

Capitolo 2

Principi della meccanica quantistica

0.1 Errata

L'Eq. (2.261) va sostituita con:

$$(x^2)_{nm} = \begin{cases} \frac{1}{\alpha^2} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}, & \text{se } m = n + 2, \\ \frac{1}{\alpha^2} \sqrt{\frac{n(n-1)}{4}}, & \text{se } m = n - 2, \\ \frac{1}{\alpha^2} \frac{2n+1}{2}, & \text{se } m = n, \\ 0 & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (1)$$

dove

$$\alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \quad (2)$$

2.1 Principi e Legge della Meccanica Quantistica

In questo capitolo sono introdotti i postulati principali e la legge della meccanica quantistica. Lo stato quantistico è descritto da una funzione d'onda; le variabili dinamiche da operatori hermitiani; infine l'evoluzione temporale dello stato dall'equazione di Schrödinger. Le predizioni della nuova meccanica sono formulate in termini di probabilità che la misura di una variabile, in un dato stato, dia uno dei possibili valori. Questi ultimi sono autovalori del relativo operatore Hermitiano.

2.1.1 Lo stato quantistico e il principio di sovrapposizione

La discussione dell'esperimento di Tonomura et. al., discussa nell'Introduzione è una conferma diretta della relazione di de Broglie, (1.123). Questo ci porta a definire uno stato quantistico non in termini di valori simultanei $\{p, q\}$ delle variabili canoniche, ma con una sorta di onda. Infatti, abbiamo il primo

Postulato Fondamentale della Meccanica Quantistica:

lo stato è descritto da una funzione complessa

$$\boxed{\text{stato quantistico} \sim \psi(\{q\}, t)} \quad (2.1)$$

chiamata *funzione d'onda*. Essa dipende dalle coordinate canoniche e dal tempo ma non dagli impulsi.¹

La conoscenza della funzione d'onda equivale alla completa conoscenza dello stato quantistico. Essa permette di calcolare le probabilità di ottenere determinati risultati in qualsiasi tipo di misura.

Per esempio consideriamo la posizione di una particella, o più in generale, le coordinate generalizzate del sistema (q). La probabilità di trovare il sistema nell'intervallo di coordinate $[q, q + dq]$ è, per postulato dato da

$$\boxed{dP = |\psi(\{q\}, t)|^2 dq} \quad (2.2)$$

($dq \equiv dq_1 dq_2 \dots dq_s$). Per una particella in tre dimensioni la probabilità che essa si trovi in un volume attorno al punto \mathbf{r} è

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}. \quad (2.3)$$

Poiché la probabilità totale deve essere 1, si deve imporre

$$\|\psi\|^2 = \int |\psi(\{q\}, t)|^2 dq = 1. \quad (2.4)$$

L'eq.(2.4) è nota come *condizione di normalizzazione*. Ogni funzione d'onda per la quale l'integrale $\int |\psi(\{q\}, t)|^2 dq$ converge, è normalizzabile, con la moltiplicazione di un numero opportuno.² Segue che la funzione ψ e un'altra funzione $c\psi$ dove c è un numero complesso costante qualsiasi diverso da zero, rappresentano lo stesso stato, *i.e.*,

$$\psi \sim c\psi, \quad c \neq 0. \quad (2.5)$$

In altre parole, lo stato quantistico è descritto dal raggio di ψ , nello spazio di funzioni normalizzabili.³

¹Tale descrizione appare introdurre la perdita della simmetria per lo scambio tra le coordinate e gli impulsi, che caratterizza il formalismo canonico della fisica classica. In realtà la legge della meccanica quantistica ha una completa simmetria per $q \leftrightarrow p$; l'apparente violazione di questa simmetria in (2.1) è dovuta alla scelta del linguaggio, alla particolare scelta della *rappresentazione* per lo stato quantistico, come sarà spiegato nei capitoli successivi.

²Per esempio, $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{+\mathbf{r}^2}$ non è normalizzabile, pertanto non rappresenta nessuno stato fisico.

³Più precisamente, ψ deve appartenere ad uno spazio di Hilbert, \mathcal{H} .

Il **principio di sovrapposizione** afferma che se ψ_1 e ψ_2 sono due stati possibili (fisici) qualsiasi ⁴ di un sistema, un terzo stato descritto da

$$\Psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \quad (2.6)$$

dove c_1, c_2 sono due costanti complesse arbitrarie, è anche esso uno stato possibile (fisico). Significa che l'insieme degli stati ammissibili di un dato sistema è descritto da uno spazio lineare di funzioni d'onda, \mathcal{H} .

Per consistenza, il principio di sovrapposizione richiede che l'evoluzione temporale della funzione d'onda sia descritta da un'equazione lineare in Ψ , i.e., del tipo

$$\mathcal{S}\Psi = 0. \quad (2.7)$$

dove \mathcal{S} è un operatore lineare, i.e., un operatore tale che

$$\mathcal{S}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\mathcal{S}\psi_1 + c_2\mathcal{S}\psi_2. \quad (2.8)$$

La forma esplicita dell'operatore \mathcal{S} sarà discussa in seguito.

La descrizione dello stato quantistico in termini di funzione d'onda introduce una certa asomiglianza con quella della dinamica di onde classiche, e per questa ragione è stata usata in passato la denominazione di "meccanica ondulatoria" per la dinamica di Schrödinger. Tuttavia, esistono delle differenze essenziali tra la dinamica delle onde classiche e quella dello stato quantistico. Per esempio, in meccanica quantistica la funzione d'onda ψ e un'altra funzione d'onda $c\psi$ ($c \neq 0$) rappresentano lo stesso stato, come abbiamo appena accennato, mentre due funzioni che differiscono di un fattore moltiplicativo rappresentano due onde classiche di diversa ampiezza, perciò di diversa energia, fisicamente distinguibili.

Il concetto stesso di sovrapposizione richiede un'interpretazione drasticamente diversa in meccanica quantistica, rispetto a quella delle onde classiche. Consideriamo per esempio due stati (quantistici) A e B .⁵ Siano questi stati tali che la misura di una determinata quantità fisica (O) dia con certezza (i.e., con probabilità 1) il risultato a nello stato A , e con certezza il risultato b , nello stato B . Ora secondo il principio di sovrapposizione esiste uno stato fisico C descritto da

$$\Psi_C = c_A\psi_A + c_B\psi_B, \quad (2.9)$$

dove ψ_A e ψ_B sono le funzioni d'onda (normalizzate) degli stati A e B ; c_A, c_B sono due numeri complessi arbitrari. Le proprietà fisiche dello stato C saranno in qualche modo intermedie tra quelle dello stato A e quelle dello stato B . Qual'è il risultato di una misura della stessa quantità O fatta nello stato C ? Secondo la regola della meccanica quantistica, il risultato di una singola misura non può mai essere diverso da a oppure da b . Più precisamente, la meccanica quantistica predice che le probabilità per ottenere i risultati a e b sono rispettivamente

$$\mathcal{P}_a = \frac{|c_A|^2}{|c_A|^2 + |c_B|^2}; \quad \mathcal{P}_b = \frac{|c_B|^2}{|c_A|^2 + |c_B|^2}, \quad (2.10)$$

e zero per tutti gli altri possibili valori di O . *In altri termini, il carattere intermedio dello stato C si manifesta nelle probabilità di ottenere un determinato risultato in un'osservazione, e non nei risultati stessi di singole misure (Dirac).* Queste "regole" della nuova meccanica saranno formulate nella successive sezioni.

Osservazioni

- Secondo quanto detto sopra le funzioni d'onda ψ e $e^{i\alpha}\psi$ (con α reale), rappresentano lo stesso stato. La fase costante davanti alla funzione d'onda non ha un significato fisico. Ma ovviamente $\psi_A = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ e $\psi_B = c_1\psi_1 + c_2e^{i\alpha}\psi_2$ sono due stati diversi (per $c_1 c_2 \neq 0$).

⁴Ci sono eccezioni a questa regola (regola di superselezione).

⁵D'ora in poi, eccetto quando c'è un rischio di un'ambiguità o un malinteso, useremo semplicemente la parola "stato" al posto di "stato quantistico."

- Per due sistemi A e B non-interagenti tra di loro e scorrelati la funzione d'onda si fattorizza:

$$\Psi_{A,B} = \Psi_A \Psi_B. \quad (2.11)$$

Si noti che in presenza di particelle identiche, la funzione d'onda di molti corpi deve avere una certa proprietà di simmetria per scambi di queste particelle, e questo introduce una correlazione anche tra particelle non-interagenti. Questo aspetto peculiare della meccanica quantistica, di fondamentale importanza nella fisica dei molti corpi, sarà discusso nel Capitolo ??

Polarizzazione del fotone

Lo stato di polarizzazione della luce è descritta in teoria classica dal vettore di polarizzazione

$$\mathbf{A} = A^\lambda(\mathbf{k}) \boldsymbol{\varepsilon}^\lambda(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} + h.c. \quad (2.12)$$

Per semplicità abbiamo assunto una luce monocromatica. In gauge di radiazione,

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k} = 0. \quad (2.13)$$

L'ultima condizione significa che ci sono due polarizzazioni indipendenti. La luce polarizzata linearmente corrisponde a, per es.,

$$\boldsymbol{\varepsilon}^1 = (1, 0, 0), \quad \mathbf{k} = (0, 0, k), \quad (2.14)$$

con

$$E_x = \frac{A^1}{c} \omega \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad E_y = 0, \quad (2.15)$$

e analogamente per $\boldsymbol{\varepsilon}^2 = (0, 1, 0)$. La luce polarizzata linearmente, ma in direzione $(\sin\theta, \cos\theta)$ (nel piano perpendicolare alla direzione della propagazione) è descritta da

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\cos\theta, \sin\theta, 0). \quad (2.16)$$

La luce con polarizzazione circolare, corrisponde per es. a

$$\boldsymbol{\varepsilon}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, i, 0),$$

$$E_x = \frac{A^+}{\sqrt{2}c} \omega \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad E_y = \frac{A^+}{\sqrt{2}c} \omega \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (2.17)$$

una polarizzazione ellittica a $\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{5}}(2, i, 0)$, etc.

Secondo la meccanica quantistica la luce va considerato come un fascio di fotoni, e l'origine della proprietà di polarizzazione può essere attribuita ai due possibili stati indipendenti del singolo fotone. Tralasciando altre caratteristiche (l'impulso, direzione della propagazione), lo stato di un singolo fotone è descritto da una combinazione generale

$$|\Psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle, \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (2.18)$$

$|1\rangle, |2\rangle$ rappresentano due stati ortonormali di polarizzazioni lineari nelle direzioni x e y , corrispondono alle luci polarizzati linearmente (2.14), e soddisfano

$$\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1, \quad \langle 1|2\rangle = 0. \quad (2.19)$$

Certi cristalli hanno la proprietà di fare passare solo la luce polarizzata lungo un asse caratteristico, chiamato asse di polarizzazione. Quando un fascio incidente ha una polarizzazione lineare nella direzione che fa un angolo θ rispetto all'asse di polarizzazione, si trova empiricamente che l'intensità di luce che passa è

$$I(\theta) = I(0) \cos^2\theta \quad (2.20)$$

(Legge di Malus).

Ora consideriamo lo stesso esperimento dal punto di vista di singoli fotoni che incidono sul cristallo, con l'asse di polarizzazione nella direzione di \hat{x} . Se il fotone ha la polarizzazione lineare

1, passerà con certezza, con probabilità $P = 1$. Se esso è di tipo $|2\rangle$, invece non passerà (probabilità nulla di passare). Cosa succede se il fotone incidente è nello stato,

$$|\theta\rangle = \cos\theta|1\rangle + \sin\theta|2\rangle \quad (2.21)$$

(stato di polarizzazione lineare nella direzione θ dall'asse x)? L'unica risposta sensata - ed è la predizione della meccanica quantistica - è che il fotone ha la *probabilità* $P_+ = |c_1|^2 = \cos^2\theta$ di passare, e la *probabilità* $P_- = |c_2|^2 = \sin^2\theta$ di non passare.

Per una luce polarizzata perfettamente nella direzione θ , composta di molti fotoni nello stato $|\theta\rangle$, ritroviamo la legge di Malus.

In questo esempio, vediamo che l'interpretazione probabilistica della meccanica quantistica è una diretta conseguenza dei fatti empirici, o meglio, l'unica formulazione logica possibile di questi fatti.

2.1.2 Principio di indeterminazione di Heisenberg

Il fatto che l'elettrone sia descritto da una sorta di onda, funzione d'onda, significa che il concetto classico di traiettoria perde validità. Esso non può avere simultaneamente valori definiti dell'impulso e della posizione. Questo non significa che i concetti stessi come la posizione, l'impulso e l'energia perdano totalmente senso. È la descrizione dello stato quantistico che differisce sostanzialmente da quella della meccanica classica, dove "lo stato fisico" è completamente specificato dai valori contemporanei di $q_i, p_i; E, \dots$.

D'altra parte, nei limiti in cui la costante di Planck h può essere considerata piccola, le leggi della meccanica quantistica devono essere consistenti con quelle della meccanica classica. In qualche modo, allora, la costante h dovrà segnare il confine tra il dominio quantistico e quello classico.

L'espressione matematica della suddetta limitazione per la determinazione simultanea di q_i e p_i è stata scoperta da Heisenberg. Essa viene espressa da un insieme di disuguaglianze:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar; \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar; \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar; \quad (2.22)$$

o più generale, per una coppia canonica *qualsiasi*,

$$\Delta q_i \cdot \Delta p_i \geq \hbar, \quad (2.23)$$

dove

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \simeq 1.054 \cdot 10^{-27} \quad (\text{erg} \cdot \text{sec}) \quad (2.24)$$

Queste relazioni sono chiamate *relazioni di Heisenberg*; o *relazioni d'indeterminazione di Heisenberg*.

La relazione d'indeterminazione segue dalla descrizione di una particella come un pacchetto d'onda. Per esempio, consideriamo un pacchetto d'onda di forma Gaussiana in una dimensione, che a $t = 0$ è dato da:

$$\psi(x, 0) = \text{cost.} \cdot e^{-x^2/d^2}. \quad (2.25)$$

Notiamo che questo pacchetto è concentrato attorno a $x = 0$ ma ha una dispersione,

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} \sim d, \quad (2.26)$$

che può essere interpretato come una sorta di indeterminazione della sua posizione.⁶

⁶Come accennato nella sezione precedente, il calcolo dei valori medii nella (2.26) coinvolge la densità di probabilità $|\psi|^2$ anziché la funzione ψ stessa.

D'altra parte $\psi(x) = \psi(x, 0)$ può essere visto come una sovrapposizione di onde piane: la sua trasformata di Fourier è

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \int_0^{\infty} d\lambda \left(a(\lambda) e^{2\pi i x/\lambda} + a^*(\lambda) e^{-2\pi i x/\lambda} \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda a(\lambda) e^{2\pi i x/\lambda}\end{aligned}\quad (2.27)$$

dove λ è la lunghezza d'onda e $a(-\lambda) \equiv a^*(\lambda)$.

Secondo de Broglie vale la relazione

$$p = \frac{h}{\lambda}\quad (2.28)$$

per ogni particella (*onda di de Broglie*): la equazione precedente può essere riletta allora come sovrapposizione di diverse componenti di impulso p :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\psi}(p) e^{ipx/\hbar}\quad (2.29)$$

dove è stato introdotto $\hbar \equiv h/2\pi$. La componente di Fourier $\tilde{\psi}(p)$ si calcola facilmente nel caso di un'onda Gaussiana, $\psi(x) = e^{-x^2/d^2}$:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(p) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{-ipx/\hbar} e^{-x^2/d^2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{-(x+ipd^2/2\hbar)^2/d^2} e^{-d^2 p^2/4\hbar^2} \\ &= \text{cost.} e^{-d^2 p^2/4\hbar^2}.\end{aligned}\quad (2.30)$$

Tale risultato è interpretabile come un'indeterminazione dell'impulso dell'ordine di

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{d}.\quad (2.31)$$

Dalle equazioni (2.26) e (2.31) segue la relazione di Heisenberg.

Risulta che il pacchetto Gaussiano minimizza il prodotto $\Delta x \Delta p$: per un pacchetto generico si trova (vedi dopo) una disuguaglianza come nelle eq.(2.22).

Le relazioni d'indeterminazione implicano che in uno stato in cui la posizione di un elettrone è esattamente nota, la conoscenza dell'impulso è completamente persa, o vice versa, ed in ogni modo il prodotto $\Delta q \Delta p$ non può essere minore di \hbar .

Il significato della relazione di Heisenberg va precisato meglio. È naturale chiedersi se tale relazione abbia affatto senso. Infatti, non basterebbe prendere una particella di cui l'impulso, p_z , per es., è perfettamente noto grazie alla preparazione antecedente, e misurarne la *posizione* z con una precisione che si vuole, per ottenere uno "stato" in cui la posizione e l'impulso sono perfettamente determinati contemporaneamente, o per lo meno uno stato arbitrariamente vicino a tale stato?

Queste questioni sono stati studiate da Heisenberg, attraverso esame di una serie di "Gedanken experiments" (le esperienze pensate, ipotetiche) ⁷. Consideriamo qui solo due esempi. La prima riguarda la misura della posizione di un elettrone con un microscopio ottico. (Fig.2.1) La luce entra orizzontalmente, viene diffusa dall'elettrone e entra nella lente dell'obiettivo. Come è noto dall'ottica, la risoluzione orizzontale di tale apparecchio è data dalla formula:

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \epsilon}\quad (2.32)$$

⁷"Principi Fisici della Meccanica Quantistica (Bolinghieri); Physical Foundation of Quantum Mechanics" di Heisenberg.

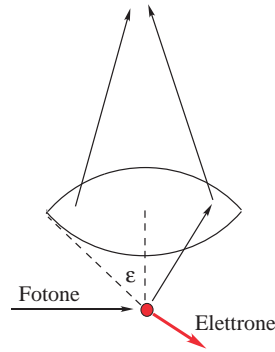


Figura 2.1: Osservazione della posizione orizzontale di un elettrone con un microscopio

dove λ è la lunghezza d'onda della luce usata, ed ε è l'apertura angolare dell'obiettivo. A causa della misura, l'elettrone riceverà un rinculo dell'ordine di $h\nu/c$, i.e., dell'ordine dell'impulso del fotone, da scattering Compton (vedi il Problema 2 della sezione precedente). Siccome la direzione del fotone è nota solo entro il limite determinato dall'angolo ε , la componente orizzontale dell'impulso dell'elettrone sarà anche essa affetta da un'incognita di

$$\Delta p_x \sim \frac{h\nu}{c} \sin \varepsilon \sim \frac{h}{\lambda} \sin \varepsilon \quad (2.33)$$

da cui segue la relazione

$$\Delta x \Delta p_x \sim h. \quad (2.34)$$

La dualità onda-corpuscolo della luce è essenziale nell'argomentazione.

Un altro "Gedanken experiment" è la misura della posizione verticale (z) dell'elettrone che entra orizzontalmente in una fenditura (Fig. 2.2). Supponiamo che il fascio di elettroni sia ben collimato di modo che il suo impulso nella direzione verticale possa essere considerato zero. L'apertura della fenditura d introduce un'indeterminazione nella posizione dell'elettrone: essa sarà misurata con la precisione di

$$\Delta z \sim d \quad (2.35)$$

se l'elettrone attraversa la fenditura. Ora, secondo de Broglie l'elettrone con impulso p si comporta come un'onda di lunghezza d'onda $\lambda = h/p$: come tale, esso subirà una diffrazione al passaggio dalla fenditura stretta. Questa onda si diffonde di un angolo α dove

$$\sin \alpha \sim \frac{\lambda}{d} \quad (2.36)$$

dove è stato usato un altro risultato ben noto in ottica. Perciò l'elettrone, al passaggio dalla fenditura, acquista una componente verticale dell'impulso, nota entro il limite di

$$\Delta p_z \sim |p| \sin \alpha = \frac{h}{\lambda} \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{d}. \quad (2.37)$$

Per il prodotto delle indeterminazioni della posizione e dell'impulso (le componenti verticali) vale perciò la relazione

$$\Delta z \Delta p_z \sim h. \quad (2.38)$$

Questa deduzione utilizza la dualità onda-corpuscolo dell'elettrone.

Queste discussioni dimostrano che c'è un limite nella precisione della determinazione *simultanea* delle variabili canonicamente coniugate, se interpretiamo la simultaneità

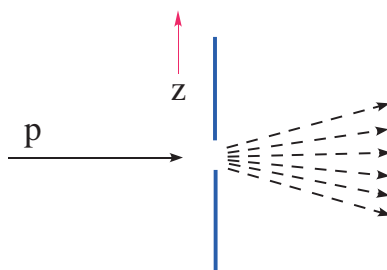


Figura 2.2: Determinazione della posizione verticale di un elettrone con il passaggio per una fenditura

nel senso fisico.⁸ Tale limite è un limite fisico, indipendente dalla condizione esterna dell'osservazione (tecnica, perizia, esperienza, qualità dell'apparato di misura, ecc.); esso è dovuto alla proprietà dinamica del processo fisico coinvolto.

Infatti queste argomentazioni di Heisenberg mettono in risalto un aspetto caratteristico importante della meccanica quantistica. Nelle esperienze che coinvolgono i sistemi atomici o sub-atomici la perturbazione dovuta al processo di una misura non può essere controllata dall'osservatore oltre un certo limite, essendo tale limite una proprietà fisica dei processi stessi. Il determinismo nel senso classico è generalmente perso nel processo di osservazione. L'interpretazione probabilistica delle predizioni della meccanica quantistica, associata al processo della misura, è legata intimamente al principio d'indeterminazione.

