} = \langle \ell, \ell_z | f \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\cos\theta Y_{\ell, \ell_z}^*(\theta, \phi) f(\theta, \phi), \quad (9.76)$$

dove abbiamo fatto uso della spettralizzazione dell'identità nella base $|\theta, \phi\rangle$. Chiaramente, una misura del momento angolare del sistema dà tutti i possibili valori, ciascuno con probabilità $|c_{\ell, \ell_z}|^2$.

Parità

Consideriamo l'applicazione dell'**operatore parità** \hat{P} ad un autostato di ℓ, ℓ_z . Sotto l'operazione di parità le coordinate del sistema cambiano nel seguente modo:

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r, \\ \theta &\rightarrow \pi - \theta, \\ \phi &\rightarrow \phi + \pi. \end{aligned} \quad (9.77)$$

Poiché $Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \phi)$ è definita come

$$Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \phi) = e^{i\ell_z\phi} \left(\frac{d}{d\cos\theta} \right)^{\ell - \ell_z} (\sin\theta)^\ell, \quad (9.78)$$

allora l'azione di \hat{P} su $Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \phi)$ dà come risultato

$$\begin{aligned} \hat{P}Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \phi) &= e^{i\ell_z(\phi+\pi)} (-1)^{\ell - \ell_z} \left(\frac{d}{d\cos\theta} \right)^{\ell - \ell_z} (\sin\theta)^\ell = \\ &= (-1)^{\ell_z} e^{i\ell_z\phi} (-1)^{\ell - \ell_z} \left(\frac{d}{d\cos\theta} \right)^{\ell - \ell_z} (\sin\theta)^\ell = \\ &= (-1)^\ell Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (9.79)$$

per cui se ℓ è pari Y_{ℓ, ℓ_z} è una funzione pari, mentre se ℓ è dispari Y_{ℓ, ℓ_z} è una funzione dispari.

Decomposizione delle autofunzioni dell'oscillatore armonico in armoniche sferiche

L'hamiltoniana dell'oscillatore armonico

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \quad (9.80)$$

commuta con ℓ^2 e con ogni componente ℓ_i (in particolare con ℓ_z). Dimostriamolo, ad esempio, calcolando $[p^2, \ell_z]$:

$$\begin{aligned}
 [p^2, \ell_z] &= [p_x^2, \ell_z] + [p_y^2, \ell_z] + [p_z^2, \ell_z] = \\
 &= p_x[p_x, \ell_z] + [p_x, \ell_z]p_x + p_y[p_y, \ell_z] + [p_y, \ell_z]p_y + p_z[p_z, \ell_z] + [p_z, \ell_z]p_z = \\
 &= p_x[p_x, xp_y - yp_x] + [p_x, xp_y - yp_x]p_x + \dots = \\
 &= -i\hbar p_x p_y - i\hbar p_y p_x + p_y i\hbar p_x + i\hbar p_y p_x + \dots = 0 .
 \end{aligned}
 \tag{9.81}$$

Un calcolo analogo dà $[r^2, \ell_z] = 0$ e, in generale, troviamo

$$[H, \ell^2] = 0 , \quad [H, \ell_z] = 0 . \tag{9.82}$$

Di conseguenza, è possibile trovare autostati simultanei di H, ℓ^2, ℓ_z , che denotiamo come $|n, \ell, \ell_z\rangle$ e tali per cui autostati con lo stesso n che appartengono allo stesso multipletto di momento angolare e differiscono solo per il valore di ℓ_z sono necessariamente degeneri. Inoltre, poiché gli stati di momento angolare ℓ hanno parità definita, data da $(-1)^\ell$, allora un autostato con n pari sarà una combinazione lineare di autostati di momento angolare con ℓ pari; viceversa per un autostato con n dispari.

9.3 Composizione dei momenti angolari

Supponiamo di avere 2 particelle debolmente interagenti. Se trascuriamo totalmente l'interazione, il momento angolare totale \hat{L} di tutto il sistema può essere considerato come la somma di momenti angolari \hat{L}_1 ed \hat{L}_2 delle singole particelle.

Ci chiediamo: quali sono i possibili valori di \hat{L} , dati \hat{L}_1 ed \hat{L}_2 ?

Innanzitutto, poiché le particelle non sono interagenti, l'hamiltoniana del sistema è separabile nella somma di due pezzi

$$H = H_1 + H_2 , \tag{9.83}$$

per cui possiamo descrivere il sistema usando la base

$$|\ell_1, \ell_{1z}\rangle \otimes |\ell_2, \ell_{2z}\rangle . \tag{9.84}$$

D'altra parte, se consideriamo il sistema come un tutto, in luogo delle 4 grandezze $\ell_1, \ell_{1z}, \ell_2, \ell_{2z}$ possiamo scegliere le 4 grandezze $\ell, \ell_z, \ell_1, \ell_2$ come sistema completo. Infatti, è facile verificare che

$$\begin{aligned}
 [\ell^2, \ell_z] &= 0 , \\
 [\ell^2, \ell_1^2] &= [\ell^2, \ell_2^2] = 0 , \\
 [\ell_1^2, \ell_2^2] &= 0 , \\
 [\ell_z, \ell_1^2] &= [\ell_z, \ell_2^2] = 0 .
 \end{aligned}
 \tag{9.85}$$

Dati i valori ℓ_1 e ℓ_2 nella base $|\ell_1, \ell_{1z}\rangle \otimes |\ell_2, \ell_{2z}\rangle$ si hanno $(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)$ stati differenti. È chiaro che anche nella base $|\ell, \ell_z, \ell_1, \ell_2\rangle$ dovremo avere $(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)$ stati differenti una volta fissati ℓ_1 e ℓ_2 .

Chiamiamo $\phi_{\ell_1, \ell_{1z}, \ell_2, \ell_{2z}}$ gli stati nella base $|\ell_1, \ell_{1z}\rangle \otimes |\ell_2, \ell_{2z}\rangle$ e $\psi_{\ell, \ell_z, \ell_1, \ell_2}$ gli stati nella base $|\ell, \ell_z, \ell_1, \ell_2\rangle$. Chiaramente è vero che

$$\hat{\ell}_z = \hat{\ell}_{1z} + \hat{\ell}_{2z} . \quad (9.86)$$

Tale composizione non è valida per gli operatori dei quadrati del momento angolare. Per determinare la legge di composizione ragioniamo, dunque, nel modo seguente. Gli stati ϕ e ψ sono sicuramente autostati di $\hat{\ell}_z$ totale, ma, in generale, ϕ non è autostato di $\hat{\ell}^2$. Esiste, però, un caso particolare in cui ϕ è autostato di $\hat{\ell}^2$, cioè quando $\ell_{1z} = \ell_1$ e $\ell_{2z} = \ell_2$. Partendo da questa osservazione possiamo scrivere

$$\begin{array}{ccc} \frac{\ell_{1z}}{\ell_1} & \frac{\ell_{2z}}{\ell_2} & \frac{\ell_z}{\ell_1 + \ell_2} \\ \\ \left. \begin{array}{cc} \ell_1 - 1 & \ell_2 \\ \ell_1 & \ell_2 - 1 \end{array} \right\} \ell_1 + \ell_2 - 1 \\ \\ \left. \begin{array}{cc} \ell_1 - 2 & \ell_2 \\ \ell_1 - 1 & \ell_2 - 1 \\ \ell_1 & \ell_2 - 2 \end{array} \right\} \ell_1 + \ell_2 - 2 \\ \\ \dots \end{array} \quad (9.87)$$

Quindi, per $\ell_{1z} = \ell_1$ e $\ell_{2z} = \ell_2 \rightarrow \ell_z = \ell_1 + \ell_2$, esiste un solo stato ϕ , cui corrisponde un solo stato ψ .

Per $\ell_z = \ell_1 + \ell_2 - 1$ esistono 2 stati ϕ . Ma allora devono esistere 2 stati ψ e precisamente quello con $\ell = \ell_1 + \ell_2$ e $\ell_z = \ell - 1$, e quello con $\ell = \ell_1 + \ell_2 - 1$ e $\ell_z = \ell$.

Andando avanti vediamo che diminuendo ℓ_z di 1 aumenta di 1 il numero di stati con il dato valore di ℓ_z . È chiaro che quando $\ell_z = |\ell_1 - \ell_2|$ il numero di stati cessa di aumentare. Di conseguenza, $|\ell_1 - \ell_2|$ è il valore minimo possibile di ℓ . Infatti avremo

$$\sum_{\ell=|\ell_1-\ell_2}^{\ell_1+\ell_2} (2\ell + 1) = (2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1) , \quad (9.88)$$

da cui confermiamo che

$$|\ell_1 - \ell_2| \leq \ell \leq \ell_1 + \ell_2 . \quad (9.89)$$

Inoltre, se $\ell_2 \leq \ell_1$, il numero di valori possibili di ℓ è proprio $(2\ell_2 + 1)$.

9.4 Regole di commutazione di vettori con il momento angolare

Un vettore, in fisica classica, trasforma per rotazioni come

$$V'_i = \sum_j R_{ij} V_j . \quad (9.90)$$

È ragionevole richiedere che il valore di aspettazione di un operatore \hat{V} in meccanica quantistica trasformi come un vettore classico per rotazioni. Se $e^{i\vec{\omega}\cdot\vec{\ell}}$ è l'operatore di rotazione nello spazio dei ket, allora richiediamo che

$$\langle \psi | e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{\ell}} \hat{V}_i e^{i\vec{\omega}\cdot\vec{\ell}} | \psi \rangle = \sum_j R_{ij} \langle \psi | \hat{V}_j | \psi \rangle . \quad (9.91)$$

Ora, poiché

$$|\psi\rangle \rightarrow e^{i\vec{\omega}\cdot\vec{\ell}} |\psi\rangle , \quad (9.92)$$

allora

$$\langle \psi | \hat{V}_i | \psi \rangle \rightarrow \langle \psi | e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{\ell}} \hat{V}_i e^{i\vec{\omega}\cdot\vec{\ell}} | \psi \rangle = \sum_j R_{ij} \langle \psi | \hat{V}_j | \psi \rangle , \quad (9.93)$$

e, siccome il ket $|\psi\rangle$ è arbitrario, l'equazione è operatoriale, i.e.

$$e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{\ell}} \hat{V}_i e^{i\vec{\omega}\cdot\vec{\ell}} = \sum_j R_{ij} \hat{V}_j . \quad (9.94)$$

Consideriamo una rotazione infinitesima intorno all'asse scelto z . Avremo

$$(1 - i\delta\vec{\omega}\cdot\vec{\ell}) \hat{V}_i (1 + i\delta\vec{\omega}\cdot\vec{\ell}) = \hat{V}_i - i\delta\omega [\vec{\ell}\cdot\vec{n}, \hat{V}_i] = \sum_j R_{ij} \hat{V}_j , \quad (9.95)$$

dove

$$R = \begin{pmatrix} \cos \delta\omega & -\sin \delta\omega & 0 \\ \sin \delta\omega & \cos \delta\omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & -\delta\omega & 0 \\ \delta\omega & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} , \quad (9.96)$$

e $\vec{n} = (0, 0, 1)$. Procedendo nel calcolo otteniamo

$$\begin{aligned} V_x - i\delta\omega [l_z, V_x] &= V_x - \delta\omega V_y , \\ V_y - i\delta\omega [l_z, V_y] &= \delta\omega V_x + V_y , \\ V_z - i\delta\omega [l_z, V_z] &= V_z , \end{aligned} \quad (9.97)$$

da cui ricaviamo

$$\begin{aligned} [l_z, V_x] &= -iV_y , \\ [l_z, V_y] &= iV_x , \\ [l_z, V_z] &= 0 . \end{aligned} \quad (9.98)$$

Generalizzando, otteniamo

$$\boxed{[V_i, l_j] = i\epsilon_{ijk} V_k} . \quad (9.99)$$

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

Chapter 10

Spin

Il seguente ragionamento (dovuto a Landau) discute l'esistenza e la natura squisitamente quantistica dello spin.

L'assegnazione dei valori ℓ, m (valore del momento angolare e della sua proiezione lungo l'asse z) determina la dipendenza angolare della funzione d'onda di una particella e di conseguenza tutte le sue proprietà di simmetria rispetto alle rotazioni.

In generale, la formulazione di queste proprietà si riduce alla deduzione della legge di trasformazione delle funzioni d'onda nelle rotazioni del sistema di coordinate.

Dati i valori ℓ e m la funzione d'onda $\psi_{\ell m}$ di un sistema di particelle resta immutata solo nelle rotazioni del sistema di coordinate attorno all'asse z .

Una rotazione che cambia, invece, la direzione dell'asse z ha come conseguenza che la proiezione del momento angolare sull'asse z non ha più un valore determinato.

Ciò vuol dire che nel nuovo sistema la funzione d'onda si trasforma in una sovrapposizione di $2\ell + 1$ funzioni corrispondenti ai diversi valori possibili di m (dato ℓ).

In sostanza nelle rotazioni del sistema le $2\ell + 1$ funzioni $\psi_{\ell m}$ si trasformano tra loro.

Queste funzioni realizzano le rappresentazioni irriducibili del gruppo delle rotazioni. Il numero di funzioni che si trasformano tra loro è detto dimensione della rappresentazione.

La legge di questa trasformazione, cioè i coefficienti della sovrapposizione, è determinata completamente dall'assegnazione dei valori di ℓ .

Il momento angolare acquista il significato di un numero quantico che classifica gli stati del sistema secondo le loro proprietà di trasformazione rispetto alle rotazioni del sistema di coordinate.

In tal modo occorre assegnare alla particella elementare un momento angolare intrinseco non legato con il suo moto nello spazio: tale è lo spin.

È necessario, quindi, che la funzione d'onda dipenda non solo dalle coordinate, ma anche da una variabile di spin discreta che determina il valore della proiezione

dello spin su una direzione scelta dello spazio (asse z), suscettibile di un numero limitato di valori discreti.

Indichiamo con

$$\psi(\vec{r}; \sigma_z) \quad (10.1)$$

l'ampiezza di probabilità di trovare la particella nel punto \vec{r} con un valore dello spin σ_z .

Nel caso di particelle a spin $\frac{1}{2}$ indichiamo con $|\psi\rangle$ il vettore (spinore) a due componenti definito come

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix} \equiv \psi_1(\vec{r})|\uparrow\rangle + \psi_2(\vec{r})|\downarrow\rangle. \quad (10.2)$$

In generale, lo spin s può essere un numero intero o semintero. Per un dato s la componente s_z dello spin può prendere i valori

$$s, s-1, \dots, -s, \quad (10.3)$$

in totale $2s+1$ valori. Di conseguenza anche la funzione d'onda di una particella di spin s ha $2s+1$ componenti.

Il momento angolare totale è

$$j = \ell + s, \quad (10.4)$$

dove ℓ e s obbediscono alla normale regola di composizione dei momenti angolari. Per dati valori di ℓ e s , j può avere i valori

$$\ell + s, \ell + s - 1, \dots, |\ell - s|. \quad (10.5)$$

Ad esempio, per un elettrone con $\ell \neq 0$ (e spin $\frac{1}{2}$), j può essere uguale a

$$j = \ell \pm \frac{1}{2}, \quad (10.6)$$

mentre se $\ell = 0$ allora

$$j = \frac{1}{2}. \quad (10.7)$$

Se lo spin è semintero anche il momento angolare totale è semintero, poiché il momento angolare orbitale è sempre intero.

L'operatore dello spin si rappresenta in forma di matrici di rango $2s+1$.

