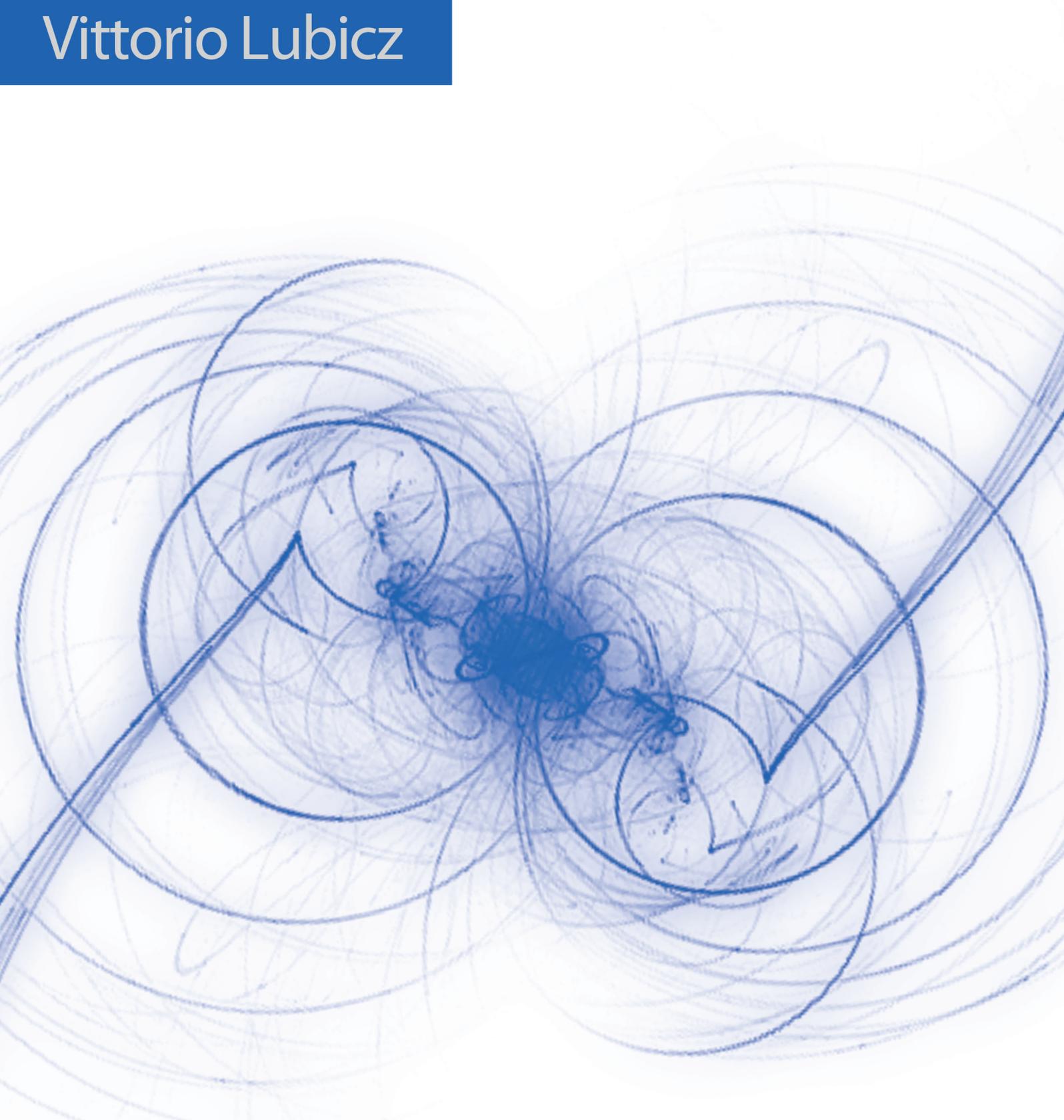


Vittorio Lubicz



Appunti di

Meccanica Quantistica

Vittorio Lubicz

Appunti di Meccanica Quantistica

Appunti delle lezioni del corso di Meccanica Quantistica

A cura degli ex-studenti

*Matteo Altorio, Ilaria Carlomagno, Paolo Costantini,
Marco De Cicco, Eleonora Diociaiuti, Emilia Margoni,
Cristina Martellini, Carmen Monaco, Emanuele Navisse,
Irene Schiesaro, Valerio Serpente, Giulio Settanta,
Carlotta Trigila, Valentina Vecchio, Antonio Vigilante*

CORSO DI LAUREA IN FISICA
DIPARTIMENTO DI MATEMATICA E FISICA
UNIVERSITÀ DEGLI STUDI “ROMA TRE”



Quest'opera è stata rilasciata sotto la licenza Creative Commons Attribuzione-Non
Commerciale-Non opere derivate 2.5 Italia, vedi
<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/2.5/it/>

Versione: Gennaio 2024

Un ringraziamento a *Sergio Giannelli* per la copertina e un'accurata revisione tipografica degli *Appunti*.

Cover image licensed under CC BY-SA by Ruslan Julbarissow. <https://zerofy.de>

Premessa degli studenti

Gli *Appunti di Meccanica Quantistica* sono da anni il testo di riferimento per il corso di Istituzioni di Fisica Teorica del CdL in Fisica a Roma Tre e rappresentano un ottimo punto di partenza per chi si affaccia, per la prima volta, al vasto e complesso mondo della Meccanica Quantistica. Tutti noi ne abbiamo apprezzato la semplicità, la chiarezza e l'esaustività con cui gli argomenti del corso venivano affrontati. Eppure, sapevamo che la fruibilità degli *Appunti* potesse essere, in qualche modo, affinata. L'idea di base era quella di realizzare una sorta di "nuova edizione", in cui venissero curati maggiormente gli aspetti grafici (coinvolgendo l'indice, le figure e l'impaginazione), il tutto senza perdere il minimo dettaglio per ciò che riguarda le dimostrazioni e, in generale, gli argomenti trattati, che sono rimasti immutati.

Dato il vasto numero di argomenti trattati negli *Appunti*, la nostra idea ha richiesto un lungo tempo per la realizzazione ed ha coinvolto un team molto ampio di persone. Speriamo che il risultato vi sia utile e vi possa piacere: è il nostro piccolo regalo. Da studenti, per gli studenti.

Matteo Altorio
Ilaria Carlomagno
Paolo Costantini
Marco De Cicco
Eleonora Diociaiuti
Emilia Margoni
Cristina Martellini
Carmen Monaco
Emanuele Navisse
Irene Schiesaro
Valerio Serpente
Giulio Settanta
Carlotta Trigila
Valentina Vecchio
Antonio Vigilante

Premessa dell'autore

Questi *Appunti* non sono un *libro*. Nascono così, come *Appunti delle lezioni*, scritti in preparazione del corso di Meccanica Quantistica all'Università Roma Tre. Intendevo raccogliere in queste pagine quello che avrei voluto insegnare agli studenti della Meccanica Quantistica.

Questi *Appunti* non sono un libro, dunque, ma nascono certamente dai libri, in particolare dai testi citati nella successiva bibliografia. Gli autori di questi testi sono stati grandi didatti oltre che grandi fisici: Feynman, Landau, Sakurai. A loro devo certamente molto, come fisico ma anche come docente. Di mio, in questi *Appunti*, c'è la scelta dei contenuti, della successione con cui vengono presentati i vari argomenti, in molti casi una loro riformulazione. A partire dalla prima stesura, il testo è stato continuamente rivisto, integrato, modificato. Ogni lezione in classe è stata, ed è ancora oggi, per me l'occasione per ripensare qualcosa.

All'epoca della prima stesura degli *Appunti* il corso era denominato "Istituzioni di Fisica Teorica" e conteneva, oltre alla Meccanica Quantistica, anche una parte dedicata alla Meccanica Statistica. I contenuti di Meccanica Quantistica erano inoltre più estesi, e gli argomenti qui presentati nella PARTE III non rientrano oggi nel programma del corso di Meccanica Quantistica.

Per molti anni questi *Appunti* sono esistiti solo in forma manoscritta, nei miei quaderni, fotocopiati e messi a disposizione degli studenti sulla mia pagina web. Molte volte ho ricevuto la richiesta di riportarli in forma dattiloscritta, ma non mi sono mai risoluto. Le altre mie attività non mi lasciavano abbastanza tempo per dedicarmi alla riscrittura. Poi, per me completamente inaspettato, è giunto questo dono da parte di alcuni miei ex-studenti. Come scrivono nella loro premessa, "un piccolo regalo, da studenti, per gli studenti". Anche io li ringrazio calorosamente per questo regalo, e spero che lo sforzo da loro profuso in questa opera possa essere stato, almeno in parte, ricompensato da parte mia dalla passione e dall'impegno dedicato ad insegnare la fisica.

Roma, Settembre 2019

Indice

I	PARTE I	1
1	Crisi della fisica classica	2
1.1	Lo spettro di corpo nero	4
1.2	L'effetto fotoelettrico	9
1.3	L'effetto Compton	11
1.4	Diffrazione degli elettroni e relazione di De Broglie	12
1.5	L'esperimento di Rutherford e gli spettri atomici	14
1.6	Modello di Bohr dell'atomo di idrogeno (1913)	15
2	Onde e particelle	18
2.1	Principi base della Meccanica quantistica: probabilità e ampiezza di probabilità	23
2.2	Il principio di indeterminazione	24
2.2.1	Il principio di indeterminazione e l'esperimento delle due fen- diture	25
2.3	Appendice: la matematica dell'interferenza con il formalismo complesso	28
3	Vettori di stato ed operatori	32
3.1	L'esperimento di Stern e Gerlach	32
3.2	Esperimenti di Stern e Gerlach ripetuti	34
3.3	Vettori di stato bra e ket. Principio di sovrapposizione	39

3.4	Operatori. Rappresentazioni matriciali e relazione di completezza . . .	41
3.5	Prodotto di Operatori	45
3.6	Cambiamenti di Base e Trasformazioni Unitarie	46
3.7	Esempio: vettori di stato, operatori e rappresentazioni matriciali per particelle di spin $1/2$	50
4	Misure, osservabili e relazione di indeterminazione	57
4.1	Autovalori ed autovettori di osservabili	59
4.2	Autovettori di osservabili come vettori di base	60
4.2.1	Misure di osservabili e proiettori	62
4.3	Osservabili compatibili ed operatori commutanti	63
4.4	Osservabili incompatibili e relazione di indeterminazione	65
4.5	Esempio: autovalori ed autovettori dello spin per particelle di spin $1/2$ e relazioni di indeterminazione	67
5	Operatore posizione	72
5.1	Normalizzazione degli autostati dell'operatore posizione e funzione δ di Dirac	74
5.2	Operatori nella rappresentazione delle coordinate	76
5.3	Regole di commutazione per gli operatori posizione	77
6	Traslazioni e impulso	78
6.1	Le regole di commutazione canoniche e la relazione di indetermina- zione di Heisenberg	81
6.2	L'operatore impulso nella rappresentazione delle coordinate. Auto- funzioni dell'impulso	84
6.3	Funzioni d'onda nella rappresentazione degli impulsi	86
6.4	Pacchetti d'onda gaussiani	87
6.5	Operatore posizione nella rappresentazione degli impulsi	91
7	Evoluzione temporale ed equazione di Schrödinger	93

7.1	Evoluzione temporale degli stati. Operatore Hamiltoniano ed equazione di Schrödinger	93
7.2	Stati stazionari	95
7.3	Equazione d'onda di Schrödinger	97
7.4	Particella libera	100
7.5	Densità di corrente ed equazione di continuità	101
8	Problemi unidimensionali	104
8.1	Proprietà generali dell'equazione di Schrödinger	104
8.2	Buca di potenziale infinita (particella su un segmento)	105
8.2.1	Buca di potenziale infinita: caso 3D	109
8.3	Buca di potenziale finita: stati legati	110
8.4	Gradino di potenziale	114
8.5	Barriera di potenziale. Effetto tunnel	119
8.5.1	Emissione fredda	123
8.5.2	Decadimento α	124
8.6	Appendici sulla barriera di potenziale	126
8.6.1	Risoluzione esatta dell'equazione di Schrödinger senza l'ipotesi $\lambda a \gg 1$	126
8.6.2	Risoluzione dell'equazione di Schrödinger in termini di funzioni d'onda simmetriche e anti-simmetriche	128
9	Parità	131
10	Oscillatore Armonico	135
11	Simmetrie e leggi di conservazione	145
11.1	Derivata di un operatore rispetto al tempo	145
11.2	Simmetrie e leggi di conservazione in meccanica quantistica	148
11.3	Teorema di Ehrenfest	151
11.4	Teorema del viriale in meccanica quantistica	152

11.5 Rappresentazioni di Schrödinger e di Heisenberg ed equazioni del moto di Heisenberg	153
12 Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo	155
12.1 Caso non degenere	155
12.2 Caso degenere	159
13 Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo	162
13.1 Transizione per effetto di una perturbazione costante e relazione di indeterminazione tempo-energia	165
13.2 Transizioni per effetto di una perturbazione periodica	169
Appendice I: Coefficienti $c_n(t)$ al secondo ordine	170
Appendice II: Trattazione della perturbazione costante con la teoria delle perturbazioni indipendente dal tempo	171
Appendice III: Determinazione dell'integrale di Dirichelet	173
II PARTE II	175
14 Rotazioni e momento angolare	176
14.1 Rotazioni, momento angolare e regole di commutazione	176
14.2 Autovalori, autostati ed elementi di matrice degli operatori di momento angolare	181
15 Momento angolare orbitale	186
15.1 Gli operatori del momento angolare orbitale	186
15.2 Autovalori del momento angolare orbitale e armoniche sferiche	188
Appendice I: rappresentazione degli operatori di momento angolare orbitale in coordinate polari	191
Appendice II: calcolo delle funzioni $\Theta_{l,m}(\theta)$ e polinomi di Legendre	194
16 Spin	204
16.1 Operatori di spin e formalismo di Pauli per spin 1/2	206

17	Composizione dei momenti angolari	209
17.1	Coefficienti di Clebsch-Gordan	212
17.2	Composizione di due momenti angolari di spin 1/2. Stati di tripletto e di singoletto	213
18	Particelle identiche	216
18.1	Funzioni d'onda per un sistema composto da due particelle identiche ed interazione di scambio	221
19	Atomo di idrogeno	224
19.1	Il problema dei due corpi e il moto in un campo centrale	224
19.1.1	Moto del centro di massa e moto relativo	224
19.1.2	Moto relativo in coordinate polari	226
19.1.3	Equazione radiale	228
19.2	Campo coulombiano	230
19.2.1	Potenziale efficace ed equazione radiale	230
19.2.2	Soluzioni asintotiche	232
19.2.3	Soluzione esatta	233
	Appendice: degenerazione dei livelli nel moto unidimensionale	237
III	PARTE III [NON IN PROGRAMMA]	245
20	Correzioni relativistiche all'atomo di idrogeno	246
20.1	Termine cinetico	246
20.2	Accoppiamento spin-orbita	247
20.3	Calcolo perturbativo delle correzioni	248
21	Particella in un campo elettromagnetico esterno	254
22	Atomo in un campo elettrico	257
22.1	Effetto Stark quadratico e lineare	257

Appendice: Parità degli autostati del momento angolare orbitale . . .	263
23 Atomo in un campo magnetico	265
23.1 Effetto Zeeman	265
23.2 Effetto Paschen-Back	267
Appendice: Composizione dei momenti angolari orbitale e di spin per una particella di spin $1/2$	268
IV APPENDICI	272
A Richiami di Meccanica Classica	273
A.1 Parentesi di Poisson	273
A.2 Trasformazioni Canoniche	274
A.3 Trasformazioni canoniche infinitesime e generatori	277
A.4 Simmetrie e leggi di conservazione	279
B Valori delle costanti fondamentali	281
B.1 Trucchi con le costanti fondamentali	281
B.2 Il raggio classico dell'elettrone	282
RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI	283

Parte I

Capitolo 1 | Crisi della fisica classica

Argomento di studio di questo corso è **la meccanica quantistica**.

La meccanica quantistica descrive **la materia e la luce (radiazione) in tutti i suoi aspetti, in particolare per quanto riguarda i fenomeni microscopici**, che avvengono cioè su scala atomica.

La meccanica quantistica, dunque, sostituisce le leggi della fisica “classica” (meccanica ed elettromagnetismo) nella descrizione più accurata della natura.

Manifestandosi principalmente nel comportamento di sistemi microscopici, la meccanica quantistica **descrive fenomeni completamente diversi da quelli ai quali ci ha abituato l’esperienza**. In questo risiede la principale **difficoltà** che incontriamo nel “capire” la meccanica quantistica. Formalmente la matematica che entra nella formulazione delle leggi quantistiche non è più complessa di quella richiesta dalle leggi classiche (è la matematica delle onde e degli spazi vettoriali complessi).

Lo sviluppo della meccanica quantistica ha rappresentato, insieme a quello della teoria della relatività, una **rivoluzione scientifica** nel ventesimo secolo. Per quanto riguarda la meccanica quantistica, questo è dovuto non solo all’introduzione di leggi nuove ma anche e soprattutto al carattere di queste nuove leggi. In particolare, **le leggi quantistiche non sono deterministiche, nel senso classico**. Non si possono prevedere gli eventi che occorreranno nell’evoluzione di un sistema fisico, ma solo le **probabilità** con cui diversi eventi potranno occorrere. E questa caratteristica non è determinata da una nostra conoscenza incompleta del sistema fisico (come nel lancio di un dado) o della teoria stessa, ma è intrinseca nel mondo fisico. **Non esistono “variabili nascoste”**, come alcuni fisici hanno per un certo tempo ipotizzato. La non esistenza di variabili nascoste locali è un fatto oggi accertato sperimentalmente, mediante lo studio delle **disuguaglianze di Bell**.