Viceversa, i sistemi lasciati indisturbati evolvono in maniera perfettamente deterministica. La funzione d'onda obbedisce l'equazione di Schrödinger, un'equazione differenziale nel tempo t .

Tutto ciò è in contrasto con quanto accade in meccanica classica. In processi macroscopici, il disturbo causato dalla misura (l'apparato e i processi) all'oggetto di misura è trascurabile. Il concetto classico di determinismo è basato su questo fatto. Dal punto di vista più generale, tuttavia, c'è da tenere presente che il determinismo tradizionale ha - negli ultimi decenni - subito una notevole revisione, anche nell'ambito della meccanica classica, collegata con i fenomeni nonlineari, il *caos*, ecc.

2.1.3 Operatori, autovalori e autostati, risultati di un'osservazione

Abbiamo visto che lo stato quantistico è descritto da una funzione complessa - funzione d'onda, $\psi(\{q\}, t)$. Come sono descritte le variabili dinamiche? Quali sono i risultati possibili di una misura? Qual'è la predizione della meccanica quantistica?

In meccanica quantistica, ad ogni variabile dinamica f viene associato un *operatore lineare* \hat{f} , che agisce nello spazio \mathcal{H} delle funzioni d'onda. Un operatore lineare \hat{f} soddisfa per definizione,

$$\hat{f}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{f}\psi_1 + c_2\hat{f}\psi_2, \quad (2.39)$$

dove c_1, c_2 sono costanti complesse arbitrarie.⁹ Le relazioni di Heisenberg implicano l'introduzione del concetto di una *media quantistica*, o *valore d'aspettazione* di un operatore in un dato stato. Esso può essere definito, nel caso dell'operatore di posizione, come

$$\langle q \rangle_\psi = \int dq q |\psi(q)|^2 = \int dq \psi^*(q) q \psi(q), \quad (2.40)$$

⁸Al contrario, il prodotto tra l'indeterminazione di p_z un istante *prima* e l'indeterminazione di z immediatamente *dopo* il passaggio dell'elettrone per la fenditura, nel secondo esempio discusso qui, ha solo un significato filosofico, non essendo tale prodotto utilizzabile come condizione iniziale per processi successivi.

⁹Esempi: la funzione d'onda di una particella in tre dimensioni ha la forma $\psi(\mathbf{r}, t)$; gli operatori differenziali $\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial z}, \dots$, $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, sono operatori lineari; l'operatore $\psi \rightarrow U(\mathbf{r})\psi$ è lineare, mentre $\hat{Q}\psi = \psi^2$ non è lineare.

visto che $|\psi(q)|^2$ è la densità di probabilità. Generalizzando, è naturale definire il valor medio dell'operatore generico \hat{f} nello stato ψ con

$$\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \int dq \psi^*(q) \hat{f} \psi(q); \quad (2.41)$$

ma la relazione tra questa quantità e la media dei risultati sperimentali della variabile f non è ovvia.

Infatti, il risultato di una singola misura della variabile dinamica f è uno degli *autovalori* di \hat{f} , f_n :

$$\hat{f} \psi_n = f_n \psi_n, \quad ||\psi_n|| = 1. \quad (2.42)$$

Le autofunzioni ψ_n descrivono gli autostati dell'operatore: stato in cui la misura di f dà con certezza il valore f_n .

Un generico stato è descritto da una combinazione lineare

$$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q). \quad (2.43)$$

di autostati $\{\psi_n\}$. Il secondo

Postulato Fondamentale della Meccanica Quantistica

asserisce che la probabilità di ottenere il risultato f_n nella misura di f fatta nello stato (2.43) è data da

$$P_n = |c_n|^2 \quad (2.44)$$

Facendo uso dell'ortonormalità degli autostati¹⁰

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int dq \psi_n^* \psi_m = \delta_{nm}, \quad (2.45)$$

(l'ortogonalità degli autostati relativi ad autovalori diversi sarà dimostrata nella sezione successiva), la condizione della normalizzazione dello stato ψ ,

$$||\psi|| = 1,$$

implica che

$$\sum_n P_n = \sum_n |c_n|^2 = 1. \quad (2.46)$$

Segue allora che il valore d'aspettazione dell'operatore \hat{f} nello stato ψ , (3.84), è uguale a

$$\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \int dq \psi^*(q) \hat{f} \psi(q) = \sum_n |c_n|^2 f_n = \sum_n P_n f_n, \quad (2.47)$$

dove abbiamo usato la linearità dell'operatore. (2.47) è giustamente la quantità da confrontare con il risultato mediato delle misure ripetute.

Una formula alternativa per la probabilità (2.44) è

$$P_n = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 \quad (2.48)$$

visto che il coefficiente dello sviluppo, usando la relazione di ortonormalità, (2.45), è uguale a

$$\langle \psi_n | \psi \rangle \equiv \int dq \psi_n^*(q) \psi(q) = c_n. \quad (2.49)$$

In altre parole, *la probabilità di trovare un determinato risultato nella misura di f è il modulo quadrato della proiezione della funzione d'onda su relativa autofunzione.*

¹⁰Nelle (2.45), (2.47), (2.49) introduciamo la notazione di Dirac, con i "ket", $| \rangle$, e i "bra", $\langle |$.

2.1.4 Risultati reali per una misura; Operatori Hermitiani

Il fatto che il risultato di misura di una quantità fisica sia un numero reale, impone una condizione particolare sull'operatore associato. Infatti, visti i postulati della meccanica quantistica, \hat{f} deve essere tale che i suoi autovalori f_n (i.e., possibili risultati sperimentali) e di conseguenza il suo valor medio siano in qualsiasi stato reali.

Prima di tutto definiamo il *trasposto* f^T di un operatore. Dato uno stato ψ , se esiste una funzione $\chi \in \mathcal{H}$ tale che per qualsiasi $\phi \in \mathcal{H}$ vale la relazione

$$\int dq (f\phi^*) \psi = \int dq \phi^* \chi, \quad (2.50)$$

allora

$$\chi \equiv f^T \psi. \quad (2.51)$$

Il *coniugato Hermitiano* di un operatore è definito come

$$f^\dagger \equiv (f^T)^* = (f^*)^T. \quad (2.52)$$

Un operatore è *Hermitiano* se

$$f^\dagger = f, \quad (2.53)$$

i.e., se

$$\langle \phi | f \psi \rangle = \langle \psi | f \phi \rangle^* \equiv \langle f \phi | \psi \rangle, \quad \forall \psi, \phi \in \mathcal{H}. \quad (2.54)$$

Per un operatore Hermitiano f si ha infatti $\langle f \rangle = \langle f \rangle^*$, prendendo $\psi = \phi$ in (2.54). In particolare, per $\psi = \psi_n$, si trova $f_n^* = f_n$, come richiesto.

Nota:

L'Hermiticità di f è anche necessaria. Infatti, supponiamo che valga $\langle \psi | f | \psi \rangle = \langle \psi | f | \psi \rangle^*$ per qualsiasi ψ . Ponendo $\psi = \chi + e^{i\alpha} \phi$, troviamo che

$$e^{i\alpha} \langle \chi | f | \phi \rangle + e^{-i\alpha} \langle \phi | f | \chi \rangle \in \mathbb{R}, \quad (2.55)$$

(reale) per qualsiasi valori di α costante reale. Segue che

$$\langle \phi | f | \chi \rangle = \langle \chi | f | \phi \rangle^*, \quad (2.56)$$

per ogni scelta di χ, ϕ , che significa che f è Hermitiano, per definizione ((2.54)).

Arriviamo alla conclusione che **ad ogni variabile dinamica è associato un operatore lineare e Hermitiano.**

Esempi: l'operatore $x, y, x^2, i\partial/\partial x, i\partial/\partial t$ ecc., sono Hermitiani; $\partial/\partial x$ non è Hermitiano.

Teorema: Gli autostati corrispondenti ad autovalori diversi di un operatore Hermitiano sono ortogonali.

Dall'eq.(2.42) segue

$$\int dq \psi_m^* f \psi_n = f_n \int dq \psi_m^* \psi_n; \quad (2.57)$$

e un'analogha relazione in cui n e m sono scambiati,

$$\int dq \psi_n^* f \psi_m = f_m \int dq \psi_n^* \psi_m. \quad (2.58)$$

Prendendo ora la combinazione, (2.57) - (2.58)*, si trova

$$(f_n - f_m) \int dq \psi_m^* \psi_n = \int dq \psi_m^* (f - f^\dagger) \psi_n = 0, \quad (2.59)$$

dove è stato usato il fatto che $\{f_n\}$ sono numeri reali, e $f^\dagger = f$. Segue

$$\int dq \psi_m^* \psi_n = 0, \quad \text{se } f_n \neq f_m. \quad (2.60)$$



2.1.5 Prodotti di operatori, Commutatori, Osservabili compatibili

Il prodotto di due operatori è definito da

$$fg\Psi \equiv f(g\Psi). \quad (2.61)$$

In generale gli operatori fg e gf sono diversi. Il *commutatore* tra due operatori f e g è definito da

$$[f, g] \equiv fg - gf. \quad (2.62)$$

Se $[f, g] = 0$, i due operatori *commutano*.

Inoltre, i commutatori soddisfano all'identità di Jacobi,

$$[f, [g, h]] + [g, [h, f]] + [h, [f, g]] = 0 \quad (2.63)$$

(cfr. vedi 1.2.2.)

Nella discussione delle osservabili gioca un ruolo importante il seguente

Teorema:

Se due operatori f e g commutano, esiste una base di stati ortonormali e completi $\{\Psi_n\}$ tale che

$$f\Psi_n = f_n\Psi_n; \quad g\Psi_n = g_n\Psi_n. \quad (2.64)$$

In altre parole si possono trovare gli stati che sono simultaneamente autostati sia di f che di g . I due operatori corrispondono perciò a due quantità fisiche (osservabili) compatibili, che possono avere simultaneamente valori definiti.

Dimostrazione: Nel sottospazio di autostati di g con determinato autovalore g_n , Ψ_n^i

$$g\Psi_n^i = g_n\Psi_n^i: \quad i = 1, 2, \dots, \quad (2.65)$$

g agisce come un operatore unità (a parte una moltiplicazione di un numero),

$$G_{ij} = \int dq \Psi^j* g \Psi^i = g_n \delta_{ij}.$$

L'operatore f in questo sottospazio in generale non è diagonale,

$$f\Psi_n^i = F_{ij}\Psi_n^j, \quad (2.66)$$

dove abbiamo utilizzato la linearità di f e il fatto che f e g commutano, per concludere che $f\Psi_n^i$ è un autostato di g con autovalore g_n . Dal fatto che l'operatore f è Hermitiano segue che (sopprimendo l'indice n)

$$F_{ij} = \int dq \Psi^j* f \Psi^i = \int dq (f* \Psi^j*) \Psi^i = (\int dq \Psi^i* f \Psi^j)* = F_{ji}^*:$$

F è una matrice Hermitiana. Una matrice Hermitiana può essere diagonalizzata con un'atrasformazione unitaria

$$\Psi^i = U_{ij}\Phi^j, \quad \Phi^i = (U^{-1})_{ij}\Psi^j = U_{ij}^\dagger\Psi^j, \quad (2.67)$$

$$U^\dagger \mathbf{F} U = \tilde{\mathbf{F}} = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & \dots \\ 0 & f_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}, \quad (2.68)$$

$$U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbf{1}. \quad (2.69)$$

Nella nuova base,

$$\begin{aligned} f\Phi^i &= U_{ij}^\dagger f \Psi^j = U_{ij}^\dagger F_{jk} \Psi^k = U_{ij}^\dagger F_{jk} U_{kl} \Phi^l \\ &= (U^\dagger \mathbf{F} U)_{il} \Phi^l = f_i \Phi^i. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Chiramente una matrice unità G_{ij} è invariante per qualsiasi trasformazione unitaria, perciò gli stati ϕ^i sono autostati simultanei di f e di g .

In breve, si tratta semplicemente di diagonalizzare l'operatore f nello spazio di autostati (degeneri) appartenenti ad un autovalore di g , o vice versa. ♠

Ricapitolando, se $[f, g] = 0$, i due operatori corrispondono a due quantità fisiche di cui valori possono essere simultaneamente precisati: sono simultaneamente osservabili con arbitraria precisione e non sono condizionate dalle relazioni d'indeterminazione.

La discussione sopra chiaramente può essere generalizzata al caso di più operatori che commutano tra di loro. Partendo da un operatore qualsiasi, si arriva al concetto di *osservabili massimali*, i.e., un insieme massimale di tutte le variabili dinamiche $\{O_i\}$ con relativi operatori che commutano tra di loro. Gli autovalori di tale osservabili massimali forniscono una caratterizzazione completa dello stato. La scelta di tale insieme massimale di osservabili non è in generale univoca.

Vice versa, la relazione di Heisenberg si riferisce, appunto, a coppie di variabili dinamiche che non commutano, e in particolare a coppie canoniche delle variabili (vedi Sez. 2.1.6).

Esercizio:

Il valor medio di un operatore di forma $A^\dagger A$ in qualsiasi stato è semipositivo definito.

$$\langle A^\dagger A \rangle_\psi = \int dq \psi^* A^\dagger A \psi = \int dq |A \psi|^2 \geq 0. \quad (2.71)$$

Esercizio: Dimostrare

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

2.1.6 Operatori di posizione e di impulso, Commutatori fondamentali, Relazione di Heisenberg

L'operatore di posizione (coordinate generalizzate) agisce in modo semplice

$$\hat{q} \psi(q, t) = q \psi(q, t), \quad (2.72)$$

esso corrisponde alla moltiplicazione di q (questo fatto era implicito nella definizione di $\langle q \rangle$.)

L'operatore dell'impulso canonicamente coniugato a q è

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}}, \quad (2.73)$$

e per una particella in tre dimensioni,

$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla \quad (2.74)$$

Segue che le due variabili canonicamente coniugate soddisfano la relazione di commutatore,

$$\boxed{[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar}. \quad (2.75)$$

Per una particella in tre dimensioni,

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (2.76)$$

Le componenti di \hat{q} commutano tra loro, ed così anche le componenti di \hat{p} :

$$[x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0. \quad (2.77)$$

Osservazione

La somiglianza tra queste relazioni e quelle soddisfatte da parentesi di Poisson in meccanica classica, (1.37), non è casuale. Dal punto di vista formale, infatti, la meccanica quantistica può essere vista come una deformazione,

$$\{f, g\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[f, g], \quad (2.78)$$

della meccanica classica, espressa in termini di parentesi di Poisson.

Relazione di Indeterminazione di Heisenberg

Ora che abbiamo definito operatori, l'azione di un operatore sugli stati, i commutatori tra operatori e il valor medio di un operatore in uno stato, siamo finalmente in grado di dimostrare la relazione di Heisenberg in modo più rigoroso. La discussione della sezione 2.1.2 lasciava molti punti oscuri. Dimostriamo infatti che, per una qualsiasi coppia di operatori Hermitiani Q, P che soddisfano

$$[Q, P] = i\hbar, \quad (2.79)$$

è valida la relazione di Heisenberg, (2.85) qui sotto. Si noti il fattore $\frac{1}{2}$.

L'indeterminazione di Q o di P è definito da

$$\Delta Q \equiv \sqrt{\langle (Q - Q_0)^2 \rangle}, \quad \Delta P \equiv \sqrt{\langle (P - P_0)^2 \rangle},$$

dove

$$Q_0 = \langle Q \rangle = \langle \psi | Q | \psi \rangle; \quad P_0 = \langle P \rangle = \langle \psi | P | \psi \rangle, \quad (2.80)$$

sono i valor medi dei due operatori nello stato ψ . Consideriamo un operatore

$$A = Q - Q_0 + i\alpha(P - P_0), \quad (2.81)$$

dove α è un numero reale qualsiasi. Facendo uso del fatto che

$$\langle \psi | A^\dagger A | \psi \rangle \geq 0, \quad (2.82)$$

per qualsiasi operatore A , si ha

$$\langle (Q - Q_0)^2 \rangle - \alpha\hbar + \alpha^2 \langle (P - P_0)^2 \rangle \geq 0, \quad (2.83)$$

una disuguaglianza valida per qualsiasi α . Un'espressione quadratica è semidefinita positiva quando il suo discriminante è negativo o zero:

$$\hbar^2 - 4(\Delta Q)^2 \cdot (\Delta P)^2 \leq 0; \quad (2.84)$$

i.e.,

$$\Delta Q \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (2.85)$$

dove abbiamo definito lo scarto quadrato come media sullo stato in questione,

$$(\Delta Q)^2 \equiv \langle (Q - Q_0)^2 \rangle = \langle Q^2 - Q_0^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2, \quad (2.86)$$

$$(\Delta P)^2 \equiv \langle (P - P_0)^2 \rangle = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2. \quad (2.87)$$



2.1.7 Evoluzione del sistema, Equazione di Schrödinger

L'evoluzione temporale degli stati deve essere descritta da un'equazione lineare, come abbiamo già accennato. L'equazione fondamentale della meccanica quantistica che descrive l'evoluzione temporale dello stato, *Equazione di Schrödinger*, è:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}; t) \psi(q, t)} \quad (2.88)$$

dove \hat{H} è l'operatore dell'energia, l'Hamiltoniana. La (2.88) sostituisce l'equazione di Newton. Per ipotesi, l'Hamiltoniana \hat{H} è uguale a,

$$\boxed{\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}; t) = H(q, p; t) \Big|_{q \rightarrow \hat{q}; p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}} \quad (2.89)$$

dove $H(q, p; t)$ è la Hamiltoniana classica.

In altre parole, la regola fondamentale della meccanica quantistica è l'associazione

$$\boxed{H \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad p_i \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}} \quad (2.90)$$

La relazione tra l'impulso e l'energia,

$$H = H(q, p; t) \quad (2.91)$$

(per es., $H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$) si traduce in una *condizione sullo stato fisico (funzione d'onda)*, che è l'equazione di Schrödinger.¹¹

Onda piana

È possibile dare una motivazione euristica per questa procedura, considerando un'onda piana

$$\psi_0 = \text{cost.} e^{-i(\omega t - \tau x)}, \quad (2.92)$$

che rappresenta una luce monocromatica con polarizzazione fissa. L'idea è di considerarla come soluzione di un'equazione quantistica. Applicando $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ su ψ_0 si ha

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0 = \hbar \omega \psi_0 = h\nu \psi_0 \quad (\omega = 2\pi\nu). \quad (2.93)$$

Ma sappiamo che per (il quanto di) una luce monocromatica $h\nu$ è la sua energia, $h\nu = E$,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0 = E \psi_0 : \quad (2.94)$$

i.e., *l'autovalore di H è l'energia*. D'altra parte, la relazione di de Broglie rivela che

$$\tau = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}, \quad (2.95)$$

di conseguenza

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_0 = p \psi_0. \quad (2.96)$$

Questa relazione suggerisce che $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ è l'operatore che rappresenta l'impulso.

Inoltre, tra l'autovalore di energia $E = h\nu$ e quello dell'impulso $p = h/\lambda$ esiste una nota relazione $E = pc$, la relazione cinematica (relativistica) corretta tra l'energia e l'impulso di una particella libera e senza massa (fotone).

¹¹ È un fatto misterioso, che queste regole scoperte nell'ambito di meccanica quantistica non relativistica, hanno una struttura perfettamente compatibile con il principio della relatività speciale, $p_\mu \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}$. Tale è la base delle equazioni relativistiche, come l'equazioni di Dirac, o quella di Klein-Gordon.

L'equazione quantistica in questione è l'equazione di D'Alembert,

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right] \psi = 0, \quad (2.97)$$

che non è altro che l'equazione di Maxwell nel vuoto per i potenziali scalare e vettoriale ($\psi = \phi, A_i$) nella gauge di radiazione. Nel caso nonrelativistico si ottiene l'equazione di Schrödinger.

Questa osservazione euristica per la legge della meccanica quantistica non è che uno dei modi per vedere la sua ragionevolezza, e in nessun modo la giustifica né dimostra la sua unicità. L'aspetto non "usuale", rispetto alla legge classica, tuttavia, riflette semplicemente il fatto che la nostra intuizione è basata (o meglio, si è evoluta basandosi) sulle esperienze su scala macroscopica (la sensazione che il moto di una particella abbia una traiettoria ben marcata, etc.). Tale intuizione è decisamente inadeguata al mondo atomico. In ultima istanza, la giustificazione delle leggi di meccanica quantistica è la sua correttezza empirica, *i.e.*, sta nelle innumerevoli conferme sperimentali, come del resto lo è l'equazione di Newton.

La correttezza e consistenza dell'equazione di Schrödinger e della regola di meccanica quantistica si può verificare tuttavia anche dal fatto che essa dà il risultato classico corretto, nel limite $\hbar \rightarrow 0$ (vedi dopo).

Esempi:

- Per una particella in tre dimensioni,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (2.98)$$

ed è Hermitiano.

-

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + g \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla, \quad (2.99)$$

non è Hermitiano, pertanto non è accettabile come buona Hamiltoniana;

-

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{g}{2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.100)$$

è invece Hermitiano ed è accettabile come operatore quantistico.

Quest'ultimo esempio mette in chiara luce il problema di "operator-ordering", una sorta di ambiguità nel trovare l'operatore Hamiltoniano, per l'Hamiltoniana classica di un sistema.

Consideriamo ora i sistemi per i quali l'Hamiltoniana è indipendente dal tempo,

$$H = H(\hat{q}, \hat{p}; t). \quad (2.101)$$

L'equazione agli autovalori per H ,

$$H\psi_n = E_n\psi_n, \quad (2.102)$$

è chiamata anche essa *equazione di Schrödinger*, o equazione di Schrödinger indipendente dal tempo, E_n autovalori d'energia. Ora,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E_n &= \frac{d}{dt} \int dq \psi_n^* E_n \psi_n = \frac{d}{dt} \int dq \psi_n^* H \psi_n \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int dq \psi_n^* [H, H] \psi_n = 0, \end{aligned} \quad (2.103)$$

perciò

$$E_n = \text{cost.} \quad (2.104)$$

Gli autovalori di energia di un'Hamiltoniana indipendente dal tempo sono costanti del moto, da cui il nome *stati stazionari* per autostati corrispondenti.