10.1 Sistemi di spin $\frac{1}{2}$

L'operatore di spin in questo caso si rappresenta in forma di matrici 2×2 :

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}, \quad (10.8)$$

con

$$\hat{\sigma} = \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_z, \quad (10.9)$$

dove le $\hat{\sigma}_i$ sono le **matrici di Pauli**:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (10.10)$$

Le $\hat{\sigma}_i$ soddisfano le seguenti proprietà

1. $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1$. Dimostriamolo esplicitamente per $\hat{\sigma}_y$:

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10.11)$$

Analogamente si dimostra per $\hat{\sigma}_x$ e $\hat{\sigma}_z$.

- 2.

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y &= i \hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z &= i \hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x &= i \hat{\sigma}_y. \end{aligned} \quad (10.12)$$

Dimostriamo esplicitamente la seconda equazione:

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.13)$$

Inoltre, sono vere le seguenti relazioni

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x &= -i \hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y &= -i \hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z &= -i \hat{\sigma}_y. \end{aligned} \quad (10.14)$$

In generale valgono le seguenti regole di commutazione e anticommutazione:

$$\begin{aligned} [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] &= 2i \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k, \\ \{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} &= 2\delta_{ij}, \end{aligned} \quad (10.15)$$

cioè le matrici di Pauli sono **anticommutative**.

3. Dati due vettori arbitrari \vec{a} e \vec{b} vale la seguente relazione:

$$(\hat{\sigma} \cdot \vec{a})(\hat{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \hat{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}). \quad (10.16)$$

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} (\hat{\sigma} \cdot \vec{a})(\hat{\sigma} \cdot \vec{b}) &= \sum_j \sum_k \sigma_j a_j \sigma_k b_k = \sum_{j,k} \left\{ \frac{1}{2} [\sigma_j, \sigma_k] + \frac{1}{2} \{\sigma_j, \sigma_k\} \right\} a_j b_k = \\ &= \sum_{j,k} (i \epsilon_{jki} \sigma_i + \delta_{jk}) a_j b_k = \sum_j a_j b_j + \sum_{j,k} i \epsilon_{jki} \sigma_i a_j b_k = \\ &= \vec{a} \cdot \vec{b} + i \hat{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}). \end{aligned} \quad (10.17)$$

C.V.D.

In particolare, ponendo $\vec{a} = \vec{b}$ troviamo

$$(\hat{\sigma} \cdot \vec{a})^2 = |\vec{a}|^2. \quad (10.18)$$

Poiché lo spin è a tutti gli effetti un momento angolare, esso deve essere il generatore di una qualche rotazione espressa dall'operatore

$$e^{i\hat{s}\cdot\vec{\omega}/\hbar} = e^{i\hat{\sigma}\cdot\vec{\omega}/2} . \quad (10.19)$$

Consideriamo perciò una funzione d'onda $\psi(\sigma)$ il cui unico grado di libertà sia lo spin. Questa trasforma nel seguente modo

$$\psi(\sigma)' = e^{i\hat{\sigma}\cdot\vec{\omega}/2}\psi(\sigma) , \quad (10.20)$$

e tenendo conto anche dei gradi di libertà spaziali:

$$\psi(\vec{r}; \sigma)' = e^{i(\hat{\ell}+\hat{\sigma}/2)\cdot\vec{\omega}}\psi(\vec{r}; \sigma) = e^{i\hat{j}\cdot\vec{\omega}}\psi(\vec{r}; \sigma) , \quad (10.21)$$

con $\hat{j} = \hat{\ell} + \hat{\sigma}/2$.

L'espressione per l'operatore $e^{i\hat{\sigma}\cdot\vec{\omega}/2}$ può essere riscritta in una forma equivalente

$$\begin{aligned} e^{i\hat{\sigma}\cdot\vec{\omega}/2} &= e^{i\hat{\sigma}\cdot\vec{n}\omega/2} = \\ &= \left[1 + \frac{i\hat{\sigma}\cdot\vec{n}\omega}{2} - \frac{1}{2!}(\hat{\sigma}\cdot\vec{n})^2 \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \frac{i}{3!}(\hat{\sigma}\cdot\vec{n})^3 \left(\frac{\omega}{2}\right)^3 + \dots \right] , \end{aligned} \quad (10.22)$$

e poiché

$$(\hat{\sigma}\cdot\vec{n})^k = \begin{cases} 1 & k \text{ pari} , \\ \hat{\sigma}\cdot\vec{n} & k \text{ dispari} , \end{cases} \quad (10.23)$$

avremo

$$\begin{aligned} &\left[1 + \frac{i\hat{\sigma}\cdot\vec{n}\omega}{2} - \frac{1}{2!}(\hat{\sigma}\cdot\vec{n})^2 \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \frac{i}{3!}(\hat{\sigma}\cdot\vec{n})^3 \left(\frac{\omega}{2}\right)^3 + \dots \right] = \\ &= \left[1 - \frac{1}{2!} \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \frac{1}{4!} \left(\frac{\omega}{2}\right)^4 - \dots \right] + i\hat{\sigma}\cdot\vec{n} \left[\frac{\omega}{2} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\omega}{2}\right)^3 + \frac{1}{5!} \left(\frac{\omega}{2}\right)^5 - \dots \right] = \\ &= \hat{I} \cos \left(\frac{\omega}{2}\right) + i\hat{\sigma}\cdot\vec{n} \sin \left(\frac{\omega}{2}\right) . \end{aligned} \quad (10.24)$$

Siamo giunti quindi all'uguaglianza

$$\boxed{e^{i\hat{\sigma}\cdot\vec{n}\omega/2} = \hat{I} \cos \left(\frac{\omega}{2}\right) + i\hat{\sigma}\cdot\vec{n} \sin \left(\frac{\omega}{2}\right)} . \quad (10.25)$$

Per convincerci che questo operatore ruota realmente il sistema fisico, consideriamo una rotazione intorno all'asse z di angolo ω . Se lo stato prima della rotazione è $\psi(\sigma_z)$, dopo la rotazione lo stato sarà

$$\psi(\sigma_z)' = e^{i\hat{\sigma}_z\omega/2}\psi(\sigma_z) . \quad (10.26)$$

A questo punto vediamo come cambia il valor medio $\hat{\sigma}_x$:

$$\langle \psi' | \hat{\sigma}_x | \psi' \rangle = \langle \psi | e^{-i\hat{\sigma}_z\omega/2} \hat{\sigma}_x e^{i\hat{\sigma}_z\omega/2} | \psi \rangle . \quad (10.27)$$

Dobbiamo valutare

$$\begin{aligned}
e^{-i\hat{\sigma}_z\omega/2}\hat{\sigma}_xe^{i\hat{\sigma}_z\omega/2} &= \left[\hat{I} \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) - i\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) \right] \hat{\sigma}_x \left[\hat{I} \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) + i\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) \right] = \\
&= \cos^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \hat{\sigma}_x + i \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z - i \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \\
&+ \sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = \\
&= \left[\cos^2\left(\frac{\omega}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \right] \hat{\sigma}_x + i \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z] = \\
&= \cos(\omega) \hat{\sigma}_x - \sin(\omega) \hat{\sigma}_y
\end{aligned} \tag{10.28}$$

e quindi

$$\langle \psi' | \hat{\sigma}_x | \psi' \rangle = \langle \psi | \cos(\omega) \hat{\sigma}_x - \sin(\omega) \hat{\sigma}_y | \psi \rangle , \tag{10.29}$$

e dunque

$$\langle \hat{\sigma}_x \rangle' = \langle \hat{\sigma}_x \rangle \cos(\omega) - \langle \hat{\sigma}_y \rangle \sin(\omega) . \tag{10.30}$$

Con questo calcolo abbiamo verificato che l'applicazione dell'operatore di rotazione $e^{i\hat{\sigma}\cdot\vec{\omega}/2}$ al ket di stato $|\psi\rangle$ ruota il valore di aspettazione di $\hat{\sigma}$ (intorno all'asse z in questo caso) di un angolo ω . In altre parole, il valore di aspettazione dell'operatore di spin si comporta per rotazioni come se fosse un vettore classico, i.e.

$$\langle \hat{\sigma}_i \rangle' = \sum_{ij} R_{ij} \langle \hat{\sigma}_j \rangle \tag{10.31}$$

Consideriamo ancora l'operatore di rotazione

$$e^{i\hat{\sigma}\cdot\vec{n}\omega/2} = \hat{I} \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) + i\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) , \tag{10.32}$$

e di nuovo consideriamo lo stato $\psi(\sigma_z)$ che dipende solo dallo spin. Ruotando di un angolo $\omega = 2\pi$ intorno all'asse z , otteniamo

$$\psi(\sigma_z)' = e^{i\hat{\sigma}_z 2\pi/2} \psi(\sigma_z) = \left[\hat{I} \cos(\pi) + i\hat{\sigma}_z \sin(\pi) \right] \psi(\sigma_z) = -\psi(\sigma_z) , \tag{10.33}$$

cioè lo stato ruotato di 2π differisce dallo stato originale per un segno meno.

10.2 Analisi della precessione dello spin

L'hamiltoniana di una particella di spin $\frac{1}{2}$ sottoposta all'azione di un campo magnetico è data da

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} , \tag{10.34}$$

dove $\vec{\mu}$ è il **momento magnetico di spin**, dato da

$$\vec{\mu} = \mu_0 \hat{s} = \mu_0 \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} . \tag{10.35}$$

Supponiamo che il campo magnetico sia diretto lungo z , cosicché possiamo scrivere l'hamiltoniana come

$$H = -\mu_0 \frac{\hbar}{2} B \hat{\sigma}_z = -\frac{\hbar\omega}{2} \hat{\sigma}_z , \quad \text{con } \omega = \mu_0 B . \tag{10.36}$$

L'operatore di evoluzione temporale sarà dato da

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{i\hat{\sigma}_z\omega t/2}, \quad (10.37)$$

che ha la stessa forma dell'operatore di rotazione di spin con ω sostituito da ωt .

Ora analizziamo come varia il valor medio di $\hat{\sigma}_x$ e di $\hat{\sigma}_y$ in funzione del tempo:

$$\langle \hat{\sigma}_x \rangle_t = {}_t\langle \psi | \hat{\sigma}_x | \psi \rangle_t = \langle \psi | e^{-i\hat{\sigma}_z\omega t/2} \hat{\sigma}_x e^{i\hat{\sigma}_z\omega t/2} | \psi \rangle. \quad (10.38)$$

Per quanto visto nella sezione precedente, avremo

$$\begin{aligned} \langle \hat{\sigma}_x \rangle_t &= \langle \hat{\sigma}_x \rangle_{t=0} \cos(\omega t) - \langle \hat{\sigma}_y \rangle_{t=0} \sin(\omega t), \\ \langle \hat{\sigma}_y \rangle_t &= \langle \hat{\sigma}_y \rangle_{t=0} \cos(\omega t) + \langle \hat{\sigma}_x \rangle_{t=0} \sin(\omega t), \end{aligned} \quad (10.39)$$

e quindi, dopo un tempo $t = 2\pi/\omega$ (il valor medio del)lo spin torna alla sua direzione originale.

Il ket di stato, invece, evolve secondo la legge

$$|\psi\rangle_t = e^{i\hat{\sigma}_z\omega t/2} |\psi\rangle_{t=0}. \quad (10.40)$$

Dopo un tempo $t = \frac{2\pi}{\omega}$ avremo

$$|\psi\rangle_t = \left[\hat{I} \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) + i\hat{\sigma}_z \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \right]_{t=\frac{2\pi}{\omega}} |\psi\rangle_{t=0} = -|\psi\rangle_{t=0}. \quad (10.41)$$

Quindi dobbiamo aspettare un tempo $t = \frac{4\pi}{\omega}$ per ritrovare il ket originale con lo stesso segno. In sintesi

$$\begin{aligned} \tau_{\text{precessione}} &= 2\pi/\omega, \\ \tau_{\text{ket di stato}} &= 4\pi/\omega. \end{aligned} \quad (10.42)$$

Analizziamo di nuovo la precessione utilizzando il formalismo di Heisenberg. L'hamiltoniano è

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_0 \frac{\hbar}{2} B \hat{\sigma}_z, \quad (10.43)$$

dove il campo è sempre diretto lungo z .

L'evoluzione temporale del momento magnetico è data da

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \vec{\mu}]. \quad (10.44)$$

Ad esempio, l'equazione per la componente μ_x è

$$\frac{d\mu_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \mu_x] = \frac{i}{\hbar} \left[-\mu_0 \frac{\hbar}{2} B \hat{\sigma}_z, \frac{\hbar}{2} \mu_0 \hat{\sigma}_x \right] = -\frac{i\mu_0^2 \hbar B}{4} [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = \frac{\mu_0^2 \hbar B}{2} \hat{\sigma}_y = \omega \mu_y. \quad (10.45)$$

Per la componente μ_y troviamo analogamente

$$\frac{d\mu_y}{dt} = -\omega \mu_x. \quad (10.46)$$

Prendendo la derivata seconda otteniamo

$$\frac{d^2 \mu_x}{dt^2} = \omega \frac{d\mu_y}{dt} = -\omega^2 \mu_x , \quad (10.47)$$

la cui soluzione è

$$\mu_x = |\mu| \cos(\omega t + \phi) . \quad (10.48)$$

Procedendo analogamente per μ_y troviamo

$$\mu_y = |\mu| \sin(\omega t + \phi) . \quad (10.49)$$

Imponendo la rimanente condizione iniziale è possibile determinare anche il valore della fase ϕ .

Considerazioni sulla densità di probabilità di spin

Consideriamo la funzione d'onda $\psi(\vec{r}; \sigma_z)$.