Per illustrare meglio il percorso che ha condotto allo sviluppo della meccanica quantistica ricordiamo sommariamente **qual era la fisica classica**, ossia la fisica conosciuta **prima del ’900**. A quell’epoca i fisici ritenevano di avere oramai compreso le leggi fondamentali in grado di spiegare, almeno in principio, qualunque fenomeno fisico.

Nel **1600** si era giunti, grazie in particolare all’opera di **Newton**, alla formula-

zione completa delle **leggi del moto** (meccanica). In particolare la seconda legge del moto, $\vec{F} = m\vec{a}$, è un'equazione che può essere integrata: note le posizioni e le velocità iniziali delle parti che costituiscono un sistema, è possibile determinare con esattezza le posizioni e le velocità di queste parti ad un qualunque istante di tempo successivo. In questa possibilità risiede il **carattere deterministico della meccanica classica**.

Nota l'equazione del moto, compito della fisica diventa lo studio delle **forze**. Lo stesso Newton comprende la **gravitazione** e formula la sua legge di gravitazione universale.

Lo studio dei **fenomeni elettrici e magnetici** conduce ad una loro descrizione esaustiva nella seconda metà dell' '800, con la formulazione delle **equazioni di Maxwell**. Queste evidenziano la completa unificazione dei fenomeni elettrici e magnetici, che sono diversi aspetti dello stesso fenomeno e che si evidenziano a seconda del sistema di riferimento dal quale vengono osservati.

Le equazioni di Maxwell mostrano inoltre come i campi elettrico e magnetico si propagano tramite **onde elettromagnetiche**, di cui la **luce** (visibile) non è che un esempio in un particolare intervallo di lunghezze d'onda. Questo risultato sembrava porre fine all'antica diatriba circa la **natura ondulatoria o corpuscolare della luce**. La prima ipotesi, sviluppata in particolare da Huygens alla fine del 1600, era supportata ad esempio dall'osservazione che due raggi di luce che si incrociano si attraversano l'un l'altro senza interferire minimamente tra loro, fenomeno che sembrava più difficilmente spiegabile con l'ipotesi che la luce fosse costituita da particelle. La teoria corpuscolare della luce era invece sostenuta in quegli stessi anni da Newton, e sembrava spiegare in modo più naturale il fenomeno della dispersione della luce in un prisma, studiato in dettaglio dallo stesso Newton. Già nel corso del 1700, tuttavia, e poi nei primi anni del 1800 con gli esperimenti di Young, l'ipotesi corpuscolare venne messa fortemente in crisi dall'osservazione dei fenomeni prettamente ondulatori della luce, quali l'interferenza e la diffrazione. La conclusione, apparentemente definitiva, fornita dalla teoria di Maxwell era destinata tuttavia ad essere messa nuovamente in discussione nei primi anni del '900.

Più in generale, nel periodo che va dalla fine del diciannovesimo secolo ai primi anni del ventesimo secolo, una serie di risultati sperimentali, riguardanti fenomeni che avvengono su scala atomica, hanno portato ad una **crisi della fisica classica**. L'interpretazione di questi risultati ha richiesto un cambiamento radicale nelle concezioni e nelle leggi classiche fondamentali, ed ha portato allo sviluppo della meccanica quantistica. Discutiamo di seguito alcuni di questi risultati che hanno evidenziato, in particolare, le **proprietà corpuscolari della radiazione** e, per contro, **proprietà ondulatorie della materia**.

1.1 Lo spettro di corpo nero

Tutti i corpi, investiti da una radiazione elettromagnetica, trasmettono, riflettono o assorbono la radiazione incidente. Un **corpo nero** è un corpo che **assorbe completamente la radiazione incidente**.

I corpi, se riscaldati ad una certa temperatura, emettono anche radiazione (avvertita, ad esempio, da una mano vicina ad un ferro da stiro caldo).

Indichiamo con $E(\omega, T)$ il **potere emissivo** di un corpo, ossia la quantità di energia emessa per unità di volume dal corpo, mediante radiazione di frequenza ω , quando questo viene riscaldato alla temperatura T . Analogamente, indichiamo con $A(\omega, T)$ il **potere assorbitivo**, ossia la frazione di energia che viene assorbita da un corpo, rispetto a quella totale incidente, quando questo viene investito da una radiazione di frequenza ω e si trova in equilibrio termico alla temperatura T .

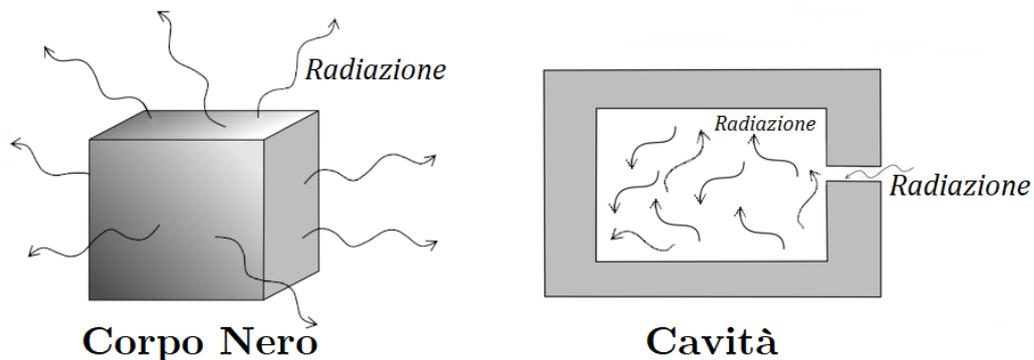
Era stato osservato da **Kirchoff**, nell'800, che il rapporto tra potere emissivo e potere assorbitivo di un corpo è una **funzione universale**, $u(\omega, T)$, ossia indipendente dal corpo:

$$\boxed{\frac{E(\omega, T)}{A(\omega, T)} = u(\omega, T)} \quad \text{Legge di Kirchoff} . \quad (1.1)$$

Per un corpo nero il potere assorbitivo è uguale ad uno, indipendentemente dalla frequenza e dalla temperatura. La funzione universale coincide pertanto con il potere emissivo del corpo nero:

$$\boxed{u(\omega, T) = E(\omega, T)|_{\text{corpo nero}}} . \quad (1.2)$$

Il potere emissivo del corpo nero coincide anche con la distribuzione della densità di energia della **radiazione elettromagnetica in equilibrio termico all'interno di una cavità** a temperatura T . Se immaginiamo di praticare un piccolo foro nella



cavità, questa si comporta come un “corpo nero”: assorbe la radiazione incidente su tutte le frequenze, perché un raggio che entra non può più uscire.

Il problema nello studio del potere emissivo del corpo nero era rappresentato dalla **discrepanza tra le osservazioni sperimentali e la descrizione teorica**.

La descrizione teorica dello spettro di energia del corpo nero riguardava due regioni: **a basse frequenze** risultava valida la previsione della fisica classica, espressa dalla cosiddetta **formula di Rayleigh-Jeans**:

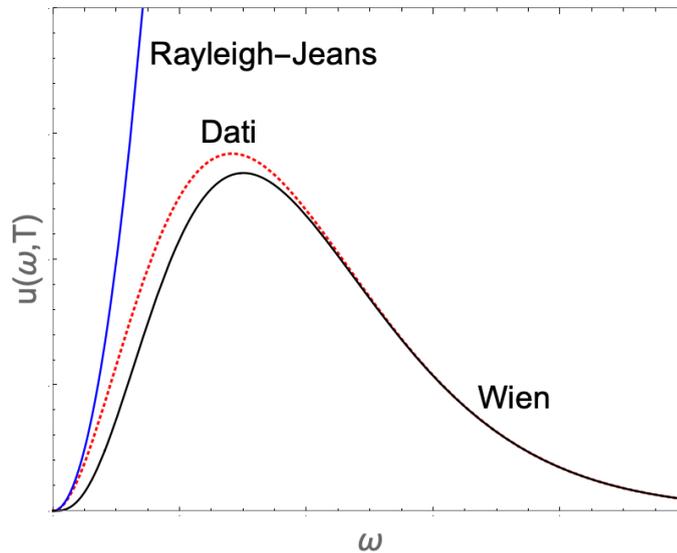
$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} KT \quad [\text{piccoli } \omega] , \quad (1.3)$$

dove K è la costante di Boltzmann e c la velocità della luce.

Ad **alte frequenze** risultava invece valida una formula empirica, senza interpretazione teorica fondamentale, detta **formula di Wien**:

$$u(\omega, T) = C \omega^3 e^{-\lambda\omega/T} \quad [\text{grandi } \omega] , \quad (1.4)$$

con C e λ costanti. Come è mostrato in figura, né la formula classica, né la formula empirica di Wien descrivevano la distribuzione spettrale nella regione di frequenze intermedie.



Osserviamo anche che la formula di Rayleigh-Jeans non poteva comunque, in generale, essere corretta perché conduce ad una densità di energia totale, integrata su tutte le frequenze, infinita (“**catastrofe ultravioletta**”):

$$E(T) = \int_0^{\infty} d\omega u(\omega, T) \stackrel{R.J.}{=} \frac{KT}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} d\omega \omega^2 = \infty ! \quad (1.5)$$

Nel **1900**, **Max Planck** derivò la sua famosa formula per lo spettro di corpo nero mediante un’ingegnosa interpolazione tra la formula di Rayleigh-Jeans e la formula di Wien. La **formula** suggerita da **Planck**,

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/KT} - 1} \quad (1.6)$$

risultava in perfetto accordo con le misure sperimentali. Il valore ottenuto per la costante \hbar , denominata **costante di Planck**, è

$$\hbar = 1.054 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{s} \quad (1.7)$$

Questa costante giocherà un ruolo fondamentale nella meccanica quantistica.

È immediato verificare come nei limiti di basse ed alte frequenze la formula di Planck riproduca correttamente gli andamenti già noti:

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/KT} - 1} \quad \begin{array}{l} \nearrow_{\hbar\omega \ll KT} \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} KT \quad [\text{Rayleigh-Jeans}] \\ \searrow_{\hbar\omega \gg KT} \frac{h}{\pi^2 c^3} \omega^3 e^{-\hbar\omega/KT} \quad [\text{Wien}] \end{array} \quad (1.8)$$

Il perfetto accordo della sua formula con i risultati delle misure sperimentali indusse Planck a cercarne una **spiegazione teorica**. Planck trovò che la sua formula per lo spettro di corpo nero poteva essere derivata assumendo che **l'energia del campo elettromagnetico** a frequenza ω non potesse variare con continuità tra zero e infinito, come predetto dalla fisica classica, ma **dovesse essere necessariamente un multiplo intero di un "quanto" minimo di energia ε** , legato alla frequenza ω da:

$$\varepsilon = \hbar\omega \quad (1.9)$$

L'energia del campo elettromagnetico può dunque essere solo della forma:

$$E_n = n\varepsilon = n\hbar\omega \quad , \quad n = 0, 1, 2... \quad (1.10)$$

Per comprendere come l'ipotesi di discretizzazione dell'energia (1.10) conduca alla formula di Planck (1.6) per lo spettro di corpo nero è utile discutere prima la derivazione della formula di Rayleigh-Jeans ottenuta utilizzando le leggi della fisica classica.

La formula classica di Rayleigh-Jeans era derivata calcolando il numero di modi normali di oscillazione della radiazione elettromagnetica con frequenza compresa tra ω ed $\omega + d\omega$ ed associando a ciascun modo un'energia media KT , in accordo con la legge classica di equipartizione dell'energia. Discutiamo la derivazione di entrambi questi risultati.

Calcoliamo il numero di modi normali di oscillazione della radiazione elettromagnetica con frequenza compresa tra ω ed $\omega + d\omega$. Un'onda che si propaga nella direzione x con vettore d'onda k_x , è descritta dalla funzione $e^{ik_x x}$. Poiché il campo elettromagnetico è contenuto in una cavità con volume finito, occorre fissare delle condizioni al bordo del volume, sebbene la specifica scelta di queste non sia rilevante per quanto segue. Se consideriamo condizioni al bordo periodiche, allora il vettore d'onda k_x è soggetto alla condizione:

$$e^{ik_x x} = e^{ik_x(x+L)} \Rightarrow e^{ik_x L} = 1 \Rightarrow k_x = \frac{2\pi}{L} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.11)$$

dove L è la lunghezza del volume nella direzione x . Il numero dn_x di modi normali di oscillazione con vettore d'onda k_x compreso tra k_x e $k_x + dk_x$ è allora:

$$dn_x = \frac{L}{2\pi} dk_x. \quad (1.12)$$

Considerando le 3 direzioni spaziali del vettore d'onda ed il fatto che per ciascun'onda di vettore \vec{k} esistono 2 gradi di polarizzazione indipendenti, otteniamo per il numero totale di oscillazioni con frequenza compresa tra ω e $\omega + d\omega$ il valore

$$dn = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k = V \frac{2 \cdot 4\pi}{8\pi^3} k^2 dk \stackrel{\omega=ck}{=} V \left(\frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \right) d\omega, \quad (1.13)$$

dove V è il volume della cavità. Pertanto, la quantità

$$\boxed{\frac{1}{V} \frac{dn}{d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}}, \quad (1.14)$$

che coincide con il primo fattore che entra nella formula di Rayleigh-Jeans (1.3), rappresenta il **numero di modi normali di oscillazione della radiazione, per unità di volume, con frequenza compresa tra ω e $\omega + d\omega$** .

Dimostriamo ora come il secondo fattore, KT , rappresenti secondo la fisica classica l'energia media di ciascun oscillatore armonico. A tale scopo è necessario introdurre alcuni concetti di **meccanica statistica**, che è quella parte della fisica che studia i sistemi costituiti da un numero molto grande di costituenti elementari.

Secondo la meccanica statistica, la probabilità che un sistema mantenuto in equilibrio termico alla temperatura T si trovi in uno stato s corrispondente ad un'energia E_s è data da:

$$\boxed{p(E_s) = \frac{1}{Z} e^{-E_s/KT}}, \quad (1.15)$$

dove Z , detta funzione di partizione, è l'opportuna costante di normalizzazione della probabilità:

$$\boxed{Z = \sum_s e^{-E_s/KT}}. \quad (1.16)$$

La sommatoria su s è estesa qui a tutti i possibili stati microscopici del sistema.

Ne segue anche, allora, che l'energia media di un sistema, mantenuto in equilibrio alla temperatura T , è data da:

$$\langle E \rangle = \sum_s E_s p(E_s) = \frac{1}{Z} \sum_s E_s e^{-E_s/KT}. \quad (1.17)$$

Ponendo $\beta = 1/(KT)$, è utile riscrivere l'energia media nella forma seguente:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s E_s e^{-\beta E_s} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_s e^{-\beta E_s} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}, \quad (1.18)$$

ossia l'energia media è legata alla funzione di partizione dalla semplice relazione

$$\boxed{\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}}. \quad (1.19)$$

Applichiamo ora questi concetti per calcolare l'energia media di un oscillatore armonico unidimensionale in equilibrio alla temperatura T . L'Hamiltoniana dell'oscillatore è:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (1.20)$$

e la "somma sugli stati" dell'oscillatore è un integrale su tutti i possibili valori di impulso e posizione:

$$\sum_s = \iint_{-\infty}^{+\infty} dp dx. \quad (1.21)$$

La funzione di partizione dell'oscillatore è allora:

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right)} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\beta \frac{1}{2}m\omega^2 x^2} = \left[s = \sqrt{\frac{\beta}{2m}} p, \quad s = \sqrt{\frac{\beta m \omega^2}{2}} x \right] \\ &= \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \sqrt{\frac{2}{\beta m \omega^2}} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{-s^2} \right)^2 = \frac{2}{\beta \omega} (\sqrt{\pi})^2 = \frac{2\pi}{\beta \omega}. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Utilizzando l'eq. (1.19) troviamo, dunque, il risultato cercato:

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \frac{2\pi}{\beta \omega} = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \beta = \frac{1}{\beta}, \quad (1.23)$$

ossia l'energia media di ciascun oscillatore è:

$$\boxed{\langle E \rangle = KT}. \quad (1.24)$$

Moltiplicando l'energia media di ciascun oscillatore per il numero di oscillatori (1.14) si ottiene la formula di Rayleigh-Jeans (1.3).

Mostriamo ora, invece, come con l'ipotesi che l'energia del campo elettromagnetico possa assumere solo i valori discreti espressi dall'eq. (1.10) si arrivi alla formula di Planck (1.6) per lo spettro di corpo nero. In questo caso, infatti, la funzione di partizione associata a ciascun modo normale a temperatura T è data da:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \hbar \omega} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \quad (1.25)$$

e l'energia media è, secondo la (1.19),

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \right) = \frac{e^{-\beta \hbar \omega} \hbar \omega}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}, \quad (1.26)$$

ossia

$$\boxed{\langle E \rangle = \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / kT} - 1}}. \quad (1.27)$$

Questa energia, moltiplicata per il numero di modi normali per unità di volume con frequenza compresa tra ω ed $\omega + d\omega$, fornito dalla formula (1.14), conduce alla formula di Planck.

Lo spettro di corpo nero sembrava dunque indicare che **la radiazione elettromagnetica si comporta come se fosse costituita da un insieme di “quanti” di energia, ciascuno con energia pari ad $\hbar \omega$.**

L'origine di questo comportamento risultava però ancora oscuro. Il passo successivo, che contribuì a chiarire la conclusione di Planck, si ebbe cinque anni dopo, con l'interpretazione fornita da Einstein dell'effetto fotoelettrico.

1.2 L'effetto fotoelettrico

L'**effetto fotoelettrico**, scoperto nel **1887** da **Hertz**, venne spiegato da **Einstein** nel **1905** utilizzando il concetto di natura quantistica (corpuscolare) della luce.

L'effetto fotoelettrico è il fenomeno per il quale quando una superficie metallica viene investita da un'onda luminosa può emettere elettroni.

L'effetto è caratterizzato dalle seguenti proprietà:

1. L'emissione o meno di elettroni dipende dalla **frequenza** della luce incidente. In generale esiste una **soglia** ω_s (che varia da metallo a metallo) per cui solo frequenze maggiori della soglia, $\omega > \omega_s$, producono la corrente fotoelettrica.