La funzione d'onda di uno stato stazionario *dipende* dal tempo, ma in modo semplice. Risolvendo l'eq. di Schrödinger, (2.88), si ha in questi casi

$$\psi_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(0), \quad (2.105)$$

dove $\psi_n(0)$ è la funzione d'onda all'istante $t = 0$.

La *soluzione generale* della eq. (2.88) per uno stato generico ψ (i.e., non necessariamente stazionario) è data da:

$$\psi(t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(0). \quad (2.106)$$

dove i coefficienti dello sviluppo sono determinati dalla condizione al contorno, $\psi(t)|_{t=0} = \psi(0)$,

$$\psi(0) = \sum_n a_n \psi_n(0), \quad a_n = \langle \psi_n | \psi(0) \rangle.$$

Più in generale, la dipendenza temporale del *valor medio* di un operatore O in uno stato ψ ,

$$\langle O \rangle_\psi \equiv \langle \psi | O | \psi \rangle \equiv \int dq \psi^* O \psi, \quad (2.107)$$

è data da:

$$\frac{d}{dt} \langle O \rangle_\psi = \langle \psi | \left(\frac{\partial}{\partial t} O + \frac{1}{i\hbar} [O, H] \right) | \psi \rangle. \quad (2.108)$$

Segue dunque che se $(\partial/\partial t)O = 0$, e se l'operatore commuta con H , allora

$$\frac{d}{dt} \langle O \rangle_\psi = 0. \quad (2.109)$$

In questo caso l'operatore O è *conservato*. È interessante notare la somiglianza dell'eq.(2.108) con l'equazione che descrive la dipendenza temporale di una variabile nella meccanica classica, in termini di parentesi di Poisson.

Esercizio: Verificare l'eq.(2.103), l'eq.(2.106) e l'eq.(2.108).

2.1.8 Spettro continuo; la funzione delta di Dirac; autostati di posizione

Finora gli autovalori di operatori sono stati assunti discreti. In meccanica quantistica, certi operatori prendono autovalori continui (per es., l'operatore della posizione, \mathbf{r} , l'energia per l'elettrone non legato, ecc.). L'equazione agli autovalori prende la forma

$$\hat{f} \psi_f(q) = f \psi_f(q) \quad (2.110)$$

dove ora f prende valori continui. (cfr. (2.42)) Una funzione generica può essere sviluppata in termini di autostati ψ_f

$$\psi(q) = \int df a(f) \psi_f(q) \quad (2.111)$$

(cfr. (2.43)). La probabilità di trovare il risultato tra f e $f + df$ nello stato ψ è

$$dP = |a(f)|^2 df. \quad (2.112)$$

(cfr. (2.44)). Poiché la probabilità totale è uno,

$$\int df |a(f)|^2 = 1; \quad (2.113)$$

mentre la condizione di normalizzazione della funzione d'onda è

$$\int dq \Psi(q)^* \Psi(q) = 1. \quad (2.114)$$

La relazione di "ortonormalità" degli autostati è più sottile nel caso di spettro continuo. Sostituendo il coniugato complesso di (2.111) nell'eq.(2.114) si trova

$$1 = \int df a(f)^* \left[\int dq \Psi_f^*(q) \Psi(q) \right], \quad (2.115)$$

da cui (cfr. (2.113))

$$\int dq \Psi_f^*(q) \Psi(q) = \langle f | \Psi \rangle = a(f), \quad (2.116)$$

che è analogo dell'eq.(2.49). Un'ulteriore sostituzione dell'eq.(2.111) in (2.116) dà luogo ad una relazione di consistenza:

$$a(f) = \int df' a(f') \left[\int dq \Psi_f^*(q) \Psi_{f'}(q) \right]. \quad (2.117)$$

Nel caso di autovalori discreti, la relazione di ortonormalizzazione (2.60) segue da una analoga equazione. Perché l'eq.(2.117) sia valida per qualsiasi $a(f)$, l'espressione dentro la parentesi quadrata deve essere identicamente nulla per $f \neq f'$. D'altra parte l'integrale su f' deve ridare $\int df' a(f') [\dots] = a(f)$: è evidente che [...] non può essere una funzione nel senso normale. Tale *funzione generalizzata o distribuzione* è stata introdotta da Dirac e si chiama funzione $\delta(x)$ di Dirac.

Definizione

$$\delta(x) = 0; \quad x \neq 0; \quad \delta(0) = \infty; \quad (2.118)$$

e

$$\int_a^b dx \delta(x) g(x) = \begin{cases} g(0), & \text{se } a < 0 < b; \\ 0, & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (2.119)$$

per una funzione qualsiasi $g(x)$ continua a $x = 0$. ♠

Segue dalla definizione

$$\int_a^b dx \delta(x-c) g(x) = \begin{cases} g(c), & \text{se } a < c < b; \\ 0, & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (2.120)$$

Alcune tra le più importanti proprietà della funzione delta sono:

$$\begin{aligned} \delta(-x) &= \delta(x); \\ \delta(ax) &= \frac{1}{|a|} \delta(x); \\ f(x) \delta(x-y) &= f(y) \delta(x-y); \\ x \delta(x) &= 0; \\ \frac{d}{dx} \theta(x) &= \delta(x); \quad \theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x \geq 0; \\ 0, & \text{se } x < 0; \end{cases} \\ \delta(f(x)) &= \sum_{i=1}^r \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x-x_i), \quad f(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, r. \end{aligned} \quad (2.121)$$

La funzione $\delta(x)$ è pari, perciò

$$\int_0^{\infty} dx \delta(x) f(x) = \frac{1}{2} f(0). \quad (2.122)$$

La funzione delta può essere definita come limite di una funzione. Alcuni esempi (le operazioni di limite vanno fatte fuori l'integrazione):

$$\delta(x) \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi\varepsilon}} e^{-x^2/\varepsilon^2}; \quad (2.123)$$

$$\delta(x) \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin(Lx)}{\pi x}; \quad (2.124)$$

$$\delta(x) \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(Lx)}{\pi L x^2}; \quad (2.125)$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2}; \quad (2.126)$$

$$\frac{1}{x - i\varepsilon} = \frac{\mathcal{P}}{x} + \pi i \delta(x), \quad (2.127)$$

dove \mathcal{P} è il valore principale di Cauchy.

Dimostrazione di (2.124): Supponiamo che $a < 0 < b$.

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \int_a^b dx \frac{\sin(Lx)}{\pi x} f(x) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \int_a^b dx \frac{\sin(Lx)}{\pi x} (f(0) + x f'(0) + \dots) \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} [f(0) \int_a^b dx \frac{\sin(Lx)}{\pi x} + O(\frac{1}{L})] \\ &= \frac{f(0)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\sin z}{z} = f(0), \end{aligned} \quad (2.128)$$

dove l'ultimo integrale può essere calcolato con il metodo di integrale nel piano complesso. Vedi il Complimento di questa Sezione. ♠ La dimostrazione di (2.125) è analoga. (Dimostratela)

In termini di funzione $\delta(x)$, la relazione di "ortonormalità" nel caso di autovalori continui dunque prende la seguente forma:

$$\int dq \psi_f^*(q) \psi_{f'}(q) = \delta(f - f'). \quad (2.129)$$

(cfr. (2.45) nel caso di autovalori discreti.)

Un'importante applicazione della funzione delta è il seguente integrale,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix(k-k')} = 2\pi \delta(k - k'), \quad (2.130)$$

e analogamente in tre dimensioni

$$\int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} = (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (2.131)$$

Sfruttando questi risultati si può dimostrare la formula inversa delle trasformazioni di Fourier: se

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} \tilde{F}(k), \quad (2.132)$$

la trasformata di Fourier di $F(x)$, $\tilde{F}(k)$, è data da:

$$\tilde{F}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} F(x). \quad (2.133)$$

2.1.9 Relazione di Completezza

Esistono delle relazioni di completezza, in un certo senso duali alle relazioni di ortonormalità. Sostituendo (2.116) in (2.111) troviamo infatti

$$\psi(q) = \int dq' \psi(q') \left[\int df \psi_f^*(q') \psi_f(q) \right]; \quad (2.134)$$

la consistenza richiede allora che sia valida la seguente relazione

$$\int df \psi_f(q) \psi_f^*(q') = \delta(q - q') \quad (2.135)$$

(chiamata *relazione di completezza*). Il secondo membro è simbolico: per una particella in tre dimensioni, $q \rightarrow \mathbf{r}$, per esempio

$$\delta(q - q') \rightarrow \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z'). \quad (2.136)$$

Analogamente per autovalori discreti troviamo

$$\sum_n \psi_n(q) \psi_n^*(q') = \delta(q - q'). \quad (2.137)$$

Infine, per un operatore che possiede sia autovalori discreti (detti propri) che autovalori continui (detti impropri) vale la relazione di completezza,

$$\sum_n \psi_n(q) \psi_n^*(q') + \int df \psi_f(q) \psi_f^*(q') = \delta(q - q'). \quad (2.138)$$

Il significato della completezza delle autofunzioni $\{\psi_n\}$ sta nel fatto che *qualsiasi* stato ψ può essere sviluppato in termini di esse:

$$\psi(q) = \sum_n a_n \psi_n(q) + \int df a(f) \psi_f(q) = \sum_n \langle n | \psi \rangle \psi_n(q) + \int df \langle f | \psi \rangle \psi_f(q). \quad (2.139)$$

2.1.10 Autostati di posizione; autostati di impulso

Gli autostati di posizione sono dati in termini di funzione delta. In una dimensione,

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0), \quad (2.140)$$

rappresenta una particella localizzata in x_0 (questo è ovvio intuitivamente), e soddisfa $x\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x)$ grazie alla proprietà della funzione delta. L'insieme di autostati $\psi_{x_0}(x)$ soddisfano le relazioni (2.129) e (2.136), come si verifica facilmente facendo uso di (2.121).

L'operatore di impulso è

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (2.141)$$

Autostati dell'impulso sono dati da:

$$\psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i\mathbf{p}_0\mathbf{r}}{\hbar}}, \quad (2.142)$$

dove \mathbf{p}_0 è un vettore numerico (i.e., non un operatore). $\psi_{\mathbf{p}_0}$ soddisfa l'equazione agli autovalori,

$$\hat{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}_0} = \mathbf{p}_0\psi_{\mathbf{p}_0}. \quad (2.143)$$

In generale, gli autovalori dell'impulso sono continui: la relazione di ortonormalità (con la particolare normalizzazione degli autostati (2.142)) è:

$$\int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}'); \quad (2.144)$$

mentre la completezza di stati $\{\psi_{\mathbf{p}}\}$ si esprime come

$$\int d\mathbf{p} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.145)$$

Dimostriamo ora la relazione (omettendo il simbolo “cappello”)

$$H(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0, \mathbf{p}) = e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0}{\hbar}} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0}{\hbar}}, \quad (2.146)$$

per un operatore qualsiasi.

Dimostrazione: È sufficiente considerare il caso di una dimensione: calcoliamo

$$G(x, \alpha) \equiv e^{\frac{i p \alpha}{\hbar}} F(x) e^{-\frac{i p \alpha}{\hbar}}; \quad p \equiv -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (2.147)$$

$G(x, 0) = F(x)$ ovviamente. La prima derivata rispetto ad α a $\alpha = 0$ è

$$\frac{d}{d\alpha} G(x, \alpha)|_{\alpha=0} = e^{\frac{i p \alpha}{\hbar}} [i p / \hbar, F(x)] e^{-\frac{i p \alpha}{\hbar}}|_{\alpha=0} = F'(x), \quad (2.148)$$

dove è stato usato il commutatore,

$$[i p / \hbar, F(x)] = \left[\frac{d}{dx}, F(x) \right] = \frac{d}{dx} \cdot F(x) - F(x) \frac{d}{dx} = F'(x). \quad (2.149)$$

Analogamente si trova che

$$\frac{d^2}{d\alpha^2} G(x, \alpha)|_{\alpha=0} = F''(x), \quad (2.150)$$

ecc. Si ottiene così

$$G(x, \alpha) = \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n}{d\alpha^n} G(x, \alpha)|_{\alpha=0} = \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} F(x) = F(x + \alpha). \quad (2.151)$$

La formula (2.146) dimostra che l'operatore di impulso genera la *traslazione* della posizione. Applichiamo ora questa formula all'Hamiltoniana. Se l'Hamiltoniana è invariante per traslazione, i.e.,

$$H(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0, \mathbf{p}) = H(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (2.152)$$

allora

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0}{\hbar}} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0}{\hbar}}. \quad (2.153)$$

Sviluppando il secondo membro in \mathbf{r}_0 al primo ordine, si ottiene

$$[p_i, H] = 0: \quad (2.154)$$

cioè, se il sistema è invariante per traslazione l'impulso commuta con l'Hamiltoniana: esso è conservato (vedi (2.108)). Questo risultato generalizza un'analogia e ben nota relazione tra l'invarianza per traslazione e la conservazione dell'impulso in meccanica classica.

Notiamo infine che le proprietà degli autostati dell'impulso e quelli della posizione sono in accordo con le relazioni di Heisenberg. Infatti, nello stato $\psi_{\mathbf{p}_0}$ l'impulso della particella è ben definito; in compenso la sua posizione è completamente indefinita, e come si vede da $|\psi_{\mathbf{p}_0}|^2 = \text{cost.}$. Viceversa, nell'autostato della posizione $\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ la posizione è perfettamente definita mentre l'impulso è del tutto indefinito, come risulta dallo sviluppo di Fourier,

$$\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar} a(\mathbf{p}); \quad a(\mathbf{p}) = 1. \quad (2.155)$$

Nota e Riflessione

Uno studente attento avrà notato che autostati che appartengono ad uno spettro continuo (autovalori continui) non sono normalizzabili. (Per esempio si paragoni (2.4) con (2.144).) Possono essere tali stati considerati “fisici” o comunque accettabili in meccanica quantistica, in vista dell’interpretazione di funzione d’onda, discussa in Sec.2.1.1?

Dal punto di vista matematico, in meccanica quantistica si avrà in generale a che fare con uno spazio vettoriale (di funzioni d’onda) di infinita dimensione; le operazioni di somma, limite, ecc. vanno definite in modo consistente in tale spazio. Questo rende indispensabile considerare spazi *chiusi*, i.e., spazi che contengono, insieme ad ogni successione $\{\psi_N\}$, $N = 1, 2, \dots$, $\psi_N \in \mathcal{H}$, anche il suo limite $\lim_{N \rightarrow \infty} \psi_N$ come suo elemento. Le proprietà di questi spazi (spazi di Hilbert) saranno discusse con più esattezza in Sec.???. Gli autostati dell’impulso (in una dimensione) in certo senso possono essere considerati come limiti di una successione,

$$\psi_N = \text{cost.} e^{ikx} e^{-(x-x_0)^2/d^2N^2}, \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (2.156)$$

C’è una differenza evidente, dal punto di vista fisico, tra autostati di energia con autovalori discreti e quelli corrispondenti allo spettro continuo. I primi, avendo funzioni d’onda normalizzabili, descrivono infatti *stati legati*, i.e., stati in cui la particella è confinata in una regione finita dello spazio; la probabilità per trovare la particella si annulla a $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Vice versa, i secondi, con $|\psi|^2 \rightarrow \text{cost.}$ a $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$, descrivono stati di *scattering*.

Ovviamente i concetti come onda piana (con loro infinita estensione spaziale) o particella completamente localizzata in un punto spaziale, sono un’idealizzazione. Nessun sistema fisico ha realmente un’estensione infinita, per esempio. Nonostante ciò, è auspicabile, ed è il caso in molte teorie fisiche (la meccanica quantistica inclusa), che la *struttura matematica* di una teoria fisica sia tale che la descrizione di situazioni idealizzate sia naturalmente contenuta nella teoria stessa, spesso in modo particolarmente semplice e elegante.

2.1.11 Problemi

1. Si dimostri che:

a) $(f^\dagger)^\dagger = f$;

b) $(fg)^\dagger = g^\dagger f^\dagger$;

c) $[f, gh] = g[f, h] + [f, g]h$, $[fg, h] = f[g, h] + [f, h]g$;

d) x è un operatore hermitiano;

e) $-i\frac{\partial}{\partial x}$ è un operatore hermitiano;

f) Se f e g sono hermitiani, lo sono anche $fg + gf$ e $i[f, g]$;

g) Le seguenti matrici sono hermitiane:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

mentre $\sigma_1\sigma_2$ è antihermitiana.

h) Per tre operatori qualsiasi \hat{f} , \hat{g} , \hat{h} vale l’identità di Jacobi:

$$[[\hat{f}, \hat{g}], \hat{h}] + [[\hat{g}, \hat{h}], \hat{f}] + [[\hat{h}, \hat{f}], \hat{g}] = 0$$

- i) Si ricavi il passaggio dalle parentesi di Poisson classiche a quelle quantistiche (commutatori tra operatori) assumendo che le loro proprietà siano le stesse. Si usi in particolare la proprietà:

$$\{f, gh\} = g\{f, h\} + \{f, g\}h$$

e si assuma che la parentesi di Poisson quantistica di grandezze hermitiane sia hermitiana e che le dimensioni fisiche delle parentesi di Poisson siano le stesse nel caso classico e in quello quantistico.

- j) Se A è un operatore qualsiasi $A^\dagger A$ ha autovalori non negativi.

2. Verificare le proprietà della funzione $\delta(x)$, (2.121).

3. Si trovino le espressioni esplicite dei seguenti operatori:

$$\left(\frac{d}{dx} + x\right)^2 \quad ; \quad \left(\frac{d}{dx} + \frac{1}{x}\right)^3 \quad ; \quad \left(x\frac{d}{dx}\right)^2$$

$$\left(\frac{d}{dx}x\right)^2 \quad ; \quad [i\hbar\nabla + A(r)]^2 \quad ; \quad (L - M)(L + M)$$

4. Si trovino le regole di commutazione dei seguenti operatori:

$$x, \frac{d}{dx} \quad ; \quad i\hbar\nabla, A(r) \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial\varphi}, f(r, \theta, \varphi)$$

5. Si trovi l'hermitiano coniugato degli operatori:

$$\frac{\partial}{\partial x} \quad ; \quad \frac{\partial^n}{\partial x^n}$$

6. Dati due operatori L ed M che soddisfano $[L, M] = 1$ si calcolino:

$$[L, M^2] \quad ; \quad [f(L), M].$$

7. Dati due operatori A e B che non commutano, con A invertibile, provare che:

a) $A^{-1}B^2A = (A^{-1}BA)^2$;

b) $A^{-1}B^nA = (A^{-1}BA)^n$;

c) $A^{-1}f(B)A = f(A^{-1}BA)$.

8. Siano c un numero e ζ un parametro. Dimostrare che:

$$[A, B] = c \quad \text{implica} \quad e^{\zeta A} B e^{-\zeta A} = B + C\zeta$$

9. Trovare le autofunzioni e gli autovalori dei seguenti operatori:

$$\frac{d}{dx} \quad ; \quad i\frac{d}{dx} \quad ; \quad x + \frac{d}{dx} \quad ; \quad \frac{d}{d\varphi} \quad ; \quad \sin \frac{d}{d\varphi}$$

$$\cos \frac{d}{d\varphi} \quad ; \quad e^{ia\frac{d}{d\varphi}} \quad ; \quad \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}$$

(Suggerimento per l'ultimo: fate agire l'operatore su $\frac{f(x)}{x}$ e studiate l'equazione per $f(x)$.)

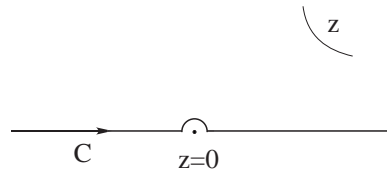


Figura 2.3:

2.1.12 Complemento: Integrale nel piano complesso e teorema di residuo

L'integrale

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\sin z}{z}$$

nella (2.128) può essere valutato facilmente col metodo di integrale nel piano complesso. Poiché l'integrando è analitico (olomorfo) attorno a $z = 0$, si può modificare il cammino dell'integrazione, sostituendo un segmento di retta attorno all'origine con un semicerchio, per evitare $z = 0$. (Fig. 2.3)

$$I = \int_C dz \frac{\sin z}{z} = \int_C dz \left[\frac{e^{iz}}{2iz} - \frac{e^{-iz}}{2iz} \right],$$

Ora che il cammino non passa a $z = 0$ si può spezzare l'integrale,

$$I = I_1 + I_2, \quad I_1 = \int_C dz \frac{e^{iz}}{2iz}, \quad I_2 = - \int_C dz \frac{e^{-iz}}{2iz},$$

e in ciascuno di $I_i, i = 1, 2$, aggiungiamo un semicerchio di raggio $R (R \rightarrow \infty)$, nel semipiano superiore in I_1 e nel semipiano inferiore per I_2 (vedi le figure),

$$I_1 = \int_{C_1} dz \frac{e^{iz}}{2iz}, \quad I_2 = - \int_{C_2} dz \frac{e^{-iz}}{2iz}.$$

Tale scelta è dettata dalla convergenza degli integrali a $|z| \rightarrow \infty$. Il contributo da semicerchi grandi è trascurabile, per cui tale modifica non cambia il valore degli integrali. Secondo il teorema del residuo (teorema di Cauchy), il primo integrale è zero, il secondo è uguale a $(-2\pi i)$ volte il residuo a $z = 0$: perciò $I_1 = 0, I_2 = \pi, I = I_1 + I_2 = \pi$.