La probabilità di trovare la particella nell'elemento di volume dV con spin σ_z è data da

$$dP(\vec{r}; \sigma_z) = |\psi(\vec{r}; \sigma_z)|^2 dV . \quad (10.50)$$

La probabilità di trovare la particella nell'elemento di volume dV , ma con uno spin arbitrario è

$$dP(\vec{r}) = \sum_{\sigma_z=-M}^M |\psi(\vec{r}; \sigma_z)|^2 dV . \quad (10.51)$$

Analogamente, la probabilità di trovare la particella con un determinato valore di σ_z , indipendentemente dalla posizione nello spazio è

$$dP(\sigma_z) = \int |\psi(\vec{r}; \sigma_z)|^2 dV . \quad (10.52)$$

Supponiamo di avere lo **spinore**

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix} = \psi_1(\vec{r}) |\uparrow\rangle + \psi_2(\vec{r}) |\downarrow\rangle . \quad (10.53)$$

Allora, la condizione

$$\int \langle \psi | \psi \rangle d^3 r = 1 \quad (10.54)$$

equivale a

$$\int |\psi_1(\vec{r})|^2 + |\psi_2(\vec{r})|^2 d^3 r = \int \sum_{\sigma_z=-M}^M |\psi(\vec{r}; \sigma_z)|^2 d^3 r . \quad (10.55)$$

10.3 Rappresentazione dell'operatore hamiltoniano nello spazio degli spin

Supponiamo di avere un'hamiltoniano del tipo

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} . \quad (10.56)$$

Quest'operatore non agisce sulle variabili di spin, quindi deve essere proporzionale alla matrice identità nello spazio degli spinori, i.e.

$$\begin{pmatrix} \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} & 0 \\ 0 & \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \end{pmatrix} . \quad (10.57)$$

Supponiamo invece di avere un'hamiltoniano del tipo

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} + \frac{m\Omega^2 r^2}{2} \sigma_x . \quad (10.58)$$

Evidentemente, la rappresentazione di quest'operatore è

$$\begin{pmatrix} \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} & \frac{m\Omega^2 r^2}{2} \\ \frac{m\Omega^2 r^2}{2} & \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \end{pmatrix} . \quad (10.59)$$

Consideriamo ora lo spinore

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix} . \quad (10.60)$$

L'equazione agli autovalori $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ è equivalente al sistema di equazioni

$$\begin{cases} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \right) \psi_1(\vec{r}) + \frac{m\Omega^2 r^2}{2} \psi_2(\vec{r}) = E\psi_1(\vec{r}) \\ \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \right) \psi_2(\vec{r}) + \frac{m\Omega^2 r^2}{2} \psi_1(\vec{r}) = E\psi_2(\vec{r}) \end{cases} . \quad (10.61)$$

Sommando membro a membro otteniamo

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\Omega_+^2 r^2}{2} \right) \psi_+(\vec{r}) = E\psi_+(\vec{r}) , \quad (10.62)$$

dove

$$\Omega_+^2 = \omega^2 + \Omega^2 , \quad \psi_+(\vec{r}) = \frac{\psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})}{\sqrt{2}} . \quad (10.63)$$

Sottraendo membro a membro otteniamo invece

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\Omega_-^2 r^2}{2} \right) \psi_-(\vec{r}) = E\psi_-(\vec{r}) , \quad (10.64)$$

dove

$$\Omega_-^2 = \omega^2 - \Omega^2, \quad \psi_-(\vec{r}) = \frac{\psi_1(\vec{r}) - \psi_2(\vec{r})}{\sqrt{2}}. \quad (10.65)$$

Otteniamo quindi due equazioni disaccoppiate per $\psi_+(\vec{r})$ e $\psi_-(\vec{r})$, che rappresentano le equazioni di due oscillatori armonici disaccoppiati. Di conseguenza gli autovalori dell'energia sono dati da

$$\begin{aligned} E_+^{(n)} &= \hbar\Omega_+ \left(n + \frac{1}{2} \right), \\ E_-^{(n)} &= \hbar\Omega_- \left(n + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (10.66)$$

mentre le autofunzioni sono date

$$\begin{aligned} \psi_+^{(n)}(\xi) &= \mathcal{N}_+ H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \xi = \left(\frac{m\Omega_+}{\hbar} \right)^{1/2} x, \\ \psi_-^{(n)}(\xi) &= \mathcal{N}_+ H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \xi = \left(\frac{m\Omega_-}{\hbar} \right)^{1/2} x. \end{aligned} \quad (10.67)$$

Infine, lo spinore ψ_n sarà dato da

$$|\psi\rangle_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi_+^{(n)} + \psi_-^{(n)} \\ \psi_+^{(n)} - \psi_-^{(n)} \end{pmatrix}. \quad (10.68)$$

10.4 Particelle identiche

In meccanica quantistica l'**identità delle particelle** relativa alle loro proprietà fisiche porta all'**indistinguibilità totale delle particelle**. Se pensiamo a due particelle questo avviene perché non possiamo specificare più di un insieme completo di osservabili compatibili per ciascuna delle due particelle.

Supponiamo di avere solo due particelle identiche (per esempio elettroni). In forza della loro equivalenza gli stati del sistema che si ottengono l'uno dall'altro semplicemente scambiando le due particelle devono essere fisicamente del tutto equivalenti. Come risultato dello scambio la funzione d'onda del sistema può variare solo di un fattore di fase (inessenziale).

Sia $\psi(\xi_1, \xi_2)$ la funzione d'onda del sistema, con ξ_1 e ξ_2 insieme delle coordinate e della proiezione dello spin di ciascuna particella. Deve verificarsi che

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = e^{i\alpha} \psi(\xi_2, \xi_1), \quad \text{con } \alpha \in \mathbb{R}. \quad (10.69)$$

Se scambiamo ancora una volta torniamo allo stato iniziale, per cui avremo

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = e^{i\alpha} \psi(\xi_2, \xi_1) = e^{2i\alpha} \psi(\xi_1, \xi_2). \quad (10.70)$$

Ma allora avremo

$$e^{2i\alpha} = 1 \rightarrow e^{i\alpha} = \pm 1, \quad (10.71)$$

cioè

$$\boxed{\psi(\xi_1, \xi_2) = \pm \psi(\xi_2, \xi_1)}. \quad (10.72)$$

Abbiamo due possibilità:

1. o la funzione d'onda è **simmetrica**, cioè non cambia segno nello scambio delle due particelle;
2. o la funzione d'onda è **antisimmetrica**, cioè nello scambio prende un segno.

Generalizzando a sistemi formati da un numero qualsiasi di particelle è chiaro che la funzione d'onda complessiva deve rimanere immutata per lo scambio di una coppia qualsiasi di particelle (nel qual caso si dice simmetrica), ovvero cambiare di segno per lo scambio di ogni coppia (nel qual caso si dice antisimmetrica).

Le particelle descritte da funzioni **antisimmetriche** ubbidiscono alla statistica di **Fermi-Dirac**. Quelle descritte da funzioni **simmetriche** obbediscono alla statistica di **Bose-Einstein**. È possibile dimostrare che la statistica cui obbediscono le particelle è univocamente legata al loro spin, i.e.:

- particelle con **spin semintero** sono **fermioni**;
- particelle con **spin intero** sono **bosoni**.

Definiamo l'operatore di scambio \hat{S} come

$$\hat{S}\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1) . \quad (10.73)$$

È facile vedere che $\hat{S}^2 = \hat{I}$, e quindi $\hat{S} = \hat{S}^{-1} = \hat{S}^\dagger$. Consideriamo un autostato dell'operatore di scambio con autovalore η :

$$\hat{S}\psi(\xi_1, \xi_2) = \eta\psi(\xi_1, \xi_2) . \quad (10.74)$$

Allora avremo

$$\hat{S}^2\psi(\xi_1, \xi_2) = \eta^2\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_1, \xi_2) , \quad (10.75)$$

e quindi

$$\eta^2 = 1 \rightarrow \eta = \pm 1 . \quad (10.76)$$

In virtù dell'identità delle particelle l'hamiltoniano del sistema deve restare invariato per lo scambio di una coppia qualsiasi di particelle. Supponiamo di avere lo stato

$$|\psi'\rangle = \hat{S}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle , \quad (10.77)$$

e calcoliamo il valor medio dell'hamiltoniano su questo stato

$$\langle\psi'|H|\psi'\rangle = \langle\psi|S^{-1}HS|\psi\rangle = \langle\psi|SHS|\psi\rangle = \langle\psi'|SHS|\psi'\rangle , \quad (10.78)$$

per cui avremo

$$H = SHS \rightarrow SH = HS \rightarrow [H, S] = 0 , \quad (10.79)$$

cioè H e S commutano.

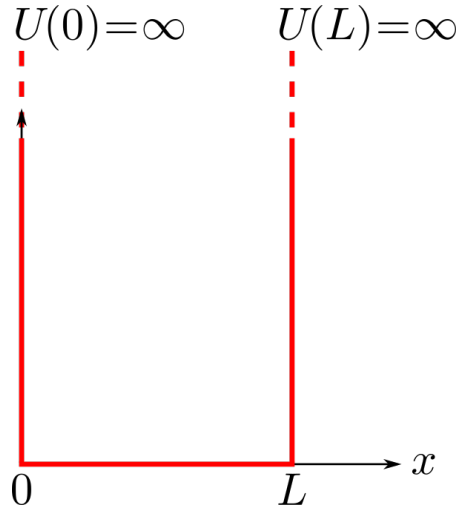


Figure 10.1: Buca di potenziale a pareti infinite.

10.4.1 Sistema di 2 bosoni di spin $s = 0$

Consideriamo 2 bosoni di spin 0 in una buca di potenziale a pareti infinite come illustrato in figura 10.1. I livelli energetici di singola particella sono

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi \hbar}{L} \right)^2 n^2 = \epsilon n^2, \quad (10.80)$$

e le autofunzioni di singola particella sono

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{n\pi x}{L} \right). \quad (10.81)$$

L'hamiltoniana del sistema delle 2 particelle è data da

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + U_1(x_1) + U_2(x_2). \quad (10.82)$$

Le autofunzioni di H saranno della forma

$$\Psi_n(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2), \quad (10.83)$$

e i corrispondenti autovalori

$$E_n = E_{n_1} + E_{n_2} = \epsilon (n_1^2 + n_2^2). \quad (10.84)$$

Consideriamo lo **stato fondamentale**

$$\Psi_1(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \psi_1(x_2) = \frac{2}{L} \sin \left(\frac{\pi x_1}{L} \right) \sin \left(\frac{\pi x_2}{L} \right), \quad (10.85)$$

che è simmetrica per lo scambio delle due particelle e rappresenta quindi uno stato possibile del sistema con autovalore

$$E_1 = 2\epsilon. \quad (10.86)$$

Consideriamo ora il **primo livello eccitato**. Abbiamo due possibilità per lo stato Ψ_2 , date da

$$\Psi_2(x_1, x_2) = \begin{cases} \psi_1(x_1)\psi_2(x_2) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right) \\ \psi_2(x_1)\psi_1(x_2) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) \end{cases}, \quad (10.87)$$

ma nessuna delle due è simmetrica per lo scambio dei due bosoni. Invece, la combinazione lineare

$$\Psi_2(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) + \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)] \quad (10.88)$$

è simmetrica per scambio e rappresenta l'autofunzione corretta del sistema corrispondente all'autovalore

$$E_2 = 5\epsilon. \quad (10.89)$$

Analogamente possiamo costruire tutti i livelli eccitati successivi.

10.4.2 Sistema di 3 bosoni di spin $s = 0$

Ragionando come nel caso di 2 bosoni, partiamo con la funzione d'onda dello stato fondamentale:

$$\Psi_1(x_1, x_2, x_3) = \psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_1(x_3), \quad (10.90)$$

che è simmetrica e corrisponde all'autovalore

$$E_1 = 3\epsilon. \quad (10.91)$$

Per la funzione d'onda del primo stato eccitato abbiamo tre possibilità

$$\Psi_2(x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} \psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3) \equiv \psi_{112} \\ \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_1(x_3) \equiv \psi_{121} \\ \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\psi_1(x_3) \equiv \psi_{211} \end{cases}, \quad (10.92)$$

delle quali nessuna è simmetrica per scambio di una coppia arbitraria di particelle; ma la combinazione lineare

$$\Psi_2(x_1, x_2, x_3) = \frac{\psi_{112} + \psi_{121} + \psi_{211}}{\sqrt{3}} \quad (10.93)$$

lo è, e rappresenta la funzione d'onda del primo stato eccitato corrispondente all'autovalore

$$E_2 = 6\epsilon. \quad (10.94)$$

Consideriamo ora il livello eccitato $E = 14\epsilon$. Non è difficile convincersi che l'autofunzione d'onda corretta corrispondente è data da

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_{123} + \psi_{132} + \psi_{231} + \psi_{321} + \psi_{213} + \psi_{312}). \quad (10.95)$$

Generalizziamo ora al caso di N bosoni. Supponiamo quindi di avere

$$\begin{aligned} n_1 & \text{ particelle nel livello 1} \\ n_2 & \text{ particelle nel livello 2} \\ & \dots \\ n_k & \text{ particelle nel livello } k, \end{aligned} \quad (10.96)$$

con

$$\sum_{i=1}^k n_i = N. \quad (10.97)$$

La funzione d'onda corretta corrispondente, cioè simmetrica per lo scambio di una coppia qualsiasi di bosoni, è data da

$$\Psi = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_k!}{N!}} \sum_P \underbrace{\psi_1 \dots \psi_1}_{n_1} \underbrace{\psi_2 \dots \psi_2}_{n_2} \dots \underbrace{\psi_k \dots \psi_k}_{n_k} \quad (10.98)$$

dove la somma è estesa a tutte le possibili permutazioni.

10.4.3 Sistema di 2 fermioni di spin $s = \frac{1}{2}$

I livelli di energia di singola particella sono sempre

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi \hbar}{L} \right)^2 n^2 = \epsilon n^2. \quad (10.99)$$

Questa volta le autofunzioni sono

$$\begin{aligned} \psi_n^+(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) |\uparrow\rangle \equiv \psi_n(x) |\uparrow\rangle, \\ \psi_n^-(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) |\downarrow\rangle \equiv \psi_n(x) |\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (10.100)$$

Consideriamo la funzione d'onda dello stato fondamentale dipendente dalle coordinate

$$\psi_{11}(x_1, x_2) = \psi_1(x_1)\psi_1(x_2), \quad (10.101)$$

che è simmetrica.

Componiamo ora gli spin. Esprimiamo quindi $|s, s_z\rangle$ nella base $|s_1, s_{1z}\rangle \otimes |s_2, s_{2z}\rangle$. Gli stati di spin totale $s = 1$ formano il tripletto seguente:

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2, \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 + \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right), \\ |1, -1\rangle &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2, \end{aligned} \quad (10.102)$$

che sono 3 combinazioni simmetriche.

Lo stato di spin totale $s = 0$ è il singoletto

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right), \quad (10.103)$$

che è una combinazione antisimmetrica. Poichè la funzione d'onda totale Ψ (parte spaziale e parte di spin) del sistema formato dai due fermioni deve essere antisimmetrica per lo scambio delle due particelle, avremo che la funzione d'onda completa dello stato fondamentale è data da

$$\Psi_1 = \psi_1(x_1)\psi_1(x_2)|0, 0\rangle. \quad (10.104)$$

Consideriamo ora il primo stato eccitato. Per la parte spaziale della funzione d'onda abbiamo due possibilità

$$\begin{cases} \psi_{12}(x_1, x_2) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2) \\ \psi_{21}(x_1, x_2) = \psi_2(x_1)\psi_1(x_2) \end{cases}. \quad (10.105)$$

Da queste possiamo costruire le combinazioni lineari simmetrica e antisimmetrica:

$$\psi_S = \frac{\psi_{12} + \psi_{21}}{\sqrt{2}}, \quad \psi_A = \frac{\psi_{12} - \psi_{21}}{\sqrt{2}}. \quad (10.106)$$

Di conseguenza, l'autofunzione completa giusta (i.e. antisimmetrica) del primo livello eccitato può essere ottenuta in due modi e cioè

$$\Psi_2 = \begin{cases} \psi_S|0, 0\rangle, \\ 1 \\ \psi_A|1, 0\rangle. \\ -1 \end{cases} \quad (10.107)$$

Generalizzando ad un sistema di N fermioni, la funzione d'onda completa si può scrivere sotto forma di un determinante, noto come **determinante di Slater**:

$$\Psi(\underbrace{x_1; \sigma_1}_{\xi_1}, \dots, \underbrace{x_N; \sigma_N}_{\xi_N}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \psi_{p_N}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{pmatrix}, \quad (10.108)$$

dove p_1, p_2, \dots, p_N indicano i numeri degli stati in cui si trovano le particelle. In questo caso, scambiare 2 particelle equivale a scambiare 2 colonne, per cui il determinante (e quindi la funzione d'onda) prende un segno.

Enunciamo ora il seguente fatto importante: se fra p_1, p_2, \dots, p_N ve ne sono almeno 2 uguali allora 2 righe del determinante saranno uguali e quindi il determinante si annulla. Questa è l'espressione matematica del **principio di esclusione di Pauli**, che equivale a dire che non ci possono essere due o più fermioni che si trovano nello stesso stato (i.e. due fermioni con gli stessi numeri quantici).

Supponiamo, ad esempio, di avere 2 fermioni con la stessa energia. Questi dovranno avere necessariamente spin antiparalleli, i.e.

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(x_1)|\uparrow\rangle & \psi_1(x_2)|\uparrow\rangle \\ \psi_1(x_1)|\downarrow\rangle & \psi_1(x_2)|\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x_1)\psi_1(x_2) [|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2] . \quad (10.109)$$

Al contrario, se i due fermioni hanno energia diversa, allora possono avere lo stesso spin, i.e.