2. Il **numero di elettroni** emessi, quando vi sono, è proporzionale all'intensità della radiazione luminosa.
3. L'**energia degli elettroni** emessi è indipendente dall'intensità della luce ma varia linearmente con la frequenza della luce incidente.

Classicamente, l'effetto fotoelettrico, con le caratteristiche osservate, **risulta inspiegabile**. Secondo l'elettrodinamica classica, infatti, l'energia trasportata da un'onda elettromagnetica è proporzionale all'intensità dell'onda, ed indipendente dalla frequenza. Non è possibile pertanto spiegare perché l'effetto abbia una soglia dipendente dalla frequenza della radiazione incidente, e non dall'intensità, e perché anche l'energia dei fotoelettroni dipenda dalla frequenza.

Per spiegare l'effetto fotoelettrico **Einstein partì dall'ipotesi che la radiazione luminosa è costituita da quanti di energia**

$$\boxed{\boxed{E = \hbar\omega}}, \quad (1.28)$$

dove ω è la frequenza della luce.

L'**assorbimento da parte di un elettrone del metallo di un singolo quanto di luce**, o **fotone**, come venne in seguito chiamato, accresce l'energia dell'elettrone di una quantità $\hbar\omega$.

Una parte di questa energia, W , detta **funzione lavoro**, deve essere spesa per separare l'elettrone dal metallo. Questa energia varia da metallo a metallo. L'energia restante è disponibile come energia cinetica dell'elettrone fotoemesso.

La **conservazione dell'energia** nel processo implica pertanto la seguente relazione tra l'energia dell'elettrone e la frequenza ω della luce:

$$\boxed{\boxed{E_{el} = \frac{1}{2}mv^2 = \hbar\omega - W}}. \quad (1.29)$$

La presenza di una soglia ($\hbar\omega \geq W$) e la relazione lineare tra energia dell'elettrone e frequenza sono contenute in questa formula.

La proporzionalità tra numero di elettroni fotoemessi ed intensità della sorgente luminosa può pure essere spiegata in termini di quanti di luce: una sorgente di luce più intensa emette più fotoni e questi, a loro volta, liberano più elettroni.

La correttezza della formula di Einstein (1.29) venne verificata in una serie di esperimenti, in particolare da **Millikan**. L'effetto fotoelettrico venne così a costituire una delle forti evidenze sperimentali a favore della natura corpuscolare della luce.

Einstein ricevette il premio Nobel per l'interpretazione dell'effetto fotoelettrico nel 1921, sebbene ancora in quell'anno molti fisici non erano affatto convinti che l'interpretazione della luce in termini di particelle fosse corretta.

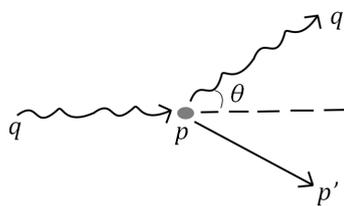
1.3 L'effetto Compton

L'effetto Compton (1922) è forse il fenomeno fisico che, più di ogni altro, ha fornito un'evidenza diretta della natura corpuscolare della luce.

Compton scoprì che la radiazione di una certa lunghezza d'onda (nella regione dei raggi x) fatta incidere su di un foglio metallico, veniva diffusa con lunghezza d'onda differente dalla lunghezza d'onda della luce incidente, e la differenza delle lunghezze d'onda dipendeva dall'angolo di diffusione.

Secondo l'elettrodinamica classica, la diffusione della luce è dovuta all'irraggiamento da parte degli elettroni atomici, che vengono posti in oscillazioni forzate dalla luce incidente. In questo caso, la lunghezza d'onda della luce diffusa è prevista essere uguale alla lunghezza d'onda della luce incidente. L'elettrone, infatti, è posto in oscillazione con la stessa frequenza dell'onda incidente e riemette poi radiazione sulla stessa frequenza (scattering Thomson).

Lo spostamento osservato nella lunghezza d'onda della luce diffusa venne spiegato da Compton considerando la radiazione incidente come fascio di fotoni di energia $\hbar\omega$. **I singoli fotoni vengono diffusi elasticamente dai singoli elettroni:**



Un fotone di frequenza ω e vettore d'onda \vec{k} ha energia $E = \hbar\omega$ ed impulso $\vec{q} = \hbar\vec{k}$. La relazione relativistica $E = cq$, valida per particelle di massa nulla, implica $\omega = c|\vec{k}|$. I 4-vettori energia-impulso per il fotone incidente ed il fotone diffuso sono dunque espressi da

$$q = \left(\frac{\hbar\omega}{c}, \hbar\vec{k} \right) \quad q' = \left(\frac{\hbar\omega'}{c}, \hbar\vec{k}' \right), \quad (1.30)$$

e si ha:

$$q^2 = q'^2 = 0. \quad (1.31)$$

Poiché l'elettrone si trova inizialmente in quiete, il suo 4-vettore energia-impulso prima dell'urto è dato da:

$$p = (mc, \vec{0}) \quad \text{con} \quad p^2 = m^2c^2. \quad (1.32)$$

La legge di **conservazione del 4-impulso** nel processo si scrive:

$$p + q = p' + q'. \quad (1.33)$$

Utilizziamo questa legge per derivare la relazione tra le frequenze del fotone incidente e diffuso. Si ha:

$$\begin{aligned} p'^2 &= m^2 c^2 = (p + q - q')^2 = p^2 + q^2 + q'^2 + 2pq - 2pq' - 2qq' = \\ &= m^2 c^2 + 2m \hbar \omega - 2m \hbar \omega' - 2 \frac{\hbar^2 \omega \omega'}{c^2} + 2\hbar^2 k k' \cos \theta, \end{aligned} \quad (1.34)$$

ossia, utilizzando $\omega = ck$ e $\omega' = ck'$,

$$\boxed{\omega - \omega' = \frac{\hbar}{mc^2} \omega \omega' (1 - \cos \theta)} . \quad (1.35)$$

Esprimiamo questo risultato in termini delle lunghezze d'onda dei fotoni incidente e diffuso. Queste sono legate alle frequenze dalla relazione:

$$\omega = ck = \frac{2\pi c}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}} . \quad (1.36)$$

Moltiplicando entrambi i membri dell'eq. (1.35) per $2\pi c/\omega\omega'$ si ottiene

$$\boxed{\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta)} , \quad (1.37)$$

che esprime lo spostamento della lunghezza d'onda del fotone diffuso, λ' , in termini della lunghezza d'onda del fotone incidente, λ . Questa previsione, nota come **formula di Compton**, risultò in perfetto accordo con i dati sperimentali.

Nella formula (1.37), la quantità h/mc , che ha dimensioni di una lunghezza, è detta **lunghezza d'onda Compton dell'elettrone** e vale:

$$\lambda_C \equiv \frac{h}{mc} \simeq 2.4 \cdot 10^{-10} \text{ cm} . \quad (1.38)$$

L'interpretazione dell'effetto Compton fornì l'**evidenza definitiva del comportamento corpuscolare della luce**. Poiché d'altra parte la radiazione elettromagnetica presenta anche proprietà ondulatorie, e dà luogo a fenomeni di interferenza e diffrazione, questi risultati dovevano portare ad un radicale cambiamento delle leggi classiche.

1.4 Diffrazione degli elettroni e relazione di De Broglie

Nel 1923 De Broglie avanzò l'ipotesi che la natura duale onda-particella della radiazione avesse la sua controparte in una natura duale onda-particella della materia.

Per un fotone la relazione tra impulso e lunghezza d'onda è data da:

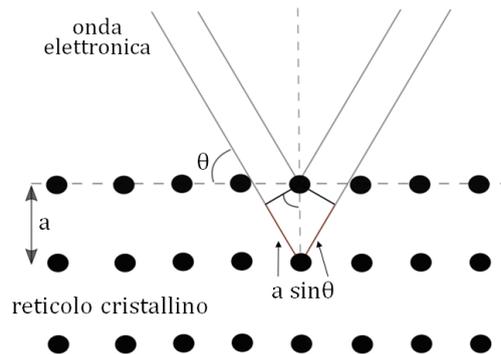
$$p = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}. \quad (1.39)$$

De Broglie ipotizzò che la stessa relazione fosse valida per le particelle della materia. In altri termini una particella di impulso p si comporta, sotto certe condizioni, come un'onda di lunghezza d'onda

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p}}. \quad (1.40)$$

Venne allora suggerito che l'ipotesi di De Broglie potesse essere verificata sperimentalmente osservando il fenomeno di **diffrazione degli elettroni**.

La diffrazione degli elettroni venne osservata in una serie di **esperimenti** da **Davisson e Germer** nel **1927**, che studiarono la **diffusione degli elettroni da una superficie di un cristallo**:



La differenza di fase tra due onde diffuse da piani adiacenti del reticolo cristallino è data da:

$$\delta = k \Delta x = \frac{2\pi}{\lambda} 2a \sin \theta. \quad (1.41)$$

Si osserverà allora interferenza costruttiva quando questa differenza è pari ad un multiplo intero di 2π : $k\Delta x = 2\pi n$, ossia:

$$\boxed{2a \sin \theta = n\lambda}. \quad (1.42)$$

Una figura di diffrazione, i cui massimi si presentano in corrispondenza degli angoli definiti dalla precedente equazione, venne effettivamente osservata negli esperimenti. La lunghezza d'onda, associata ad elettroni di impulso p , risultò inoltre in accordo con la formula di De Broglie (1.40). Questa osservazione rappresentò pertanto un passo fondamentale nella formulazione della **meccanica ondulatoria**.

1.5 L'esperimento di Rutherford e gli spettri atomici

Nel **1897 Thomson scopre** che all'interno dell'atomo sono contenute delle piccolissime particelle con carica elettrica negativa, **gli elettroni**. Gli atomi non sono dunque "indivisibili", come ritenuto sino ad allora, ma hanno una struttura interna, dei costituenti più piccoli. Inoltre, essendo l'atomo elettricamente neutro, la presenza degli elettroni implica che all'interno dell'atomo è contenuta anche una carica positiva, uguale e opposta a quella degli elettroni.

Nel **1908 Rutherford** effettuò un **esperimento per studiare la struttura atomica**. L'esperimento consisteva nel bombardare sottili fogli di metallo con particelle α , prodotte nel decadimento radioattivo. Il risultato inatteso fu che una significativa frazione di particelle α veniva deviata a grandi angoli di diffusione.

Il risultato dell'esperimento di Rutherford era inconsistente con le aspettative basate sul **modello di Thomson** dell'atomo. In questo modello si ipotizzavano gli elettroni immersi in una distribuzione di carica positiva, la cui estensione determina le dimensioni dell'atomo. Tuttavia gli elettroni non deviano le particelle α , avendo una massa circa 10^4 volte più piccola. Pertanto la sorgente che diffonde le particelle α deve essere la carica positiva, e grandi angoli di diffusione implicano che il potenziale sulla superficie della distribuzione di carica è grande. Questo a sua volta implica che la carica positiva è confinata in una regione di spazio molto più piccola dell'atomo.

Rutherford propose un **nuovo modello** in grado di spiegare i dati. In questo modello tutta la carica positiva (e quasi tutta la massa) è concentrata in una piccola regione al centro dell'atomo. Questo **nucleo** di carica positiva attrae gli elettroni, carichi negativamente, e, poiché la legge di forza ha un andamento $1/r^2$, **gli elettroni si muovono in orbite circolari od ellittiche attorno al nucleo**.

Sebbene in grado di spiegare quantitativamente i dati sperimentali relativi alla diffusione delle particelle α , il modello di Rutherford presentava **due insuperabili difficoltà**:

- **Manca un meccanismo per stabilizzare gli atomi**: gli elettroni in orbite circolari od ellittiche sono costantemente accelerati e, secondo la teoria elettrodinamica classica, dovrebbero irradiare. La continua perdita di energia condurrebbe, in un tempo molto breve (dell'ordine di 10^{-10} s) al collasso dell'atomo con gli elettroni che cadono sopra il nucleo.¹
- Il modello non è in grado di spiegare gli **spettri atomici**. Questi si osservavano

¹Il modello atomico di Rutherford è analogo al sistema dei pianeti che ruotano attorno al Sole. I pianeti tuttavia, a differenza degli elettroni, sono elettricamente neutri e dunque non emettono radiazione elettromagnetica. Allo stesso tempo, però, ruotando attorno al Sole i pianeti emettono onde gravitazionali. La potenza emessa dalla Terra nelle onde gravitazionali, ad esempio, ammonta a circa 200 watt, equivalente a quella di qualche lampadina, e del tutto insignificante dunque rispetto ad altri meccanismi (come le forze di marea) per i quali la Terra perde energia.

essere costituiti da righe con lunghezza d'onda λ determinate dalla relazione

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = \text{cost.} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)}, \quad (1.43)$$

dove n_1 ed n_2 sono numeri interi.

Queste evidenti difficoltà teoriche nell'interpretazione dei risultati sperimentali relativi alla struttura atomica giocarono un ruolo fondamentale nello sviluppo della teoria quantistica.

1.6 Modello di Bohr dell'atomo di idrogeno (1913)

Nel **1913 Bohr** formulò un **modello dell'atomo di idrogeno** che era in grado di riprodurre quantitativamente le principali caratteristiche dell'atomo e, in particolare, lo spettro osservato delle righe di emissione e assorbimento.

Il modello si basa su **tre ipotesi**:

- L'elettrone ruota attorno al nucleo su orbite stabili senza emettere radiazione.
- Le sole orbite consentite sono quelle per le quali il momento angolare risulta un multiplo intero della costante di Planck \hbar :

$$\boxed{L = mvr = n\hbar} . \quad (1.44)$$

- L'elettrone può effettuare transizioni discontinue tra due orbite consentite. Quando ciò accade viene emessa o assorbita radiazione di frequenza

$$\boxed{\hbar\omega = E - E'} , \quad (1.45)$$

dove $E - E'$ è la variazione di energia dell'elettrone tra le due orbite.

Studiamo allora le conseguenze di queste tre ipotesi del modello.

La stabilità di un'orbita è determinata dall'equilibrio tra la forza coulombiana e la forza centrifuga

$$F_{coul} = F_{centr} \quad \Rightarrow \quad \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} . \quad (1.46)$$

Questa condizione, unita alla (1.44), fornisce

$$\begin{cases} mv^2r = e^2 \\ mvr = n\hbar \end{cases} \quad \Rightarrow \quad v = \frac{e^2}{n\hbar} , \quad r = \frac{n\hbar}{mv} = \frac{n^2\hbar^2}{me^2} . \quad (1.47)$$

Dunque

$$\boxed{r = n^2 \frac{\hbar^2}{me^2} \equiv n^2 a_0}, \quad \boxed{\frac{v}{c} = \frac{1}{n} \frac{e^2}{\hbar c} \equiv \frac{\alpha}{n}}, \quad (1.48)$$

dove si sono introdotti il **raggio di Bohr**,

$$\boxed{a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ cm}} \quad (1.49)$$

e la **costante di struttura fine**²:

$$\boxed{\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}}. \quad (1.50)$$

I risultati (1.48) verranno poi riprodotti dalla meccanica quantistica in termini dei valori medi, $\langle 1/r \rangle = 1/(n^2 a_0)$ e $\langle v^2/c^2 \rangle = \alpha^2/n^2$.

Noti il raggio e la velocità dell'orbita possiamo calcolare l'**energia delle orbite elettroniche**. L'energia cinetica e potenziale sono date da:

$$\begin{aligned} T &= \frac{p^2}{2m} = \frac{mv^2}{2} = \frac{me^4}{2n^2\hbar^2} = \frac{1}{2n^2} mc^2\alpha^2, \\ V &= -\frac{e^2}{r} = -\frac{me^4}{n^2\hbar^2} = -\frac{1}{n^2} mc^2\alpha^2, \end{aligned} \quad (1.51)$$

da cui

$$\boxed{E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{2n^2} mc^2\alpha^2}. \quad (1.52)$$

Questo risultato per i livelli di energia sarà riprodotto esattamente dalla **meccanica quantistica**. Inoltre, i risultati ottenuti in (1.51) valgono anche meccanica quantistica rispettivamente per i valori medi di T e V .

L'espressione (1.52) per i livelli di energia dell'elettrone consente di calcolare, sulla base dell'ipotesi (1.45) del modello, le **frequenze delle righe di emissione e assorbimento dell'atomo**:

$$\boxed{\hbar\omega = E - E' = \frac{1}{2} mc^2\alpha^2 \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)}. \quad (1.53)$$

²In questo corso utilizziamo il sistema di unità CGS Gaussiano, in cui la costante di Coulomb, che nel sistema internazionale vale $k_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ (SI), e la costante che entra nella legge di Ampere, $k_2 = \frac{\mu_0}{4\pi}$ (SI), valgono rispettivamente $k_1 = 1$ (GAUSS) e $k_2 = \frac{1}{c^2}$ (GAUSS) (in qualunque sistema si ha $k_1/k_2 = c^2$). Osserviamo che il raggio di Bohr a_0 e la costante di struttura fine α , definiti in eq. (1.49) e (1.50), sono espressi nel sistema SI da $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$ (SI) e $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$ (SI).

Questo risultato, in accordo con le misure sperimentali e non spiegato altrimenti in alcun modo sino a quel momento, decretò l'**enorme successo del modello di Bohr**.

Più tardi, nel 1923, l'ipotesi di quantizzazione del momento angolare (1.44), introdotta "ad hoc" nel modello di Bohr, troverà una sua giustificazione nella teoria ondulatoria dell'elettrone formulata da De Broglie. Introducendo infatti la relazione di De Broglie tra impulso e lunghezza d'onda, $p = mv = h/\lambda$, nella condizione di Bohr (1.44), si ottiene

$$L = mvr = pr = \frac{h}{\lambda} r = n \hbar = n \frac{h}{2\pi}, \quad (1.54)$$

ossia

$$\boxed{2\pi r = n \lambda} . \quad (1.55)$$

Dunque, le orbite consentite nel modello di Bohr sono quelle a cui corrisponde un'onda elettronica stazionaria, la cui circonferenza cioè contiene un numero intero di lunghezze d'onda.