2.2 Equazione di Schrödinger: Proprietà Generali

In questo capitolo le proprietà generali dell'equazione di Schrödinger sono discusse e saranno illustrate con alcuni sistemi uni-dimensionali.

2.2.1 Proprietà generali dell'Equazione di Schrödinger; Teorema di Ehrenfest; Densità e corrente di probabilità

Consideriamo una particella in tre dimensioni. L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo

$$H\psi = E\psi, \quad (2.157)$$

dove

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (2.158)$$

è un'equazione differenziale del secondo grado. Di conseguenza la sua soluzione richiede un'opportuna condizione al contorno sul valore della funzione d'onda e delle sue derivate prime. In accordo con la sua interpretazione, richiederemo che la funzione d'onda sia continua e monodroma, dappertutto. Imporrò tale continuità anche dove il potenziale V risulta discontinuo, ma finito.

La condizione di continuità sulla derivata prima al punto \mathbf{r}_0 segue dall'equazione di Schrödinger (scriviamo in una dimensione per semplicità, a x vicino a x_0)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = (E - V(x))\psi(x). \quad (2.159)$$

Integrando infatti i due membri nell'intervallo $[x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon]$, si ha

$$\psi'(x_0 + \varepsilon) - \psi'(x_0 - \varepsilon) \simeq 2\varepsilon \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x_0))\psi(x_0) \rightarrow 0, \quad (2.160)$$

se il potenziale è finito a $x = x_0$. Segue che la derivata prima della funzione d'onda è continua, dappertutto nella regione dove il potenziale è finito. (Vedi la sezione 2.2.8 sulla condizione di continuazione in presenza di potenziale di tipo $\delta(x - x_0)$.)

Dalla proprietà

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle \geq 0, \quad (2.161)$$

valida per qualsiasi operatore di forma $A^\dagger A$, segue immediatamente che gli autovalori di energia E_n soddisfano

$$E_n > V_{min}, \quad (2.162)$$

dove V_{min} è il minimo del potenziale.

Supponiamo che $V(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ a $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$, ma che il potenziale possa essere negativo a \mathbf{r} finito. Risulta che tutti gli stati con $E < 0$ corrispondono a livelli discreti, i.e., a stati legati.

La funzione d'onda non si annulla necessariamente nelle regioni classicamente proibite, i.e., dove $E < V(\mathbf{r})$. Il valore di ψ è determinato dall'equazione di Schrödinger e dalle opportune condizioni al contorno. Una conseguenza di questo fatto è che le particelle possano infatti penetrare, con probabilità finita, le barriere di potenziale che sono insormontabili dal punto di vista classico (conservazione dell'energia). Questi fenomeni (*effetto tunnel*), tra i più importanti che caratterizzano la Meccanica Quantistica, saranno discussi in più occasioni in seguito.

Teorema di Ehrenfest

Consideriamo il moto di un pacchetto d'onda. L'Hamiltoniana è la (2.158). Dimostriamo che:

I valor medi degli operatori della posizione \mathbf{r} , dell'impulso \mathbf{p} e del potenziale $V(\mathbf{r})$ soddisfano alle relazioni "classiche":

$$\frac{d}{dt}\langle m\mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{p} \rangle; \quad \frac{d}{dt}\langle \mathbf{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle. \quad (2.163)$$

Dimostrazione: per un operatore generico indipendente dal tempo, vale (vedi Sec.2.1)

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle O \rangle = \langle [O, H] \rangle. \quad (2.164)$$

Per $O = m\mathbf{r}$ il commutatore è

$$[m\mathbf{r}, H] = [m\mathbf{r}, \frac{\mathbf{p}^2}{2m}] = i\hbar \mathbf{p}, \quad (2.165)$$

dove abbiamo usato i commutatori, $[x, p_x^2] = 2p_x[x, p_x] = 2i\hbar p_x$, ecc, nonché il fatto che \mathbf{r} e $V(\mathbf{r})$ commutano. Per $O = \mathbf{p}$, invece, il commutatore $[O, H]$ è uguale a

$$[\mathbf{p}, V(\mathbf{r})] = -i\hbar \nabla V. \quad (2.166)$$



Ricapitolando, un pacchetto d'onda si muove secondo l'equazione di Newton, fatto che appare giustificare l'identificazione di tale pacchetto con la distribuzione materiale di una particella classica (Born). Tale identificazione è errata. Una funzione d'onda rappresenta la distribuzione di *probabilità*. Si noti che un "frammento" dell'elettrone non è stato mai osservato, la carica elettrica dell'elettrone è sempre e , mentre un pacchetto d'onda si può facilmente spezzare in due, se lo mandiamo contro una barriera.

Densità di corrente; Equazione di continuità

$|\psi(\mathbf{r})|^2 \equiv \rho$ rappresenta la densità (di probabilità) della particella. Un'altra quantità importante che ha una interpretazione fisica diretta è la densità di corrente o di flusso (di probabilità), \mathbf{j} .

Facendo uso dell'equazione di Schrödinger, si ha

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}|\psi|^2 &= (\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi + (\frac{\partial}{\partial t} \psi^*) \psi) = \frac{1}{i\hbar} (\psi^* H \psi - (H^* \psi^*) \psi) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\psi^* (-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi) - (-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi^*) \psi] \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\nabla \cdot \{\psi^* (-\frac{\hbar^2 \nabla}{2m} \psi)\} + \nabla \cdot \{(\frac{\hbar^2 \nabla}{2m} \psi^*) \psi\}] \\ &= -\nabla \cdot \mathbf{j} \end{aligned} \quad (2.167)$$

dove

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \{ (\nabla \psi^*) \psi - \psi^* \nabla \psi \}, \quad (2.168)$$

i.e.,

$$\frac{d}{dt} \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0: \quad (2.169)$$

equazione di continuità. Se prendiamo un volume finito V nello spazio, si ha

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3\mathbf{r} |\psi|^2 = - \oint_{\partial V} dS \mathbf{n} \cdot \mathbf{j}, \quad (2.170)$$

(il teorema di Gauss). Queste relazioni permettono di interpretare \mathbf{j} come densità di corrente (di probabilità), le (2.169) e (2.170) come espressione della conservazione della probabilità.

Per una particella libera, rappresentata da un'onda piana (autostato dell'impulso),

$$\psi_{\mathbf{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}, \quad (2.171)$$

si ha

$$\mathbf{j} = \frac{\mathbf{p}}{m} = \mathbf{v} : \quad (2.172)$$

uguale alla velocità classica. La funzione d'onda che rappresenta un flusso unitario (in media una particella attraverso una superficie unitaria in un intervallo unitario di tempo) è allora data da $\psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}$.

Esercizio: Dimostrare che per una particella in un campo magnetico esterno $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$,

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2m} \left[\psi^* \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \psi - \left\{ \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right\}^* \psi \right]. \quad (2.173)$$

Dimostrare che esso è invariante di gauge, se la funzione d'onda si trasforma in modo opportuno.

Teorema del Viriale

Il teorema del Viriale (1.74) in meccanica classica riguarda una media temporale dei termini cinetici e termini di potenziale. È interessante che esiste un teorema analogo in meccanica quantistica, che concerne le medie quantistiche dei vari termini dell'Hamiltoniana. Per dimostrarlo, basta considerare il valor medio del commutatore

$$[px + xp, H] = [px + xp, \frac{p^2}{2m} + V(x)] = 2(i\hbar) [2 \frac{p^2}{2m} - xV']$$

(per semplicità di scrittura consideriamo il caso unidimensionale) in uno stato stazionario, ψ_n . Il primo membro si annulla:

$$\langle \psi_n | [px + xp, H] | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | (px + xp) | \psi_n \rangle E_n - E_n \langle \psi_n | (px + xp) | \psi_n \rangle = 0,$$

dove abbiamo utilizzato la proprietà di un operatore Hermitiano H , che agisce a sinistra e a destra ugualmente. Segue il teorema,

$$2 \langle \psi_n | \frac{p^2}{2m} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | xV' | \psi_n \rangle. \quad (2.174)$$

La generalizzazione del teorema ai sistemi tridimensionali è immediata:

$$2 \langle \psi_n | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \mathbf{r} \cdot \nabla V | \psi_n \rangle. \quad (2.175)$$

(cfr. (1.74)).

Teorema di Feynman-Hellman

In molti problemi ci sono uno o più parametri esterni; chiamiamolo g genericamente. Gli autovalori di energia $E_n(g)$ è una funzione di essi. Esiste un semplice teorema

$$\frac{\partial E_n}{\partial g} = \left\langle \frac{\partial V}{\partial g} \right\rangle_n, \quad (2.176)$$

valido se il parametro g appare solo nel potenziale. (*Dimostratelo*).

Tale teorema resta valido anche nel caso in cui il parametro esterno g varia lentamente col tempo, e dà la variazione adiabatica dei livelli di energia col tempo.

2.2.2 Equazione di Schrödinger in una dimensione

L'equazione di Schrödinger per una particella che si muove in una dimensione è

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (2.177)$$

Lo studio dell'eq.(2.177) è importante come laboratorio teorico per studiare varie situazioni fisiche che possono sorgere e per imparare il funzionamento della Meccanica Quantistica. Tuttavia, l'interesse in (2.177) è tutt'altro che accademico. Infatti, un problema dinamico tri-dimensionale si riduce effettivamente a quello uni-dimensionale, nel caso in cui il potenziale ha una particolare forma,

$$V = V(x, y, z) : \quad (2.178)$$

se il potenziale dipende solo da x . La sostituzione $\psi(x, y, z) = \psi(x)\phi(y)\eta(z)$ in (2.158) infatti dà luogo a una equazione

$$\frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x)}{\psi(x)} + \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \phi(y)}{\phi(y)} + \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \eta(z)}{\eta(z)} = E. \quad (2.179)$$

I tre termini del primo membro, ciascuno dipendente solo da una delle variabili, devono essere costanti. L'equazione è risolta in termini di soluzioni di

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x) &= E_1 \psi(x); \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \phi(y) &= E_2 \phi(y); \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \eta(z) &= E_3 \eta(z); \\ E &= E_1 + E_2 + E_3, \end{aligned} \quad (2.180)$$

di cui la prima è proprio la (2.177) (le altre sono equazioni di Schrödinger libere).

L'equazione di Schrödinger tridimensionale si riduce, anche nei casi di potenziale a simmetria centrale,

$$V = V(r), \quad (2.181)$$

(vedi Cap.4.1.1)

Esempi

- Per una particella libera, $V(x) = 0$, l'eq. di Schrödinger è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E\psi, \quad (2.182)$$

oppure

$$\psi'' = -k^2 \psi, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}; \quad (2.183)$$

gli autostati dell'energia sono

$$e^{\pm ikx}, \quad (2.184)$$

o una combinazione lineare qualsiasi di questi due

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (2.185)$$

con $k \geq 0$ arbitrario. La soluzione dipendente dal tempo è

$$\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}), \quad E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}. \quad (2.186)$$

Lo spettro di energia (l'intervallo degli autovalori permessi) è $E \geq 0$ in questo caso; per $E < 0$ la soluzione è $\psi \propto \exp \pm |k|x$ ed è non normalizzabile. Ogni livello con energia positiva è doppiamente degenere.

- Una particella libera che si muove su un anello (lungo il bordo di un cerchio). La soluzione è come sopra (2.184), tranne che la funzione d'onda deve soddisfare la condizione $\psi(x+L) = \psi(x)$ per essere ben definita. I valori permessi di k sono quindi $k = 2\pi n/L$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, e lo spettro è discreto in questo caso

$$E_n = \frac{(2\pi n)^2 \hbar^2}{2mL^2}; \quad (2.187)$$

ogni livello energetico positivo è doppiamente degenere mentre lo stato fondamentale con $E = 0$ è singolo. Vedi il sottocapitolo 2.2.7 per una discussione più approfondita del sistema.

L'equazione di Schrödinger in una dimensione ha varie proprietà speciali. Una di queste è il seguente teorema: *In un problema uni-dimensionale, non esistono degenerazioni dei livelli discreti. In altre parole, ad ogni autovalore E_n discreto corrisponde uno e soltanto un autostato ψ_n .*

Dimostrazione: supponiamo, per assurdo, che ci siano due soluzioni normalizzabili ψ_1 e ψ_2 dell'Eq.(2.177) con lo stesso autovalore E , i.e.,

$$\psi_1'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi_1, \quad \psi_2'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi_2. \quad (2.188)$$

Moltiplicando la prima e la seconda equazione con ψ_2 , ψ_1 rispettivamente, e sottraendo termine per termine, si ottiene

$$\psi_1''\psi_2 - \psi_2''\psi_1 = 0. \quad (2.189)$$

Integrando quest'ultimo,

$$\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x) = \text{cost.} \quad (2.190)$$

Ma $\psi_1 = \psi_2 = 0$ a $x = \pm\infty$, essendo ambedue normalizzabili (stati discreti), perciò $\text{cost.} = 0$ sopra:

$$\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x) = 0. \quad (2.191)$$

Integrando ancora,

$$\log \psi_1 = \log \psi_2 + \text{cost.}, \quad \psi_1 = \text{cost.} \psi_2 : \quad (2.192)$$

dovremmo dunque concludere che le due funzioni d'onda in realtà rappresentano lo stesso stato, al contrario all'ipotesi fatta. ♠

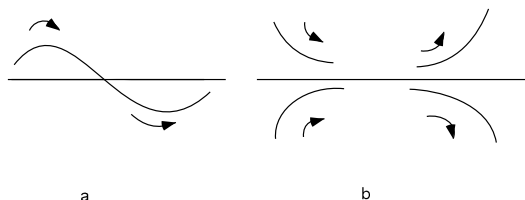


Figura 2.4: Andamento generale della funzione d'onda. Fig.a rappresenta la situazione per $E > V(x)$; Fig.b quella per $E < V(x)$

Poiché l'Hamiltoniana è Hermitiana, $V(x)$ e E sono reali. L'equazione di Schrödinger (2.177) ha i coefficienti reali. Di conseguenza, la funzione d'onda può essere scelta reale. L'andamento generale della funzione d'onda può essere dedotto da:

$$\psi'' = \frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} \psi. \quad (2.193)$$

Nell'intervallo dove $E > V(x)$ (regione classicamente accessibile),

$$\begin{cases} \psi'' > 0 & \text{se } \psi < 0, \\ \psi'' < 0 & \text{se } \psi > 0, \end{cases} \quad (2.194)$$

i.e., un andamento oscillatorio. Nell'intervallo di x dove $E < V(x)$ (regione classicamente proibita) abbiamo una situazione opposta

$$\begin{cases} \psi'' > 0 & \text{se } \psi > 0, \\ \psi'' < 0 & \text{se } \psi < 0, \end{cases} \quad (2.195)$$

un andamento instabile. In ambedue i casi, la curvatura $|\psi''|$ cresce con $|E - V(x)|$. La situazione è illustrata in Fig.2.4.

Tenendo conto di queste proprietà non è difficile dimostrare il **teorema di oscillazione**: *La funzione d'onda dell' n -simo livello discreto di energia ha $n - 1$ nodi (zeri).*

Dimostrazione. Supponiamo che $V(x) \rightarrow \infty$ a $x \rightarrow \pm\infty$, di modo che il sistema abbia solo livelli discreti. L'eq.(2.193) ha due soluzioni (normalizzabili o no) generali. Nella ricerca di funzione d'onda normalizzabile, basta scegliere una soluzione ψ che tende a zero a $x = -\infty$. Senza perdita di generalità si può assumere che ψ sia positivo a $x < 0$ e $|x|$ molto grande. La normalizzazione di ψ può essere fissata di modo che $\psi(x_1) = 1$ dove x_1 è un punto scelto in maniera opportuna. Partiamo con un valore di energia, $E < V_{min}$ e studiamo come cambia la situazione al crescere di E .

- (I) $E < V(x)$, $\forall x$. ψ è concavo ($\psi'' > 0$) dappertutto, ψ continua ad aumentare come funzione di x : ψ diverge inevitabilmente a $x \rightarrow \infty$. Segue che non ci sono autovalori al di sotto di V_{min} . (Questo "teorema" è già stato dimostrato prima).
- (II) E è appena maggiore di V_{min} , $E_1 > E > V_{min}$. Supponiamo che $E > V(x)$ per $x_1 < x < x_2$ e $E < V(x)$ altrimenti. ψ aumenta da zero (a $x = -\infty$) fino a $x = x_1$, dove $\psi(x_1) = 1$; tra x_1 e x_2 , ψ è convesso; a $x > x_2$ ψ è di nuovo concavo ($\psi'' > 0$). È ovvio, per continuità, che fino a un certo valore di E (appunto, E_1) ψ continua a divergere a $x = \infty$, e rimane non normalizzabile. (Fig.2.5)
- (III) $E = E_1$. All'aumentare di E , l'intervallo x_1, x_2 dove ψ è convessa si allarga e la curvatura per x fissato aumenta. Per continuità ci deve essere un primo valore di E , E_1 , per il quale ψ tende esattamente a zero a $x = \infty$. La funzione d'onda è allora normalizzabile: il sistema è nello stato fondamentale. (Fig.2.6) ψ non ha nodi.
- (IV) $E_1 < E < E_2$. Quando E è appena al di sopra di E_1 , la funzione d'onda si annulla ad un valore di x finito, e diverge come $\psi \rightarrow -\infty$ a $x \rightarrow \infty$. (Fig.2.7). Si noti che $\psi'' = 0$ dove $\psi = 0$, per cui non è possibile che ψ ritorni su dopo aver toccato zero.
- (V) $E = E_2$. Al crescere di E , la regione classicamente accessibile (dove la funzione d'onda oscilla) diventa sempre più grande. Per $E = E_2$ la funzione d'onda tende esattamente a zero a $x = \infty$. La funzione d'onda ora ha un nodo. (Fig.2.8)
- (VI) Ripetendo l'argomentazione aumentando sempre l'energia, si dimostra che l' n -simo stato stazionario ha esattamente $n - 1$ nodi.



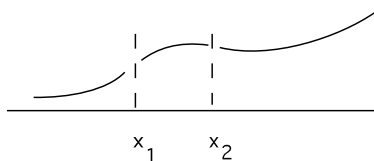


Fig. a

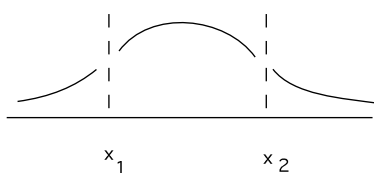
Figura 2.5: Andamento della funzione d'onda per $V_{min} < E < E_1$ 

Fig. b

Figura 2.6: Andamento della funzione d'onda per $E = E_1$ (Stato fondamentale)

2.2.3 Buche di potenziale

Buca infinitamente alta

Consideriamo come primo esempio non banale di potenziale con stati legati, la buca di potenziale di profondità infinita,

$$\begin{aligned} V(x) &= 0, & 0 < x < a, & \text{ II;} \\ V(x) &= \infty, & x \leq 0 \text{ I}; & x \geq a \text{ III} \end{aligned} \quad (2.196)$$

La soluzione negli intervalli I e III è

$$\psi = 0. \quad (2.197)$$

Nell'intervallo II, l'equazione di Schrödinger è quella libera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi: \quad (2.198)$$

con la soluzione generale

$$\psi = A \sin(kx + \delta). \quad (2.199)$$

La condizione di continuità a $x = 0$ impone che

$$A \sin \delta = 0, \quad \rightarrow \quad \sin \delta = 0; \quad (2.200)$$

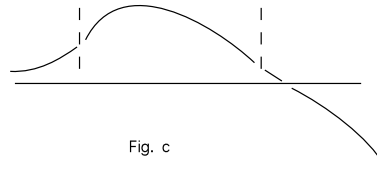
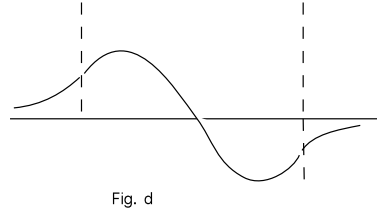
mentre quella a $x = a$ dà

$$\psi = A \sin(ka + \delta) = 0, \quad \rightarrow \quad \sin(ka + \delta) = 0. \quad (2.201)$$

La prima condizione si risolve con $\delta = 0$ (la scelta $\delta = \pi$ essendo equivalente a $A \rightarrow -A$.)

La seconda dà allora la quantizzazione

$$ka = n\pi, \quad E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.202)$$

Figura 2.7: Andamento della funzione d'onda per $E_1 < E < E_2$ Figura 2.8: Andamento della funzione d'onda per $E = E_2$ (Il primo stato eccitato)

La funzione d'onda dell' n simo stato (normalizzata) è

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right). \quad (2.203)$$

Esercizio Una particella si muove in tre dimensioni, confinata in un potenziale

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= 0, & 0 < x < a, & 0 < y < b, & 0 < z < c; \\ V(\mathbf{r}) &= \infty, & \text{altrimenti.} \end{aligned} \quad (2.204)$$

Trovare gli autosati e gli autovalori dell'energia. Discutere la degenerazione dei livelli energetici in generale, e nel caso di una scatola isotropa, $a = b = c$, in particolare.