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(x_1)|\uparrow\rangle & \psi_1(x_2)|\uparrow\rangle \\ \psi_2(x_1)|\uparrow\rangle & \psi_2(x_2)|\uparrow\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) - \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)] [|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2] . \quad (10.110)$$

10.5 Due particelle identiche libere

Consideriamo 2 particelle identiche libere. L'hamiltoniano del sistema è dato da

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} = H_1 + H_2 , \quad (10.111)$$

e le funzioni d'onda di singola particella sono

$$\begin{aligned} \psi_1(\vec{r}_1) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{i\vec{p}_1 \cdot \vec{r}_1/\hbar} , \\ \psi_2(\vec{r}_2) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{i\vec{p}_2 \cdot \vec{r}_2/\hbar} . \end{aligned} \quad (10.112)$$

La funzione d'onda costruita come il prodotto delle due funzioni d'onda di singola particella

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 e^{i(\vec{p}_1 \cdot \vec{r}_1 + \vec{p}_2 \cdot \vec{r}_2)/\hbar} \quad (10.113)$$

non ha simmetria definita.

Al contrario, la funzione d'onda costruita come

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 [e^{i(\vec{p}_1 \cdot \vec{r}_1 + \vec{p}_2 \cdot \vec{r}_2)/\hbar} \pm e^{i(\vec{p}_1 \cdot \vec{r}_2 + \vec{p}_2 \cdot \vec{r}_1)/\hbar}] \quad (10.114)$$

è simmetrica (+) o antisimmetrica (-) per lo scambio delle due particelle.

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

Chapter 11

Moto in un campo a simmetria centrale

Prima di discutere il problema del moto in un campo a simmetria centrale, analizziamo alcuni aspetti generali delle funzioni d'onda degli stati stazionari.

11.1 Spettro degli autovalori dell'energia

11.1.1 Spettro discreto

Lo stato stazionario dello spettro discreto corrisponde sempre a un **moto finito del sistema**, cioè a un moto in cui né il sistema nel suo complesso, né alcuna delle sue parti, si allontana all'infinito. Infatti, per le autofunzioni dello spettro discreto l'integrale

$$\int |\psi|^2 d^3x , \quad (11.1)$$

esteso a tutto lo spazio, è finito. Ciò vuol dire che il quadrato $|\psi|^2$ decresce in modo sufficientemente rapido e si annulla all'infinito.

In altre parole, la probabilità dei valori infiniti delle coordinate è nulla, cioè il sistema compie un **moto finito** e si trova quindi in uno **stato legato**.

Un altro modo di vedere la stessa cosa è il seguente. Consideriamo una funzione d'onda arbitraria $\psi(x, t)$ decomposta nella base delle autofunzioni dell'energia:

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x) . \quad (11.2)$$

Consideriamo ora la densità di probabilità

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \sum_n \sum_m c_n c_m^* e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \psi_n(x) \psi_m^*(x) , \quad (11.3)$$

e facciamone la media temporale in un certo intervallo di tempo T , facendo poi

tendere T all'infinito:

$$\begin{aligned}\bar{\rho} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \rho(x, t) dt = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sum_n \sum_m c_n c_m^* e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \psi_n(x) \psi_m^*(x) dx = \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sum_n |c_n|^2 |\psi_n(x)|^2 dx dt = \sum_n |c_n \psi_n(x)|^2 \neq 0 ,\end{aligned}\tag{11.4}$$

cioè la densità di probabilità resta finita quando si prende la media rispetto al tempo. Questo vuol dire che la particella è **localizzata** in una regione limitata dello spazio delle configurazioni.

11.1.2 Spettro continuo

Nel caso di spettro continuo l'integrale $\int |\psi|^2 d^3x$ diverge e il quadrato $|\psi|^2$ della funzione d'onda non dà direttamente la probabilità dei diversi valori delle coordinate, ma deve essere considerato come una grandezza proporzionale a tale probabilità.

La divergenza è sempre dovuta al fatto che $|\psi|^2$ non si annulla all'infinito (o comunque non con sufficiente rapidità). Questo vuol dire che l'integrale $\int |\psi|^2 d^3x$ calcolato all'esterno di una superficie arbitrariamente grande ma finita continua ad essere divergente. Ciò vuol dire che nello stato considerato il sistema, o una delle sue parti, si trova all'infinito. Il sistema compie cioè un **moto infinito** e si trova in uno **stato non legato**.

Analogamente a prima, consideriamo una funzione d'onda $\psi(x, t)$ decomposta nella base delle autofunzioni dell'energia:

$$\psi(x, t) = \int c(E) e^{-iEt/\hbar} \psi_E(x) dE .\tag{11.5}$$

Facciamo la media rispetto al tempo della densità di probabilità

$$\begin{aligned}\bar{\rho} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int c(E) c(E')^* e^{i(E' - E)t/\hbar} \psi_E \psi_{E'}^* dE dE' = \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2\pi\hbar}{T} \int c(E) c(E')^* \psi_E \psi_{E'}^* \delta(E - E') dE dE' = \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2\pi\hbar}{T} \int |c(E)|^2 |\psi_E|^2 dE = 0 .\end{aligned}\tag{11.6}$$

Questo per dire che la media rispetto al tempo della probabilità che il sistema si trovi in un sottospazio limitato qualsiasi dello spazio delle configurazioni si annulla. Ma ciò è possibile solo se il moto si estende in tutto lo spazio infinito.

Comunque, è possibile avere in un dato istante una funzione d'onda rappresentata dalla sovrapposizione di funzioni d'onda di diversi stati stazionari dello spettro continuo tale che l'integrale $\int |\psi|^2 d^3x$ sia convergente. In questo istante il sistema è localizzato in una regione finita dello spazio. Tuttavia, con il passare del tempo, questa regione si sposterà indefinitamente e infine il sistema si delocalizzerà all'infinito.

11.2 Proprietà fondamentali dell'equazione di Schrödinger

Elenchiamo di seguito le proprietà fondamentali della funzione d'onda che risolve l'equazione di Schrödinger:

- La funzione d'onda è **monodroma** e **continua**, anche nei casi in cui il potenziale $U(x, y, z)$ ha superfici di discontinuità.
- Ha derivate continue.
- Se U diventa infinito all'esterno di una superficie, allora $\psi = 0$ in tale regione e sulla superficie (in questo caso le derivate esibiscono in generale un salto).
- Se U non diventa infinito, allora anche ψ deve essere finita in tutto lo spazio.
- Se U ha un minimo U_{\min} , allora deve sempre valere la condizione

$$\langle E \rangle > U_{\min} . \quad (11.7)$$

Infatti, poiché $E = T + U$, dove T è la parte cinetica dell'energia, avremo

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle \geq \langle U \rangle > U_{\min} . \quad (11.8)$$

- Se U si annulla all'infinito, allora
 1. lo spettro degli autovalori negativi dell'energia è discreto, cioè tutti gli stati con $E < 0$ sono legati;
 2. gli autovalori positivi formano uno spettro continuo.

11.2.1 Proprietà generali del moto unidimensionale

Elenchiamo di seguito due proprietà generali del moto unidimensionale

1. Tutti i livelli energetici dello spettro discreto sono non degeneri.
2. Se lo spettro è continuo, ma il moto avviene in una regione semi-limitata, allora tutti i livelli energetici dello spettro continuo sono non degeneri.

11.3 Moto in un campo a simmetria centrale (Atomo di Idrogeno)

Il moto di due particelle interagenti (che interagiscono con un potenziale che dipende solo dalla distanza) può essere ridotto al moto di una singola particella in un campo a simmetria centrale.

Consideriamo l'hamiltoniana di 2 particelle

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) . \quad (11.9)$$

Introducendo le variabili

$$\begin{aligned}\vec{R} &= \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}, & \vec{P} &= M\dot{\vec{R}}, & M &= m_1 + m_2, \\ \vec{r} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2, & \vec{p} &= m\dot{\vec{r}}, & m &= \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2},\end{aligned}\quad (11.10)$$

l'hamiltoniana diventa

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + V(r), \quad (11.11)$$

dove il potenziale è funzione solo del **modulo della distanza**. Vediamo subito che la coordinata \vec{R} non compare esplicitamente nell'hamiltoniana, cioè è ciclica, e quindi

$$\dot{\vec{P}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{R}} = 0 \rightarrow \vec{P} \text{ si conserva.} \quad (11.12)$$

In altre parole, il moto del centro di massa corrisponde a quello di una particella libera di massa M .

L'hamiltoniana si separa in 2 pezzi:

$$H = H_{\text{CM}} + H_{\text{RID}}, \quad (11.13)$$

e i due pezzi commutano fra di loro. È possibile cercare allora la funzione d'onda $\Psi(R, r)$ in forma di prodotto

$$\Psi(R, r) = \phi(R)\psi(r). \quad (11.14)$$

L'equazione agli autovalori

$$H\Psi(R, r) = E\Psi(R, r) \quad (11.15)$$

equivale alle due equazioni

$$\begin{aligned}H_{\text{CM}} \phi(R) &= E_{\text{CM}} \phi(R), \\ H_{\text{RID}} \psi(r) &= E_{\text{RID}} \psi(r).\end{aligned}\quad (11.16)$$

Per quanto riguarda la prima equazione, la soluzione è un'onda piana del tipo

$$\phi(\vec{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{P}\cdot\vec{R}/\hbar}. \quad (11.17)$$

Analizziamo, quindi, la seconda equazione (rinominando $E_{\text{RID}} \rightarrow E$):

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r) \rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r). \quad (11.18)$$

Poiché il moto avviene in un campo a simmetria centrale, il **momento angolare si conserva**. Questo equivale a dire che **l'hamiltoniana è invariante per rotazioni**.

Riscriviamo l'equazione (11.18) nella forma seguente

$$\left[\nabla^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] \psi(r) = 0, \quad (11.19)$$

che in coordinate polari diventa

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi = 0. \quad (11.20)$$

Introducendo l'operatore \hat{p}_r definito come

$$\hat{p}_r \psi = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\psi), \quad (11.21)$$

possiamo riscrivere l'hamiltoniana ridotta (che rinominiamo $H_{\text{RID}} \rightarrow H$) come segue

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r), \quad (11.22)$$

dove \hat{L} è l'operatore del momento angolare. Verifichiamo che \hat{p}_r è effettivamente l'operatore 'giusto'. Calcoliamo

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \equiv \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \psi') = \frac{1}{r^2} [2r\psi' + r^2 \psi''] = \frac{2\psi'}{r} + \psi''. \quad (11.23)$$

Ora

$$\hat{p}_r^2 \psi = \hat{p}_r \hat{p}_r \psi, \quad (11.24)$$

per cui calcoliamo $\hat{p}_r \psi$:

$$\frac{1}{-i\hbar} \hat{p}_r \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\psi) = \frac{1}{r} (\psi + r\psi') = \frac{\psi}{r} + \psi', \quad (11.25)$$

e quindi $\hat{p}_r \hat{p}_r \psi$ sarà dato da:

$$\frac{1}{(-i\hbar)^2} \hat{p}_r \hat{p}_r \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \left(\frac{\psi}{r} + \psi' \right) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\psi + r\psi') = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\psi' + \psi' + r\psi'') = \frac{2\psi'}{r} + \psi'', \quad (11.26)$$

che è uguale al risultato nel lato destro dell'equazione (11.23). Inoltre, calcolando il commutatore $[r, p_r]$ otteniamo

$$\begin{aligned} [r, p_r] \psi &= r \left[-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\psi) \right] - \left[-i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \psi) \right] = \\ &= -i\hbar (\psi + r\psi') + i\hbar \frac{1}{r} (2r\psi + r^2 \psi') = i\hbar \psi \end{aligned} \quad (11.27)$$

e quindi

$$[r, p_r] = i\hbar. \quad (11.28)$$

Torniamo all'equazione agli autovalori (11.20)

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi \right) - \frac{\ell^2}{r^2} \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi = 0 . \quad (11.29)$$

Poiché

$$[H, \ell^2] = 0 , \quad [H, \ell_i] = 0 , \quad (11.30)$$

allora $\hat{H}, \hat{\ell}^2, \hat{\ell}_z$ sono un insieme completo di **operatori che commutano**. La soluzione, perciò, sarà un autostato simultaneo di $\hat{H}, \hat{\ell}^2, \hat{\ell}_z$, denotato con

$$|E, \ell, \ell_z\rangle . \quad (11.31)$$

Gli **stati stazionari** allora possono essere cercati nella forma di prodotto di una funzione radiale $R(r)$ e un'armonica sferica $Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \varphi)$, i.e.

$$\boxed{\psi(\vec{r}) = R(r) Y_{\ell, \ell_z}(\theta, \varphi)} . \quad (11.32)$$

Assegnando i valori di ℓ e ℓ_z si determina la dipendenza angolare della funzione d'onda. La parte radiale $R(r)$, invece, soddisfa la seguente equazione agli autovalori

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) R = 0 . \quad (11.33)$$

Poiché questa equazione non contiene il valore di ℓ_z esplicitamente, allora **i livelli energetici sono $(2\ell+1)$ volte degeneri rispetto alle direzioni del momento angolare**.

Risolviamo l'equazione (11.33) con la sostituzione

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} , \quad (11.34)$$

mediante la quale l'equazione (11.33) diventa

$$\chi''(r) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \chi(r) = 0 . \quad (11.35)$$

Per semplicità, indichiamo con $V_{\text{eff}}(r)$ la quantità

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} , \quad (11.36)$$

dove il secondo termine al lato destro è proprio l'**energia centrifuga**. L'equazione (11.35) diventa quindi

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_{\text{eff}}) \chi = 0 . \quad (11.37)$$

Per risolvere quest'equazione imponiamo le seguenti condizioni su $V(r)$

$$\begin{cases} V(r) \rightarrow 0 & \text{per } r \rightarrow \infty , \\ r^2 V(r) \rightarrow 0 & \text{per } r \rightarrow 0 , \end{cases} \quad (11.38)$$

La seconda condizione, i.e.

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0 \quad (11.39)$$

è necessaria affinché l'energia (hamiltoniana) sia limitata inferiormente.

–Elaboriamo ulteriormente sul significato di questa affermazione.–

Consideriamo un potenziale che tenda a $-\infty$ per $r \rightarrow 0$ della forma

$$V \sim -\frac{\alpha}{r^s}, \quad (11.40)$$

e consideriamo un pacchetto d'onda localizzato in una regione molto piccola intorno all'origine delle coordinate di raggio r_0 .

L'indeterminazione nei valori delle coordinate della particella è dell'ordine di r_0 e quindi l'indeterminazione nel valore della quantità di moto sarà

$$p \sim \frac{\hbar}{r_0}. \quad (11.41)$$

Il valor medio dell'energia cinetica in questo stato è dell'ordine di

$$T \sim \frac{\hbar^2}{mr_0^2}, \quad (11.42)$$

e il valor medio dell'energia potenziale è dell'ordine di

$$U \sim -\frac{\alpha}{r_0^s}. \quad (11.43)$$

La loro somma, l'energia media, è quindi dell'ordine di

$$E = T + U \sim \frac{\hbar^2}{mr_0^2} - \frac{\alpha}{r_0^s}. \quad (11.44)$$

Consideriamo ora due casi.