Capitolo 2 | Onde e particelle

La meccanica quantistica è la descrizione del comportamento della materia e della luce in tutti i suoi dettagli ed in particolare di ciò che avviene su scala atomica.

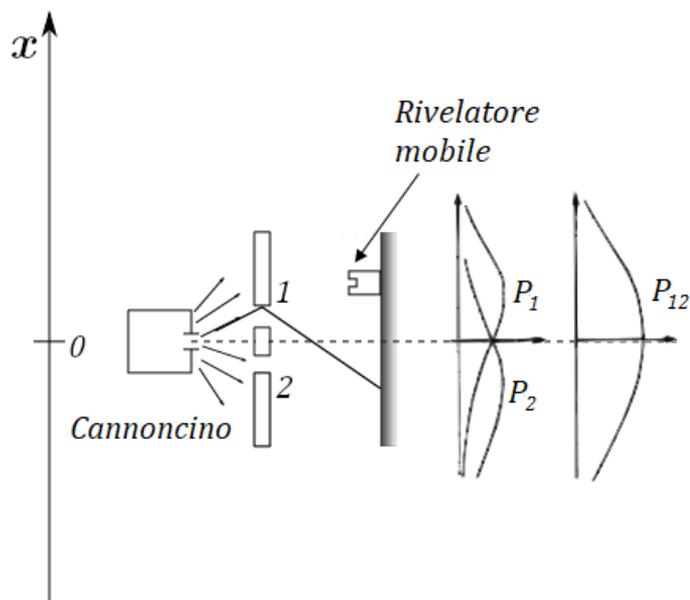
Gli oggetti su scala molto piccola non si comportano come nessuna cosa di cui si possa avere diretta esperienza. Sotto alcuni aspetti si comportano come onde, sotto altri come particelle, ma in effetti non si comportano come né l'una né l'altra cosa.

D'altra parte il **comportamento quantistico degli oggetti atomici** (elettroni, protoni, neutroni, fotoni e così via) **è lo stesso per tutti**: sono tutti “onde-particelle”, o qualunque altro nome gli si voglia dare.

Una descrizione coerente del comportamento della materia su scala microscopica venne dato, negli anni 1925-1927, principalmente da Heisenberg, Schrödinger, Dirac e Born.

Consideriamo qui le principali caratteristiche di tale descrizione, descrivendo un **“esperimento ideale”**, che mette a confronto, in una particolare situazione sperimentale, il comportamento quantistico degli elettroni con il comportamento di particelle classiche, quali pallottole, ed onde classiche, del tipo di quelle che si formano nell'acqua.

Un esperimento con pallottole



P_1 = probabilità che la pallottola giunga in x passando per il foro 1;

P_2 = probabilità che la pallottola giunga in x passando per il foro 2;

P_{12} = probabilità che la pallottola giunga in x passando per il foro 1 o per il foro 2.

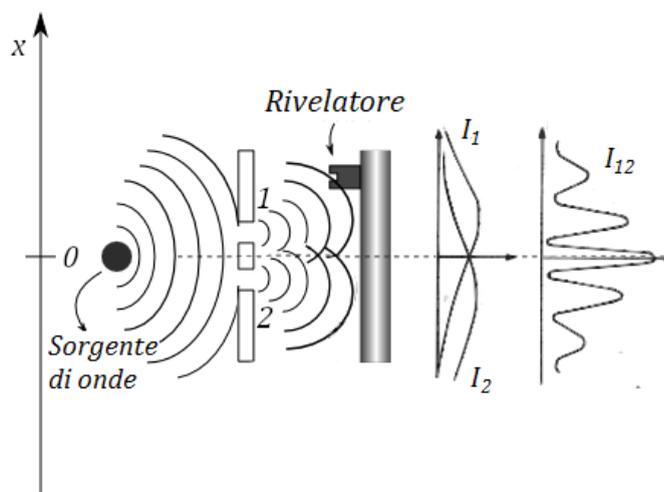
Risultato dell'esperimento:

- Le pallottole arrivano sempre a blocchi identici e distinti.
- L'effetto con entrambi i fori aperti è la somma degli effetti che si hanno quando è aperto ciascuno dei due fori da solo. Le probabilità vanno sommate:

$$\boxed{P_{12} = P_1 + P_2} \quad . \quad (2.1)$$

Non si osserva interferenza.

Un esperimento con onde (d'acqua)



I_1 = intensità misurata lasciando aperto solo il foro 1;

I_2 = intensità misurata lasciando aperto solo il foro 2;

I_{12} = intensità misurata lasciando aperti entrambi i fori.

Risultato dell'esperimento:

- L'intensità può assumere qualsiasi valore; non possiede una struttura *a blocchi*.
- L'intensità misurata quando entrambi i fori sono aperti **non è la somma di I_1 e I_2** : si ha **interferenza tra le due onde**.

Matematica dell'interferenza

Per la descrizione matematica dell'interferenza delle onde risulta particolarmente vantaggioso l'utilizzo del **formalismo complesso** (si veda a tal proposito l'appendice di questo capitolo). In questo formalismo, si introducono delle ampiezze complesse la cui parte reale coincide con l'ampiezza fisica dell'onda. Pertanto:

- $\text{Re}(h_1 e^{i\omega t})$ = altezza istantanea al rivelatore dell'onda proveniente dal foro 1;
- $\text{Re}(h_2 e^{i\omega t})$ = altezza istantanea al rivelatore dell'onda proveniente dal foro 2;
- $\text{Re}[(h_1 + h_2) e^{i\omega t}]$ = altezza istantanea al rivelatore dell'onda che arriva quando entrambi i fori sono aperti.

L'intensità è proporzionale all'ampiezza quadratica media, cioè, con il formalismo complesso, al modulo quadro dell'ampiezza. Tralasciando la costante di proporzionalità:

$$I_1 = |h_1|^2 \quad , \quad I_2 = |h_2|^2 \quad ,$$

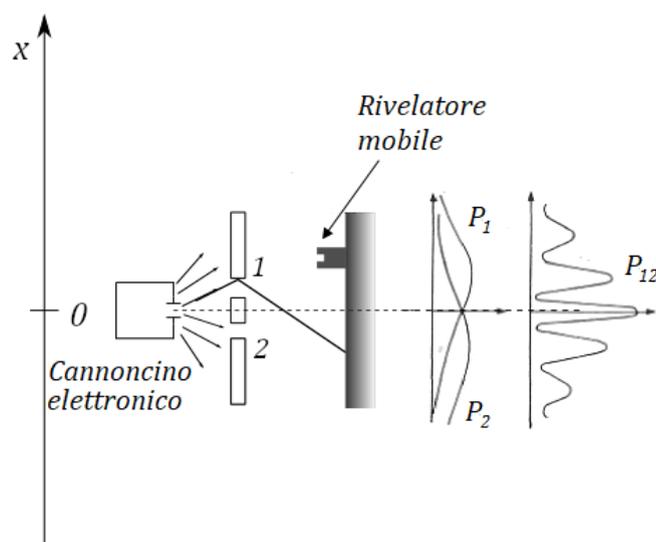
$$I_{12} = |h_1 + h_2|^2 = |h_1|^2 + |h_2|^2 + 2|h_1||h_2| \cos \delta \quad , \quad (2.2)$$

dove δ è la differenza di fase tra h_1 e h_2 (funzione di x). Allora, in termini di intensità:

$$I_{12} = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta \quad . \quad (2.3)$$

L'ultimo termine in questa espressione è il **termine di interferenza**.

Un esperimento con elettroni



P_1 = probabilità che l'elettrone giunga in x passando per il foro 1 (con il foro 2 chiuso);

P_2 = probabilità che l'elettrone giunga in x passando per il foro 2 (con il foro 1 chiuso);

P_{12} = probabilità che l'elettrone giunga in x con entrambi i fori aperti.

Risultato dell'esperimento:

- Gli elettroni arrivano sempre in granuli, tutti identici tra loro (come le pallottole).

- La probabilità P_{12} ottenuta con entrambi i fori aperti **non è la somma di P_1 e P_2** :

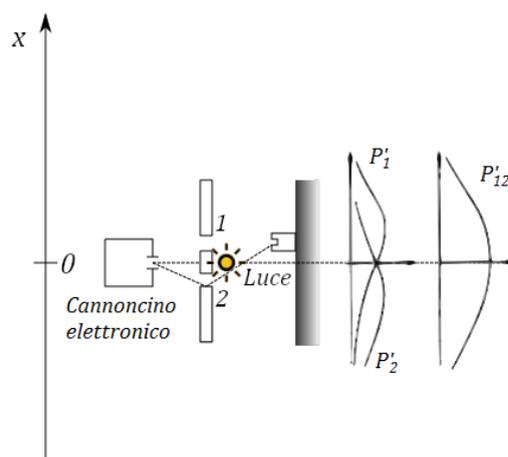
$$\boxed{P_{12} \neq P_1 + P_2} . \quad (2.4)$$

Se fosse vero che ciascun elettrone o attraversa il foro 1 oppure attraversa il foro 2 allora la probabilità P_{12} dovrebbe essere la somma di P_1 e P_2 . Si potrebbe pensare che gli elettroni seguano percorsi complicati, passando magari più volte per ciascun foro. Ma nemmeno questo è possibile:

- **Vi sono punti in cui** arrivano meno elettroni quando sono aperti entrambi i fori, ossia **la chiusura di un foro aumenta il numero di elettroni provenienti dall'altro.**
- **Al centro della curva,** P_{12} è maggiore della somma $P_1 + P_2$; è come se la chiusura di un foro diminuisse il numero di elettroni che escono dall'altro.

Osservazione degli elettroni

Poiché il numero di elettroni che arriva in un particolare punto non è uguale al numero di elettroni che arrivano passando dal foro 1 più quelli che passano dal foro 2, dobbiamo concludere che **non è vero che gli elettroni passano attraverso l'uno o l'altro dei fori 1 e 2**. Verifichiamo questa conclusione con un esperimento.



Aggiungiamo nell'apparato sperimentale una sorgente di luce, posta dietro allo schermo, a metà tra i due fori. Poiché le cariche elettriche diffondono la luce, quando un elettrone attraversa lo schermo con le due fenditure devierà verso il nostro occhio della luce e potremo *vedere* il cammino dell'elettrone stesso.

Risultato dell'esperimento:

- Gli elettroni che vengono osservati risultano essere passati o dal foro 1 o dal foro 2 ma non da tutti e due insieme.
- L'andamento di P'_1 e P'_2 , costruiti lasciando entrambi i fori aperti ma osservando da quale foro sia passato l'elettrone è uguale all'andamento di P_1 e P_2 osservato nel precedente esperimento chiudendo uno dei due fori. Quindi **gli elettroni che vediamo arrivare attraverso il foro 1 sono distribuiti nello stesso modo, indipendentemente dalla situazione del foro 2.**

La probabilità totale risulta dunque essere la somma delle probabilità

$$\boxed{P'_{12} = P'_1 + P'_2} . \quad (2.5)$$

Non c'è interferenza.

La distribuzione degli elettroni sullo schermo quando li osserviamo è differente da quella quando non li osserviamo.

Evidentemente la luce, nell'essere diffusa dagli elettroni, dà loro un colpo che ne fa mutare il movimento. Si può tentare allora di modificare l'esperimento in modo da osservare gli elettroni senza disturbarli troppo. Ma questo non risulta essere possibile. **È impossibile costruire un apparecchio per determinare da quale foro è passato l'elettrone che allo stesso tempo non perturbi l'elettrone sufficientemente da distruggere l'interferenza.** Se un apparecchio è capace di determinare da quale foro è passato l'elettrone non può essere così delicato da non alterarne in modo essenziale la distribuzione. Questo risultato è una conseguenza particolare del **principio di indeterminazione.**

2.1 Principi base della Meccanica quantistica: probabilità e ampiezza di probabilità

Sebbene i risultati dell'esperimento di interferenza degli elettroni possano apparire incomprensibili, la loro descrizione matematica è estremamente semplice: **la curva P_{12} , che si ottiene quando sono aperte entrambe le fenditure e non si osservano gli elettroni, è infatti proprio una curva di interferenza come I_{12} . La matematica è dunque quella dell'interferenza.**

I risultati dell'esperimento possono pertanto essere descritti introducendo due numeri complessi, ϕ_1 e ϕ_2 , funzioni di x . Si ha poi:

$$\boxed{P_1 = |\phi_1|^2 \quad , \quad P_2 = |\phi_2|^2 \quad , \quad P_{12} = |\phi_1 + \phi_2|^2} . \quad (2.6)$$

Quando invece si osserva attraverso quale fenditura sono passati gli elettroni, vale l'eq. (2.5).

Possiamo allora riassumere, in forma generale, le principali conclusioni dell'esperimento sopra descritto:

1. **La probabilità di un evento in un esperimento ideale è data dal quadrato del modulo di un numero complesso ϕ che viene detto ampiezza di probabilità:**

$$\begin{array}{l} P = \text{probabilità} \\ \phi = \text{ampiezza di probabilità} \\ P = |\phi|^2 \end{array} \quad . \quad (2.7)$$

2. **Quando un evento può avvenire secondo varie alternative, l'ampiezza di probabilità per l'evento è la somma delle ampiezze di probabilità per le varie alternative considerate separatamente. Si ha perciò interferenza:**

$$\begin{array}{l} \phi = \phi_1 + \phi_2 \\ P = |\phi_1 + \phi_2|^2 \end{array} \quad . \quad (2.8)$$

3. **Se si effettua un'esperienza capace di determinare se una o l'altra delle possibili alternative è effettivamente realizzata, la probabilità dell'evento è la somma delle probabilità per ciascuna delle alternative. Non si ha più interferenza:**

$$P = P_1 + P_2 \quad . \quad (2.9)$$

Sottolineiamo una differenza molto importante tra la meccanica classica e quella quantistica: **nella meccanica quantistica è impossibile prevedere esattamente ciò che accadrà in una data situazione. La sola cosa che è possibile prevedere è la probabilità di eventi differenti.**

2.2 Il principio di indeterminazione

La presenza di interferenza nell'esperimento delle due fenditure, con gli elettroni, mette in risalto come, nel caso di particelle microscopiche, il **concetto di traiettoria**, che sta a fondamento della meccanica classica, **viene a perdere di significato nella meccanica quantistica.**

Tale circostanza trova la sua espressione nel cosiddetto **principio di indeterminazione**, uno dei principi basilari della meccanica quantistica, scoperto da **Heisenberg** nel **1927**.

Se, in seguito ad una misura, ad un elettrone vengono assegnate coordinate determinate, esso non ha, in generale, nessuna velocità determinata. Viceversa se è dotato di una velocità determinata, l'elettrone non potrà avere una posizione determinata nello spazio. Infatti **l'esistenza simultanea ad ogni istante delle coordinate e delle velocità, o degli impulsi, significherebbe l'esistenza di una traiettoria determinata, che l'elettrone non ha.**

Di conseguenza nella meccanica quantistica **le coordinate e l'impulso dell'elettrone sono grandezze che non possono essere misurate con precisione allo stesso istante, cioè non possono avere simultaneamente valori determinati. Si può dire che le coordinate e l'impulso dell'elettrone sono grandezze non esistenti simultaneamente.**

Una formulazione matematica del principio di indeterminazione è data dalla relazione:

$$\boxed{\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (2.10)$$

È importante sottolineare come il principio di indeterminazione esprima un limite non legato in alcun modo alla misura, ma ad una proprietà intrinseca dei sistemi fisici. Ciascuna misura, sia essa di posizione o di impulso, può essere effettuata con accuratezza in linea di principio arbitraria. A seguito della misura di posizione o di impulso, tuttavia, l'indeterminazione sull'impulso o sulla posizione risulterà variata in accordo con quanto imposto dal principio di indeterminazione.

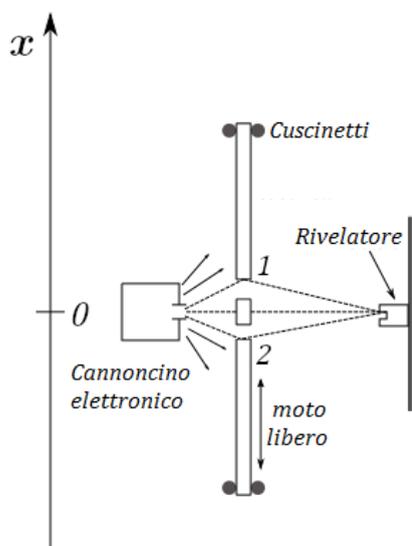
Risulterà ora anche chiaro quanto affermato in precedenza, riguardo all'impossibilità nell'esperimento di interferenza di misurare la posizione dell'elettrone senza alterarne lo stato. Osservare dove passa l'elettrone vuol dire determinarne più precisamente la posizione e dunque, in accordo con il principio di indeterminazione, modificarne lo stato, per posizione e impulso.

2.2.1 Il principio di indeterminazione e l'esperimento delle due fenditure

Mostriamo, in un caso particolare, come il principio di indeterminazione di Heisenberg debba essere valido al fine di evitare situazioni inconsistenti. L'argomento che riportiamo qui di seguito è ripreso dal dibattito tra Einstein e Bohr al congresso Solvay nel 1927.

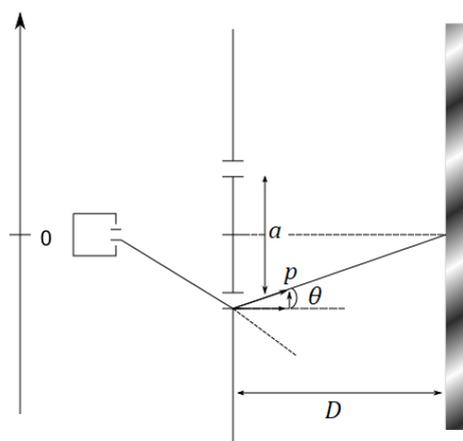
Immaginiamo di modificare l'esperimento di interferenza degli elettroni sostituendo la parete fissa, con le due fenditure, con una lamina montata su due cuscinetti

che si può muovere liberamente in direzione dell'asse x (vedi figura seguente).