Buca di potenziale di altezza finita

Consideriamo ora il caso di un potenziale di altezza finita

$$\begin{aligned} V(x) &= 0, & 0 < x < a, & \text{II;} \\ V(x) &= V_0, & x \leq 0 & \text{I;} & x \geq a & \text{III} \end{aligned} \quad (2.205)$$

e cerchiamo le soluzioni di tipo stati legati, con $0 < E < V_0$. La soluzione in II è come prima:

$$\psi_{II} = A \sin(kx + \delta); \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (2.206)$$

Nelle regioni I e III, l'equazione di Schrödinger prende la forma:

$$\psi'' = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi = \kappa^2 \psi; \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0. \quad (2.207)$$

I numeri d'onda k e κ non sono indipendenti:

$$k^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}. \quad (2.208)$$

La soluzione di (2.207) è $\exp \pm \kappa x$: la condizione di normalizzazione implica che va fatta la scelta:

$$\begin{aligned}\psi_I &= B e^{\kappa x}; \\ \psi_{III} &= C e^{-\kappa x},\end{aligned}\quad (2.209)$$

nelle regioni I e III, di modo che la funzione d'onda tende a zero sia a $x = -\infty$ che a $x = \infty$.

La funzione d'onda e la sua derivata prima devono essere continue attraverso i confini delle diverse regioni, I, II, e III. A $x = 0$ si deve imporre dunque $\psi_I = \psi_{II}$; $\psi_I' = \psi_{II}'$:

$$B = A \sin \delta; \quad B\kappa = Ak \cos \delta, \quad \rightarrow \quad \tan \delta = \frac{k}{\kappa} > 0. \quad (2.210)$$

Si può prendere, senza perdita di generalità, δ nel primo quadrante,

$$0 \leq \delta \leq \pi/2; \quad (2.211)$$

da (2.210) si trova

$$\sin \delta = \frac{\tan \delta}{\sqrt{1 + \tan^2 \delta}} = \frac{k}{\sqrt{k^2 + \kappa^2}} = \frac{k\hbar}{\sqrt{2mV_0}} < 1. \quad (2.212)$$

La condizione di continuità tra II e III è:

$$C e^{-\kappa a} = A \sin(ka + \delta); \quad -C\kappa e^{-\kappa a} = Ak \cos(ka + \delta), \quad (2.213)$$

cioè

$$-\kappa = k \cot(ka + \delta), \quad \rightarrow \quad \tan(ka + \delta) = -\frac{k}{\kappa} < 0. \quad (2.214)$$

Secondo questa condizione l'angolo $ka + \delta$ è o nel secondo o nel quarto quadrante. Segue che

$$\sin(ka + \delta) = \pm \frac{\tan(ka + \delta)}{\sqrt{1 + \tan^2(ka + \delta)}} = \pm \sin \delta: \quad (2.215)$$

o semplicemente

$$ka + \delta = \begin{cases} -\delta + 2n\pi, & (n = 1, 2, \dots) \\ -\delta + (2n + 1)\pi, & (n = 0, 1, 2, \dots) \end{cases} \quad \text{oppure,} \quad (2.216)$$

Ma poiché δ soddisfa (2.212), si ottengono le equazioni implicite

$$ka = -2 \sin^{-1} \frac{k\hbar}{\sqrt{2mV_0}} + n\pi, \quad (n = 1, 2, 3, \dots): \quad (2.217)$$

queste danno (implicitamente) gli autovalori dell'energia.

La (2.217) può essere risolta graficamente. Da (2.215) si trova

$$\frac{\kappa}{k} \sin ka + \cos ka = \pm 1. \quad (2.218)$$

Ponendo

$$ka/2 \equiv \xi; \quad \kappa a/2 \equiv \eta, \quad (\xi, \eta > 0). \quad (2.219)$$

ξ, η soddisfano

$$\xi \tan \xi = \eta, \quad (A), \quad (2.220)$$

oppure

$$\xi \cot \xi = -\eta, \quad (B) \quad (2.221)$$

e allo stesso tempo

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{ma^2V_0}{2\hbar^2} \quad (2.222)$$

(vedi l'eq.(2.208)). I punti di intersezione tra le due curve (2.220) e (2.222), e quelli tra (2.221) e (2.222), nel quarto del piano $\xi > 0, \eta > 0$, corrispondono agli autovalori dell'energia.

Tali soluzioni sono facilmente visualizzate nel piano $\xi - \eta$: (2.220) e (2.221) rappresentano i vari rami delle curve $\eta = \xi \tan \xi$ e $\eta = -\xi \cot \xi$ mentre (2.222) rappresenta un cerchio di raggio $\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}}$ col centro all'origine. (Fig.2.9). Non è difficile vedere allora che il numero degli stati legati è n per $\frac{(n-1)\pi}{2} < \sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} \leq \frac{n\pi}{2}$.

- (i) $0 < \sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} \leq \frac{\pi}{2}$: Esiste una sola intersezione tra le curve (2.220) e (2.222), e nessuna tra (2.221) e (2.222) (vedi la Nota qui sotto). Vuol dire che esiste un solo stato legato;
- (ii) $\frac{\pi}{2} < \sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} \leq \pi$. In questo intervallo ci sono due stati legati, una soluzione con $0 < ka/2 < \pi/2$ (soluzione del tipo A), un'altra soluzione con $\pi/2 \leq ka/2 < \pi$ (tipo B);
- (iii) Per $\pi < \sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} \leq \frac{3\pi}{2}$, ci sono tre livelli dell'energia, uno con $0 < ka/2 < \pi/2$ (soluzione del tipo A); uno con $\pi/2 \leq ka/2 < \pi$ (tipo B) e il terzo con $\pi \leq ka/2 < 3\pi/2$ (del tipo A); ecc.

Il numero dei nodi della funzione d'onda dell' n -simo stato di eccitazione obedisce al teorema di oscillazione $(n-1)$ come è facile da verificare. Infine, nel limite $V_0 \rightarrow \infty$, l'eq.(2.217) si riduce a $ka = n\pi$, e $\psi_I, \psi_{III} \rightarrow 0$, e ritroviamo le soluzioni per la buca 2 infinita, come ci si aspetta. Il modello illustra il fatto che, in generale, il numero di stati legati dipende dai dettagli del potenziale.

Nota

La buca con parametri esattamente corrispondenti ad uno dei valori critici

$$\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} = \frac{\pi n}{2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.223)$$

merita una particolare attenzione. Consideriamo infatti come cambia il numero di stati legati, al variare dei parametri (V_0, a, m) . Quando la combinazione $\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}}$ in aumento supera uno dei valori critici, il numero di stati legati aumenta di uno. Più precisamente, uno stato nello spettro continuo diventa normalizzabile (diventa uno stato legato), e entra nello spettro discreto. (Fig. 2.10). Ma ad esattamente a uno dei valori critici, la soluzione nuova ha l'energia zero, se misuriamo partendo da V_0 ($\eta = 0$, vedi Fig. (2.9)), e la funziona d'onda del nuovo stato nelle regioni fuori buca è costante ($\kappa = 0$ nella (2.209)), e la soluzione non è normalizzabile. Vuol dire che questi soluzioni non rappresentano stati legati, ma uno stato del continuo *che sta per diventare uno stato legato*. Soltanto per $\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}}$ strettamente maggiore di $\frac{\pi n}{2}$ il nuovo stato rappresenta un nuovo stato legato.

Esercizi:

- (i) Se $\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} = \varepsilon \ll 1$ il sistema ha un solo stato legato. Calcolare approssimativamente, al primo ordine non banale in ε , l'energia di questo stato (come funzione di V_0 e di ε .)

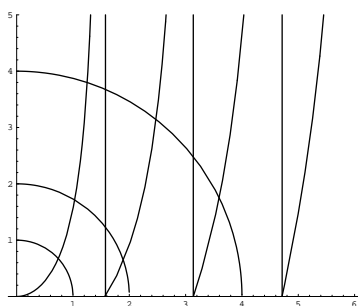


Figura 2.9: Soluzione grafica delle Eq.(2.220) e Eq.(2.222), oppure Eq.(2.221) e Eq.(2.222).

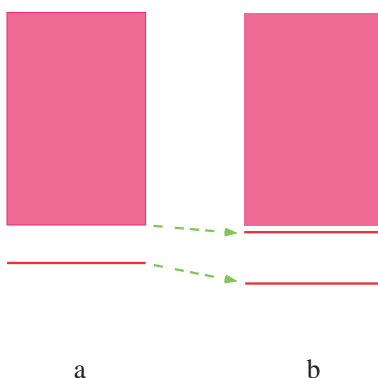


Figura 2.10: Spettro della buca finita con (a) $\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} = \frac{\pi}{2} - \epsilon$, e con (b) $\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} = \frac{\pi}{2} + \epsilon$.

- (ii) Considerare il limite $a \rightarrow 0$, $V_0 \rightarrow \infty$, con il prodotto $aV_0 \equiv f$ fisso. Usando il risultato di questo sottocapitolo, dimostrare che esiste un solo stato legato, e determinare l'energia del livello, $E - V_0$, e la funzione d'onda.
- (iii) Calcolare lo spettro discreto del sistema

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad V(x) = -f\delta(x), \quad f > 0,$$

direttamente (vedi Sec. 2.2.8) e verificare che il risultato coincide con quello del punto (ii).

- (iv) Determinare la funzione d'onda e l'energia dello stato legato (o degli stati legati) del potenziale, $V(x) = -f\delta(x+a) - f\delta(x-a)$. Quanti stati legati ha il sistema?

2.2.4 Oscillatore armonico

L'oscillatore armonico unidimensionale è descritto dall'Hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad (2.224)$$

dove m e ω sono costanti. L'equazione di Schrödinger $H\psi = E\psi$ può essere riscritto come

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi = 0. \quad (2.225)$$

Introducendo una variabile adimensionale

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \quad (2.226)$$

si ha ($\psi'' \equiv \frac{d^2}{d\xi^2}$)

$$\psi'' + (\lambda - \xi^2)\psi = 0, \quad (2.227)$$

$$\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} > 0. \quad (2.228)$$

Per grande ξ , $\psi'' \sim \xi^2\psi$, perciò il comportamento asintotico di ψ è

$$\psi \sim (\text{polinomio})e^{-\xi^2/2}. \quad (2.229)$$

Poniamo allora

$$\psi(\xi) = \chi(\xi)e^{-\xi^2/2} \quad (\text{Def. } \chi): \quad (2.230)$$

l'equazione per χ è:

$$\chi'' - 2\xi\chi' + (\lambda - 1)\chi = 0. \quad (2.231)$$

Supponiamo che una funzione rappresentata da una serie di potenze,

$$\chi(\xi) = \xi^s(a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots), \quad a_0 \neq 0; \quad s \geq 0, \quad (2.232)$$

risolva la (2.231). Allora la sostituzione di (2.232) nel primo membro di (2.231) deve dare zero identicamente: tutti i coefficienti di ξ^{s-2+n} ($n = 1, 2, \dots$) si devono annullare. Le condizioni sono:

$$\begin{aligned} s(s-1)a_0 &= 0, \\ (s+1)a_1 &= 0; \\ (s+2)(s+1)a_2 - (2s+1-\lambda)a_0 &= 0; \\ (s+3)(s+2)a_3 - (2s+3-\lambda)a_1 &= 0; \\ &\dots \dots \\ (s+\ell+2)(s+\ell+1)a_{\ell+2} - (2s+2\ell+1-\lambda)a_\ell &= 0. \end{aligned} \quad (2.233)$$

La prima di queste relazioni è soddisfatta se $s = 0$ o $s = 1$, mentre la seconda richiede o $a_1 = 0$ o $s = 0$. In altre parole la serie inizia o con un termine costante o con un termine $\propto \xi$. Consideriamo prima la sottoserie formata dai termini alternativi, con i coefficienti a_0, a_2, a_4, \dots (determinati da (2.233)). Questa serie o terminerà dopo un numero finito di termini o non terminerà. Se essa è una serie infinita (i.e., non termina), il comportamento asintotico (a grande ξ) della somma è principalmente determinato dai coefficienti a grande ℓ . Essi obbediscono alle relazioni:

$$\frac{a_{\ell+2}}{a_\ell} \xrightarrow{\ell \rightarrow \infty} \frac{2}{\ell}. \quad (2.234)$$

È facile trovare che i coefficienti sono dati da $a_{2n} \simeq \frac{1}{(n-1)!}$: la somma si comporterà come

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \xi^{2n} \simeq \xi^2 e^{\xi^2}. \quad (2.235)$$

Un tale comportamento asintotico di χ non è accettabile: esso renderebbe ψ non normalizzabile (vedi (2.230)). La serie $a_0 + a_2\xi^2 + \dots$ deve perciò terminare. Essa terminerà se il parametro λ è tale che

$$2s + 2\ell + 1 - \lambda = 0, \quad (2.236)$$

per un valore di ℓ (pari). Infatti da (2.233) segue che in tal caso $a_{\ell+2} = a_{\ell+4} = \dots = 0$, e la serie si riduce ad un polinomio.

Per quanto riguarda l'altra sottoserie con i coefficienti, a_1, a_3, \dots , essa non può terminare. (Per s fisso, la condizione $2s + 2\ell + 1 - \lambda = 0$ per ℓ dispari non è compatibile con (2.236).) Il comportamento asintotico della somma è determinato da (2.234): $a_{2n+1} \simeq 2^n / (2n-1)!!$ perciò $a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \dots \simeq \xi \exp \xi^2$. Anche questo contributo renderebbe ψ non normalizzabile e pertanto non è accettabile. L'unica possibilità è porre $a_1 = 0$, che comporta $a_3 = a_5 = \dots = 0$ via la relazione di ricorrenza.

La funzione d'onda ψ è normalizzabile dunque se e solo se la condizione (2.236) è soddisfatta per $s = 0$ o per $s = 1$. Mettendo insieme i due casi, la condizione è

$$\lambda = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.237)$$

Da (2.228) e (2.237) troviamo

$$E_n = \frac{\omega\hbar}{2}(2n + 1) = \omega\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.238)$$

il famoso risultato per i livelli dell'energia di un oscillatore lineare in meccanica quantistica.

Per trovare la funzione d'onda dell' n -simo livello dobbiamo risolvere l'equazione (sostituendo (2.237) in (2.231) e scrivendo $\chi = H_n(\xi)$):

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0, \quad (2.239)$$

nota come *equazione di Hermite*. La sua soluzione polinomiale è nota come *polinomio di Hermite*.

Digressione su polinomi di Hermite

I polinomi di Hermite $H_n(\xi)$ possono essere definiti tramite la funzione *generatrice*

$$\begin{aligned} S(\xi, s) &= e^{-s^2 + 2s\xi} = e^{\xi^2 - (s-\xi)^2} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(\xi), \end{aligned} \quad (2.240)$$

dove s è un parametro. Dalla considerazione di $\partial S / \partial \xi$:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n'(\xi) = \frac{\partial S}{\partial \xi} = 2se^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2s^{n+1}}{n!} H_n(\xi), \quad (2.241)$$

si ottiene una relazione ricorsiva

$$H_n' = 2nH_{n-1}; \quad (2.242)$$

mentre dalle due espressioni per $\partial S / \partial s$:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{s^{n-1}}{(n-1)!} H_n(\xi) = \frac{\partial S}{\partial s} = (-2s + 2\xi)e^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2s + 2\xi)s^n}{n!} H_n(\xi), \quad (2.243)$$

risulta un'altra relazione ricorsiva

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1}. \quad (2.244)$$

Prendendo una derivata (rispetto a ξ) dell'eq.(2.244) e facendo ripetuto uso di (2.242) troviamo

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0, \quad (2.245)$$

che è precisamente l'equazione di Hermite. Le espressioni esplicite di $H_n(\xi)$ si possono trovare facilmente dalla formula

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (2.246)$$

che segue dalla seconda equazione in (2.240). Calcolando le derivate troviamo:

$$\begin{aligned}
 H_0(\xi) &= 1, \\
 H_1(\xi) &= 2\xi, \\
 H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, \\
 H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, \\
 H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \\
 &\dots \quad \dots
 \end{aligned} \tag{2.247}$$

I polinomi di Hermite soddisfano alla seguente relazione di ortonormalizzazione

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) = \delta_{n,m} \sqrt{\pi} 2^n n!. \tag{2.248}$$

Per dimostrarla basta considerare l'integrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} S(\xi, s) S(\xi, t) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n! m!} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi), \tag{2.249}$$

che è uguale a

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\{\xi-(s+t)\}^2 + 2st} = \sqrt{\pi} e^{2st} = \sqrt{\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2^\ell (st)^\ell}{\ell!}. \tag{2.250}$$

Il paragone tra queste due espressioni comporta la relazione di ortonormalizzazione.



La funzione d'onda dell' n -simo livello dell'oscillatore armonico (normalizzata) è allora data da

$$\Psi_n(x) = C_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} = C_n H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}; \tag{2.251}$$

dove

$$C_n = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!}\right)^{1/2} = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}; \quad \alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{2.252}$$

Lo stato fondamentale è descritto dalla funzione d'onda Gaussiana

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}, \tag{2.253}$$

e ha l'energia

$$E_0 = \frac{1}{2} \omega \hbar, \tag{2.254}$$

nota come energia di punto zero.

È molto istruttivo osservare che l'estensione della funzione d'onda, $\Delta x \sim \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ nonché la presenza dell'energia di punto zero, possono essere dedotti a partire dalle relazioni di Heisenberg e dalla forma dell'Hamiltoniana, ma senza usare la soluzione esplicita. Infatti, supponiamo che lo stato fondamentale sia lo stato in cui il prodotto delle indeterminazioni sia minimo:

$$\Delta x \Delta p \simeq \frac{\hbar}{2}. \tag{2.255}$$

Senza perdita di generalità possiamo inoltre supporre che i valori medi di x e di p siano nulli: $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$. Le indeterminazioni di x e di p sono allora uguali a $\sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$; $\sqrt{\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$.

Prendendo il valore di aspettazione dell'Hamiltoniana, $H = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$, si avrà quindi

$$\langle H \rangle = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8(\Delta p)^2}. \tag{2.256}$$

Minimizziamo ora $\langle H \rangle$ rispetto a $(\Delta p)^2$, visto che si tratta dello stato fondamentale:

$$\frac{1}{2m} - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8(\Delta p)^4} = 0 \quad \rightarrow \quad (\Delta p)^2 \simeq \frac{1}{2} m\omega \hbar. \quad (2.257)$$

Inserzione di questo risultato in (2.256) dà la stima dell'energia dello stato fondamentale,

$$E_{st.fond} \simeq \frac{1}{2} \omega \hbar, \quad (2.258)$$

che è in accordo con il risultato esatto. L'estensione della funzione d'onda è stimata come $\Delta x \sim \hbar/\Delta p \simeq \sqrt{\hbar/m\omega}$ che è pure in accordo con (2.253).

L'energia di punto zero (chiamata alternativamente come energia del "vuoto") è così interpretata come effetto di *fluttuazione quantistica minima* compatibile con il principio di Heisenberg: una particella confinata in uno spazio finito ha un'indeterminazione dell'impulso non nulla, che equivale a una certa quantità di energia cinetica. Nei sistemi di infiniti gradi di libertà (dei solidi, sistemi quantistici relativistici, ecc.) la presenza dell'energia del vuoto causa fenomeni interessanti (e.g., *effetto Casimir*).

Esercizi: Si calcolino i valori di aspettazione (esatti) degli operatori x^2 e p^2 sullo stato fondamentale dell'oscillatore armonico, (2.253). (Risposta: $\hbar/2m\omega$ e $m\omega\hbar/2$, rispettivamente.)

Per le applicazioni in seguito troveremo molto utili avere gli *elementi di matrice* degli operatori, x , x^2 , i.e.,

$$x_{nm} = \langle n|x|m \rangle \equiv \int dx \psi_n^*(x) x \psi_m(x), \quad (x^2)_{nm} = \langle n|x^2|m \rangle \equiv \int dx \psi_n^*(x) x^2 \psi_m(x), \quad (2.259)$$

calcolati. Tali quantità possono essere calcolate con l'aiuto della funzione generatrice dei polinomi di Hermite: i risultati sono:

$$x_{nm} = \begin{cases} \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{n+1}{2}}, & \text{se } m = n + 1, \\ \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{n}{2}}, & \text{se } m = n - 1, \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (2.260)$$

$$(x^2)_{nm} = \begin{cases} \frac{1}{\alpha^2} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}, & \text{se } m = n + 2, \\ \frac{1}{\alpha^2} \sqrt{\frac{n(n-1)}{4}}, & \text{se } m = n - 2, \\ 0 & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (2.261)$$

dove

$$\alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \quad (2.262)$$

Analogamente gli elementi di matrice dell'operatore dell'impulso p sono:

$$p_{mn} = \langle m|p|n \rangle = -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\delta_{m,n-1} \sqrt{n} - \delta_{m,n+1} \sqrt{n+1}). \quad (2.263)$$

Osservazione

Lo spettro di energia dell'oscillatore armonico, $\omega\hbar(n+1/2)$, è discreto e equispaziato, e a parte l'energia di punto zero, $\omega\hbar/2$, assomiglia alla formula per l'energia di n particelle (ciascuno con massa $\omega\hbar$) non interagenti a riposo. Questa analogia è di importanza fondamentale: esiste infatti un formalismo che discuteremo in seguito, che mette questo aspetto in risalto - formalismo di operatori di creazione e di annichilazione. L'intera teoria quantistica dei sistemi di infiniti gradi di libertà (fisica dei solidi, fisica delle particelle

elementari, teoria quantistica dei campi) è basata su tale formalismo, detto *seconda quantizzazione*. In meccanica quantistica non ci sono differenze essenziali tra la massa di una particella “elementare, e l’energia di stati composti.

Esercizio Plottare la funzione d’onda dell’ n -simo livello, con la **Mathematica**. Risposta: il comando

$$\Psi[n_-, x_-] := \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^n n!}} \text{HermiteH}[n, x] e^{-x^2/2}, \quad (2.264)$$

che definisce la funzione d’onda; il comando

$$\text{Plot}[\Psi[10, x], \{x, -11, 11\}] \quad (2.265)$$

plotta la funzione d’onda del livello $n = 10$, nella regione $-11 \leq x \leq 11$.