1. Caso 1: $s > 2$.

In questo caso, per r_0 sufficientemente piccolo, E prende valori negativi arbitrariamente grandi in valore assoluto. Ma se l'energia media può prendere tali valori, ciò significa in ogni caso che esistono autovalori negativi dell'energia arbitrariamente grandi in valore assoluto. A valori con grandi $|E|$ corrisponde un moto della particella localizzato in una regione molto piccola attorno all'origine delle coordinate. Lo stato fondamentale sarà quello in cui una particella si trova all'origine delle coordinate, cioè **avverrà una caduta della particella nel punto $r = 0$** .

2. Caso 2: $s < 2$.

In questo caso l'energia non può prendere valori negativi arbitrariamente grandi in valore assoluto e lo spettro discreto comincia da un certo valore negativo finito. In altre parole, **se $s < 2$, allora la caduta della particella nel centro non avviene**.

Torniamo ora all'equazione (11.37). Studiamo la soluzione nel limite asintotico $r \rightarrow \infty$. In questo limite, l'equazione (11.37) diventa

$$\chi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \chi = 0 . \quad (11.45)$$

Ora, se $E > 0$, allora avremo

$$\chi'' + k^2 \chi = 0 , \quad \text{con } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} , \quad E > 0 , \quad (11.46)$$

e le soluzioni sono di tipo armonico, i.e.

$$\begin{aligned} \chi \sim e^{ikr} &\rightarrow R = \frac{e^{ikr}}{r} , \\ \chi \sim e^{-ikr} &\rightarrow R = \frac{e^{-ikr}}{r} , \end{aligned} \quad (11.47)$$

e quindi la soluzione per la funzione originale $R(r)$ rappresenta un'onda sferica.

Se $E < 0$ avremo

$$\chi'' - k^2 \chi = 0 , \quad \text{con } k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} , \quad E < 0 , \quad (11.48)$$

e le soluzioni sono del tipo

$$\begin{aligned} \chi \sim e^{kr} , \\ \chi \sim e^{-kr} \rightarrow R = \frac{e^{-kr}}{r} , \end{aligned} \quad (11.49)$$

dove la prima non è accettabile perché diverge all'infinito. La probabilità di trovare la particella fra r e $r + dr$ sarà quindi

$$dP \sim |R|^2 r^2 dr \sim e^{-2kr} dr = e^{-r/r_0} dr , \quad r_0 = \frac{1}{2k} . \quad (11.50)$$

Studiamo ora la soluzione nel limite asintotico $r \rightarrow 0$. Moltiplicando l'equazione (11.35) per r^2 otteniamo

$$r^2 \chi'' + \left[\frac{2mr^2}{\hbar^2} (E - V) - \ell(\ell + 1) \right] \chi = 0 , \quad (11.51)$$

che nel limite $r \rightarrow 0$ diventa

$$\chi'' - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \chi = 0 . \quad (11.52)$$

Cerchiamo la soluzione nella forma $\chi(r) = Cr^{s+1}$, dove C è una costante. Inserendo questa forma nell'equazione precedente troviamo

$$(s + 1)sr^{s-1} - \ell(\ell + 1)r^{s-1} = 0 \rightarrow s(s + 1) = \ell(\ell + 1) . \quad (11.53)$$

Abbiamo due possibilità:

1. $s = \ell$;
2. $s = -(\ell + 1)$.

Consideriamo prima la seconda. In questo caso avremmo

$$\chi = r^{-\ell-1+1} = r^{-\ell} \rightarrow R(r) = r^{-\ell-1} = \frac{1}{r^{\ell+1}}. \quad (11.54)$$

Ora, poiché $\ell \geq 0$, allora $R(r)$ non soddisfa le condizioni richieste, perché diventa infinita per $r = 0$, mentre dovrebbe annullarsi alldove il potenziale diventa infinito.

L'unica soluzione accettabile è allora la prima, per cui avremo

$$\chi(r) = Cr^{\ell+1} \rightarrow R(r) \sim r^\ell. \quad (11.55)$$

La probabilità di trovare la particella fra r e $r + dr$ è

$$dP \sim |R|^2 r^2 dr \sim r^{2(\ell+1)} dr. \quad (11.56)$$

11.3.1 Spettro e autofunzioni dell'atomo di idrogeno

Consideriamo il caso in cui il potenziale $V(r)$ è il **potenziale coulombiano**, i.e.

$$V(r) = -\frac{|e|^2}{r}, \quad (11.57)$$

dove e è la carica dell'elettrone. In altre parole cerchiamo lo spettro e le autofunzioni dell'atomo di idrogeno.

Partiamo dall'equazione

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2m r^2} \right] \chi = 0, \quad (11.58)$$

dove $V(r) = -\frac{|e|^2}{r}$. Abbiamo visto che asintoticamente la soluzione deve andare come

$$\chi(r) \sim r^{\ell+1} e^{-\alpha r}, \quad \text{con} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \quad (11.59)$$

É lecito allora cercare la soluzione nella forma di una serie di potenze del tipo.

$$\chi(r) = \left(\sum_{k=\ell+1}^{\infty} c_k r^k \right) e^{-\alpha r}. \quad (11.60)$$

Inserendo questo sviluppo nell'equazione (11.58) otteniamo

$$\begin{aligned} & \left(\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \left(\sum_{k=\ell+1}^{\infty} c_k r^k \right) e^{-\alpha r} + \sum_{k=\ell+1}^{\infty} r^{k-1} \left(-2\alpha k c_k + \frac{2m|e|^2}{\hbar^2} c_k \right) e^{-\alpha r} + \\ & + \sum_{k=\ell+1}^{\infty} r^{k-2} [c_k (k-1)k - \ell(\ell+1)c_k] e^{-\alpha r} = 0. \end{aligned} \quad (11.61)$$

Ora, il primo termine è nullo perché $\alpha^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$ e l'energia E è negativa. Il terzo termine riscritto con $k' = k - 1$ dà

$$\sum_{k'=\ell}^{\infty} r^{k'-1} [c_{k'+1}(k'+1)k' - \ell(\ell+1)c_{k'+1}] e^{-\alpha r} , \quad (11.62)$$

e quindi il primo termine con $k' = \ell$ è nullo e possiamo far partire la somma da $k' = \ell + 1$. Di conseguenza l'equazione (11.61) diventa

$$\sum_{k=\ell+1}^{\infty} r^{k-1} \left\{ c_{k+1} [(k(k+1) - \ell(\ell+1))] + c_k \left(\frac{2m|e|^2}{\hbar^2} - 2\alpha k \right) \right\} = 0 . \quad (11.63)$$

Affinché questa equazione sia soddisfatta è necessario che i termini fra parentesi siano nulli per ogni valore di k . Studiamo l'equazione nel limite di $k \rightarrow \infty$. Il generico coefficiente di r^k sarà tale da soddisfare

$$\begin{aligned} c_{k+1}k(k+1) - 2\alpha kc_k &= 0 , \\ \rightarrow c_{k+1} &= \frac{2\alpha k}{k(k+1)} c_k = \frac{2\alpha}{k+1} c_k = \frac{(2\alpha)^2}{k(k+1)} c_{k-1} = \dots \\ \rightarrow c_k &\sim \frac{(2\alpha)^k}{k!} \quad \text{per } k \rightarrow \infty . \end{aligned} \quad (11.64)$$

In questo modo avremmo però che

$$\chi \sim e^{2\alpha r} e^{-\alpha r} = e^{\alpha r} , \quad (11.65)$$

che diverge per $r \rightarrow \infty$. Quindi la soluzione diverge per $r \rightarrow \infty$ se tutti i $c_k \neq 0$ per $k \rightarrow \infty$. Allora deve necessariamente esistere un valore di k , diciamo k_{\max} , tale che

$$c_{k_{\max}+1} = 0 , \quad (11.66)$$

e quindi

$$c_{k+1} = \frac{\left(2\alpha k - \frac{2m|e|^2}{\hbar^2} \right) c_k}{k(k+1) - \ell(\ell+1)} \Big|_{k=k_{\max}} = 0 . \quad (11.67)$$

Di conseguenza otteniamo

$$2\alpha k_{\max} - \frac{2m|e|^2}{\hbar^2} = 0 , \quad (11.68)$$

e, chiamando $k_{\max} = n$, avremo

$$\alpha = \frac{m|e|^2}{n\hbar^2} , \quad (11.69)$$

cioè

$$\alpha^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} = \frac{m^2|e|^4}{n^2\hbar^4} \rightarrow |E| = \frac{m|e|^4}{2n^2\hbar^2} , \quad (11.70)$$

e poiché l'energia deve essere negativa (altrimenti lo spettro non sarebbe discreto e le considerazioni che abbiamo fatto fin qui non sarebbero valide) troviamo

$$\boxed{E_n = -\frac{m|e|^4}{2n^2\hbar^2}}, \quad (11.71)$$

che rappresenta lo **spettro discreto degli autovalori dell'energia**.

Inoltre, poiché la somma si estende da $\sum_{k=\ell+1}^{k_{\max}=n}$, troviamo che

$$k_{\max} = n \geq k_{\min} = \ell + 1, \quad (11.72)$$

cioè

$$\boxed{n \geq \ell + 1}. \quad (11.73)$$

È possibile scrivere E_n nell'equazione (11.71) come

$$E_n = -\frac{|e|^2}{2r_n}, \quad \text{dove } r_n = n^2 r_0, \quad \text{e } \frac{1}{r_0} = \frac{m|e|^2}{\hbar^2}, \quad (11.74)$$

dove r_0 è detto **raggio di Bohr** e vale

$$r_0 \sim 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ cm}. \quad (11.75)$$

Lo **stato fondamentale** si ottiene per $n = 1$, per cui otteniamo

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \equiv R_{n=1,\ell=0}(r) \sim e^{-\alpha r}, \quad (11.76)$$

e poiché

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m|e|^4}{2n^2\hbar^4}} = \frac{1}{n} \frac{m|e|^2}{\hbar^2} = \frac{1}{nr_0}, \quad (11.77)$$

ponendo $n = 1$, possiamo scrivere R_{10} come

$$\boxed{R_{10}(r) \sim e^{-r/r_0}}, \quad (11.78)$$

da cui vediamo che il raggio di Bohr r_0 rappresenta la **distanza media dell'elettrone dal nucleo** (vedi figura 11.1).

Per gli stati eccitati ($n > 1$) avremo

$$R_{n0}(r) \sim e^{-r/nr_0}, \quad (11.79)$$

cioè la distanza media dell'elettrone dal nucleo aumenta.

L'energia dello stato fondamentale vale

$$E_1 = -\frac{m|e|^4}{2\hbar^2} = -\frac{1}{2}E_0, \quad (11.80)$$

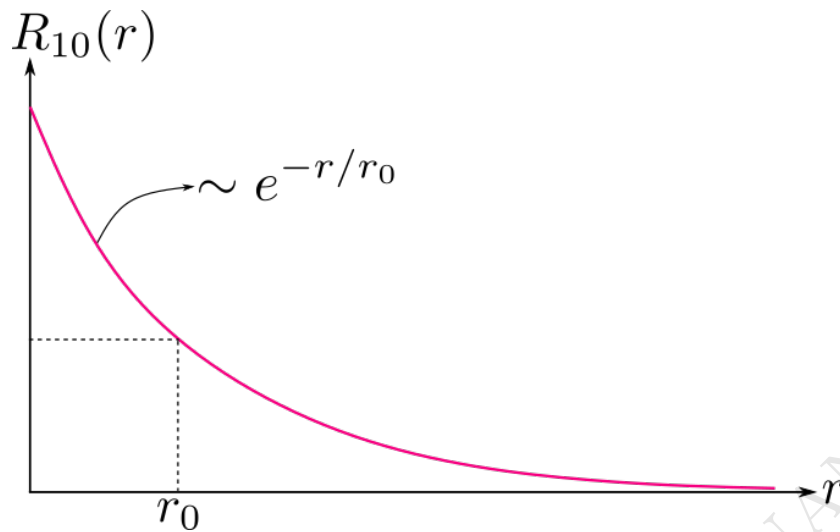


Figure 11.1: Funzione d'onda radiale $R_{10}(r)$ dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno. La grandezza r_0 (raggio di Bohr) rappresenta la distanza media dell'elettrone dal protone.

dove E_0 vale

$$E_0 = \frac{m|e|^4}{\hbar^2} = \frac{|e|^2}{r_0} \sim 27.21 \text{ eV} . \quad (11.81)$$

Usando queste unità avremo

n	E_n/E_0	
1	-1/2	
2	-1/8	
3	-1/18	
...	...	

(11.82)

come illustrato in figura 11.2.

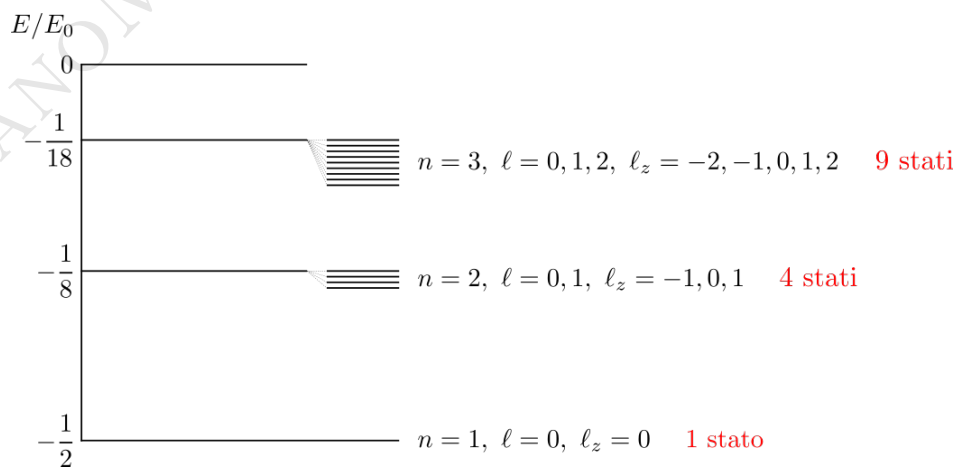


Figure 11.2: Spettro energetico dell'atomo di idrogeno.

Facciamo ora alcune considerazioni sui livelli di energia E_n dell'atomo di idrogeno, che riscriviamo per comodità

$$E_n = -\frac{m|e|^4}{2n^2\hbar^2} . \quad (11.83)$$

- Come si vede si ha un'infinità di livelli compresi tra

$$-\frac{1}{2} \leq \frac{E_n}{E_0} < 0 . \quad (11.84)$$

- Gli intervalli tra due livelli consecutivi diminuiscono al crescere di n .
- I livelli si infittiscono man mano che ci si avvicina al valore zero dove lo spettro discreto si connette con quello continuo
- Ogni autovalore è genere non solo rispetto a ℓ_z , ma anche rispetto a ℓ (simmetria supplementare dell'hamiltoniano nel campo coulombiano).

Calcoliamo la degenerazione dell' n -esimo livello.

Poiché per un dato ℓ abbiamo $2\ell + 1$ differenti valori di ℓ_z , il grado di degenerazione sarà

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2 \sum_{\ell=0}^{n-1} \ell + \sum_{\ell=0}^{n-1} 1 = \frac{2n(n-1)}{2} + n = n^2 , \quad (11.85)$$

per cui **ogni livello sarà n^2 volte degenerare.**

Consideriamo due livelli energetici E_n e E_m , con $m > n$. La differenza di energia sarà

$$\Delta E = E_m - E_n = -\frac{m|e|^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \frac{|e|^2}{2r_0} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) . \quad (11.86)$$

Questa relazione determina la distanza energetica delle linee spettrali e permette di calcolare anche la distanza fra i due livelli.