Osservando il moto della lamina possiamo provare a determinare attraverso quale foro passa un elettrone. Consideriamo infatti il caso in cui il rivelatore sia posto in $x = 0$. Ci aspettiamo che un elettrone che passi per il foro 1 debba essere deflesso verso il basso dalla lamina per poter arrivare al rivelatore. Poiché la componente verticale dell'impulso dell'elettrone è variata, la lamina deve muoversi in direzione opposta con lo stesso impulso. La lamina riceverà quindi una spinta verso l'alto. Se invece l'elettrone passa dal foro inferiore la lamina dovrebbe subire una spinta verso il basso. È chiaro che per ogni posizione del rivelatore l'impulso ricevuto dalla lamina avrà un valore differente a seconda che l'elettrone attraversi il foro 1 o il foro 2. Quindi, **senza per nulla perturbare gli elettroni, ma solo osservando la lamina, possiamo determinare il percorso scelto dall'elettrone.**

Tuttavia, per determinare di quanto è variato l'impulso della lamina dopo il passaggio dell'elettrone occorre conoscere l'impulso di questa prima che l'elettrone la attraversi. Calcoliamo l'impulso che l'elettrone trasmette alla lamina attraversando un foro:



$$\tan \theta \simeq \theta \simeq \frac{a}{2D}$$

L'impulso trasmesso è dell'ordine di

$$\Delta p \simeq 2p_x = 2p \sin \theta \simeq \frac{pa}{D} \quad , \quad (2.11)$$

e questa quantità rappresenta anche l'incertezza massima con la quale è necessario conoscere l'impulso della lamina prima che l'elettrone l'attraversi, per poter distinguere se l'elettrone è passato attraverso il foro 1 o il foro 2.

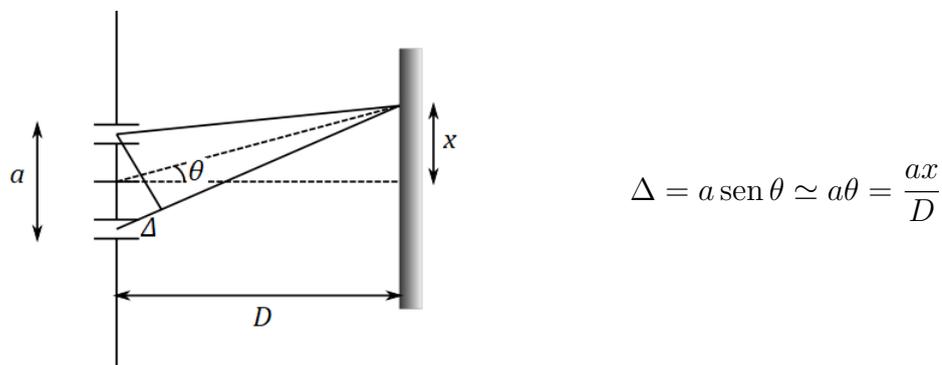
In base al **principio di indeterminazione**, se l'impulso è noto con una precisione maggiore di Δp , allora **la posizione della lamina stessa non può essere conosciuta con una precisione maggiore di:**

$$\Delta x \approx \frac{\hbar}{\Delta p} \approx \frac{\hbar D}{pa} \approx \frac{\lambda D}{a} \quad , \quad (2.12)$$

dove $\lambda = h/p$ è la lunghezza d'onda di De Broglie associata all'elettrone che si muove con impulso p .

L'incertezza Δx è allora anche l'incertezza con cui è definita la posizione delle due fenditure, che saranno quindi in diverse posizioni per ogni elettrone che le attraversi. Questo significa che **il centro delle frange di interferenza avrà una posizione differente per i vari elettroni.**

Dimostriamo ora che la lunghezza Δx , di cui oscillano lungo l'asse x le frange di interferenza, è circa uguale alla distanza tra due massimi vicini. **Un tale movimento, che avviene a caso, è giusto sufficiente a distruggere le oscillazioni di intensità e quindi a far sì che non si osservi più interferenza.**



La differenza di fase tra le onde che giungono nel punto x dalle due fenditure è:

$$\delta = k \Delta = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{ax}{D} \quad . \quad (2.13)$$

I massimi di interferenza si hanno quando la differenza di fase δ è pari ad un multiplo intero di 2π , ossia $\delta = 2\pi n$, cioè nei punti di coordinate

$$x_n = \frac{\lambda D}{a} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.14)$$

Due massimi consecutivi si trovano dunque a distanza

$$\boxed{\Delta x = \frac{\lambda D}{a}}, \quad (2.15)$$

che coincide proprio, secondo l'eq. (2.12), con lo spostamento tipico del centro delle frange di interferenza per ciascun elettrone.

Il principio di indeterminazione garantisce quindi che l'aver osservato la fenditura attraverso la quale è passato l'elettrone porta alla scomparsa dell'interferenza.

2.3 Appendice: la matematica dell'interferenza con il formalismo complesso

In questa appendice discutiamo la trattazione matematica dell'interferenza con il **formalismo complesso**.

È utile a tale scopo ricordare prima la trattazione con il **formalismo reale**. Consideriamo dunque la sovrapposizione di due onde prodotte da sorgenti monocromatiche di ampiezze

$$\boxed{\vec{A}_1 = \vec{A}_{01} \cos(\omega t + \varphi_1)} \quad , \quad \boxed{\vec{A}_2 = \vec{A}_{02} \cos(\omega t + \varphi_2)} \quad , \quad (2.16)$$

dove si è inclusa nelle fasi φ_1 e φ_2 anche la dipendenza dalle coordinate spaziali ($\varphi = \vec{k} \cdot \vec{x} + \varphi_0$).

L'intensità I prodotta dalla sovrapposizione delle due onde è proporzionale al quadrato dell'ampiezza totale $\vec{A} = \vec{A}_1 + \vec{A}_2$. Omettendo la costante di proporzionalità, che è irrilevante per quanto qui vogliamo discutere, si ha

$$I = A^2 = \left(\vec{A}_1 + \vec{A}_2 \right)^2 = A_{01}^2 \cos^2(\omega t + \varphi_1) + A_{02}^2 \cos^2(\omega t + \varphi_2) + 2 \vec{A}_{01} \cdot \vec{A}_{02} \cos(\omega t + \varphi_1) \cos(\omega t + \varphi_2) . \quad (2.17)$$

Nella maggior parte dei casi di interesse pratico, il tempo di osservazione delle onde è molto maggiore del periodo di oscillazione delle stesse, e quello che si osserva

in effetti è un'intensità media nel tempo. Prendiamo allora dell'eq. (2.17) la media sul tempo, definita, per una generica funzione $f(t)$, come

$$\langle f(t) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt f(t) . \quad (2.18)$$

Indicando per semplicità ancora con I l'intensità media nel tempo, si ha allora

$$I = A_{01}^2 \langle \cos^2(\omega t + \varphi_1) \rangle + A_{02}^2 \langle \cos^2(\omega t + \varphi_2) \rangle + 2 \vec{A}_{01} \cdot \vec{A}_{02} \langle \cos(\omega t + \varphi_1) \cos(\omega t + \varphi_2) \rangle . \quad (2.19)$$

Calcoliamo le medie temporali:

$$\begin{aligned} \langle \cos(\omega t + \varphi_1) \cos(\omega t + \varphi_2) \rangle &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \cos(\omega t + \varphi_1) \cos(\omega t + \varphi_2) = \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \frac{1}{2} [\cos(2\omega t + \varphi_1 + \varphi_2) + \cos(\varphi_1 - \varphi_2)] = \\ &= \frac{1}{2} \cos(\varphi_1 - \varphi_2) , \end{aligned} \quad (2.20)$$

da cui segue anche, ponendo nella (2.20) $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi$,

$$\langle \cos^2(\omega t + \varphi) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \cos^2(\omega t + \varphi) = \frac{1}{2} . \quad (2.21)$$

Sostituendo infine le medie temporali nell'eq. (2.19), si ottiene

$$\boxed{I = \frac{1}{2} [A_{01}^2 + A_{02}^2 + 2 \vec{A}_{01} \cdot \vec{A}_{02} \cos(\varphi_1 - \varphi_2)]} , \quad (2.22)$$

che rappresenta la ben nota formula dell'interferenza prodotta da due sorgenti monocromatiche puntiformi. L'ultimo termine nell'eq. (2.22) rappresenta in particolare il termine di interferenza.

Osserviamo che se le due onde hanno polarizzazioni ortogonali, ossia $\vec{A}_{01} \cdot \vec{A}_{02} = 0$, il termine di interferenza è nullo. Si può inoltre verificare facilmente che il termine di interferenza è nullo anche per onde con diversa frequenza ($\omega_1 \neq \omega_2$), giacchè in questo caso risulta nulla la media sul tempo di eq. (2.20).

Mostriamo ora come allo stesso risultato di eq. (2.22) si giunga, anche più semplicemente, utilizzando il **formalismo complesso delle onde**. Poichè, come abbiamo visto, il termine di interferenza è nullo per polarizzazioni ortogonali, consideriamo direttamente il caso di onde polarizzate nella stessa direzione. Scriviamo quindi le ampiezze di eq. (2.16) nella forma scalare

$$A_1 = A_{01} \cos(\omega t + \varphi_1) \quad , \quad A_2 = A_{02} \cos(\omega t + \varphi_2) . \quad (2.23)$$

L'idea alla base del formalismo complesso consiste nell'introdurre, in luogo delle ampiezze reali (2.23), due ampiezze complesse, \bar{A}_1 e \bar{A}_2 , le cui parti reali coincidano con le ampiezze fisiche (2.23),

$$\boxed{\bar{A}_1 = A_{01} e^{i(\omega t + \varphi_1)}} \quad , \quad \boxed{\bar{A}_2 = A_{02} e^{i(\omega t + \varphi_2)}} \quad . \quad (2.24)$$

L'ampiezza complessa risultante, $\bar{A} = \bar{A}_1 + \bar{A}_2$, è allora data da

$$\bar{A} = \bar{A}_1 + \bar{A}_2 = (A_{01} e^{i\varphi_1} + A_{02} e^{i\varphi_2}) e^{i\omega t} = \bar{A}_{12} e^{i\omega t} \quad , \quad (2.25)$$

dove si è posto

$$\bar{A}_{12} = A_{01} e^{i\varphi_1} + A_{02} e^{i\varphi_2} \quad . \quad (2.26)$$

Dall'eq. (2.25) segue allora che l'ampiezza fisica totale A , corrispondente alla parte reale di \bar{A} , è data da

$$A = \text{Re } \bar{A} = \text{Re}(\bar{A}_{12} e^{i\omega t}) = \text{Re}(|\bar{A}_{12}| e^{i\varphi} e^{i\omega t}) = |\bar{A}_{12}| \cos(\omega t + \varphi) \quad , \quad (2.27)$$

dove si è indicata con φ la fase di \bar{A}_{12} . Utilizzando l'eq. (2.21) per la media sul tempo, possiamo allora calcolare semplicemente l'intensità media,

$$I = \langle A^2 \rangle = |\bar{A}_{12}|^2 \langle \cos^2(\omega t + \varphi) \rangle = \frac{1}{2} |\bar{A}_{12}|^2 \quad , \quad (2.28)$$

o anche, ricordando l'eq. (2.26),

$$\boxed{I = \frac{1}{2} |A_{01} e^{i\varphi_1} + A_{02} e^{i\varphi_2}|^2} \quad . \quad (2.29)$$

Con il formalismo complesso delle onde, dunque, l'intensità media sul tempo si ottiene semplicemente prendendo il modulo quadro della somma delle due ampiezze complesse. Poichè $|e^{i\omega t}| = 1$, in luogo della (2.29) possiamo anche scrivere, equivalentemente,

$$\boxed{I = \frac{1}{2} |\bar{A}_1 + \bar{A}_2|^2} \quad , \quad (2.30)$$

dove \bar{A}_1 e \bar{A}_2 sono le ampiezze complesse di eq. (2.24). Esplicitando nell'eq. (2.29) il modulo quadro, si ottiene

$$\boxed{I = \frac{1}{2} [A_{01}^2 + A_{02}^2 + 2 A_{01} A_{02} \cos(\varphi_1 - \varphi_2)]} \quad , \quad (2.31)$$

in accordo con l'eq. (2.22). Si noti tuttavia la semplicità del formalismo complesso che, per determinare l'intensità media sul tempo, richiede solo di calcolare il modulo quadro dell'ampiezza complessa, come indicato dall'eq. (2.30).

Il vantaggio del formalismo complesso risulta ancora più evidente quando si vuole calcolare l'interferenza di un numero più elevato di sorgenti monocromatiche, o al limite anche un continuo di sorgenti. Ad esempio, nel caso di N sorgenti di ampiezze complesse

$$\bar{A}_1 = A_{01} e^{i(\omega t + \varphi_1)}, \dots, \bar{A}_N = A_{0N} e^{i(\omega t + \varphi_N)} \quad (2.32)$$

l'ampiezza totale è

$$\bar{A} = \bar{A}_1 + \dots + \bar{A}_N = (A_{01} e^{i\varphi_1} + \dots + A_{0N} e^{i\varphi_N}) e^{i\omega t} = |\bar{A}_{1N}| e^{i\varphi} e^{i\omega t}. \quad (2.33)$$

L'intensità totale media sul tempo risulta allora

$$I = \frac{1}{2} |\bar{A}_1 + \dots + \bar{A}_N|^2 = \frac{1}{2} |A_{01} e^{i\varphi_1} + \dots + A_{0N} e^{i\varphi_N}|^2, \quad (2.34)$$

ossia è data di nuovo dal modulo quadro della somma delle ampiezze complesse.

Capitolo 3 | Vettori di stato e operatori

Introduciamo qui il **formalismo generale** della meccanica quantistica descrivendo, in termini completamente quantistici, ancora un esperimento ideale. Questo esperimento è una generalizzazione di un famoso **esperimento** realizzato da **Stern e Gerlach** nel **1921**, che ha evidenziato la quantizzazione del momento angolare

3.1 L'esperimento di Stern e Gerlach

L'esperimento di Stern-Gerlach aveva come obiettivo la misura del momento magnetico degli atomi.

Esso consisteva nel far passare un fascio collimato di atomi di argento attraverso un campo magnetico non omogeneo.

Un atomo di momento magnetico $\vec{\mu}$, che si trova in un campo magnetico di intensità \vec{B} , diretto lungo l'asse z , acquista un'energia potenziale

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B \quad . \quad (3.1)$$

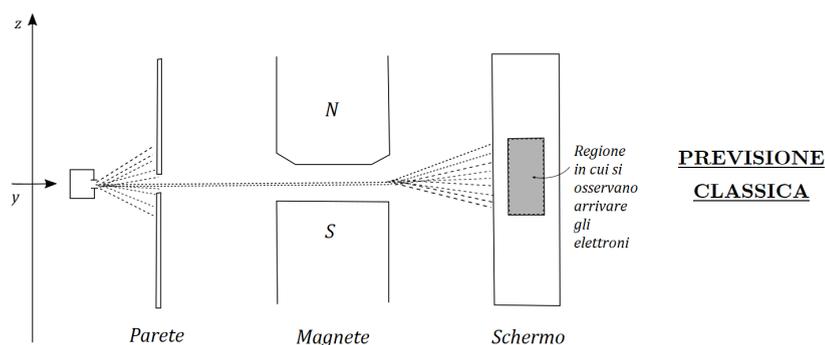
Se il campo magnetico non è omogeneo, ma la sua intensità varia lungo l'asse z , allora l'atomo è soggetto ad una forza

$$F_z = -\frac{\partial V}{\partial z} = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z} \quad . \quad (3.2)$$

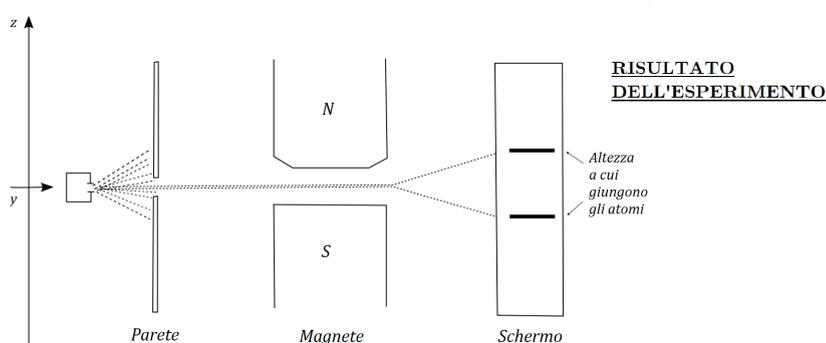
Nell'esperimento di Stern e Gerlach il campo magnetico era orientato perpendicolarmente alla direzione di propagazione del fascio, dimodoché la forza F devia gli atomi dalla loro traiettoria iniziale.

Secondo la **teoria classica**, tutte le orientazioni del momento magnetico sono ugualmente possibili e la forza F può dunque assumere tutti i valori compresi tra $-\mu \partial B / \partial z$ e $+\mu \partial B / \partial z$. Atomi diversi verranno quindi differentemente deviati e

si dovrebbe osservare, sullo schermo che intercetta il fascio, che questo si è uniformemente sparpagliato su una regione limitata tra un valore massimo e minimo di altezza.



Il **risultato dell'esperimento**, invece, fu completamente diverso dalle aspettative classiche: il fascio di atomi si separò perfettamente in due. Si osservò cioè che **il momento magnetico dell'atomo non può prendere che due orientazioni discrete**: $\mu_z = \pm \mu$.