2.2.5 Operatori di creazione e di distruzione

L’oscillatore armonico ammette soluzione con un’altro formalismo molto elegante, che è la base del metodo di seconda quantizzazione. Introduciamo

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} p; \quad (2.266)$$

e il suo coniugato hermitiano

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} p, \quad (2.267)$$

detti rispettivamente *operatore di distruzione* e *operatore di creazione*. L’inverso della trasformazione è

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger); \quad p = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a - a^\dagger). \quad (2.268)$$

Segue dal commutatore tra x e p che a, a^\dagger soddisfano alla relazione

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (2.269)$$

L’Hamiltoniana dell’oscillatore armonico è uguale a

$$H = \frac{\omega\hbar}{2} (aa^\dagger + a^\dagger a) = \omega\hbar (a^\dagger a + \frac{1}{2}), \quad (2.270)$$

dove è stato usato il commutatore (2.269). Usando i noti elementi di matrice degli operatori x e p si trova che gli unici elementi di matrice non nulli di a e a^\dagger sono ($n = 0, 1, 2, \dots$):

$$\langle n-1 | a | n \rangle = \sqrt{n}; \quad \langle n+1 | a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1}. \quad (2.271)$$

O equivalentemente,

$$a | n \rangle = \sqrt{n} | n-1 \rangle, \quad a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle. \quad (2.272)$$

Segue allora che

$$a^\dagger a | n \rangle = n | n \rangle : \quad (2.273)$$

l’operatore $\mathcal{N} \equiv a^\dagger a$ è chiamato *operatore del numero di occupazione* o semplicemente come operatore del numero. Infine, l’Hamiltoniana e il suo autovalore sono ovviamente

$$H | n \rangle = \omega\hbar (\mathcal{N} + \frac{1}{2}) | n \rangle = \omega\hbar (n + \frac{1}{2}) | n \rangle, \quad (2.274)$$

risultato già trovato risolvendo l'equazione di Schrödinger.

L' n -simo autostato di energia di oscillatore armonico $|n\rangle$ è interpretato - questo è il linguaggio del formalismo di seconda quantizzazione - come stato di n "fononi. Lo stato fondamentale è il "vuoto" senza fononi (ma con l'energia $\omega\hbar/2$ di "punto zero); l'operatore a^\dagger crea un fonone, l'operatore a ne distrugge uno. L'operatore $\mathcal{N} \equiv a^\dagger a$ "conta il numero dei fononi nello stato sul quale agisce. In questo sistema esiste un solo tipo di fonone con l'energia $\omega\hbar$. Qualsiasi elemento di matrice di tipo $\langle n|F(x,p)|m\rangle$ dove $F(x,p)$ è un polinomio di x e di p , può essere trovato con facilità dagli elementi di matrice di a e a^\dagger .

Infatti gli autovalori e gli autostati di H possono essere trovati caso direttamente da (2.270) e (2.269), senza mai parlare dei polinomi di Hermite, ecc., in modo assiomatico. Prima di tutto si deve assumere l'esistenza di uno stato di minima energia (lo stato fondamentale), $|0\rangle$. Per definizione tale stato (normalizzato) è annichilato da a :

$$a|0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1. \quad (2.275)$$

Agendo l'operatore a^\dagger iterativamente su questo stato, possiamo definire lo stato con n fononi, definito come

$$|n\rangle \equiv \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.276)$$

dove la costante davanti è introdotta di modo che

$$\langle n|n\rangle = 1. \quad (2.277)$$

Facendo uso del commutatore

$$[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1} \quad (2.278)$$

e della (2.275) ripetutamente, si può verificare la prima della (2.272), (la seconda della (2.272) è ovvia), la (2.273), e infine la (2.274), il che equivale alla soluzione del problema.

Esercizio:

Si verifichi la (2.277). Si verifichi che la funzione d'onda $\psi(x) \equiv \langle x|0\rangle$ coincide con la (2.253).

Stati coerenti

Un'importante applicazione dell'uso del formalismo con operatori a e a^\dagger riguarda i cosiddetti *stati coerenti*. Gli stati coerenti sono gli stati in cui il prodotto di indeterminazione di x e di p nella relazione di Heisenberg (vedi Sez. 2.1.6) prende il minimo valore possibile, $\hbar/2$: essi descrivono i "pacchetti d'onda i più compatti possibili, e in un senso i più classici.

Gli stati coerenti possono essere convenientemente definiti come autostati dell'operatore di distruzione, a ,

$$a|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle, \quad (2.279)$$

dove β è un numero complesso. Per costruire lo stato $|\beta\rangle$, introduciamo un operatore unitario,

$$U(\beta) = e^{\beta a^\dagger - \beta^* a}, \quad (2.280)$$

con β un numero complesso arbitrario. Allora

$$|\beta\rangle = U(\beta)|0\rangle, \quad (2.281)$$

dove $|0\rangle$ è lo stato fondamentale (2.275) nella base di numero di occupazione. Infatti, poiché

$$aU(\beta) = U(\beta)(a + \beta) \quad (2.282)$$

(Esercizio: verificatelo), la dimostrazione della (2.279) è immediata.

Un'identità molto utile per studiare gli stati coerenti è la formula di Baker-Campbell-Hausdorff-Weyl,

$$e^X e^Y = e^{X+Y + \frac{1}{2}[X,Y]}, \quad (2.283)$$

valida se $[X, Y]$ è un c-numero (i.e., se esso commuta con tutti gli operatori). Per esempio,

$$U(\beta) = e^{-|\beta|^2/2} e^{\beta a^\dagger} e^{-\beta^* a}. \quad (2.284)$$

Si ha dunque

$$|\beta\rangle = e^{-|\beta|^2/2} e^{\beta a^\dagger} |0\rangle. \quad (2.285)$$

Sviluppando l'esponenziale, si ha

$$|\beta\rangle = \sum_n A_n |n\rangle, \quad A_n = e^{-|\beta|^2/2} \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}, \quad (2.286)$$

dove $|n\rangle$ è lo stato di n fononi. La probabilità di osservare n quanti nello stato coerente $|\beta\rangle$ allora è

$$P_n = e^{-|\beta|^2} \frac{|\beta|^{2n}}{n!}. \quad (2.287)$$

è una distribuzione Poissoniana, con il valor medio di numero di occupazione

$$\langle \beta | a^\dagger a | \beta \rangle = |\beta|^2. \quad (2.288)$$

Infine, non è difficile dimostrare che nello stato coerente

- i) il prodotto di indeterminazione $\langle (\Delta x)^2 \rangle \cdot \langle (\Delta p)^2 \rangle$ prende il valore minimo possibile, $\hbar^2/4$;
- ii) la funzione d'onda nella base x prende forma,

$$\psi(x) = \langle x | \beta \rangle = \mathcal{N} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\langle (\Delta x)^2 \rangle} + i\frac{p_0 x}{\hbar}\right], \quad (2.289)$$

dove

$$x_0 = (\hbar/2m\omega)^{1/2}(\beta + \beta^*); \quad p_0 = i(m\hbar\omega/2)^{1/2}(\beta^* - \beta); \quad (2.290)$$

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \hbar/2m\omega. \quad (2.291)$$

(vedi, per es., Davydov, "Quantum Mechanics). Gli stati coerenti hanno generalizzazioni interessanti chiamati stati "schiacciati" (*squeezed states*), recentemente studiati in connessione con ottica quantistica, in cui le indeterminazioni $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ e $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ sono variati, tenendo fisso (e il minimo possibile) il loro prodotto.

2.2.6 Barriera di potenziale e Effetto tunnel

Consideriamo ora la barriera di potenziale,

$$V = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0, \text{ (I), } x > a \text{ (III),} \\ V_0 > 0 & \text{se } 0 \leq x \leq a, \text{ (II).} \end{cases} \quad (2.292)$$

Una particella è incidente da $x = -\infty$. Si vuole calcolare la probabilità di trasmissione attraverso/riflessione da tale potenziale. L'interpretazione con la densità di corrente di un'onda piana (vedi Sec.2.2.2) ci permette di trattare il problema con l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo.

(i) Dapprima consideriamo il caso $E > V_0$. Una particella classica che entra da sinistra, non sentirebbe nemmeno la presenza del potenziale, e continuerebbe il suo viaggio verso destra indisturbata. In Meccanica Quantistica il moto della particella è descritto dall'equazione di Schrödinger, che è una equazione libera nelle regioni I e III. Nella regione II l'equazione è

pure quella libera, a parte lo spostamento $E \rightarrow E - V_0$ dell'energia. La soluzione ha quindi la forma

$$\begin{aligned}\psi_I &= e^{ikx} + Ae^{-ikx}; & k &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \\ \psi_{II} &= Be^{ik'x} + B'e^{-ik'x}; & k' &= \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}; \\ \psi_{III} &= Ce^{ikx}.\end{aligned}\quad (2.293)$$

Nello scrivere (2.293) abbiamo arbitrariamente scelto la normalizzazione della funzione d'onda di modo che l'onda piana incidente (in ψ_I) abbia il coefficiente 1. Inoltre abbiamo imposto la condizione al contorno adatta per il problema d'urto in considerazione: nella regione III abbiamo solo l'onda trasmessa ($\propto \exp(-iEt/\hbar + ikx)$).

La condizione di continuità tra le due regioni I e II è:

$$1 + A = B + B', \quad ik(1 - A) = ik'(B - B'), \quad (2.294)$$

mentre quella tra II e III è

$$Be^{ik'a} + B'e^{-ik'a} = Ce^{ika} \equiv C'; \quad ik'(Be^{ik'a} - B'e^{-ik'a}) = ikCe^{ika} = ikC'. \quad (2.295)$$

Questi sistemi di equazioni si risolvono facilmente, eliminando B, B' da

$$\begin{pmatrix} B \\ B' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ A \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} Be^{ik'a} \\ B'e^{-ik'a} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} Ce^{ika} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.296)$$

Un calcolo elementare dà il risultato

$$\begin{aligned}A &= -\frac{i(k^2 - k'^2) \sin k'a}{2kk' \cos k'a - i(k^2 + k'^2) \sin k'a}; \\ C' &= \frac{2kk'}{2kk' \cos k'a - i(k^2 + k'^2) \sin k'a}\end{aligned}\quad (2.297)$$

Si vuole calcolare soprattutto il *coefficiente di trasmissione*,

$$D \equiv \frac{|j_{tras}|}{|j_{inc}|} \quad (2.298)$$

e il *coefficiente di riflessione*

$$R \equiv \frac{|j_{rifl}|}{|j_{inc}|}, \quad (2.299)$$

dove j_{inc} , j_{tras} e j_{rifl} rappresentano rispettivamente la densità di corrente dell'onda incidente (il primo termine di ψ_I), dell'onda trasmessa (ψ_{III}), e dell'onda riflessa (il secondo termine di ψ_I). Le tre correnti sono $k\hbar/m$, $k\hbar|C|^2/m$ e $k\hbar|A|^2/m$, perciò

$$D = |C|^2 = |C'|^2; \quad R = |A|^2, \quad (2.300)$$

cioè

$$\begin{aligned}D &= \frac{4k^2k'^2}{4k^2k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a} \\ R &= \frac{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a}{4k^2k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a}.\end{aligned}\quad (2.301)$$

Si osservi che:

- $D + R = 1$. Questo è quanto ci si aspetta per la probabilità totale.
- La probabilità di riflessione non è zero in generale, nonostante il fatto che l'energia della particella incidente sia al di sopra della barriera di potenziale. Questa è una conseguenza dell'aspetto ondulatorio delle particelle in Meccanica Quantistica: in Meccanica Classica avremmo semplicemente $D = 1$, $R = 0$.
- Per certi valori discreti dell'energia incidente, $(\sqrt{2m(E - V_0)}a/\hbar = n\pi, n = 1, 2, \dots)$, c'è trasmissione completa ($D = 1$). Anche questo è un fenomeno tipicamente quantistico: è analogo dell'*effetto Ramsauer-Taunsend* in tre dimensioni.

Consideriamo ora invece il caso $E < V_0$. Classicamente la particella, non avendo un'energia sufficiente per superare la barriera, sarà riflessa a $x = 0$: avremmo $D = 0$; $R = 1$. Il comportamento di una particella quantistica è ben diverso.

Le soluzioni dell'equazione di Schrödinger in questo caso sono:

$$\begin{aligned}\psi_I &= e^{ikx} + Ae^{-ikx}, & k &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \\ \psi_{II} &= Be^{-\kappa x} + B'e^{\kappa x}, & \kappa &= \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}; \\ \psi_{III} &= Ce^{ikx},\end{aligned}\tag{2.302}$$

Si osservi che l'andamento della funzione d'onda nella regione intermedia è del tipo esponenziale reale. Per il resto si procederà come prima: bisognerà imporre la condizione di continuità a $x = 0$ e a $x = a$, per trovare C e A . Per fortuna, una semplice osservazione ci permette di arrivare al risultato senza fare nessun calcolo: le equazioni da risolvere sono identiche a (2.295) a parte la sostituzione

$$k' \rightarrow i\kappa.\tag{2.303}$$

Di conseguenza i coefficienti A e C' nel caso $E < V_0$ sono dati da (2.297) con la suddetta sostituzione (si noti la sostituzioni, $\sin k'a \rightarrow i \sinh \kappa a$; $\cos k'a \rightarrow \cosh \kappa a$):

$$\begin{aligned}A &= \frac{(k^2 + \kappa^2) \sinh \kappa a}{2k\kappa i \cosh \kappa a + (k^2 - \kappa^2) \sinh \kappa a}; \\ C' &= \frac{2k\kappa i}{2k\kappa i \cosh \kappa a + (k^2 - \kappa^2) \sinh \kappa a}.\end{aligned}\tag{2.304}$$

Le probabilità di trasmissione e di riflessione sono quindi date da

$$\begin{aligned}D &= \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a}; \\ R &= \frac{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a}{4k^2\kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a}.\end{aligned}\tag{2.305}$$

Osservazioni

- In generale si ha $D \neq 0$, $D > 0$. La particella ha una probabilità non nulla di attraversare la barriera, nonostante che la sua energia non è sufficiente per superare la barriera dal punto di vista classico. Questo è un esempio del celebre *effetto tunnel* che distingue la Meccanica Quantistica in modo così netto dalla Meccanica Classica.
- Nel limite di barriera molto grande, $V_0 \rightarrow \infty$ e/o $a \rightarrow \infty$, il coefficiente di trasmissione si comporta come

$$D \sim e^{-2\sqrt{2m(V_0 - E)}a/\hbar},\tag{2.306}$$

ed è esponenzialmente piccolo, (con due volte l'azione classica nell'esponente), caratteristica questa dell'effetto tunnel in generale.

Esercizio: Calcolare il coefficiente di trasmissione della barriera unidimensionale, $V(x) = f\delta(x)$ ($f > 0$), prendendo il limite $V_0 \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$, con $f = V_0 a$ fisso.

Esercizio: Lo stesso problema con $V(x) = -f\delta(x)$ ($f > 0$).

2.2.7 Sistemi in uno spazio topologicamente non banale

Una particella che si muove su un anello (discussa in (2.187)), è l'esempio di un sistema meccanico-quantistico, che possiede un parametro nascosto che non ha analoghi classici. Dovuto alla nota arbitrarietà della fase della funzione d'onda, la periodicità dello spazio,

$$x = x + L, \quad (2.307)$$

in generale richiede che la funzione d'onda obbedisca alla condizione più generale,

$$\psi(x + L) = e^{i\theta}\psi(x), \quad (2.308)$$

dove θ è una costante che caratterizza il sistema quantistico. La soluzione dell'equazione di Schrödinger è sempre $\psi = e^{ikx}$, ma la condizione al contorno è ora

$$kL = 2\pi n + \theta, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2.309)$$

perciò

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2}(2\pi n + \theta)^2. \quad (2.310)$$

Per un generico θ la doppia degenerazione del livello (2.187) del caso $\theta = 0$ viene eliminata, $E_n \neq E_{-n}$. È interessante che per un particolare valore di θ , $\theta = \pi$, i livelli di energia sono

$$E_n = \frac{\hbar^2(2\pi)^2}{2mL^2}\left(n + \frac{1}{2}\right)^2. \quad (2.311)$$

In questo caso, *tutti* i livelli sono doppiamente degeneri (le coppie di stati sono $(0, -1)$, $(1, -2)$, ecc.). Un'altro caso particolare, $\theta = 2\pi$, è interessante. In questo caso, lo spettro del sistema è identico al caso $\theta = 0$, come si vede facilmente. In generale, lo spettro è periodico in θ con periodo 2π , risultato che ci si aspetta dalla definizione stessa del parametro, (2.308). Si noti che nella discussione la caratteristica topologica non banale dello spazio in questione (S^1) è fondamentale. Esistono molti sistemi di interesse fisico, analoghi a questo sistema. Un esempio è l'effetto Aharonov-Bohm (in questo caso, il ruolo del parametro θ è giocato dal flusso magnetico, attraverso una superficie circondata da due classi di cammini dell'elettrone.)

θ può essere considerata in generale come un parametro esterno. Supponiamo ora che θ varia adiabaticamente da 0 a 2π . Lo spettro del sistema varia lentamente e alla fine del ciclo, ritorna a quello originale. Se la particella è inizialmente in uno stato stazionario, e.g., n -simo stato, la variazione adiabatica di θ aumenterà l'energia del sistema. Alla fine, lo spettro ritorna allo spettro originale, il parametro esterno ritorna al valore originale (visto che θ è una variabile angolare, $2\pi \sim 0$), ma il sistema si trova nello stato $n + 1$! In altre parole, l'intero spettro si è spostato di un'unità ($n \rightarrow n \pm 1$ se $\theta = 0 \rightarrow \pm 2\pi$). Questo fenomeno è noto come "spectral flow." Ci sono importanti applicazioni di questo fenomeno in teorie di gauge non abeliane.

2.2.8 buca/barriera di potenziale con funzioni δ

Considerazione generale: condizioni di continuazione

Consideriamo ora il moto di una particella in un potenziale delta unidimensionale

$$H = \frac{p^2}{2m} - g\delta(x), \quad (2.312)$$

A causa della singolarità del potenziale a $x = 0$, le condizioni di continuità sulla funzione d'onda richiedono una considerazione particolare. Per quanto riguarda il valore della funzione d'onda dobbiamo richiedere semplicemente

$$\psi(x)|_{x \rightarrow 0^+} = \psi(x)|_{x \rightarrow 0^-}, \quad \psi_-(0) = \psi_+(0) \quad (2.313)$$

per la continuità della densità ρ , dove con ψ_{\pm} abbiamo indicato le funzioni d'onda definite nelle regioni $x > 0$ e $x < 0$.

La condizione di continuità sulla derivata deve tenere conto della singolarità del potenziale. Infatti, integrando l'equazione di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - g\delta(x)\psi = E\psi, \quad (2.314)$$

nella regione $[-\epsilon, \epsilon]$, si ha

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) - g\psi(0) = O(\epsilon). \quad (2.315)$$

Considerando poi il limite $\epsilon \rightarrow 0$, si trova la condizione di continuità per la derivata prima della funzione d'onda,

$$\psi'_+(0) - \psi'_-(0) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0). \quad (2.316)$$

La stessa condizione si trova, sostituendo la funzione d'onda

$$\psi(x) = \psi_-(x)\theta(-x) + \psi_+(x)\theta(x) \quad (2.317)$$

direttamente nell'equazione di Schrödinger, utilizzando $\theta'(x) = \delta(x)$, *i.e.*, richiedendo che (2.317) effettivamente soddisfi quest'ultimo dappertutto, incluso $x = 0$.

Esercizio: Dimostrare che la condizione (2.316) sia compatibile con la continuità della densità di corrente, $j = \frac{i\hbar}{2m}[(\psi^*)'\psi - \psi^*\psi']$.

i) Spettro discreto

La funzione d'onda di uno stato legato, con energia $E_0 < 0$ è:

$$\psi(x) = \theta(-x)e^{\kappa x} + \theta(x)e^{-\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{-2mE_0}{\hbar^2}}. \quad (2.318)$$

dove abbiamo già tenuto conto della normalizzabilità (per cui la scelta della soluzione $e^{\kappa x}$ per $x < 0$ e $e^{-\kappa x}$ per $x > 0$) e la continuità della funzione d'onda a $x = 0$; la normalizzazione globale è lasciata arbitraria.

Dalla (2.316) segue immediatamente la condizione di quantizzazione,

$$\kappa = \frac{mg}{\hbar^2}; \quad E_0 = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}. \quad (2.319)$$

La funzione d'onda normalizzata è

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa}[\theta(-x)e^{\kappa x} + \theta(x)e^{-\kappa x}]. \quad (2.320)$$

ii) Spettro continuo

Si può porre, per gli stati di $E \geq 0$,

$$\psi(x) = \theta(-x)[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}] + \theta(x)[Ce^{ikx} + De^{-ikx}], \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (2.321)$$

La condizione di continuità tra le due regioni I e II è:

$$A + B = C + D. \quad (2.322)$$

La condizione di continuità per la derivata prima dà (dalla (2.316)):

$$C - D = A - B + \frac{2img}{k\hbar^2}(A + B) = (1 + 2i\alpha)A - (1 - 2i\alpha)B, \quad (2.323)$$

dove

$$\alpha = \frac{mg}{k\hbar^2} > 0. \quad (2.324)$$

Risolvendo (2.323) e (2.322) per C, D , si ha

$$C = (1 + i\alpha)A + i\alpha B, \quad (2.325)$$

$$D = -i\alpha A + (1 - i\alpha)B. \quad (2.326)$$

O

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\alpha & i\alpha \\ -i\alpha & 1 - i\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \equiv S \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (2.327)$$

La matrice S

$$S = \begin{pmatrix} 1 + i\alpha & i\alpha \\ -i\alpha & 1 - i\alpha \end{pmatrix}; \quad S^{-1} = \begin{pmatrix} 1 - i\alpha & -i\alpha \\ i\alpha & 1 + i\alpha \end{pmatrix} \quad (2.328)$$

è nota come *matrice di transizione*;

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S^{-1} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - i\alpha & -i\alpha \\ i\alpha & 1 + i\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (2.329)$$

Per qualsiasi valore di k reale la (2.321) con tali coefficienti rappresenta gli autostati dell'Hamiltoniana.

iii) Barriera di potenziale

Per $g < 0$, il potenziale rappresenta una barriera, non una buca. In questo caso non ci sono stati legati. La funzione d'onda (2.321) con la (4.379) correttamente rappresenta lo stato di diffusione generale.