Riportiamo di seguito, per completezza, le funzioni d'onda complete $\psi_{n,\ell,\ell_z}(r, \theta, \varphi)$ dei primi livelli dell'atomo di idrogeno:

$$\begin{aligned} R_{10} = 2e^{-r/r_0} &\rightarrow \psi_{1,0,0} = R_{10}Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r/r_0} , \\ R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-r/2r_0} \left(1 - \frac{r}{2r_0} \right) &\rightarrow \psi_{2,0,0} = R_{20}Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}e^{-r/2r_0} \left(1 - \frac{r}{2r_0} \right) , \\ R_{21} = \frac{1}{\sqrt{6}}e^{-r/2r_0} \left(\frac{r}{2r_0} \right) &\rightarrow \psi_{n,\ell,\ell_z} = \begin{cases} R_{21}Y_{1-1} = i\sqrt{\frac{1}{16\pi}}e^{-r/2r_0} \left(\frac{r}{2r_0} \right) \sin(\theta)e^{-i\varphi} , \\ R_{21}Y_{11} = -i\sqrt{\frac{1}{16\pi}}e^{-r/2r_0} \left(\frac{r}{2r_0} \right) \sin(\theta)e^{i\varphi} , \\ R_{21}Y_{10} = i\sqrt{\frac{1}{8\pi}}e^{-r/2r_0} \left(\frac{r}{2r_0} \right) \cos(\theta) . \end{cases} \end{aligned} \quad (11.87)$$

11.4 Effetto Zeeman normale

Consideriamo un atomo di idrogeno in un campo magnetico \vec{B} costante diretto lungo l'asse z :

$$\vec{B} = (0, 0, B) . \quad (11.88)$$

Scegliamo il potenziale vettore \vec{A} come

$$\vec{A} = \left(-\frac{yB}{2}, \frac{xB}{2}, 0 \right) . \quad (11.89)$$

L'hamiltoniana del sistema sarà data da

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e^2}{r} = \frac{1}{2m} \left(p_x - \frac{e}{c} A_x \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{e}{c} A_y \right)^2 + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = \\ &= \frac{1}{2m} \left(p_x + \frac{e}{2c} yB \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{e}{2c} xB \right)^2 + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{e^2}{8mc^2} B^2 (x^2 + y^2) + \frac{eB}{2mc} (p_x y - p_y x) - \frac{e^2}{r} . \end{aligned} \quad (11.90)$$

Supponiamo ora che il campo sia debole, cosicché possiamo trascurare il termine di ordine B^2 e possiamo scrivere H come (ponendo $e = -|e|$)

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{|e|B}{2mc} (xp_y - yp_x) - \frac{e^2}{r} = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \frac{|e|\hbar}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} , \quad (11.91)$$

e quindi come

$$H = H_H + \frac{|e|\hbar}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} = H_H + \frac{|e|\hbar}{2mc} \vec{\ell} \cdot \vec{B} = H_H + \mu_B \vec{\ell} \cdot \vec{B} , \quad (11.92)$$

dove H_H è l'hamiltoniana dell'atomo di idrogeno in assenza di campo magnetico e μ_B è il **magnetone di Bohr**.

Poiché \vec{B} è diretto lungo z possiamo scrivere

$$H = H_H + \mu_B \ell_z B_z . \quad (11.93)$$

Vediamo se H commuta con H_H , cioè se

$$[H, H_H] = [H_H + \mu_B \ell_z B_z, H_H] = 0 . \quad (11.94)$$

Ma questo è sicuramente vero perché H_H commuta con se stessa, con ℓ_z e con B_z che è una quantità conservata. (Alternativamente possiamo dire che B_z commuta con H sicuramente perché è costante e con ℓ_z perché è invariante per rotazioni attorno all'asse z , e di conseguenza deve commutare necessariamente anche con H_H).

Ora, siccome $[H, H_H] = 0$, allora H e H_H hanno lo stesso insieme di autofunzioni. Di conseguenza, possiamo scrivere immediatamente i livelli di energia dello spettro discreto dell'atomo di idrogeno in presenza di un campo magnetico debole come

$$E_{n, \ell_z} = -\frac{m|e|^4}{2n^2\hbar^2} + \frac{|e|\hbar}{2mc} B \ell_z . \quad (11.95)$$

Analizziamo il livello con $n = 2$. In assenza di campo magnetico questo livello ha una degenerazione di ordine 4. In presenza di campo magnetico, però, parte di questa degenerazione viene eliminata. Infatti, poiché $n = 2$, si hanno i valori possibili per $\ell = 0, 1$ e per $\ell_z = -1, 0, 1$. Ora, i livelli con $\ell_z = 0$ rimangono degeneri, mentre i livelli con $\ell_z = \pm 1$ non sono più degeneri, come illustrato in figura 11.3. Ricapitolando, nell'effetto Zeeman normale **il campo magnetico rimuove parte della degenerazione dei livelli energetici dello spettro discreto**.

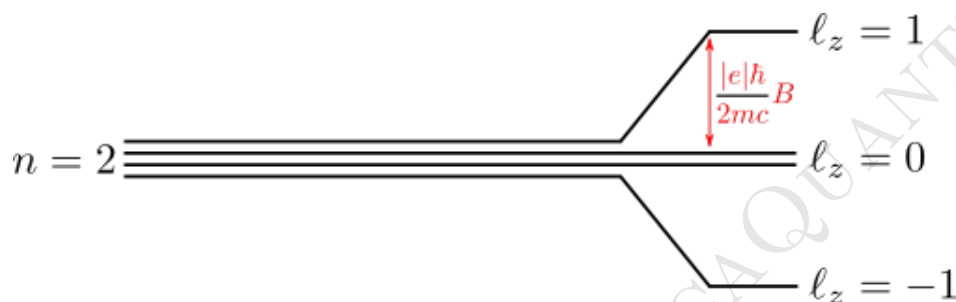


Figure 11.3: Esempio di effetto Zeeman normale sul livello energetico $n = 2$ dell'atomo di idrogeno. La presenza di un campo magnetico debole B diretto lungo l'asse z provoca la rimozione parziale (splitting) della degenerazione del livello $n = 2$.

11.5 Effetto Zeeman anomalo

Consideriamo un atomo di idrogeno in un campo magnetico \vec{B} diretto lungo l'asse z . La sua hamiltoniana, **tenendo conto anche dello spin**, sarà

$$H = \frac{1}{2m} \left[\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \cdot \hat{\sigma} \right]^2 - \frac{e^2}{r}. \quad (11.96)$$

Sviluppando il primo termine troviamo

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \cdot \hat{\sigma} \right]^2 = \frac{1}{2m} \sum_i \left[\left(p_i - \frac{e}{c} A_i \right) \hat{\sigma}_i \right]^2 = \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \left(p_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left(p_j - \frac{e}{c} A_j \right) \sigma_i \sigma_j. \quad (11.97)$$

Ora, sappiamo che

$$\sigma_i \sigma_j = \frac{1}{2} \{ \sigma_i, \sigma_j \} + \frac{1}{2} [\sigma_i, \sigma_j] = \delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (11.98)$$

per cui otteniamo

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \left(p_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left(p_j - \frac{e}{c} A_j \right) \sigma_i \sigma_j = \\
& = \frac{1}{2m} \sum_{i,j} \left(p_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left(p_j - \frac{e}{c} A_j \right) \left(\delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k \right) = \quad (11.99) \\
& = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \frac{i}{2m} \sum_{i,j,k} \left(p_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left(p_j - \frac{e}{c} A_j \right) \epsilon_{ijk} \sigma_k .
\end{aligned}$$

Ora, poiché ci sono le somme su i e j , al termine $p_1 p_2$ corrisponderà un termine $p_2 p_1$ ma con il segno invertito perché c'è il tensore antisimmetrico ϵ_{ijk} . Quindi

$$\sum_{ij} \left(p_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left(p_j - \frac{e}{c} A_j \right) \epsilon_{ijk} = \left[p_i - \frac{e}{c} A_i, p_j - \frac{e}{c} A_j \right], \quad (11.100)$$

dove nel lato destro $i \neq j \neq k$. Valutiamo questo commutatore:

$$\begin{aligned}
& \left[p_i - \frac{e}{c} A_i, p_j - \frac{e}{c} A_j \right] \psi = \left[\left(p_i - \frac{e}{c} A_i \right) \left(p_j - \frac{e}{c} A_j \right) - \left(p_j - \frac{e}{c} A_j \right) \left(p_i - \frac{e}{c} A_i \right) \right] \psi = \\
& = \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{e}{c} A_i \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{e}{c} A_j \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{e}{c} A_j \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{e}{c} A_i \right) \right] \psi, \quad (11.101)
\end{aligned}$$

da cui otteniamo

$$\left[p_i - \frac{e}{c} A_i, p_j - \frac{e}{c} A_j \right] = i\hbar \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) = i\hbar \frac{e}{c} (\nabla \times A)_k = i\hbar \frac{e}{c} B_k. \quad (11.102)$$

L'hamiltoniana quindi diventa

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \sum_k B_k \sigma_k - \frac{e^2}{r}, \quad (11.103)$$

e poiché sappiamo che il primo termine è uguale a $\frac{p^2}{2m} + \frac{|e|\hbar}{2mc} \vec{\ell} \cdot \vec{B}$, possiamo scrivere l'hamiltoniana nella forma

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \frac{|e|\hbar}{2mc} \vec{B} \cdot (\vec{\ell} + \vec{\sigma}) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \mu_B \vec{B} \cdot (\vec{\ell} + \vec{\sigma}), \quad (11.104)$$

per cui i livelli di energia saranno

$$\boxed{E_{n,\ell_z,\sigma_z} = -\frac{m|e|^4}{2n^2\hbar^2} + \frac{|e|\hbar}{2mc} B(\ell_z + \sigma_z)} \quad (11.105)$$

In altre parole, l'effetto Zeeman anomalo dà luogo ad un'ulteriore separazione dei livelli energetici, come illustrato in figura 11.4.

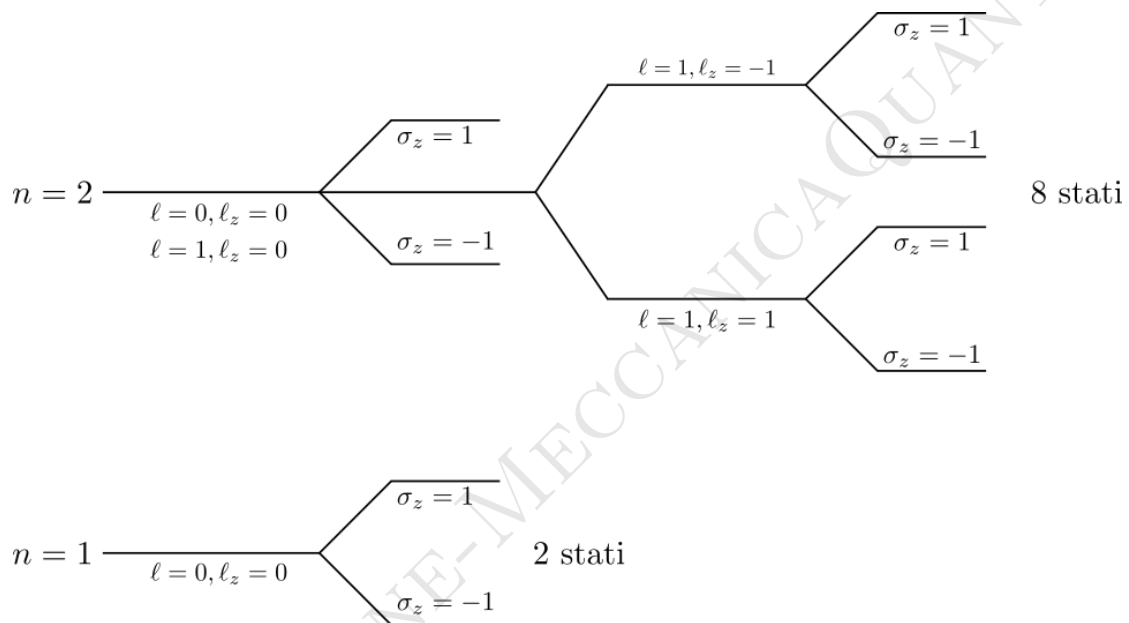


Figure 11.4: Esempio di effetto Zeeman anomalo sui livelli energetici $n = 1$ e $n = 2$ dell'atomo di idrogeno. La presenza di un campo magnetico debole B diretto lungo l'asse z che sia accoppia anche con lo spin dell'elettrone provoca un'ulteriore separazione dei livelli energetici rispetto al caso dell'effetto Zeeman normale (dove abbiamo considerato solo l'accoppiamento del campo magnetico col momento angolare orbitale).

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

Chapter 12

Formulazione di Feynman e integrale sui cammini

12.1 Propagatore dell'equazione di Schrödinger

Consideriamo la funzione d'onda $\psi(x, t)$

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \langle x | \psi \rangle_t = \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \psi \rangle_{t_0} = \int dx' \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle_{t_0} = \\ &= \int dx' K(x, t | x', t_0) \psi(x', t_0),\end{aligned}\quad (12.1)$$

dove abbiamo definito il **propagatore**

$$K(x, t | x', t_0) = \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x' \rangle, \quad (12.2)$$

che rappresenta proprio l'elemento di matrice dell'operatore di evoluzione temporale nella base delle posizioni e, per definizione, è l'ampiezza di probabilità che la particella, localizzata in x' all'istante t_0 , si trovi nel punto x all'istante t .

Possiamo anche scrivere

$$K(x, t | x', t_0) = \sum_n \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | n \rangle \langle n | x' \rangle = \sum_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \psi_n(x) \psi_n^*(x'), \quad (12.3)$$

dove $\psi_n(x)$ sono le autofunzioni dell'hamiltoniana.

Il propagatore soddisfa l'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K = \hat{H} K. \quad (12.4)$$

Dimostrazione:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \psi_n(x) \psi_n^*(x') = i\hbar \sum_n \left(\frac{-iE_n}{\hbar} \right) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \psi_n(x) \psi_n^*(x') = \\
&= \sum_n E_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \psi_n(x) \psi_n^*(x') = \\
&= \hat{H} K = \hat{H} \sum_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \psi_n(x) \psi_n^*(x') = \\
&= \sum_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} E_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') .
\end{aligned} \tag{12.5}$$

C.V.D.

Poiché l'evoluzione temporale regolata dell'equazione di Schrödinger ha significato solo per $t > t_0$ è opportuno definire un **propagatore ritardato** come

$$\tilde{K}(x, t|x', t_0) = \langle x|e^{-iH(t-t_0)/\hbar}|x'\rangle \theta(t-t_0) = K(x, t|x', t_0) \theta(t-t_0) . \tag{12.6}$$

Utilizzando l'equazione di Schrödinger troviamo

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{K} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [K\theta(t-t_0)] = i\hbar \left(\frac{\partial K}{\partial t} \right) \theta(t-t_0) + i\hbar K \delta(t-t_0) = \\
&= \hat{H} K \theta(t-t_0) + i\hbar K \delta(t-t_0) ,
\end{aligned} \tag{12.7}$$

e quindi

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \tilde{K} = i\hbar K \delta(t-t_0) . \tag{12.8}$$

Ora, poiché $K(x, t|x', t_0) = \langle x|e^{-iH(t-t_0)/\hbar}|x'\rangle$, per $t = t_0$ avremo

$$K(x, t_0|x', t_0) = \langle x|x'\rangle = \delta(x-x') , \tag{12.9}$$

per cui

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \tilde{K} = i\hbar \delta(x-x') \delta(t-t_0) , \tag{12.10}$$

che rappresenta l'equazione soddisfatta da \tilde{K} .