L'atomo di argento è costituito da un nucleo e 47 elettroni, dei quali 46 possono essere visualizzati come una nube elettronica simmetrica priva di momento angolare complessivo. Se ignoriamo lo spin nucleare (che è accoppiato molto debolmente con il campo magnetico), vediamo che l'atomo nel suo complesso ha un momento angolare dovuto unicamente al momento angolare di spin (ossia "intrinseco") del solo 47-esimo elettrone. Poiché il momento magnetico risulta proporzionale al momento angolare, **il risultato dell'esperimento di Stern e Gerlach dimostra che il momento angolare di spin dell'elettrone è quantizzato, e la sua componente z può assumere soltanto due valori discreti**. Questi valori sono:

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (3.3)$$

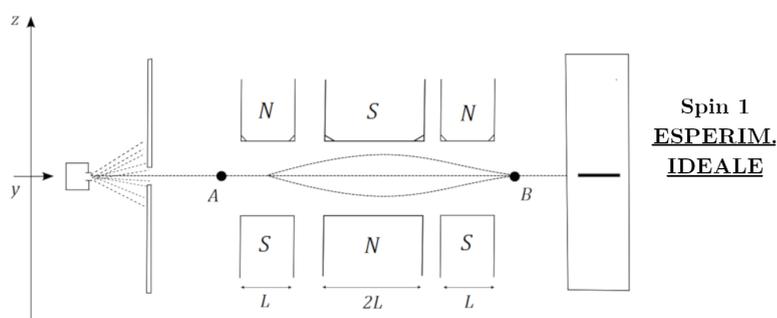
3.2 Esperimenti di Stern e Gerlach ripetuti

Per discutere il formalismo generale della meccanica quantistica consideriamo una **versione modificata e ideale dell'esperimento di Stern e Gerlach**.

Consideriamo in primo luogo particelle di **spin 1** che, nell'attraversare un apparecchio di Stern e Gerlach, si separano in tre fasci: un fascio è deviato verso l'alto, uno verso il basso ed uno non viene affatto deflesso. La componente z dello spin della particella può assumere i valori

$$S_z = 0, \pm \hbar \quad . \quad (3.4)$$

Consideriamo poi una versione modificata dell'apparecchio di Stern e Gerlach, rappresentata in figura:



Per la simmetria dell'apparecchio, il fascio di particelle che all'interno viene suddiviso in tre, esce comunque riunito.

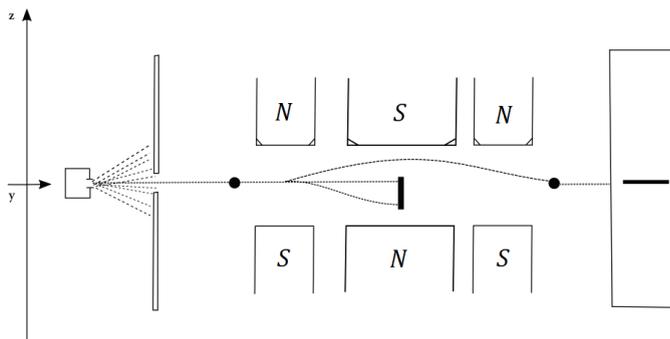
Per concentrarci solo su fenomeni che dipendono dallo spin degli atomi, e non dover includere effetti del moto sugli atomi che escono fuori, supponiamo che all'ingresso dell'apparecchio in A ci sia un meccanismo che fa partire gli atomi da fermi, e all'uscita dell'apparecchio in B ci sia un altro meccanismo atto a fermare gli atomi e a riportarli a riposo in B .

Per brevità di notazione, conveniamo di indicare l'apparecchio di Stern e Gerlach modificato con il simbolo:

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S, \quad (3.5)$$

dove $+$, 0 , $-$ indicano i tre diversi fasci in cui si suddivide, all'interno, il fascio originario. Poiché ci proponiamo di usare molti apparecchi insieme, e con diverse orientazioni, li distingueremo ognuno con una lettera in basso (S nell'esempio precedente).

Supponiamo inoltre che, con degli opportuni diaframmi, sia possibile bloccare all'interno dell'apparecchio uno o più dei tre fasci, permettendo solo agli altri il proseguimento del percorso. Indicheremo allora per esempio l'apparecchio



con il simbolo

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \quad S \quad (3.6)$$

Diremo che gli atomi che nell'apparecchio S passano nel fascio superiore sono **"nello stato + rispetto ad S "**, quelli che prendono il cammino di mezzo sono **"nello stato 0 rispetto ad S "** e quelli che passano sotto **"nello stato - rispetto ad S "**.

Un apparecchio di Stern e Gerlach con diaframmi, quale quello indicato in (3.6), è in grado di selezionare uno stato puro rispetto ad S . Infatti con due apparecchi di Stern e Gerlach consecutivi, nella combinazione

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \quad \text{SÌ} \quad (3.7)$$

osserviamo che tutte le particelle che hanno attraversato il primo apparecchio attraversano pure il secondo. D'altro canto, con le due combinazioni di apparecchi

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} + \\ - \end{array} \right\} \quad \text{NO} \quad (3.8)$$

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \quad \text{NO} \quad (3.9)$$

non si osserva nessuna particella in uscita.

Abbiamo già discusso come, secondo la meccanica quantistica, la probabilità di un evento in un esperimento ideale è data dal modulo quadro di un numero complesso detto **ampiezza di probabilità**.

Per le ampiezze di probabilità utilizziamo la **notazione inventata da Dirac** ed applicata usualmente in meccanica quantistica, secondo cui si indica con

$$\boxed{\langle \beta | \alpha \rangle}, \quad (3.10)$$

l'ampiezza di probabilità che un atomo, inizialmente nello stato α , finisca nello stato β , o, come anche si dice, che un atomo dallo stato α si porti nello stato β .

Le esperienze (3.7), (3.8) e (3.9) indicano per le ampiezze di probabilità le relazioni:

$$\boxed{\langle +S | +S \rangle = 1 \quad , \quad \langle 0S | +S \rangle = 0 \quad , \quad \langle -S | +S \rangle = 0} \quad . \quad (3.11)$$

Notiamo che, a rigore, il risultato dell'esperienza (3.7) indica solo che la corrispondente probabilità è uguale ad 1, ossia $|\langle +S | +S \rangle|^2 = 1$. Dimosteremo in seguito che le ampiezze della forma $\langle \alpha | \alpha \rangle$ sono reali e non negative, da cui segue anche che $\langle +S | +S \rangle = 1$, come anticipato in eq. (3.11).

Supponiamo ora di utilizzare due apparecchi di Stern e Gerlach in serie dei quali il secondo sia ruotato di un angolo α intorno all'asse y . Eseguiamo quindi i seguenti esperimenti (T indica l'apparecchio ruotato)

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_T \quad \text{SÌ} \quad \boxed{\langle +T | +S \rangle \neq 0}, \quad (3.12)$$

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_T \quad \text{SÌ} \quad \boxed{\langle 0T | +S \rangle \neq 0}, \quad (3.13)$$

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_T \quad \text{SÌ} \quad \boxed{\langle -T | +S \rangle \neq 0}. \quad (3.14)$$

Ne segue che **gli atomi che sono in uno stato definito rispetto ad S non sono in uno stato definito rispetto a T** .

Si osserva inoltre che il **filtrare uno stato puro di T fa perdere l'informazione circa lo stato precedente della particella**. Questo è mostrato ad esempio dal seguente esperimento:

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0| \\ -| \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} +| \\ 0 \\ -| \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} +| \\ 0 \\ -| \end{array} \right\} \text{ SÌ ,} \quad (3.15)$$

$S \qquad T \qquad S$

o in termini di ampiezze:

$$\langle 0S|0T \rangle \langle 0T|+S \rangle \neq 0. \quad (3.16)$$

In altri termini, gli atomi che escono da T sono nello stato $(0T)$ e non hanno memoria del fatto che prima erano nello stato $(+S)$.

Questi risultati illustrano uno dei principi fondamentali della meccanica quantistica: **ogni sistema atomico può essere analizzato, per mezzo di un processo di filtraggio, in termini di un certo insieme di stati, chiamati stati di base. Il comportamento futuro degli atomi che si trovano in un determinato stato di base dipende solo dalla natura di questo stato ed è indipendente dalla storia precedente.**

Gli stati di base dipendono, come è chiaro, dal filtro che si è usato. Per esempio i tre stati $(+S)$, $(0S)$ e $(-S)$ sono un insieme di stati di base, i tre stati $(+T)$, $(0T)$ e $(-T)$ un altro. Si parla comunemente di stati di base in un certa **“rappresentazione”**.

Osserviamo che la perdita di informazione nell'esperimento (3.15) è causata non dall'aver separato in tre il fascio nell'apparecchio T , ma dall'aver introdotto in T dei diaframmi. Infatti si ha:

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0| \\ -| \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} +| \\ 0 \\ -| \end{array} \right\} \text{ NO .} \quad (3.17)$$

$S \qquad T \qquad S$

In generale un apparecchio T , o un altro qualsiasi, non diaframmato, non produce alcun cambiamento.

Abbiamo già discusso come, in meccanica quantistica, quando un evento può avvenire secondo varie alternative, l'ampiezza di probabilità per l'evento è la somma delle ampiezze di probabilità per le varie alternative considerate separatamente. L'ampiezza di probabilità per l'esperimento (3.17) si scrive allora:

$$\sum_{i=+,0,-} \langle 0S|iT \rangle \langle iT|+S \rangle, \quad (3.18)$$

e questa ampiezza deve essere uguale a quella ottenuta rimuovendo dall'esperimento l'apparecchio T non diaframmato. Dunque:

$$\boxed{\sum_{i=+,0,-} \langle 0S|iT \rangle \langle iT| + S \rangle = \langle 0S| + S \rangle} . \quad (3.19)$$

La perdita di informazione sullo stato iniziale della particella nell'esperimento (3.15) è dunque dovuto all'introduzione nell'apparecchio T dei diaframmi di arresto, ossia all'aver eseguito una misura dello stato T della particella. Questo risultato è generale (e ne abbiamo visto un altro esempio nella discussione dell'esperimento di interferenza degli elettroni nel passaggio di due fenditure): **il processo di misura nella meccanica quantistica influisce sempre sulla particella, oggetto della misura. Questa proprietà è dovuta al fatto che le caratteristiche delle particelle non si manifestano che come risultato della misura stessa.**

È questa proprietà essenziale del processo di misura che giustifica il paradosso cui si giunge confrontando i risultati (3.15) e (3.17): **lasciando aperti più canali passano meno atomi** (si ha pertanto un esempio di interferenza distruttiva). Dal punto di vista matematico questo è conseguenza del fatto che in meccanica quantistica si sommano le ampiezze e non le probabilità. Nel caso delle esperimento (3.15) abbiamo

$$P = |\langle 0S|0T \rangle \langle 0T| + S \rangle|^2 \neq 0 . \quad (3.20)$$

Nel caso (3.17) invece

$$P = \left| \sum_{i=+,0,-} \langle 0S|iT \rangle \langle iT| + S \rangle \right|^2 = 0 . \quad (3.21)$$

La somma delle ampiezze è nulla ma ciascuna delle tre ampiezze è diversa da zero.

Dimostriamo infine un'altra importante legge cui soddisfano le ampiezze. Abbiamo già visto come un apparecchio senza diaframmi non abbia alcuna influenza sullo stato della particella. Abbiamo allora che:

$$\sum_{i=+,0,-} \langle +S|iT \rangle \langle iT| + S \rangle = \langle +S| + S \rangle = 1 . \quad (3.22)$$

D'altra parte la probabilità che una particella nello stato $| + S \rangle$ attraversando un apparecchio T vada a passare attraverso uno qualsiasi dei tre fasci di T deve essere 1, cioè

$$\sum_{i=+,0,-} |\langle iT| + S \rangle|^2 = \sum_{i=+,0,-} \langle iT| + S \rangle^* \langle iT| + S \rangle = 1 . \quad (3.23)$$

Dal confronto delle eq. (3.22) e (3.23) ricaviamo che, per ogni i

$$\boxed{\langle iT| + S \rangle^* = \langle +S|iT \rangle} . \quad (3.24)$$

Riepiloghiamo **tre leggi importanti** ricavate per le ampiezze. Queste sono contenute nelle eq. (3.11), (3.19), (3.24) che, senza più fare riferimento esplicito agli esperimenti di Stern e Gerlach, riscriviamo nella forma generale

$$\boxed{
 \begin{array}{l}
 1. \langle i|j \rangle = \delta_{ij} \\
 2. \langle \chi|\varphi \rangle = \sum_i \langle \chi|i \rangle \langle i|\varphi \rangle \\
 3. \langle \chi|\varphi \rangle = \langle \varphi|\chi \rangle^*
 \end{array}
 } . \quad (3.25)$$

In queste equazioni i e j si riferiscono a **tutti** gli stati di base in una **singola** rappresentazione, mentre φ e χ rappresentano due stati arbitrari della particella.

3.3 Vettori di stato bra e ket. Principio di sovrapposizione

Le equazioni sin qui derivate per le ampiezze di probabilità quantistiche presentano una forte rassomiglianza formale con le proprietà del prodotto scalare di due vettori.

Per esempio l'equazione

$$\langle \chi|\varphi \rangle = \sum_i \langle \chi|i \rangle \langle i|\varphi \rangle \quad (3.26)$$

può essere paragonata con la formula valida per il prodotto scalare di due vettori \vec{B} ed \vec{A} :

$$\vec{B} \cdot \vec{A} = \sum_i (\vec{B} \cdot \vec{e}_i) (\vec{e}_i \cdot \vec{A}) , \quad (3.27)$$

dove \vec{e}_i sono i tre versori di base nelle direzioni x, y, z . Infatti $\vec{B} \cdot \vec{e}_1 = B_x$, $\vec{B} \cdot \vec{e}_2 = B_y$, $\vec{B} \cdot \vec{e}_3 = B_z$ (e analoghe per \vec{A}) e l'eq.(3.27) è equivalente a:

$$\vec{B} \cdot \vec{A} = B_x A_x + B_y A_y + B_z A_z . \quad (3.28)$$

Confrontando le eq. (3.26) e (3.27) si vede che gli stati φ e χ corrispondono ai due vettori \vec{A} e \vec{B} e gli stati di base i corrispondono ai vettori di base \vec{e}_i .

Poiché i vettori di base \vec{e}_i sono ortonormali, vale la relazione

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij} . \quad (3.29)$$

Questa relazione ha il suo analogo nell'equazione

$$\langle i|j \rangle = \delta_{ij} , \quad (3.30)$$

valida per le ampiezze di transizione tra stati di base.

C'è una differenza tra le ampiezze quantistiche ed il prodotto scalare. Per le prime si ha che

$$\langle \varphi | \chi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle^* , \quad (3.31)$$

mentre, nell'algebra dei vettori,

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = \vec{B} \cdot \vec{A} , \quad (3.32)$$

ossia, nel prodotto scalare l'ordinamento dei termini è irrilevante.

L'eq. (3.27), che esprime una proprietà del prodotto scalare di due vettori, è valida in generale per qualunque vettore \vec{B} . L'equazione può quindi essere scritta in forma vettoriale "eliminando" \vec{B} da entrambi i membri. Si arriva così all'equazione

$$\vec{A} = \sum_i \vec{e}_i (\vec{e}_i \cdot \vec{A}) = \sum_i A_i \vec{e}_i = A_x \vec{e}_x + A_y \vec{e}_y + A_z \vec{e}_z . \quad (3.33)$$

In modo analogo si può pensare di definire dalla relazione quantistica (3.26) l'analogo di un "vettore". Eliminando il $\langle \chi |$ da entrambi i membri della (3.26) si ottiene

$$\boxed{|\varphi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\varphi\rangle \equiv \sum_i c_i |i\rangle} . \quad (3.34)$$

In altri termini: la "parentesi" $\langle \chi | \varphi \rangle$ viene considerata composta di due parti. La seconda parte, $|\varphi\rangle$, è detta *ket* mentre la prima, $\langle \chi |$, è detta *bra*. La notazione è di Dirac. Insieme $\langle \chi |$ e $|\varphi\rangle$ compongono una *bra-ket* ("bracket" = parentesi in inglese). I simboli $\langle \chi |$ e $|\varphi\rangle$ sono anche detti **vettori di stato**.

La differenza fra le eq. (3.31) e (3.32) sta ad indicare che i vettori di stato ket ed i vettori bra sono definiti in uno **spazio vettoriale complesso**. In particolare, scriviamo l'eq. (3.34) per un vettore $|\chi\rangle$:

$$|\chi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\chi\rangle \equiv \sum_i d_i |i\rangle . \quad (3.35)$$

Confrontiamo questa equazione con quella che si ottiene dalla (3.26) eliminando il ket $|\varphi\rangle$ ed utilizzando la proprietà (3.31):

$$\langle \chi | = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | = \sum_i d_i^* \langle i | . \quad (3.36)$$

Vediamo dunque che vale la seguente regola di corrispondenza tra ket e bra:

$$\boxed{c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle \longleftrightarrow c_\alpha^* \langle \alpha | + c_\beta^* \langle \beta |} . \quad (3.37)$$

Sottolineiamo che mentre i vettori nello spazio a tre dimensioni sono rappresentabili per mezzo di tre versori mutuamente ortogonali, **i vettori di base $|i\rangle$ per gli**

stati quantistici devono variare su quell'insieme completo che si adatta al particolare problema. A seconda dei casi, possono essere necessarie due, o tre o anche un numero infinito di stati di base.

Consideriamo l'interpretazione fisica dell'eq. (3.34). Essa afferma che, **in meccanica quantistica, ogni stato $|\varphi\rangle$ può essere espresso come combinazione lineare, o sovrapposizione, con opportuni coefficienti, di un insieme di stati di base. Viceversa, se lo stato $|\varphi\rangle$ e lo stato $|\chi\rangle$ sono due stati accessibili per il sistema, allora qualunque combinazione lineare di $|\varphi\rangle$ e $|\chi\rangle$, essendo un vettore di stato, è ancora uno stato accessibile del sistema.** Questo enunciato costituisce il cosiddetto **principio di sovrapposizione degli stati** e rappresenta uno dei principi fondamentali della meccanica quantistica.