Se la particella entra da $x = -\infty$, allora la condizione al contorno è

$$D = 0: \quad (2.330)$$

la soluzione è

$$A = (1 - i\alpha)C; \quad B = i\alpha C, \quad (2.331)$$

per cui le probabilità di trasmissione e di riflessione sono:

$$D = \frac{1}{1 + \alpha^2}, \quad R = \frac{\alpha^2}{1 + \alpha^2}. \quad (2.332)$$

Osserviamo che nel caso di potenziale delta, il risultato è indifferente del segno di g , *i.e.*, sia il potenziale ripulsivo che il potenziale attrattivo dà lo stesso effetto.

iv) Doppia barriera di potenziale delta

Il risultato sopra può essere immediatamente generalizzato al caso di multi barriere di potenziale. Consideriamo per esempio il problema col il potenziale con due barriere di forma delta, spaziate di a ,

$$V = g[\delta(x) + \delta(x - a)]. \quad (2.333)$$

La funzione d'onda è ora

$$\psi(x) = \theta(-x)[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}] + \theta(x)\theta(a-x)[Ce^{ikx} + De^{-ikx}] + \theta(x-a)[Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}]. \quad (2.334)$$

Definendo

$$F' = Fe^{ika}; \quad G' = Ge^{-ika}; \quad C' = Ce^{ika}; \quad D' = De^{-ika}, \quad (2.335)$$

C, D sono dati in termini di A, B come nella (2.400), mentre

$$\begin{pmatrix} F' \\ G' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - i\beta & -i\beta \\ i\beta & 1 + i\beta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C' \\ D' \end{pmatrix} \equiv S \cdot \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \cdot S \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (2.336)$$

Oppure

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} \cdot S \cdot \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \cdot S \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (2.337)$$

dove

$$S = \begin{pmatrix} 1 - i\beta & -i\beta \\ i\beta & 1 + i\beta \end{pmatrix}; \quad \beta = \frac{mg}{k\hbar^2}, \quad (2.338)$$

dove la forma della matrice S qui (2.338) (cfr. (2.401)) riflette il segno opposto di delta nella (2.333) rispetto alla (2.312).

Rispetto al caso di una singola barriera delta, (2.332), la fisica qui è decisamente più interessante. Dalla matrice di transizione nella (2.336), si trova i coefficienti di trasmissione D e di riflessione R ,

$$D = \frac{1}{1 + 4\beta^2(\cos ka + \beta \sin ka)^2}; \quad R = \frac{4\beta^2(\cos ka + \beta \sin ka)^2}{1 + 4\beta^2(\cos ka + \beta \sin ka)^2}. \quad (2.339)$$

Per una prima verifica, si noti che per $a \rightarrow 0$, si ritrova il risultato precedente con $g \rightarrow 2g$. Per generici valori di energia k , la situazione è analoga al caso di singola barriera delta. In particolare, nel limite di $\beta \rightarrow \infty$ ($g \rightarrow \infty$), il coefficiente di trasmissione tende a zero.

Per certi valori di energia incidente,

$$\tan ka = -\frac{1}{\beta}, \quad (2.340)$$

tuttavia, si ha una trasmissione totale ($R = 0, D = 1$)! Notiamo che nel limite di $g \rightarrow \infty$, i valori di risonanza ($R = 0, D = 1$) sono a

$$ka \simeq \pi n, \quad n = 1, 2, \dots : \quad (2.341)$$

essi corrispondono a stati stazionari nella buca di larghezza a , infinitamente alta (Eq. (2.202)). Per generico valore di k , si ha invece la riflessione totale ($R \rightarrow 1, D \rightarrow 0$) nel limite $g \rightarrow \infty$. La situazione è illustrata nella figura (Fig.??), dove i coefficienti di trasmissione e di riflessione è plottata come funzione di k , per tre valori in ordine crescente di β . È interessante che il sistema della doppia barriera delta (nel limite di grande g) pu'ò essere considerato come un filtro per la misura dell'impulso: se la particella incidente ha l'energia $ka \simeq \pi n$ passa, altrimenti non passa.

La generalizzazione della formula (2.337) nel caso di N potenziali delta equispaziati e con lo stesso accoppiamento g , è

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-iNka} & 0 \\ 0 & e^{iNka} \end{pmatrix} \cdot \left[\begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \cdot S \right]^N \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (2.342)$$

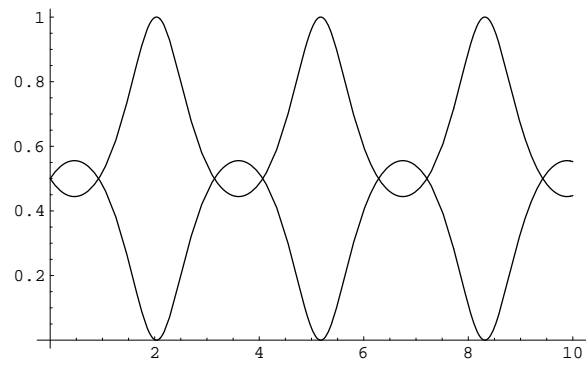


Figura 2.11:

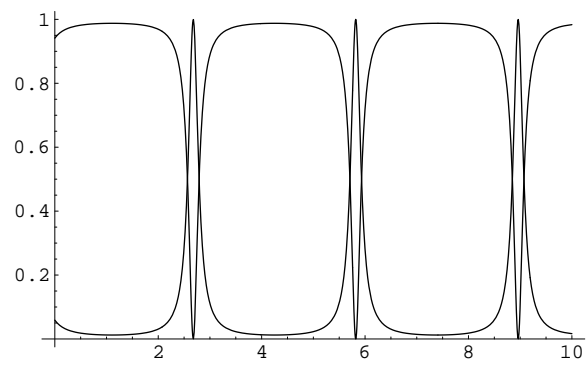


Figura 2.12:

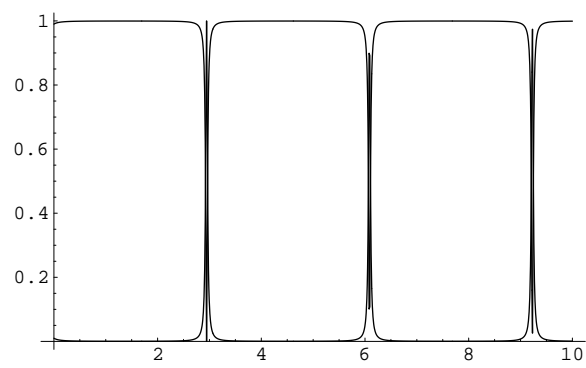


Figura 2.13:

2.2.9 Applicazioni della buca infinitamente alta

Consideriamo ora alcune applicazioni del problema della buca di altezza infinita discusso in Sec.2.2.3. La pressione che una particella confinata nella buca (scatola) esercita sul muro può essere calcolata nel modo seguente. Supponiamo che la particella sia nell' n -simo livello energetico. L'energia del sistema è

$$E_n = \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m}. \quad (2.343)$$

Supponiamo di comprimere la scatola adiabaticamente, $a \rightarrow a - \delta a$: il lavoro richiesto è uguale a

$$\begin{aligned} E_n(a - \delta a) - E_n(a) &= \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{(a - \delta a)^2} - \frac{1}{a^2} \right) \\ &= \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{m a^3} \delta a \equiv p \cdot \delta a, \end{aligned} \quad (2.344)$$

La pressione è perciò

$$p = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{m a^3} = \frac{2}{a} E_n. \quad (2.345)$$

Consideriamo ora un gas di N particelle in equilibrio con il serbatoio termico di temperatura T .¹² Per tale insieme canonico la distribuzione di energia è quella di Boltzman,

$$P_n = \mathcal{N} e^{-E_n/kT}, \quad (2.346)$$

con \mathcal{N} costante di normalizzazione. Per la particella in n -simo livello, $E_n = \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} \equiv A \cdot n^2$, $A = \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m}$. Il valor medio dell'energia è

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n P_n. \quad (2.347)$$

Ora per uno stato di N particelle con le interazioni trascurabili tra loro,

$$E_{(n_1, n_2, \dots, n_N)} \simeq E_{n_1} + E_{n_2} + \dots + E_{n_N}, \quad (2.348)$$

il suo valor medio è

$$\begin{aligned} \langle E \rangle^{(N)} &= \frac{\sum_{(n_1, n_2, \dots, n_N)} E_{(n_1, n_2, \dots, n_N)} e^{-E_{(n_1, n_2, \dots, n_N)}/kT}}{\sum_{(n_1, n_2, \dots, n_N)} e^{-E_{(n_1, n_2, \dots, n_N)}/kT}} \\ &= N \frac{\sum_{n_1} E_{n_1} e^{-E_{n_1}/kT}}{\sum_{n_1} e^{-E_{n_1}/kT}} = N \langle E \rangle. \end{aligned} \quad (2.349)$$

Per temperature alte, $\frac{A}{kT} \ll 1$, la somma su n può essere approssimata con un integrale, *i.e.* con $\sqrt{An} \equiv x$,

$$\langle E \rangle \sim \frac{\int dx x^2 e^{-x^2/kT}}{\int dx e^{-x^2/kT}} = \frac{1}{2} kT. \quad (2.350)$$

L'energia del sistema è data dall'espressione classica

$$U = \langle E \rangle^{(N)} = \frac{1}{2} N kT \quad (2.351)$$

¹²Questa discussione trascura la correlazione tra le particelle identiche, dovuta alla statistica di Bose-Einstein o di Fermi-Dirac, che sarà discussa più in là, e in questo senso non va considerata come approssimazione valida a sistemi fisici quantistici.

dalla quale segue il risultato noto per il calore specifico (per un gas monoatomico 1D)
 $C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{1}{2}Nk$.

A temperature basse, la somma in $\langle E \rangle$ è dominato dallo stato fondamentale,

$$\langle E \rangle \simeq E_1, \quad (2.352)$$

per cui il calore specifico tende a zero a $T \rightarrow 0$.

Per quanto riguarda la pressione, si ha dalla (2.345)

$$P = \frac{2}{a}N\langle E \rangle = \frac{2}{a}N\langle E \rangle \simeq \frac{2}{a}N\frac{kT}{2} = \frac{1}{a}NkT, \quad (2.353)$$

a temperatura ambiente. Questa non è altro che l'equazione di gas unidimensionale, $PV = NkT$.

♠ Infine, **il numero di stati quantistici** con $E \leq E_{max}$ per E_{max} grande può essere stimato facendo uso della condizione di quantizzazione di Bohr e Sommerfeld:

$$\oint dx p = nh. \quad (2.354)$$

Siccome E_{max} corrisponde a $p_{max} = \sqrt{2mE_{max}}$, il livello massimo n_{max} è determinato dalla richiesta

$$n_{max}h = \left(\oint dx p \right)_{max} = \sqrt{2mE_{max}} \cdot 2a, \quad (2.355)$$

per cui

$$n_{max} \simeq \frac{2a\sqrt{2mE_{max}}}{h}. \quad (2.356)$$

Questo coincide con il risultato quantistico esatto

$$E_n = \left(\frac{\pi n}{a} \right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} \leq E_{max}, \quad (2.357)$$

$$n_{max} \simeq \frac{\sqrt{2ma^2E_{max}}}{\pi\hbar}. \quad (2.358)$$

2.2.10 Dalla fisica di una particella alla fisica dei sistemi di molti gradi di libertà: Cristallo Unidimensionale

Come prototipo del modello dei cristalli (dei solidi) prendiamo in esame una catena di atomi in una dimensione, interagenti tra loro con una forza armonica. Il sistema è descritto dalla Lagrangiana classica

$$L = \sum_n \left[\frac{m}{2} \dot{x}_n^2 - \frac{\kappa}{2} (x_{n+1} - x_n)^2 \right], \quad (2.359)$$

dove x_n indica lo spostamento della posizione dell' n -simo atomo dalla sua posizione di equilibrio, e per semplificare le cose poniamo la condizione periodica

$$x_N \equiv x_0; \quad x_{i+N} = x_i, \quad (2.360)$$

e supponiamo che n in (2.359) prenda valori $n = 1, 2, \dots, N$.

La (2.359) descrive N particelle accoppiate tra loro, e il fatto che il sistema possa essere risolto con esattezza potrebbe sembrare miracoloso. Come è ben noto, la chiave della soluzione è la trasformata di Fourier (discreta),

$$x_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k A_k e^{ikna}, \quad A_k = A_{-k}^*, \quad (2.361)$$

dove la condizione sulle ampiezze complesse A_k riflette la realtà delle variabili x_n , l'impulso k prende valori

$$k = \frac{2\pi\ell}{Na}; \quad \ell = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N-1}{2}, \frac{N}{2}. \quad (2.362)$$

$A_{N/2} = A_{-N/2}$ è reale. Inoltre, il termine $\ell = 0$ (che corrisponderebbe alla traslazione dell'intero sistema) è assente. Perciò il numero dei gradi di libertà associati a vari A_k è

$$2 \cdot \frac{N-1}{2} + 1 = N, \quad (2.363)$$

uguale al numero dei x_n indipendenti.

Come è facile verificare, ci sono delle identità,

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{ina(k-k')} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{i2\pi n(\ell-\ell')/N} = \delta_{\ell,\ell'}; \quad (2.364)$$

$$\frac{1}{N} \sum_k e^{ik(n-n')a} = \delta_{n,n'}, \quad (2.365)$$

che risulteranno molto utili. Usando queste identità, infatti, si trovano

$$\begin{aligned} \sum_n (x_{n+1} - x_n)^2 &= \sum_n \frac{1}{N} \sum_k \sum_{k'} A_k A_{k'} e^{ikna} (e^{ika} - 1) e^{ik'na} (e^{ik'a} - 1) \\ &= \sum_k A_k A_{-k} (e^{ika} - 1)(e^{-ika} - 1) = 4 \sum_k A_k A_{-k} \sin^2 \frac{ka}{2}; \end{aligned} \quad (2.366)$$

$$\sum_n \frac{m \dot{x}_n^2}{2} = \frac{m}{2} \sum_n \frac{1}{N} \sum_k \dot{A}_k \dot{A}_{k'} e^{ikna} e^{ik'na} = \frac{m}{2} \sum_k \dot{A}_k \dot{A}_{-k}. \quad (2.367)$$

Ma usando la condizione di realtà di x_n (2.361) si può scrivere (definendo $A_k = a_k + ib_k$, a_k, b_k reali per $\ell = 1, 2, \dots, (N-1)/2$)

$$A_k A_{-k} = A_k A_k^* = a_k^2 + b_k^2; \quad \dot{A}_k \dot{A}_{-k} = \dot{a}_k^2 + \dot{b}_k^2; \quad k = 1, 2, \dots, (N-1)/2; \quad (2.368)$$

e

$$A_{N/2} A_{-N/2} = A_{N/2}^2. \quad (2.369)$$

Raccogliendo tutti i termini, troviamo che la Lagrangiana è uguale a

$$\begin{aligned} L &= \sum_{\ell=1}^{(N-1)/2} \left[\frac{m}{2} \dot{a}_\ell^2 - \frac{m\omega_\ell^2}{2} a_\ell^2 + \frac{m}{2} \dot{b}_\ell^2 - \frac{m\omega_\ell^2}{2} b_\ell^2 \right] \\ &+ \frac{m}{2} \dot{A}_{N/2}^2 - \frac{m\omega_{(N/2)}^2}{2} A_{N/2}^2, \quad \omega_\ell^2 \equiv \frac{4\kappa}{m} \sin^2 \frac{\ell a}{2}. \end{aligned} \quad (2.370)$$

In altre parole, il sistema (2.359) è equivalente ad un insieme di N oscillatori armonici indipendenti! In termini di coordinate generalizzate $\{q_i\} = \{a_k, b_k, A_{N/2}\}$, e gli impulsi canonici corrispondenti, $\{p_i\}$, l'Hamiltoniana del sistema è semplicemente,

$$H = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega_i^2}{2} q_i^2 \right]. \quad (2.371)$$

La quantizzazione del sistema procede esattamente come nel caso di un singolo oscillatore armonico: la descrizione degli autostati di energia è particolarmente semplice nel formalismo di seconda quantizzazione (con operatori di creazione e di distruzione, per ciascun modo), seguendo l'esempio di Sec. 2.2.5 Un generico stato di stato di eccitazione è dato dal ket

$$|\dots, n_i, \dots\rangle = \prod_i \frac{(a_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |0, 0, \dots\rangle \quad (2.372)$$

con energia,

$$E = \sum_i \omega_i \hbar (n_i + \frac{1}{2}). \quad (2.373)$$

A differenza col caso del singolo oscillatore, qui ci sono N tipi di fononi di energia $\omega_i \hbar$, $i = 1, 2, \dots, N$. Si osservi che, corrispondente al passo reticolare (a) del sistema originale, c'è un limite superiore della frequenza (limite inferiore della lunghezza d'onda, a). Nel limite continuo, ($N \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$, $Na = L$ con L fisso), il sistema si riduce al caso di una corda finita (con la condizione periodica, *cfr* Appendice 2): in tal caso non c'è nessun limite inferiore alla lunghezza d'onda.

Un analogo trattamento è possibile per i cristalli tri-dimensionali. I fononi sono quanti di eccitazioni collettive (con energia $\omega_i \hbar$ ciascuno). La radiazione elettromagnetica libera (senza particelle cariche) è descritta in modo analogo, come un insieme di oscillatori armonici (Appendice 2 e Capitolo 1.3), il fonone è chiamato *fonone* in questo caso.

Il fatto che molti sistemi di molti o infiniti gradi di libertà sono descritti nella prima approssimazione come un insieme di oscillatori indipendenti, è basale nel permetterci di analizzare questi sistemi complessi con la teoria delle perturbazioni, nell'ambito del formalismo di seconda quantizzazione (teoria dei campi quantistici).

2.3 Potenziale periodico e struttura di bande d'energia

Il comportamento in Meccanica Quantistica di una particella che si muove in un potenziale periodico

$$V(x) = V(x + a) \quad (2.374)$$

(vedi Fig. 1.3) differisce in modo essenziale da quello che ci si aspetta dalla meccanica classica. Come è stato anticipato già nell'introduzione, tale sistema può essere considerato come prototipo dei sistemi più interessanti (per es., elettroni nei solidi).

Supponiamo che l'energia della particella E sia tale che

$$0 < E \ll V_0, \quad (2.375)$$

dove 0 e V_0 sono rispettivamente il valore minimo e il valore massimo del potenziale. Supponiamo inoltre che nell'approssimazione in qui il potenziale è considerato infinitamente alto ($V_0 \simeq \infty$) i livelli di energia e le funzione d'onda di una singola (n -sima) buca siano dati da

$$E_1^{(0)}, E_2^{(0)}, \dots, E_i^{(0)}, \dots; \quad \psi_1(x; n), \psi_2(x; n), \dots, \psi_i(x; n), \dots \quad (2.376)$$

I livelli di energia in altre buche sono identici a questi, mentre le funzioni d'onda dell' m -sima buca sarà data da $\psi_i(x - (m - n)a; n)$. In altre parole, nell'approssimazione in qui l'effetto tunnel è trascurato ogni livello è infinitamente degenero (con funzioni d'onda $\{\psi_i(x; n)\}$, $n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$ che rappresentano la particella varie buche). In seguito concentreremo la nostra attenzione ad un determinato livello (per es., i -simo), e lasceremo implicito l'indice i . Un'identica considerazione è valida per tutti i livelli.

Dovuto all'effetto tunnel, sappiamo che i stati $\{\psi(x; n)\}$ non rappresentano gli autostati esatti dell'Hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} + V. \quad (2.377)$$

Tuttavia, considerando gli effetti dovuti alla penetrazione di barriera come perturbazione, possiamo scrivere

$$H\psi(x; n) \simeq E^{(0)}\psi(x; n) - \varepsilon[\psi(x; n + 1) + \psi(x; n - 1)], \quad (2.378)$$

$$n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (2.379)$$

dove ε corrisponde all'ampiezza di probabilità di tunnelling tra l' n -sima buca e le due buche adiacenti.

La diagonalizzazione dell'Hamiltoniana, date il numero infinito di equazioni accoppiate, (2.379), appare un problema formidabile. In verità, essa si compie senza difficoltà con la trasformata di Fourier rispetto a n ,

$$\tilde{\Psi}_k(x) \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikan} \psi(x;n), \quad (2.380)$$

dove k è un parametro reale ($k\hbar = p$ è una sorta di impulso coniugato a n). Essendo il coniugato di Fourier di una variabile discreta n , ka è un parametro angolare: $k \in [-\pi/a, \pi/a]$.

Infatti, moltiplicando con e^{ikan} e sommando su n in ambedue i membri di (2.379), e usando $\psi(x;n \pm 1) = \psi(x \mp a;n)$, troviamo che le combinazioni lineari in (2.380) sono infatti autostati dell'energia:

$$H\tilde{\Psi}_k(x) = [E^{(0)} - 2\varepsilon \cos(ka)] \tilde{\Psi}_k(x). \quad (2.381)$$

In altre parole, invece di un singolo livello $E^{(0)}$ infinitamente degenerare, abbiamo trovato una spettro continuo compreso in $[E^{(0)} - 2\varepsilon, E^{(0)} + 2\varepsilon]$ (*banda di energia*), parametrizzato dall'impulso $p = k\hbar$. Ad ogni valore di energia nella banda sono associati solo due stati distinti, con $k = \pm|k|$. Gli autostati di energia (2.380) non sono localizzati a una delle buche; sono estesi a tutto lo spazio $-\infty < x < \infty$.