Calcoliamo il propagatore nel caso in cui $t - t_0 = dt$ è un intervallo di tempo infinitesimo e $\hat{H} = p^2/2m$ è l'hamiltoniana di una particella libera:

$$\begin{aligned}
K(x, t|x', t_0) &= \langle x|e^{-iHdt/\hbar}|x'\rangle = \int \langle x|e^{-ip^2 dt/2m\hbar}|p\rangle \langle p|x'\rangle dp = \\
&= \int dp e^{-ip^2 dt/2m\hbar} \psi_p(x) \psi_p^*(x) = \int dp e^{-ip^2 dt/2m\hbar} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{ip(x-x')/\hbar} = \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{p^2 dt}{2m} - p(x-x') \right] \right\} .
\end{aligned} \tag{12.11}$$

Usando la nota formula per integrali gaussiani

$$\int e^{-(Ax^2+Bx)} dx = \sqrt{\frac{\pi}{A}} e^{-B^2/4A} , \quad (12.12)$$

con

$$A = \frac{idt}{2m\hbar} , \quad B = -\frac{i}{\hbar}(x - x') , \quad (12.13)$$

otteniamo

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{p^2 dt}{2m} - p(x - x') \right] \right\} &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\pi 2m\hbar}{idt}} \exp \left[-\frac{(x - x')^2 2m\hbar}{4\hbar^2 dt i} \right] = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar dt}} \exp \left[i \frac{(x - x')^2 m}{2\hbar dt} \right] . \end{aligned} \quad (12.14)$$

Identificando

$$\frac{x - x'}{dt} = \dot{x} , \quad (12.15)$$

possiamo riscrivere l'equazione (12.14) nella forma

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar dt}} \exp \left[i \frac{(x - x')^2 m}{2\hbar dt} \right] = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar dt}} \exp \left(i \frac{m \dot{x}^2}{2\hbar} \right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar dt}} e^{iL(\dot{x})dt/\hbar} , \quad (12.16)$$

dove $L(\dot{x})$ è la **lagrangiana classica** di una particella libera. Ricapitolando abbiamo trovato

$$K(x, t_0 + dt | x', t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar dt}} e^{iL(\dot{x})dt/\hbar} . \quad (12.17)$$

Se invece consideriamo l'hamiltoniano $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\hat{x})$ e calcoliamo il propagatore come prima, allora troviamo

$$\begin{aligned} \langle x | e^{-iHdt/\hbar} | x' \rangle &= \langle x | \exp \left[-i \frac{p^2 dt}{2m\hbar} - iV(\hat{x}) \frac{dt}{\hbar} \right] | x' \rangle = \langle x | \exp \left(-i \frac{p^2 dt}{2m\hbar} \right) | x' \rangle e^{-iV(x) \frac{dt}{\hbar}} = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar dt}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m \dot{x}^2}{2} - V(x) \right) dt \right] = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar dt}} e^{\frac{i}{\hbar} L(x, \dot{x}) dt} . \end{aligned} \quad (12.18)$$

Quindi, in generale, abbiamo trovato che

$$\boxed{K(x, t_0 + dt | x', t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar dt}} e^{iL(x, \dot{x})dt/\hbar} .} \quad (12.19)$$

12.2 Derivazione dell'integrale sui cammini

Ricaviamo ora la regola di **composizione dei propagatori**. Sappiamo che

$$\psi(x, t) = \int dx' K(x, t|x', t_0)\psi(x', t_0) . \quad (12.20)$$

Se consideriamo un punto finale x_f at tempo $t_f > t$ possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \psi(x_f, t_f) &= \int dx K(x_f, t_f|x, t)\psi(x, t) = \int dx \int dx' K(x_f, t_f|x, t)K(x, t|x', t_0)\psi(x', t_0) = \\ &= \int dx' K(x_f, t_f|x', t_0)\psi(x', t_0) , \end{aligned} \quad (12.21)$$

da cui ricaviamo che

$$K(x_f, t_f|x', t_0) = \int dx K(x_f, t_f|x, t)K(x, t|x', t_0) . \quad (12.22)$$

Consideriamo ora il moto di una particella dal punto iniziale x_i al tempo t_i a punto finale x_f al tempo t_f , come illustrato schematicamente in figura 12.1.

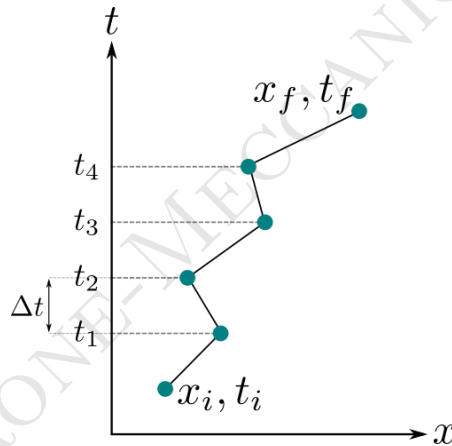


Figure 12.1: Uno dei cammini possibili che una particella quantistica compie per andare dal punto iniziale x_i al tempo t_i al punto finale x_f al tempo t_f .

Ci chiediamo: quanto vale il propagatore fra x_i e x_f , cioè **l'ampiezza di transizione** da x_i a x_f ?

Usando la regola di composizione dei propagatori possiamo scrivere l'ampiezza di transizione A_T come

$$\begin{aligned} A_T &= \int \langle x_f, t_f|x_N, t_f - \Delta t \rangle \cdots \langle x_1, t_i + \Delta t|x_i, t_i \rangle dx_1 \dots dx_N = \\ &= \int dx_1 \dots dx_N \prod_{i=1}^N e^{\frac{i}{\hbar} L(x(t_i), \dot{x}(t_i)) \Delta t} = \\ &= \int K(x_f, t_f|x_N, t_f - \Delta t) \cdots K(x_1, t_i + \Delta t|x_i, t_i) dx_1 \dots dx_N = \\ &= \int dx_1 \dots dx_N e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N L(x(t_i), \dot{x}(t_i)) \Delta t} . \end{aligned} \quad (12.23)$$

Ora, facendo tendere a zero l'intervallo di tempo Δt fra due punti successivi otteniamo

$$A_T = \int D[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(x, \dot{x}) dt} = \int D[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S} , \quad (12.24)$$

che esprime l'ampiezza di transizione come un **integrale su tutti i possibili cammini**. Precisamente, questa espressione ci dice che per ottenere l'ampiezza di transizione (o il propagatore) occorre sommare su tutte le possibili traiettorie $x(t)$ nello spazio delle posizioni che partono da x_i al tempo t_i e arrivano a x_f al tempo t_f , pesando ogni traiettoria con il corrispondente fattore $e^{\frac{i}{\hbar} S}$: tutti i cammini contribuiscono ugualmente in modulo, mentre la fase dei loro contributi è l'**azione classica** S in unità di \hbar .

Quindi nel calcolo dell'ampiezza di probabilità viene coinvolto l'insieme di tutte le traiettorie e non solo la traiettoria che una particella classica effettivamente descriverebbe (cioè quella di minima azione).

Torniamo al caso di una particella libera. Sappiamo che

$$K(x, t + \Delta t | x', t) = C \exp \left[i \frac{(x - x')^2 m}{2\hbar \Delta t} \right] , \quad (12.25)$$

dove C è una costante indipendente da x e x' . Calcoliamo la **lunghezza d'onda tipica** imponendo che

$$\frac{m(x + \lambda - x')^2}{2\hbar \Delta t} - \frac{m(x - x')^2}{2\hbar \Delta t} = 2\pi , \quad (12.26)$$

da cui ricaviamo

$$\frac{m(x - x')^2}{2\hbar \Delta t} + \frac{m}{2\hbar \Delta t} 2\lambda(x - x') - \frac{m(x - x')^2}{2\hbar \Delta t} + O(\lambda^2) = 2\pi , \quad (12.27)$$

da cui, osservando che $\frac{x - x'}{\Delta t} = v$ è la velocità della particella e $mv = p$ il suo impulso, troviamo

$$\frac{mv\lambda}{\hbar} = 2\pi \rightarrow \lambda = \frac{2\pi \hbar}{p} , \quad (12.28)$$

che è proprio la **lunghezza d'onda di De Broglie**.

Analogamente, possiamo calcolare la frequenza tipica come

$$\frac{m(x - x')^2}{2\hbar(t + T - t_0)} - \frac{m(x - x')^2}{2\hbar(t - t_0)} = 2\pi , \quad (12.29)$$

e, scrivendo $\frac{1}{t + T - t_0}$ come

$$\frac{1}{t + T - t_0} = \frac{1}{(t - t_0) \left(1 + \frac{T}{t - t_0} \right)} \sim \frac{1}{t - t_0} \left(1 - \frac{T}{t - t_0} \right) , \quad (12.30)$$

otteniamo

$$-\frac{mT(x - x')^2}{2\hbar(t - t_0)^2} = 2\pi \rightarrow \frac{mv^2 T}{2\hbar} = 2\pi \rightarrow \frac{E}{\hbar} = \frac{2\pi}{T} = \omega . \quad (12.31)$$

12.3 Integrale sui cammini e limite classico

Per cominciare, consideriamo un integrale unidimensionale del tipo

$$I = \int dx f(x) e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \quad (12.32)$$

e valutiamolo con il **metodo del punto di sella**. Poiché l'azione ha un minimo quando la si calcola lungo la traiettoria classica, possiamo sviluppare $S(x)$ intorno a x_c :

$$S(x) \sim S(x_c) + \frac{dS}{dx} \Big|_{x=x_c} (x-x_c) + \frac{1}{2} \frac{d^2 S}{dx^2} \Big|_{x=x_c} (x-x_c)^2 = S(x_c) + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{d^2 S}{dx^2} \Big|_{x=x_c}}_{>0} (x-x_c)^2, \quad (12.33)$$

perché x_c è un punto di minimo. Inserendo quest'espansione nell'integrale I otteniamo

$$\begin{aligned} I &= \int dx f(x) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[S(x_c) + \frac{1}{2} \frac{d^2 S}{dx^2} \Big|_{x=x_c} (x-x_c)^2 \right] \right\} = \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} S(x_c)} \int dx f(x) \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \frac{d^2 S}{dx^2} \Big|_{x=x_c} (x-x_c)^2 \right]. \end{aligned} \quad (12.34)$$

Chiamiamo

$$\frac{1}{\hbar} \frac{d^2 S}{dx^2} \Big|_{x=x_c} = \frac{1}{\Delta x^2}, \quad (12.35)$$

e passiamo a tempi immaginari $\Delta t \rightarrow i\Delta t$ facendo una rotazione antioraria nel piano complesso Δt dall'asse reale all'asse immaginario, cosicché l'integrale I diventa

$$I = e^{-\frac{1}{\hbar} S(x_c)} \int dx f(x) e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\Delta x^2}}. \quad (12.36)$$

Sviluppando anche $f(x)$ intorno a x_c otteniamo il risultato finale:

$$\begin{aligned} I &= e^{-\frac{1}{\hbar} S(x_c)} \int dx \left[f(x_c) + f'(x_c)(x-x_c) + \frac{1}{2} f''(x_c)(x-x_c)^2 + \dots \right] e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2\Delta x^2}} = \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar} S(x_c)} \left[f(x_c) \sqrt{2\pi\Delta x^2} + \frac{1}{2} f''(x_c) 2\Delta x^3 \sqrt{\pi} \right] = \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar} S(x_c)} \sqrt{2\pi\Delta x^2} \left[f(x_c) + \frac{f''(x_c)}{2} \sqrt{2}\Delta x^2 \right]. \end{aligned} \quad (12.37)$$

Consideriamo ora il caso di più traiettorie, e calcoliamo il propagatore K con il metodo del punto di sella

$$\begin{aligned} K &= \int dx_1 \dots dx_N e^{-\frac{1}{\hbar} S(x_1, \dots, x_N)} = \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar} S(x_c)} \int dx_1 \dots dx_N \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \sum_{k,l} \frac{\partial^2 S}{\partial x_k \partial x_l} \Big|_{x_{k,l}=x_c} (x_k - x_k^c)(x_l - x_l^c) \right], \end{aligned} \quad (12.38)$$

avendo preso di nuovo tempi immaginari. Chiamando

$$y_k = x_k - x_k^c, \quad \left. \frac{\partial^2 S}{\partial x_k \partial x_l} \right|_{x_{k,l}=x_c} = A_{kl}, \quad (12.39)$$

possiamo scrivere

$$K = e^{-\frac{1}{\hbar}S(x_c)} \int dy_1 \dots dy_N \exp \left(-\frac{1}{2\hbar} \sum_{k,l} y_k A_{kl} y_l \right). \quad (12.40)$$

Ora, A è una matrice simmetrica e può essere sempre diagonalizzata da una trasformazione ortogonale. Sia

$$z_k = \sum_s O_{ks} y_s, \quad (12.41)$$

con O matrice ortogonale. Allora possiamo scrivere

$$A' = O^t A O \rightarrow A'_{ls} = \lambda_l \delta_{ls}, \quad (12.42)$$

con

$$\lambda_1, \dots, \lambda_N > 0, \quad (12.43)$$

perché x_c è un punto di minimo. Di conseguenza, avremo

$$K = e^{-\frac{1}{\hbar}S(x_c)} \int dz_1 \dots dz_N \exp \left(-\frac{1}{2\hbar} \sum_k \lambda_k z_k^2 \right) = e^{-\frac{1}{\hbar}S(x_c)} \frac{(2\pi\hbar)^{N/2}}{(\det A)^{1/2}}. \quad (12.44)$$

Passando al limite per $\Delta t \rightarrow 0$ e tornando a tempi reali otteniamo

$$K \sim \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x_c(t)) \right] = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(x_c, \dot{x}_c) dt \right]. \quad (12.45)$$

Ricapitolando, abbiamo trovato che, in prima approssimazione, il propagatore può essere scritto come

$$\boxed{K(x_f, t_f | x_i, t_i) \sim \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(x_c, \dot{x}_c) dt \right]}, \quad (12.46)$$

dove interviene solo la **lagrangiana valutata lungo la traiettoria classica**.

Per capire meglio il limite classico dobbiamo fare alcune considerazioni.

La situazione della fisica classica corrisponde al caso in cui, in generale, piccole variazioni della traiettoria producono variazioni d'azione grandi rispetto ad \hbar ; mentre tipicamente nella meccanica quantistica anche grandi variazioni di traiettoria comportano solo variazioni d'azione confrontabili con \hbar .

Dunque classicamente il contributo $e^{iS/\hbar}$ di una traiettoria può essere in generale cancellato dal corrispondente contributo $e^{iS'/\hbar}$ di una traiettoria vicina con

$$S' \sim S + \pi\hbar. \quad (12.47)$$

Inoltre (classicamente) esiste una sola traiettoria effettivamente descritta dal sistema e che viene individuata dal **principio di minima azione**. Traiettorie vicine a questa hanno un'azione di poco diversa e producono quindi un'**interferenza costruttiva** nella **somma sui possibili cammini**. Siccome il contributo principale al propagatore proviene allora dai cammini vicini alla traiettoria classica e siccome tutti contribuiscono approssimativamente con lo stesso ammontare, ecco che in prima approssimazione possiamo porre

$$K \sim \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(x_c, \dot{x}_c) dt \right] . \quad (12.48)$$

In realtà, però, all'integrale contribuisce tutta una fascia di cammini vicini alla traiettoria classica, nella quale l'azione varia meno di $\pi\hbar$ (vedi figura 12.2). Per un problema al limite classico questa fascia è molto stretta, mentre per un tipico problema quantistico la fascia diventa molto ampia e il **concetto di traiettoria classica si svuota di significato**.