La possibilità per un sistema di trovarsi in uno stato che è una sovrapposizione di più stati è un concetto puramente quantistico e non ha analogo classico. Così un atomo può trovarsi in una sovrapposizione di stati di spin, un fotone in una sovrapposizione di stati di polarizzazione, un elettrone in uno stato risultante dalla sovrapposizione di stati che definiscono il passaggio attraverso una o l'altra di due fenditure. È il principio di sovrapposizione che è dunque alla base di tutti i fenomeni di interferenza sin qui considerati.

Concludiamo con un'osservazione sulla **normalizzazione** dei vettori di stato. Scegliendo nell'eq. (3.26) lo stato arbitrario $|\chi\rangle$ uguale allo stato $|\varphi\rangle$ troviamo che:

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \sum_i \langle\varphi|i\rangle\langle i|\varphi\rangle = \sum_i |\langle i|\varphi\rangle|^2, \quad (3.38)$$

ossia l'ampiezza $\langle\varphi|\varphi\rangle$ è sempre un numero reale non negativo. Il quadrato di questa ampiezza rappresenta la probabilità che un sistema nello stato $|\varphi\rangle$ venga trovato nello stato $|\varphi\rangle$. Tale probabilità è evidentemente uguale a 1. L'ampiezza $\langle\varphi|\varphi\rangle$ deve dunque soddisfare

$$\boxed{\langle\varphi|\varphi\rangle = 1}. \quad (3.39)$$

I vettori di stato corrispondenti a stati fisici devono essere normalizzati.

3.4 Operatori. Rappresentazioni matriciali e relazione di completezza

Per introdurre il concetto di **operatore** consideriamo nuovamente un esperimento di Stern e Gerlach ideale costruito nel modo seguente:

$$\underbrace{\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}}_S \quad \underbrace{\left\{ A \right\}} \quad \underbrace{\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}}_R \quad (3.40)$$

Con A si intende un qualunque insieme, comunque complicato, di apparecchi di Stern e Gerlach. La corrispondente ampiezza di probabilità che la particella, inizialmente nello stato $|+S\rangle$ prima di entrare in A , ne esca nello stato $|0R\rangle$ si indica con

$$\langle 0R|A|+S\rangle. \quad (3.41)$$

In generale A indica **una qualunque operazione effettuata sullo stato della particella**, e si dice che A è **un operatore**. Quando un operatore agisce su un vettore di stato lo trasforma in un altro vettore di stato.

Per comprendere come l'apparecchio A agisca tra una coppia di stati arbitrari consideriamo il seguente esperimento

$$\begin{matrix} \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} & \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} & \left\{ A \right\} & \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} & \left\{ \begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix} \right\} \\ S & T & & T & R \end{matrix} \quad (3.42)$$

in cui ai lati dell'apparecchio A sono aggiunti due apparecchi T senza filtri. Poiché la presenza di apparecchi senza filtri non modifica la situazione dal punto di vista fisico, per le corrispondenti ampiezze abbiamo

$$\langle 0R|A|+S\rangle = \sum_i \sum_j \langle 0R|iT\rangle \langle iT|A|jT\rangle \langle jT|+S\rangle. \quad (3.43)$$

Questa espressione non dipende evidentemente dalla specifica scelta dell'apparecchio T e dalla scelta degli stati iniziale e finale, $|+S\rangle$ e $\langle 0R|$. Può quindi essere scritta nella forma generale

$$\boxed{\langle \chi|A|\varphi\rangle = \sum_{i,j} \langle \chi|i\rangle \langle i|A|j\rangle \langle j|\varphi\rangle}. \quad (3.44)$$

Il secondo membro dell'eq. (3.44) è in realtà più semplice del primo. Ci dice che **l'apparecchio A è completamente descritto da $N \times N$ numeri**

$$\boxed{\langle i|A|j\rangle}, \quad (3.45)$$

per ogni i e j , dove N è in generale la dimensione dello spazio dei ket ($N = 3$ per gli atomi di spin 1 nell'esperimento di Stern e Gerlach), che danno la risposta di A relativa agli N stati di base in una determinata rappresentazione. Una volta noti questi $N \times N$ numeri è possibile calcolare l'azione dell'operatore A tra due stati iniziali e finali $|\varphi\rangle$ e $|\chi\rangle$ qualsiasi se definiamo ciascuno di essi per mezzo delle N ampiezze per la transizione a ($\langle j|\varphi\rangle$) o da ($\langle \chi|i\rangle$) ognuno degli stati di base.

L'eq. (3.44) può essere anche scritta in forma vettoriale eliminando lo stato arbitrario $\langle \chi |$:

$$A|\varphi\rangle = \sum_{i,j} |i\rangle \langle i|A|j\rangle \langle j|\varphi\rangle \quad (3.46)$$

Questa equazione definisce completamente lo **sviluppo, in termini dei vettori di base $|i\rangle$, del vettore di stato $A|\varphi\rangle$** , ottenuto facendo agire l'operatore A sul ket $|\varphi\rangle$.

Analogamente, eliminando lo stato $|\varphi\rangle$ nell'eq. (3.44) possiamo derivare l'effetto di un operatore A che agisce su un bra $\langle \chi |$ da destra:

$$\langle \chi|A = \sum_{i,j} \langle \chi|i\rangle \langle i|A|j\rangle \langle j| \quad (3.47)$$

Questa equazione definisce **lo sviluppo del bra $\langle \chi|A$ in termini dei bra di base $\langle j|$** .

Risulta spesso conveniente raccogliere i diversi numeri complessi $\langle i|A|j\rangle$ che definiscono l'azione dell'operatore A nella forma di una **matrice quadrata $N \times N$** :

$$A \doteq \begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \langle 1|A|2\rangle & \dots \\ \langle 2|A|1\rangle & \langle 2|A|2\rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

Il simbolo \doteq sta per "è rappresentato da".

Osserviamo che gli elementi di questa matrice dipendono evidentemente dalla particolare scelta effettuata per i vettori di base $|i\rangle$.

I coefficienti dello sviluppo del vettore di stato

$$|\psi\rangle \equiv A|\varphi\rangle, \quad (3.49)$$

in termini dei ket di base possono essere ottenuti moltiplicando entrambi i membri dell'eq. (3.46) a sinistra per un bra di base $\langle k|$:

$$\langle k|\psi\rangle \equiv \langle k|A|\varphi\rangle = \sum_{i,j} \langle k|i\rangle \langle i|A|j\rangle \langle j|\varphi\rangle = \sum_j \langle k|A|j\rangle \langle j|\varphi\rangle, \quad (3.50)$$

dove si è utilizzata l'ortonormalità dei vettori di base: $\langle k|i\rangle = \delta_{ki}$. Ma questa equazione può essere vista come l'ordinario **prodotto di una matrice per un vettore colonna** quando i coefficienti dello sviluppo dei vettori di stato $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle = A|\varphi\rangle$ siano disposti nella forma di vettore colonna,

$$|\varphi\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle 1|\varphi\rangle \\ \langle 2|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

L'eq. (3.50) si scrive infatti, in forma matriciale, come

$$\boxed{\begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \langle 1|A|2\rangle & \dots \\ \langle 2|A|1\rangle & \langle 2|A|2\rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1|\varphi\rangle \\ \langle 2|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}} \quad (3.52)$$

Analogamente, i coefficienti dello sviluppo del bra

$$\langle \gamma| = \langle \chi|A, \quad (3.53)$$

ottenuto facendo agire (da destra) l'operatore A sul bra $\langle \chi|$, possono essere ottenuti moltiplicando scalarmente l'eq. (3.47) per il ket di base $|k\rangle$:

$$\langle \gamma|k\rangle = \langle \chi|A|k\rangle \equiv \sum_{i,j} \langle \chi|i\rangle \langle i|A|j\rangle \langle j|k\rangle = \sum_i \langle \chi|i\rangle \langle i|A|k\rangle. \quad (3.54)$$

Questa equazione può essere ora interpretata come l'ordinario **prodotto di un vettore riga per una matrice** quando conveniamo di rappresentare i bra $\langle \gamma|$ e $\langle \chi|$ in termini di vettori riga:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \chi| &\doteq (\langle \chi|1\rangle \quad \langle \chi|2\rangle \quad \dots) = (\langle 1|\chi\rangle^* \quad \langle 2|\chi\rangle^* \quad \dots), \\ \langle \gamma| &\doteq (\langle \gamma|1\rangle \quad \langle \gamma|2\rangle \quad \dots) = (\langle 1|\gamma\rangle^* \quad \langle 2|\gamma\rangle^* \quad \dots) \end{aligned}} \quad (3.55)$$

Si noti in queste espressioni la comparsa dell'operazione di coniugazione complessa. Con notazione matriciale l'eq. (3.54) è infatti

$$\boxed{(\langle 1|\gamma\rangle^* \quad \langle 2|\gamma\rangle^* \quad \dots) = (\langle 1|\chi\rangle^* \quad \langle 2|\chi\rangle^* \quad \dots) \begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \langle 1|A|2\rangle & \dots \\ \langle 2|A|1\rangle & \langle 2|A|2\rangle & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}} \quad (3.56)$$

Con una notazione matriciale può essere anche espresso il prodotto scalare di due vettori di stato $\langle \chi|$ e $|\varphi\rangle$. Scriviamo questo prodotto nella forma (3.26):

$$\langle \chi|\varphi\rangle = \sum_i \langle \chi|i\rangle \langle i|\varphi\rangle. \quad (3.57)$$

Questo non è altro che **il prodotto di un vettore riga per un vettore colonna**:

$$\boxed{\langle \chi|\varphi\rangle = (\langle 1|\chi\rangle^* \quad \langle 2|\chi\rangle^* \quad \dots) \begin{pmatrix} \langle 1|\varphi\rangle \\ \langle 2|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}} \quad (3.58)$$

In generale, è possibile anche definire il prodotto di un ket per un bra nella forma

$$\boxed{\boxed{|\alpha\rangle\langle\beta|}}, \quad (3.59)$$

e viene detto **prodotto esterno** (come contrapposto al prodotto scalare di un bra per un ket detto anche prodotto interno).

Il prodotto esterno è evidentemente un operatore, ed i suoi elementi di matrice in una determinata rappresentazione si ottengono moltiplicando (come in ogni altro caso) l'operatore per il bra di base $\langle i|$ a sinistra ed il ket di base $|j\rangle$ a destra:

$$|\alpha\rangle\langle\beta| \doteq \begin{pmatrix} \langle 1|\alpha\rangle\langle 1|\beta\rangle^* & \langle 1|\alpha\rangle\langle 2|\beta\rangle^* & \cdots \\ \langle 2|\alpha\rangle\langle 1|\beta\rangle^* & \langle 2|\alpha\rangle\langle 2|\beta\rangle^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.60)$$

Questa matrice si ottiene naturalmente dal prodotto righe per colonne del vettore colonna rappresentativo di $|\alpha\rangle$ e del vettore riga rappresentativo di $\langle\beta|$.

Un operatore particolarmente semplice è l'**operatore identità I** , definito come l'operatore la cui azione su un qualunque vettore di stato è nulla:

$$\boxed{\langle\chi|I|\varphi\rangle \equiv \langle\chi|\varphi\rangle}. \quad (3.61)$$

Confrontando questa relazione con l'eq. (3.57), se ne deduce che è possibile scrivere per gli stati di base

$$\boxed{\sum_i |i\rangle\langle i| = I}. \quad (3.62)$$

Questa equazione è nota come **relazione di completezza**.

La relazione di completezza, unita all'equazione

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \quad (3.63)$$

garantisce che gli stati $|i\rangle$ costituiscono un buon sistema di base.

3.5 Prodotto di Operatori

Riferendoci nuovamente ad un esperimento di Stern e Gerlach consideriamo un apparecchio, che chiameremo C , costituito da due apparecchi A e B posti in serie:

$$\left\{ C \right\} = \left\{ A \right\} \left\{ B \right\}. \quad (3.64)$$

L'azione dell'apparecchio C può essere studiata inserendo un apparecchio senza filtri tra A e B . Per due stati iniziali e finali arbitrari, $|\varphi\rangle$ e $\langle\chi|$, si ha allora

$$\langle\chi|C|\varphi\rangle = \sum_i \langle\chi|B|i\rangle \langle i|A|\varphi\rangle . \quad (3.65)$$

Questa equazione può essere espressa nella forma di un'identità operatoriale utilizzando la relazione di completezza e l'arbitrarietà degli stati esterni:

$$C = B \cdot A . \quad (3.66)$$

L'operatore risultante dall'applicazione successiva di due operatori, A e B , è dunque il prodotto degli operatori $B \cdot A$.

Sostituendo nell'eq. (3.65) gli stati esterni $\langle\chi|$ e $|\varphi\rangle$ con due vettori di base $\langle j|$ e $|k\rangle$ si ottengono gli elementi di matrice dell'operatore C mediante l'usuale **prodotto righe per colonne** degli elementi di matrice corrispondenti agli operatori B ed A rispettivamente:

$$\langle j|C|k\rangle = \sum_i \langle j|B|i\rangle \langle i|A|k\rangle . \quad (3.67)$$

Ne segue immediatamente che il prodotto di due operatori non gode della proprietà commutativa ossia, in generale,

$$A \cdot B \neq B \cdot A . \quad (3.68)$$

3.6 Cambiamenti di Base e Trasformazioni Unitarie

Abbiamo già osservato come la scelta di un determinato insieme di vettori di base non è univoca ed in generale, anzi, **esistono infinite possibili scelte di vettori di base o, come si dice anche, di rappresentazioni.**

È evidente come **due scelte differenti implicano** la comparsa, nei calcoli, di **diverse componenti di vettore** per la rappresentazione degli stati, e di **diversi elementi di matrice** per la rappresentazione di operatori (ad esempio $\langle i|\varphi\rangle$ o $\langle i|A|j\rangle$).

Tuttavia, se il formalismo sin qui sviluppato è consistente, **la risposta finale circa il risultato di una misura qualsiasi deve essere sempre la stessa.**

Discutiamo qui in dettaglio come si effettua un **cambiamento di base** e quali sono le relazioni tra elementi di vettori e di matrici in due basi differenti.

Consideriamo due diverse possibili scelte di vettori di base che indicheremo, per poterli distinguere chiaramente, con

$$|a^{(1)}\rangle, |a^{(2)}\rangle, \dots, |a^{(N)}\rangle \quad (3.69)$$

e

$$|b^{(1)}\rangle, |b^{(2)}\rangle, \dots, |b^{(N)}\rangle \quad (3.70)$$

rispettivamente.

Ci proponiamo in primo luogo di trovare un operatore U che trasforma i vettori di base $|a^{(i)}\rangle$ nei vettori di base $|b^{(i)}\rangle$, ossia

$$\boxed{|b^{(i)}\rangle \equiv U|a^{(i)}\rangle} \quad (3.71)$$

per ogni i .

La forma esplicita di questo operatore si ottiene prendendo il prodotto esterno di entrambi i membri di questa equazione con il bra $\langle a^{(i)}|$ e sommando su tutti gli i . Utilizzando la relazione di completezza troviamo allora:

$$\sum_i |b^{(i)}\rangle \langle a^{(i)}| = \sum_i U|a^{(i)}\rangle \langle a^{(i)}| = U, \quad (3.72)$$

ossia

$$\boxed{U = \sum_i |b^{(i)}\rangle \langle a^{(i)}|} . \quad (3.73)$$

Calcoliamo esplicitamente la matrice rappresentativa dell'operatore U nella base $\{|a^{(i)}\rangle\}$:

$$\langle a^{(i)}|U|a^{(j)}\rangle \equiv \sum_k \langle a^{(i)}|b^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}|a^{(j)}\rangle, \quad (3.74)$$

ossia, per la proprietà di ortonormalità $\langle a^{(k)}|a^{(j)}\rangle = \delta_{k,j}$

$$\boxed{\langle a^{(i)}|U|a^{(j)}\rangle \equiv \langle a^{(i)}|b^{(j)}\rangle} . \quad (3.75)$$

La matrice quadrata costruita da $\langle a^{(i)}|U|a^{(j)}\rangle$ è detta **matrice di trasformazione** dalla base $\{|a^{(i)}\rangle\}$ alla base $\{|b^{(i)}\rangle\}$. Le **colonne** di questa matrice sono costituite dai vettori rappresentativi degli stati di base $\{|b^{(i)}\rangle\}$ nella rappresentazione $\{|a^{(i)}\rangle\}$.

Prima di procedere, introduciamo la seguente definizione. Dato un operatore arbitrario A , si definisce **operatore hermitiano coniugato** di A , e lo si indica con il simbolo A^+ , l'operatore tale che, per qualunque coppia di vettori $|\varphi\rangle$ e $|\chi\rangle$ soddisfa

$$\boxed{\langle \varphi|A^+|\chi\rangle = \langle \chi|A|\varphi\rangle^*} . \quad (3.76)$$

Questa relazione implica, per gli elementi di matrice rappresentativa dell'operatore in una determinata base,

$$\langle i|A^+|j\rangle = \langle j|A|i\rangle^*. \quad (3.77)$$

Pertanto, la matrice che rappresenta l'hermitiano coniugato di un operatore A si ottiene a partire dalla matrice che rappresenta A considerandone la trasposta ed effettuando un'operazione di coniugazione complessa sugli elementi di matrice.