(Osserviamo a questo proposito il seguente fatto. Le autofunzioni vere differiscono in modo essenziale da quelle "non perturbate", (2.376), anche quando i termini di "perturbazioni" $\propto \varepsilon$ sono infinitesimi. La ragione di tale fenomeno sta nella *degenerazione* degli stati nonperturbati. Vedi Capitolo ??)

Le autofunzioni (2.380) non sono autostati dell'operatore d'impulso $-i\hbar(d/dx)$, tanto è vero che l'invarianza per traslazioni $x \rightarrow x + \Delta x$ è violata dal potenziale. D'altra parte, l'invarianza per traslazioni discrete generate da $x \rightarrow x \pm a$ (che è una simmetria dell'Hamiltoniana) fa sì che le autofunzioni soddisfano

$$\tilde{\Psi}_k(x \pm a) = e^{\pm ika} \tilde{\Psi}_k(x), \quad (2.382)$$

(dove abbiamo usato la relazione $\psi(x+a;n) = \psi(x;n-1)$, ecc.), proprietà condivisa da un'onda piana usuale. Questo aspetto si illustra meglio ancora se si considerasse i casi di piccoli impulsi, $ka \ll 1$. La relazione energia-impulso in questi casi si riduce a

$$E = E^{(0)} - 2\varepsilon \cos(ka) \simeq E^{(0)} - 2\varepsilon + \varepsilon k^2 a^2. \quad (2.383)$$

A parte una costante, questa è la relazione standard tra l'energia e l'impulso di una particella libera con la massa,

$$m_{eff} = \frac{\hbar^2}{2\varepsilon a^2}. \quad (2.384)$$

Naturalmente si tratta di una massa efficace, dipendente da dettagli del potenziale e dalla banda considerata; essa non ha niente a che fare con la massa vera della particella m . Nonostante ciò, resta il fatto che la particella "propaga liberamente attraverso le barriere di potenziale.

Ricapitolando, gli autovalori dell'energia sono le bande di energia, attorno a ciascuno di $E_1^{(0)}, E_2^{(0)}, \dots, E_i^{(0)}, \dots$. Le autofunzioni descrivono una sorta di onda piana, con l'impulso limitato a $p \in [-\hbar\pi/a, \hbar\pi/a]$, e collegato al valore di energia tramite una relazione del tipo (2.381). Questo, dunque, è il meccanismo con cui l'elettrone nei cristalli si muove liberamente (*conduzione elettrica dei metalli*), sebbene subisse diffusione da tutti gli atomi che formano il reticolo cristallino.

In tutto ciò, è fondamentale il fatto che l'effetto tunnel descrive una penetrazione di particella a livello di *ampiezza* o di funzione d'onda (vedi (2.379)), e non a livello di probabilità. In questo senso, la conduttività elettrica dei metalli è uno dei fenomeni che meglio illustrano le caratteristiche della meccanica quantistica.

2.3.1 Esempio di simmetria: parità della funzione d'onda; doppia buca

Il concetto di *simmetrie* è di importanza sia in meccanica classica che in meccanica quantistica. Anticipando la discussione più generale sulle simmetrie, discutiamo qui le conseguenze della simmetria della parità (simmetria per $x \rightarrow -x$) del sistema.

Molti sistemi come buca di potenziale, il sistema con il potenziale delta, etc, possiedono la proprietà che l'Hamiltoniana è invariante per l'operazione di riflessione spaziale,

$$\mathcal{P}H(x, p)\mathcal{P} \equiv H(-x, -p) = H(x, p).$$

Se definiamo la parità sulla funzione d'onda

$$\mathcal{P}\psi(x) = \psi(-x),$$

segue dall'equazione di Schrödinger che se $\psi^{(n)}(x)$ è l'autofunzione dell' n -simo livello energetico, con E_n , $\mathcal{P}\psi^{(n)}(x) = \psi^{(n)}(-x)$ lo è anche. Visto che in una dimensione non ci sono degenerazione dei livelli discreti, segue che

$$\psi^{(n)}(-x) = \pm \psi^{(n)}(x) : \quad (2.385)$$

ogni autofunzione di energia deve essere o pari o dispari rispetto a $x \rightarrow -x$. Secondo il teorema di oscillazione, lo stato fondamentale non ha nodi, perciò è pari. Il primo stato di eccitazione ha un nodo ed è dispari, e così via. Tali caratteristiche sono effettivamente possedute dalle autofunzioni in tutti gli esempi considerati, le buche di potenziale, il sistema con il potenziale delta, etc.

È interessante considerare il sistema di doppia buca di potenziale come quella in Fig. 2.14. Se la barriera centrale è molto alta, si avranno approssimativamente due buche di potenziali (simmetriche), con i primi livelli di energia $E = E_0, E_1, \dots$, e le funzioni d'onda saranno $\psi_L^{(n)}(x)$ e $\psi_R^{(n)}(x) = \psi_L^{(n)}(-x)$. In altre parole avremo una doppia degenerazione dei livelli, cosa che è tuttavia proibita dal teorema di non degenerazione. Fisicamente, la particella che si muove in una delle buche non dovrebbe accorgersi dell'altra buca se la barriera centrale è sufficientemente alta, ma la conclusione naïva - doppia degenerazione dei livelli - non può essere corretta. Come si evita la contraddizione?

Il punto è che, dovuto all'effetto tunnel, l'ampiezza per andare da una buca all'altra non è nulla (anche se è molto piccola) comunque alta sia la barriera centrale. D'altra parte, dalla discussione sulla parità qui sopra, è chiaro che ogni autofunzione di energia deve avere la parità definita. Segue che lo stato fondamentale del sistema 'e la combinazione simmetrica

$$\psi^{(fond)}(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_L^{(n)}(x) + \psi_R^{(n)}(x)); \quad (2.386)$$

mentre il primo stato eccitato è

$$\psi^{(primo)}(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_L^{(n)}(x) - \psi_R^{(n)}(x)). \quad (2.387)$$

Se consideriamo una situazione fisica dove l'energia rilevante è piccola rispetto a $E_1 - E_0$, un tale sistema può essere approssimato con un sistema "a due stati", descritta da

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -\epsilon \\ -\epsilon & E_0 \end{pmatrix}, \quad (2.388)$$

nella base di $\psi_L^{(0)}(x)$ e $\psi_R^{(0)}(x)$, dove ϵ descrive l'ampiezza di penetrazione da una buca all'altra. La diagonalizzazione di H dà i livelli di energia $E \mp \epsilon$, con $\psi^{(fond)}(x)$ e $\psi^{(primo)}(x)$ come autofunzioni corrispondenti.

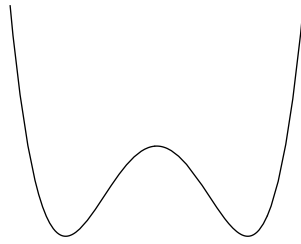


Figura 2.14: Una doppia buca di potenziale

2.3.2 Problemi

1. Al tempo $t = 0$ lo stato di una particella libera è espresso dalla funzione d'onda

$$\Psi(x, 0) = A \exp\left\{-\frac{x^2}{a^2} + ik_0x\right\}$$

- Si calcoli il fattore A e la regione dove la particella è localizzata.
 - Si determini la densità di corrente di probabilità \mathbf{j} .
 - Si determinino $\Psi(x, t)$, $\rho(x, t)$ e $\mathbf{j}(x, t)$.
 - Si trovino i valori di aspettazione della posizione e dell'impulso al tempo $t = 0$.
 - Si calcolino $\langle \Delta x^2 \rangle$ e $\langle \Delta p^2 \rangle$ al tempo $t = 0$ e si verifichi la relazione di indeterminazione per queste due quantità.
2. Una particella si trova in una buca di potenziale unidimensionale $0 \leq x \leq a$, per la quale $V = 0$ dentro la buca e $V = \infty$ al di fuori. Si risolva l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo per questo sistema.
3. Si trovino le funzioni d'onda e i livelli energetici per una particella in un potenziale $V(x)$ della forma

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < -a, \\ -V_0 & \text{per } -a \leq x \leq a, \\ 0 & \text{per } x > a. \end{cases}$$

4. Si trovino i livelli energetici e le funzioni d'onda di un oscillatore armonico unidimensionale che è posto in un campo elettrico costante E . La carica elettrica dell'oscillatore è e .
5. Si consideri un oscillatore armonico unidimensionale nel suo n -mo livello energetico. Si trovino $\langle x^2 \rangle$ e il valore di aspettazione dell'energia potenziale per questo caso.
6. Si calcoli l'energia cinetica media di un oscillatore armonico unidimensionale la cui energia è $\frac{7}{2}\hbar\omega$.
7. Si trovino i livelli energetici e le funzioni d'onda per la buca di potenziale unidimensionale Coulombiano

$$V(x) = -\frac{e^2}{|x|}.$$

8. Si studi l'evoluzione temporale del pacchetto d'onda che all'istante $t = 0$ ha la forma

$$\Psi(x, 0) = \pi^{-1/4} \alpha^{1/2} e^{-\alpha^2(x-a)^2/2}, \quad (2.389)$$

($\alpha \equiv \sqrt{m\omega/\hbar}$.) L'Hamiltoniana è quella dell'oscillatore armonico.

9. Disegnare la variazione dello spettro del sistema discusso nel sottocapitolo 2.2.7, come funzione di θ nell'intervallo, $0 \leq \theta \leq 2\pi$.

2.4 Complemento sul sistema con il potenziale $g\delta(x)$

In questo complemento, illustreremo la relazione di ortonormalità e la relazione di completezza in un sistema in cui lo spettro contiene sia la parte discreta che quella continua. Il sistema è quella di una buca delta,

$$H = \frac{p^2}{2m} - g\delta(x), \quad g > 0 \quad (2.390)$$

già discusso in una sezione precedente.

2.4.1 Spettro discreto

In questo sistema esiste un solo stato legato,

$$\Psi^{(0)}(x) = \begin{cases} \sqrt{\kappa} e^{\kappa x} & x < 0 \\ \sqrt{\kappa} e^{-\kappa x} & x > 0, \end{cases} \quad (2.391)$$

dove

$$\kappa = \frac{mg}{\hbar^2}; \quad E_0 = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}. \quad (2.392)$$

2.4.2 Spettro continuo

Si può porre, per gli stati di $E \geq 0$,

$$\Psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < 0, \\ C e^{ikx} + D e^{-ikx} & x > 0, \end{cases} \quad (2.393)$$

dove

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}. \quad (2.394)$$

La condizione di continuità tra le due regioni I e II è:

$$A + B = C + D. \quad (2.395)$$

La condizione di continuità per la derivata prima dà (dalla (2.316)):

$$C - D = A - B + \frac{2img}{k\hbar^2}(A + B) = (1 + 2i\alpha)A - (1 - 2i\alpha)B, \quad (2.396)$$

dove

$$\alpha = \frac{mg}{k\hbar^2} = \frac{\kappa}{k} > 0. \quad (2.397)$$

Risolviendo (2.395) e (2.396) per C, D , si ha

$$C = (1 + i\alpha)A + i\alpha B, \quad (2.398)$$

$$D = -i\alpha A + (1 - i\alpha)B. \quad (2.399)$$

o

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (2.400)$$

dove

$$S = \begin{pmatrix} 1+i\alpha & i\alpha \\ -i\alpha & 1-i\alpha \end{pmatrix}; \quad S^{-1} = \begin{pmatrix} 1-i\alpha & -i\alpha \\ i\alpha & 1+i\alpha \end{pmatrix}, \quad \alpha = \frac{\kappa}{k} \quad (2.401)$$

è la *matrice di transizione*. L'inverso è

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S^{-1} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-i\alpha & -i\alpha \\ i\alpha & 1+i\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (2.402)$$

Per qualsiasi valore di k reale la (2.321) con tali coefficienti rappresenta autostati possibili (continui) dell'Hamiltoniana.

Per le applicazioni fisiche e per la considerazione sotto, conviene introdurre gli stati R (right mover) e L (left mover) corrispondenti alla particella incidente da $x = -\infty$, e quelli corrispondenti a particella incidente da $x = +\infty$. Gli stati R e L sono analoghi degli stati $e^{\pm ikx}$ nel caso libero. Essi sono (ponendo $D = 0$ o $A = 0$, rispettivamente)

$$\Psi_k^{(R)}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}[e^{ikx} - F(k)e^{-ikx}], & x < 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(1 - F(k))e^{ikx}, & x > 0, \end{cases} \quad (2.403)$$

dove

$$F(k) = \frac{1}{1 + ik/\kappa}. \quad (2.404)$$

e

$$\Psi_k^{(L)}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(1 - F(k))e^{-ikx}, & x < 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}[e^{-ikx} - F(k)e^{ikx}], & x > 0, \end{cases} \quad (2.405)$$

con lo stesso $F(k)$. $k \geq 0$ sopra, e la normalizzazione è stata fissata di modo che la relazioni di ortonormalità prende la forma canonica.

2.4.3 Ortogonalità tra lo stato discreto e uno stato nel continuo

Facendo uso di

$$\kappa \pm ik = \frac{mg}{\hbar^2} \pm ik = \pm ik(1 \mp i\alpha) \quad (2.406)$$

si ha infatti

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{com} | \Psi_{dis} \rangle &= \int_{-\infty}^0 dx [A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}] e^{\kappa x} + \int_0^{\infty} dx [C^* e^{-ikx} + D^* e^{ikx}] e^{-\kappa x} \\ &= \frac{A^*}{\kappa - ik} + \frac{B^*}{\kappa + ik} + \frac{C^*}{\kappa + ik} + \frac{D^*}{\kappa - ik} \\ &= \frac{A^* + D^*}{\kappa - ik} + \frac{B^* + C^*}{\kappa + ik} = \frac{1}{-ik} \frac{1 + i\alpha}{1 + i\alpha} (C^* + D^*) + \frac{1}{ik} \frac{1 - i\alpha}{1 - i\alpha} (C^* + D^*) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.407)$$

2.4.4 Ortogonalità tra gli stati del continuo

Prendiamo due stati di tipo R:

$$\begin{aligned} {}_R \langle k' | k \rangle_R &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 dx [e^{-ik'x} - F^*(k) e^{ik'x}] [e^{ikx} - F(k) e^{-ikx}] \\ &\quad + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dx (1 - F^*(k)) (1 - F(k)) e^{-ik'x} e^{ikx}. \end{aligned} \quad (2.408)$$

Utilizzando le formule

$$\int_0^{\infty} dx e^{-ikx} = \int_{-\infty}^0 dx e^{ikx} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 dx e^{ikx - \varepsilon x} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon - ik} = \pi \delta(k) + i \frac{\mathcal{P}}{k}, \quad (2.409)$$

dove \mathcal{P} indica il valor principale di Cauchy, si ha

$$\begin{aligned} {}_R\langle k'|k\rangle_R &= \frac{1}{2\pi} \left[\pi\delta(k-k') + i\frac{\mathcal{P}}{k-k'} - F(k)(\pi\delta(k+k') - i\frac{\mathcal{P}}{k+k'}) \right. \\ &\quad - F(k')^*(\pi\delta(k+k') + i\frac{\mathcal{P}}{k+k'}) + F(k')^*F(k)(\pi\delta(k-k') - i\frac{\mathcal{P}}{k-k'}) \\ &\quad \left. + (1-F(k')^*)(1-F(k))(\pi\delta(k-k') - i\frac{\mathcal{P}}{k-k'}) \right]. \end{aligned} \quad (2.410)$$

Notando

$$\delta(k+k') = 0; \quad 1 + F(k')^*F(k) - (1-F(k')^*)(1-F(k))|_{k=k'} = 2; \quad (2.411)$$

$$1 - F(k')^*F(k) - (1-F(k')^*)(1-F(k)) = \frac{\frac{i}{\kappa}(k-k')}{(1+ik/\kappa)(1-ik'/\kappa)}; \quad (2.412)$$

$$F(k) - F(k')^* = -\frac{\frac{i}{\kappa}(k+k')}{(1+ik/\kappa)(1-ik'/\kappa)}, \quad (2.413)$$

e infine

$$(k+k')\frac{\mathcal{P}}{k+k'} = (k-k')\frac{\mathcal{P}}{k-k'} = 1, \quad (2.414)$$

troviamo

$${}_R\langle k'|k\rangle_R = \delta(k-k'). \quad (2.415)$$

Analoghi calcoli dimostrano che

$${}_L\langle k'|k\rangle_L = \delta(k-k'), \quad {}_L\langle k'|k\rangle_R = {}_R\langle k'|k\rangle_L = 0. \quad (2.416)$$

2.4.5 Completezza

Illustriamo ora la relazione di completezza, Eq.(2.138),

$$\sum_n \Psi_n(q)\Psi_n^*(q') + \int df \Psi_f(q)\Psi_f^*(q') = \delta(q-q') \quad (2.417)$$

che in questo sistema coinvolge sia un termine di stato discreto e l'integrale sugli stati del continuo. Calcoliamo il contributo del continuo

$$\int_0^\infty dk \Psi_k^{(R)}(x)\Psi_k^{(R)*}(x') + \int_0^\infty dk \Psi_k^{(L)}(x)\Psi_k^{(L)*}(x'). \quad (2.418)$$

dove le funzioni d'onda di una particella del tipo R (right-mover) e del tipo L(left mover) sono definite nelle (2.403), (2.405). Ora per $x > 0, x' > 0$, troviamo

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty dk \Psi_k^{(R)}(x)\Psi_k^{(R)*}(x') = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk (1-F(k))(1-F^*(k))e^{ik(x-x')} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \left[1 + \frac{i\kappa}{k-i\kappa} - \frac{i\kappa}{k+i\kappa} + \frac{\kappa^2}{(k-i\kappa)(k+i\kappa)} \right] e^{ik(x-x')} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \left[1 - \frac{\kappa^2}{(k-i\kappa)(k+i\kappa)} \right] e^{ik(x-x')}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty dk \Psi_k^{(L)}(x)\Psi_k^{(L)*}(x') = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk [e^{-ikx} - F(k)e^{ikx}] [e^{ikx'} - F(k)e^{-ikx'}] = \\ &\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \left[e^{-ik(x-x')} + \frac{i\kappa}{k-i\kappa} e^{ik(x+x')} - \frac{i\kappa}{k+i\kappa} e^{-ik(x+x')} + \frac{\kappa^2}{(k-i\kappa)(k+i\kappa)} e^{ik(x-x')} \right]. \end{aligned}$$

Perciò (ricordando che $x > 0, x' > 0$),

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dk [\Psi_k^{(R)}(x) \Psi_k^{(R)*}(x') + \Psi_k^{(L)}(x) \Psi_k^{(L)*}(x')] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dk [e^{ik(x-x')} + \frac{i\kappa}{k-i\kappa} e^{ik(x+x')}] \\ & = \delta(x-x') - \kappa e^{-\kappa(x+x')} = \delta(x-x') - \Psi^{(0)}(x) \Psi^{(0)*}(x'), \end{aligned} \quad (2.419)$$

dove il secondo integrale è stato fatto col teorema di residuo. Abbiamo quindi dimostrato esplicitamente (per $x > 0, x' > 0$) la relazione di completezza,

$$\Psi^{(0)}(x) \Psi^{(0)*}(x') + \int_0^\infty dk [\Psi_k^{(R)}(x) \Psi_k^{(R)*}(x') + \Psi_k^{(L)}(x) \Psi_k^{(L)*}(x')] = \delta(x-x'). \quad (2.420)$$

Per $x < 0, x' > 0$, il contributo dello spettro continuo è

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dk [\Psi_k^{(R)}(x) \Psi_k^{(R)*}(x') + \Psi_k^{(L)}(x) \Psi_k^{(L)*}(x')] \\ & = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \left([e^{ikx} - F(k) e^{-ikx}] (1 - F^*(k)) e^{-ikx'} + (1 - F(k)) e^{-ikx} [e^{ikx'} - F^*(k) e^{-ikx'}] \right) \\ & = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dk [e^{ik(x-x')} - \frac{i\kappa}{k+i\kappa} e^{ik(x-x')}] \\ & = \delta(x-x') - \kappa e^{\kappa(x-x')} = \delta(x-x') - \Psi^{(0)}(x) \Psi^{(0)*}(x') \end{aligned} \quad (2.421)$$

che è il risultato corretto.

È interessante considerare il caso di potenziale $\delta(x)$ ripulsivo, che corrisponde a prendere il segno $g < 0$ nella (2.390). In questo caso non esiste nessun stato legato. Il contributo del continuo deve dare esattamente $\delta(x-x')$. La dimostrazione è semplice: l'unico cambiamento nel precedente è che ora $\kappa < 0$. I passaggi fino alla (2.419) non subiscono modifiche sostanziali, poiché coinvolgono soltanto cancellazioni algebriche. Nel secondo termine della (2.419), per $x > 0, x' > 0$, il polo dell'integrando ora sta nel piano inferiore: essendo $x+x' > 0$, l'integrale su k dà zero grazie al teorema di Cauchy. Perciò

$$\int_0^\infty dk [\Psi_k^{(R)}(x) \Psi_k^{(R)*}(x') + \Psi_k^{(L)}(x) \Psi_k^{(L)*}(x')] = \delta(x-x') \quad (2.422)$$

semplicemente, come deve essere. Lo stesso vale per (2.421), che dà nel secondo membro semplicemente $\delta(x-x')$.