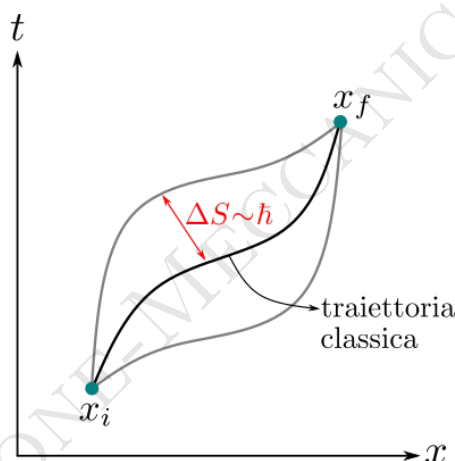


Figure 12.2: Le traiettorie che contribuiscono all'integrale sui cammini sono le traiettorie vicine alla traiettoria classica.

12.4 Limite semiclassico della meccanica quantistica

12.4.1 Equazione di Hamilton-Jacobi

Consideriamo un sistema hamiltoniano descritto dalle coordinate q_i, p_i che soddisfano le equazioni

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} . \quad (12.49)$$

Consideriamo una trasformazione canonica

$$\begin{aligned} Q_i &= Q_i(q_i, p_i, t) , \\ P_i &= P_i(q_i, p_i, t) , \end{aligned} \quad (12.50)$$

che soddisfa

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}. \quad (12.51)$$

Queste nuove coordinate devono soddisfare un principio variazionale

$$\delta \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\sum_i P_i \frac{dQ_i}{dt} - K(Q_i, P_i, t) \right] = 0, \quad (12.52)$$

così come anche le vecchie coordinate

$$\delta \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\sum_i p_i \frac{dq_i}{dt} - H(Q_i, P_i, t) \right] = 0. \quad (12.53)$$

Ma allora gli integrandi devono essere uguali a meno della derivata totale rispetto al tempo di una funzione F il cui integrale

$$\int_{t_i}^{t_f} \frac{dF}{dt} dt = F(t_f) - F(t_i), \quad (12.54)$$

ha variazione nulla. Quindi possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \sum_i p_i \frac{dq_i}{dt} - H(Q_i, P_i, t) &= \sum_i P_i \frac{dQ_i}{dt} - K(Q_i, P_i, t) + \frac{dF}{dt} = \\ &= \sum_i -Q_i \frac{dP_i}{dt} - K(Q_i, P_i, t) + \frac{dF'}{dt}, \end{aligned} \quad (12.55)$$

dove

$$\frac{dF'}{dt} = \frac{dF}{dt} + \frac{d}{dt}(P_i Q_i). \quad (12.56)$$

Consideriamo $F' = F'(q_i, P_i, t)$ e prendiamo la derivata totale rispetto al tempo

$$\frac{dF'}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial F'}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial F'}{\partial P_i} \frac{dP_i}{dt} \right) + \frac{\partial F'}{\partial t}, \quad (12.57)$$

da cui ricaviamo le seguenti equazioni

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial F'}{\partial q_i}, \\ Q_i &= \frac{\partial F'}{\partial P_i}, \\ K &= H + \frac{\partial F'}{\partial t}. \end{aligned} \quad (12.58)$$

Possiamo ora anche rinominare F' con F , come di fatto faremo in seguito. Ora, tra tutte le trasformazioni canoniche scegliamo quelle per cui le variabili canoniche siano espresse semplicemente in termini di **costanti del moto**, cioè dei loro valori all'istante iniziale:

$$\begin{aligned} q_i &= q_i(q_i^0, p_i^0, t), \\ p_i &= p_i(q_i^0, p_i^0, t). \end{aligned} \quad (12.59)$$

Questo implica che le nuove variabili sono **cicliche** e soddisfano le equazioni del moto

$$\frac{dQ_i}{dt} = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0, \quad \frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0. \quad (12.60)$$

In altre parole, cerchiamo una trasformazione canonica in cui $K = 0$ e le Q_i e P_i siano proprio le costanti del moto. Quindi, dobbiamo risolvere

$$\begin{aligned} H + \frac{\partial F}{\partial t} &= K = 0, \\ \rightarrow H(q_i, p_i, t) + \frac{\partial F}{\partial t} &= 0, \\ \rightarrow H\left(q_i, \frac{\partial F}{\partial q_i}, t\right) + \frac{\partial F}{\partial t} &= 0, \end{aligned} \quad (12.61)$$

dove ricordiamo che $F = F(q_i, P_i, t)$. Quest'ultima equazione differenziale per F è chiamata **equazione di Hamilton-Jacobi** e la sua soluzione è detta **funzione principale di Hamilton**. Indichiamo con S la soluzione, cioè

$$S \equiv F(q_i, P_i, t). \quad (12.62)$$

Ma P_i sono costanti del moto, che indichiamo con α_i , cosicché scriviamo

$$S = F(q_i, \alpha_i, t). \quad (12.63)$$

Derivando rispetto al tempo otteniamo

$$\frac{dS}{dt} = \sum_i \frac{\partial S}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial S}{\partial t} = \sum_i p_i \frac{dq_i}{dt} - H = L\left(q_i, \frac{dq_i}{dt}, t\right), \quad (12.64)$$

da cui ricaviamo

$$S = \int_{t_i}^{t_f} L\left(q_i, \frac{dq_i}{dt}, t\right) dt, \quad (12.65)$$

per cui S – la funzione principale di Hamilton – è proprio l'azione.

Supponiamo ora che H non dipenda esplicitamente dal tempo. Allora l'equazione di Hamilton-Jacobi

$$H(q_i, p_i) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0, \quad (12.66)$$

ha una soluzione del tipo

$$S(q_i, P_i, t) = S(q_i, \alpha_i, t) = W(q_i, \alpha_i) - Et. \quad (12.67)$$

Infatti è facile verificare che

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -E = -H. \quad (12.68)$$

Consideriamo, in particolare, un'hamiltoniana della forma

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q). \quad (12.69)$$

Vogliamo risolvere l'equazione

$$H(p, q) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 . \quad (12.70)$$

Ora $p = \frac{\partial S}{\partial q}$, per cui otteniamo

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V(q) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 . \quad (12.71)$$

Ma

$$S(q, P, t) = W(q, P) - Et , \quad (12.72)$$

perché H non dipende dal tempo. Quindi avremo

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial q} \right)^2 + V(q) &= E , \\ \rightarrow \frac{\partial W}{\partial q} &= \pm \sqrt{2m(E - V(q))} , \\ \rightarrow W \pm \int dq \sqrt{2m(E - V(q))} , \end{aligned} \quad (12.73)$$

da cui otteniamo S come

$$S = \pm \int dq \sqrt{2m(E - V(q))} - Et . \quad (12.74)$$

Possiamo ora studiare il limite semiclassico della meccanica quantistica.

12.4.2 Il limite semiclassico

Consideriamo l'equazione di Schrödinger $H\psi = E\psi$, dove

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x}) , \quad (12.75)$$

e quindi l'equazione è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}) = (E - V(\vec{x})) \psi(\vec{x}) . \quad (12.76)$$

Cerchiamo la soluzione nella forma

$$\psi(\vec{x}) = M(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x})} . \quad (12.77)$$

Inserendo $\psi(\vec{x})$ nell'equazione (12.76) otteniamo

$$-\hbar^2 \left[\nabla^2 M + \frac{2i}{\hbar} \nabla M \cdot \nabla S + \frac{i}{\hbar} M \nabla^2 S - \frac{1}{\hbar^2} M (\nabla S)^2 \right] = 2m(E - V(\vec{x})) M . \quad (12.78)$$

Uguagliando i termini di ordine 0 in \hbar otteniamo la seguente equazione

$$M(\nabla S)^2 = 2m(E - V(\vec{x}))M \rightarrow (\nabla S)^2 = 2m(E - V(\vec{x})) , \quad (12.79)$$

che ha come soluzione proprio l'equazione precedente (12.74):

$$S(\vec{x}, t) = \int d^3x \sqrt{2m(E - V(\vec{x}))} - Et . \quad (12.80)$$

Quindi, per $\hbar \rightarrow 0$ si ottiene proprio l'equazione di Hamilton-Jacobi classica.

Uguagliando i termini di ordine 1 in \hbar otteniamo un'altra equazione

$$-\hbar(2i\nabla M \cdot \nabla S + iM\nabla^2 S) = 0 \rightarrow 2\nabla M \cdot \nabla S + M\nabla^2 S = 0 . \quad (12.81)$$

Risolviamo in una dimensione, cioè risolviamo l'equazione seguente

$$2\frac{dM}{dx}\frac{dS}{dx} + M\frac{d^2S}{dx^2} = 0 . \quad (12.82)$$

Avremo

$$M\frac{d^2S}{dx^2} = -2\frac{dM}{dx}\frac{dS}{dx} \rightarrow \frac{\frac{d^2S}{dx^2}}{\frac{dS}{dx}} = -2\frac{1}{M}\frac{dM}{dx} \rightarrow \frac{d}{dx} \ln \frac{dS}{dx} = -2\frac{d}{dx} \ln M , \quad (12.83)$$

da cui ricaviamo

$$M = C \left(\frac{dS}{dx} \right)^{-1/2} , \quad (12.84)$$

dove C è una costante. Ora, poiché $S(x, t) = \int^x dx' \sqrt{2m(E - V(x'))} - Et$, allora $\frac{dS}{dx} = \sqrt{2m(E - V(x))}$, e quindi

$$M(x) = \frac{C}{[2m(E - V(x))]^{1/4}} . \quad (12.85)$$

Ricapitolando

- All'ordine \hbar^0 la funzione d'onda è

$$\psi_0(x) \sim \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int^x dx' \sqrt{2m(E - V(x'))} \right] . \quad (12.86)$$

- All'ordine \hbar^1 la funzione d'onda è

$$\psi_1(x) \sim \frac{C}{[2m(E - V(x))]^{1/4}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int^x dx' \sqrt{2m(E - V(x'))} \right] , \quad (12.87)$$

che possiamo anche scrivere come

$$\psi_1(x) \sim \frac{C}{\sqrt{p}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int^x dx' p(x') \right], \quad (12.88)$$

dove

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}. \quad (12.89)$$

Il fattore $1/\sqrt{p}$ nell'equazione (12.88) ammette la seguente interpretazione. La probabilità di trovare la particella nei punti con coordinate comprese tra x e $x + dx$ è data da $|\psi_1|^2$, cioè è proporzionale a $1/p$. Ma questo è quanto ci aspettiamo da una particella “**quasi classica**”, in quanto nel moto classico il tempo speso dalla particella sul segmento dx è inversamente proporzionale alla velocità (o quantità di moto) della particella stessa.

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

Appendices

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA

Appendix A

Sulla condizione di trasversalità $\nabla \cdot \vec{A} = 0$

Iniziamo la discussione scrivendo l'equazione delle onde elettromagnetiche nel vuoto

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \vec{A} = 0, \quad (\text{A.1})$$

nella gauge di (Ludvig) Lorenz

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{A} = 0, \quad (\text{A.2})$$

dove ϕ e \vec{A} sono, rispettivamente, il potenziale scalare e il potenziale vettore del campo elettromagnetico, e c l'intensità della velocità della luce nel vuoto.

Le equazioni di Maxwell per il campo elettrico nel vuoto sono

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= 0, \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \vec{A} \rightarrow \nabla \times \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Dalla seconda equazione ricaviamo

$$\vec{E} = -\nabla \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad (\text{A.4})$$

da cui, scegliendo la gauge in modo tale che $\phi = 0$, otteniamo

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \quad (\text{A.5})$$

Usando la prima delle equazioni di Maxwell (A.3) troviamo che

$$\nabla \cdot \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \vec{A}) = 0, \quad (\text{A.6})$$

da cui deduciamo che $\nabla \cdot \vec{A}$ è una funzione solo delle coordinate spaziali, i.e.

$$\nabla \cdot \vec{A} = f(\vec{x}). \quad (\text{A.7})$$

Alla luce di questo fatto, conviene allora fare un'ulteriore trasformazione

$$\begin{aligned}\vec{A}' &= \vec{A} + \nabla\Omega(\vec{x}) , \\ \phi' &= \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial\Omega(\vec{x})}{\partial t} ,\end{aligned}\tag{A.8}$$

tale che sia verificata la condizione

$$\nabla \cdot \vec{A}' = \nabla \cdot \vec{A} + \nabla^2\Omega = 0 ,\tag{A.9}$$

cioè

$$\nabla \cdot \vec{A} = -\nabla^2\Omega(\vec{x}) .\tag{A.10}$$

Con questa scelta della gauge l'equazione delle onde diventa

$$\begin{cases} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}'}{\partial t^2} - \nabla^2 \vec{A}' = 0 \\ \nabla \cdot \vec{A}' = 0 \end{cases} .\tag{A.11}$$

La condizione $\nabla \cdot \vec{A}' = 0$ è detta **condizione di trasversalità**.

Appendix B

Risoluzione dell'integrale

$$\int_0^\pi \sin \theta (\sin \theta)^{2\ell} d\theta$$

Osserviamo innanzitutto che

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta = - \int_1^{-1} d \cos \theta = \int_{-1}^1 d \cos \theta . \quad (\text{B.1})$$

Quindi possiamo scrivere il nostro integrale come

$$\int_0^\pi \sin \theta (\sin \theta)^{2\ell} d\theta = \int_{-1}^1 (\sin \theta)^{2\ell} d \cos \theta = \int_{-1}^1 (1 - t^2)^\ell dt . \quad (\text{B.2})$$

Facendo il cambio di variabili $t = 1 - 2x$ otteniamo

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 (1 - t^2)^\ell dt &= -2 \int_0^1 [1 - (1 - 2x)^2]^\ell dx = 2 \int_0^1 (1 - 1 - 4x^2 + 4x)^\ell dx = \\ &= 2 \int_0^1 (4x - 4x^2)^\ell dx = 2^{2\ell} \int_0^1 (x - x^2)^\ell dx = 2^{2\ell} \int_0^1 [x(1 - x)]^\ell dx = \\ &= 2^{2\ell} \int_0^1 x^\ell (1 - x)^\ell dx . \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Valutiamo ora

$$\begin{aligned} \int_0^1 x^\ell (1 - x)^\ell dx &= \frac{1}{\ell + 1} \int_0^1 \left(\frac{d}{dx} x^{\ell+1} \right) (1 - x)^\ell dx = \\ &= \frac{1}{\ell + 1} \left[x^{\ell+1} (1 - x)^\ell \Big|_0^1 + \ell \int_0^1 x^{\ell+1} (1 - x)^{\ell-1} dx \right] = \\ &= \frac{\ell}{\ell + 1} \int_0^1 x^{\ell+1} (1 - x)^{\ell-1} dx = \\ &= \frac{\ell}{\ell + 1} \frac{1}{\ell + 2} \int_0^1 \left(\frac{d}{dx} x^{\ell+2} \right) (1 - x)^{\ell-1} dx = \\ &= \frac{\ell(\ell - 1)}{(\ell + 1)(\ell + 2)} \int_0^1 x^{\ell+2} (1 - x)^{\ell-2} dx = \dots = \\ &= \frac{\ell(\ell - 1)(\ell - 2) \dots 1}{(\ell + 1)(\ell + 2) \dots (2\ell)} \int_0^1 x^{2\ell} dx = \frac{\ell! \ell!}{(2\ell + 1)!} . \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Mettendo insieme i pezzi troviamo il risultato finale seguente:

$$\boxed{\int_0^\pi \sin \theta (\sin \theta)^{2\ell} d\theta = 2^{2\ell} \frac{(\ell!)^2}{(2\ell + 1)!}}. \quad (\text{B.5})$$

FLAVIANO MORONE - MECCANICA QUANTISTICA