Osserviamo inoltre che, in accordo con la definizione (3.76), vale la seguente regola di corrispondenza tra il ket $A|\varphi\rangle$ e il suo bra:

$$\boxed{A|\varphi\rangle \longleftrightarrow \langle\varphi|A^+} . \quad (3.78)$$

Calcoliamo allora esplicitamente l'operatore hermitiano coniugato dell'operatore di cambiamento di base U . Dalla definizione di hermitiano coniugato si ha:

$$\langle\varphi|U^+|\chi\rangle = \langle\chi|U|\varphi\rangle^* = \left(\sum_i \langle\chi|b^{(i)}\rangle\langle a^{(i)}|\varphi\rangle \right)^* = \sum_i \langle\varphi|a^{(i)}\rangle\langle b^{(i)}|\chi\rangle, \quad (3.79)$$

da cui, per l'arbitrarietà degli stati $|\varphi\rangle$ e $|\chi\rangle$,

$$\boxed{U^+ \equiv \sum_i |a^{(i)}\rangle\langle b^{(i)}|} . \quad (3.80)$$

Gli operatori U che effettuano la trasformazione di base soddisfano l'importante proprietà

$$\boxed{UU^+ = U^+U = 1} , \quad (3.81)$$

o, come si dice, sono **operatori unitari**. La dimostrazione è immediata:

$$UU^+ = \sum_{i,j} |b^{(i)}\rangle\langle a^{(i)}|a^{(j)}\rangle\langle b^{(j)}| = \sum_i |b^{(i)}\rangle\langle b^{(i)}| = 1 , \quad (3.82)$$

e analogamente per U^+U .

La condizione di unitarietà garantisce che anche i vettori di base $|b^{(i)}\rangle$, ottenuti con la trasformazione U dai vettori di base $|a^{(i)}\rangle$, risultano ortonormali tra loro. Per dimostrarlo, utilizziamo la regola di corrispondenza (3.78) tra il ket $A|\varphi\rangle$ ed il suo bra e l'unitarietà dell'operatore U e troviamo:

$$\langle b^{(i)}|b^{(j)}\rangle = \langle a^{(i)}|U^+U|a^{(j)}\rangle = \langle a^{(i)}|a^{(j)}\rangle = \delta_{i,j}, \quad (3.83)$$

che è quanto volevamo dimostrare.

Con il formalismo sin qui sviluppato è semplice stabilire la **relazione tra le componenti del vettore colonna rappresentativo di un determinato ket nella nuova e nella vecchia base**. Si ha:

$$\boxed{|\varphi\rangle = \sum_i |a^{(i)}\rangle \langle a^{(i)}|\varphi\rangle} \quad , \quad \boxed{|\varphi\rangle = \sum_i |b^{(i)}\rangle \langle b^{(i)}|\varphi\rangle} \quad , \quad (3.84)$$

con

$$\boxed{\langle b^{(i)}|\varphi\rangle = \langle a^{(i)}|U^+|\varphi\rangle = \sum_j \langle a^{(i)}|U^+|a^{(j)}\rangle \langle a^{(j)}|\varphi\rangle} \quad , \quad (3.85)$$

ossia

$$\boxed{\begin{pmatrix} \langle b^{(1)}|\varphi\rangle \\ \langle b^{(2)}|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = U^+ \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\varphi\rangle \\ \langle a^{(2)}|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}} \quad . \quad (3.86)$$

In forma compatta, possiamo anche scrivere questa legge di trasformazione come

$$\boxed{|\varphi\rangle \longrightarrow U^+|\varphi\rangle} \quad . \quad (3.87)$$

Analogamente possiamo derivare la **relazione tra gli elementi di matrice di un operatore nelle due rappresentazioni**:

$$\boxed{\langle b^{(i)}|A|b^{(j)}\rangle = \langle a^{(i)}|U^+AU|a^{(j)}\rangle = \sum_{k,l} \langle a^{(i)}|U^+|a^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}|A|a^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|U|a^{(j)}\rangle} \quad , \quad (3.88)$$

ossia:

$$\boxed{\begin{pmatrix} \langle b^{(1)}|A|b^{(1)}\rangle & \langle b^{(1)}|A|b^{(2)}\rangle & \dots \\ \langle b^{(2)}|A|b^{(1)}\rangle & \langle b^{(2)}|A|b^{(2)}\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = U^+ \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|A|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(1)}|A|a^{(2)}\rangle & \dots \\ \langle a^{(2)}|A|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(2)}|A|a^{(2)}\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} U} \quad . \quad (3.89)$$

o, in forma compatta,

$$\boxed{A \longrightarrow U^+AU} \quad . \quad (3.90)$$

Ovviamente qualunque ampiezza di probabilità, del tipo $\langle \chi | A | \varphi \rangle$, e dunque il risultato di qualunque tipo di misura, non dipende dalla particolare rappresentazione o scelta di vettori di base utilizzata per calcolarla:

$$\sum_{i,j} \langle \chi | a^{(i)} \rangle \langle a^{(i)} | A | a^{(j)} \rangle \langle a^{(j)} | \varphi \rangle = \langle \chi | A | \varphi \rangle = \sum_{i,j} \langle \chi | b^{(i)} \rangle \langle b^{(i)} | A | b^{(j)} \rangle \langle b^{(j)} | \varphi \rangle . \quad (3.91)$$

L'eq. (3.90) mostra anche che la rappresentazione matriciale dell'operatore del cambiamento di base U è la stessa nelle due basi. Si ha infatti

$$U \longrightarrow U^+ U U = U . \quad (3.92)$$

3.7 Esempio: vettori di stato, operatori e rappresentazioni matriciali per particelle di spin 1/2

Vettori di stato:

Gli atomi di spin 1/2 che attraversano un apparecchio di Stern e Gerlach con il campo magnetico orientato nella direzione dell'asse z si separano in due fasci. Questi fasci contengono le particelle per le quali le proiezioni dello spin lungo l'asse z valgono rispettivamente $\pm \hbar/2$. Indichiamo i due corrispondenti **vettori di stato** con i simboli

$$\boxed{|+\rangle \longleftrightarrow S_z = +\hbar/2 \quad , \quad |-\rangle \longleftrightarrow S_z = -\hbar/2} . \quad (3.93)$$

Come abbiamo visto, questi vettori di stato soddisfano le **condizioni di ortonormalità**

$$\boxed{\langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1, \quad \langle + | - \rangle = \langle - | + \rangle = 0} . \quad (3.94)$$

Scegliamo i due stati $|+\rangle$ e $|-\rangle$ come insieme di stati di base. Utilizzando l'eq. (3.51) e le relazioni di ortonormalità (3.94) è immediato derivare le **rappresentazioni matriciali** per i ket $|+\rangle$ e $|-\rangle$ nella base considerata:

$$\boxed{|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle + | + \rangle \\ \langle - | + \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle + | - \rangle \\ \langle - | - \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}} . \quad (3.95)$$

Le corrispondenti rappresentazioni per i vettori di stato di tipo bra sono:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle + | &\doteq (\langle + | + \rangle^* \quad \langle - | + \rangle^*) = (1 \quad 0) , \\ \langle - | &\doteq (\langle + | - \rangle^* \quad \langle - | - \rangle^*) = (0 \quad 1) \end{aligned}} . \quad (3.96)$$

Possiamo anche verificare come gli stati di base $|+\rangle$ e $|-\rangle$ soddisfino la **relazione di completezza**:

$$\begin{aligned} \sum_{i=\pm} |i\rangle\langle i| &= |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I, \end{aligned}$$

ossia

$$\boxed{\sum_{i=+,-} |i\rangle\langle i| = I} . \quad (3.97)$$

Un qualunque vettore di stato $|\varphi\rangle$ può essere espresso come **combinazione lineare** (sovrapposizione) dei vettori di stato

$$\boxed{|\varphi\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle} , \quad (3.98)$$

dove c_{\pm} sono coefficienti complessi. La **condizione di normalizzazione** per il vettore di stato $|\varphi\rangle$ implica

$$\begin{aligned} 1 = \langle\varphi|\varphi\rangle &= (c_+^*\langle +| + c_-^*\langle -|)(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle) = \\ &= |c_+|^2\langle +|+\rangle + c_+^*c_- \langle +|-\rangle + c_-^*c_+ \langle -|+\rangle + |c_-|^2\langle -|-\rangle = \\ &= |c_+|^2 + |c_-|^2, \end{aligned} \quad (3.99)$$

ossia

$$\boxed{|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1} . \quad (3.100)$$

Le **rappresentazioni matriciali** per il vettore di stato ket $|\varphi\rangle$ e per il corrispondente bra $\langle\varphi|$ sono evidentemente:

$$\boxed{|\varphi\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle +|\varphi\rangle \\ \langle -|\varphi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}} , \quad (3.101)$$

$$\boxed{\langle\varphi| \doteq (\langle +|\varphi\rangle^* \quad \langle -|\varphi\rangle^*) = (c_+^* \quad c_-^*)} . \quad (3.102)$$

Così ad esempio, due possibili vettori di stato per gli atomi di spin 1/2 si ottengono scegliendo per i coefficienti c_+ e c_- i valori

$$c_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} , \quad c_- = \pm \frac{i}{\sqrt{2}} , \quad (3.103)$$

ossia

$$\boxed{\begin{aligned} | + y \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} | + \rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} | - \rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \\ | - y \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} | + \rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} | - \rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \end{aligned}} \quad . \quad (3.104)$$

La notazione adottata per questi vettori di stato corrisponde al fatto che tali stati possono essere selezionati utilizzando un apparecchio di Stern e Gerlach con il campo magnetico diretto lungo l'asse y . Essi corrispondono pertanto agli stati in cui la proiezione dello spin lungo l'asse y vale rispettivamente $\pm \hbar/2$.

Consideriamo la **probabilità** che un atomo, selezionato nello stato $| + \rangle$ ($S_z = +\hbar/2$) venga trovato a seguito di una misura di S_y nello stato $| - y \rangle$ ($S_y = -\hbar/2$). In altri termini, consideriamo la probabilità per il seguente esperimento di Stern e Gerlach:

$$\begin{matrix} \left\{ \begin{array}{l} + \\ - \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{l} + \\ - \end{array} \right\} \\ S_z & S_y \end{matrix} \quad (3.105)$$

La corrispondente **ampiezza di probabilità**, $\langle -y | + \rangle$, può essere calcolata utilizzando la seconda delle eq. (3.104):

$$\langle -y | + \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | + \frac{i}{\sqrt{2}} \langle - | - \right) | + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | + \rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} \langle - | + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad . \quad (3.106)$$

Allo stesso risultato si giunge utilizzando le rappresentazioni matriciali per i vettori di stato:

$$\langle -y | + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad . \quad (3.107)$$

Per la **probabilità** corrispondente si ha pertanto

$$\boxed{P_- = |\langle -y | + \rangle|^2 = \frac{1}{2}} \quad . \quad (3.108)$$

La probabilità che un atomo nello stato $| + \rangle$ venga trovato invece nello stato con $S_y = \hbar/2$ deve valere ovviamente

$$\boxed{P_+ = 1 - P_- = \frac{1}{2}} \quad . \quad (3.109)$$

Si ha infatti, per l'ampiezza corrispondente:

$$\langle +y | + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \quad (3.110)$$

da cui, come previsto,

$$P_+ = |\langle +y|+\rangle|^2 = \frac{1}{2}. \quad (3.111)$$

Operatori:

Consideriamo ora un **operatore** A rappresentato dal seguente apparecchio di Stern e Gerlach:

$$\left\{ A \right\} = \left\{ \begin{array}{c} + \\ -| \end{array} \right\} \quad (3.112)$$

S_z

L'azione di questo operatore è evidentemente la seguente: se nell'apparecchio di Stern e Gerlach viene fatto entrare un atomo selezionato nello stato $|+\rangle$ questo attraversa l'apparecchio indisturbato e ne esce trovandosi sempre nello stato $|+\rangle$. Viceversa, se nell'apparecchio viene fatto entrare un atomo selezionato nello stato $|-\rangle$, allora questo atomo è bloccato dal diaframma e non si osserva alcun atomo in uscita. In formule:

$$A|+\rangle = |+\rangle \quad , \quad A|-\rangle = 0. \quad (3.113)$$

Da queste espressioni, è immediato ricavare la rappresentazione matriciale dell'operatore A nella base di S_z :

$$A \doteq \begin{pmatrix} \langle +|A|+\rangle & \langle +|A|-\rangle \\ \langle -|A|+\rangle & \langle -|A|-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.114)$$

Esercizio: dimostrare che $A = |+\rangle\langle +|$.

Utilizzando la rappresentazione (3.114) è possibile derivare l'azione dell'operatore A su un generico vettore di stato. Nel caso dello stato $|+y\rangle$ si ha ad esempio:

$$A|+y\rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle. \quad (3.115)$$

È evidente a priori, del resto, come un atomo all'uscita dell'apparecchio S_z debba trovarsi nello stato $|+\rangle$.

Cambiamento di base:

I due vettori di stato $|+y\rangle$ e $|-y\rangle$ definiti in eq. (3.104) sono tra loro ortogonali. Si ha infatti.

$$\begin{aligned} \langle +y|+y\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 (1 \ -i) \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cdot 2 = 1, \\ \langle -y|-y\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 (1 \ i) \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cdot 2 = 1, \\ \langle +y|-y\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 (1 \ -i) \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cdot 0 = 0, \\ \langle -y|+y\rangle &= \langle +y|-y\rangle^* = 0. \end{aligned} \tag{3.116}$$

Dunque:

$$\boxed{\langle iy|jy\rangle = \delta_{ij}}. \tag{3.117}$$

È possibile anche verificare che questi due vettori soddisfano la **relazione di completezza**:

$$\begin{aligned} \sum_{i=+,-} |iy\rangle\langle iy| &= |+y\rangle\langle +y| + |-y\rangle\langle -y| \doteq \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} (1 \ -i) + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} (1 \ i) = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{3.118}$$

ossia

$$\boxed{\sum_{i=+,-} |iy\rangle\langle iy| = I}. \tag{3.119}$$

I due vettori $|+y\rangle$ e $|-y\rangle$ rappresentano pertanto un'altra possibile scelta per i **vettori di base**.

Nella base $|+y\rangle$ e $|-y\rangle$ valgono le seguenti **rappresentazioni matriciali**:

$$\boxed{\begin{aligned} |+y\rangle &\doteq \begin{pmatrix} \langle +y|+y\rangle \\ \langle -y|+y\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |-y\rangle &\doteq \begin{pmatrix} \langle +y|-y\rangle \\ \langle -y|-y\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}} \quad \begin{array}{l} \text{nella base} \\ |+y\rangle, |-y\rangle, \end{array} \tag{3.120}$$

mentre per i vettori $|+\rangle$ e $|-\rangle$ si trova, utilizzando le eq (3.104):

$$\boxed{\begin{aligned} |+\rangle &\doteq \begin{pmatrix} \langle +y|+\rangle \\ \langle -y|+\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ |-\rangle &\doteq \begin{pmatrix} \langle +y|-\rangle \\ \langle -y|-\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ i \end{pmatrix} \end{aligned}} \quad \begin{array}{l} \text{nella base} \\ |+y\rangle, |-y\rangle. \end{array} \tag{3.121}$$

Calcoliamo la **matrice unitaria** U che consente di passare dalla base $|+\rangle, |-\rangle$ alla base $|+y\rangle, |-y\rangle$. Utilizzando le relazioni generali

$$\boxed{|b^{(i)}\rangle = U|a^{(i)}\rangle} \longrightarrow \boxed{U = \sum_i |b^{(i)}\rangle\langle a^{(i)}|} , \quad (3.122)$$

troviamo, nella base $|+\rangle, |-\rangle$:

$$\begin{aligned} U &= |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} (1 \ 0) + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} (0 \ 1) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ i & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.123)$$

ossia

$$\boxed{U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}} . \quad (3.124)$$

Come già osservato nella trattazione generale, le colonne di questa matrice sono costituite dai vettori $|+\rangle$ e $|-\rangle$ nella base $|+\rangle, |-\rangle$. Inoltre, per l'eq. (3.92), la rappresentazione (3.124) è la stessa nelle due basi $|+\rangle, |-\rangle$ e $|+y\rangle, |-y\rangle$.

Possiamo verificare che effettivamente

$$\begin{cases} U|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = |+\rangle , \\ U|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = |-\rangle . \end{cases} \quad (3.125)$$

Verifichiamo inoltre che la matrice U è **unitaria**:

$$U^+U = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.126)$$

ossia

$$\boxed{U^+U = 1} . \quad (3.127)$$

Sappiamo che, se nel cambiamento di base i vettori di base sono legati dalla matrice U , la **rappresentazione matriciale dei vettori di stato nella nuova base** si ottiene applicando l'operatore U^+ . Così, ad esempio, la rappresentazione dei vettori $|+\rangle$ e $|-\rangle$ nella base $|+y\rangle, |-y\rangle$ è

$$\begin{cases} U^+|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ U^+|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ i \end{pmatrix}, \end{cases} \quad (3.128)$$

in accordo con quanto già trovato in eq. (3.121).

Per quanto concerne gli **operatori**, questi trasformano secondo la legge (3.90)

$$\boxed{A \longrightarrow U^+ A U} . \quad (3.129)$$

Così, ad esempio, l'operatore A che rappresenta l'esperimento di Stern e Gerlach

$$\left\{ A \right\} = \left\{ \begin{array}{c} + \\ - \end{array} \right\} \quad (3.130)$$

S_z

e che, come abbiamo visto, nella base $|+\rangle, |-\rangle$ è rappresentato dalla matrice

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{nella base} \quad (3.131)$$

$|+\rangle, |-\rangle,$

nella base $|+y\rangle, |-y\rangle$ si scrive:

$$\begin{aligned} U^+ A U &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (3.132)$$

Pertanto,

$$\boxed{A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}} \quad \text{nella base} \quad (3.133)$$

$|+y\rangle, |-y\rangle .$

Sappiamo che l'effetto dell'operatore A deve essere quello di proiettare qualunque stato fisico $|\varphi\rangle$ sullo stato $|+\rangle$ corrispondente a $S_z = +\hbar/2$. Verifichiamo che questo accade effettivamente, anche quando si utilizza come rappresentazione la base $|+y\rangle$ e $|-y\rangle$. Consideriamo un generico vettore di stato

$$|\varphi\rangle = c_1 | + y \rangle + c_2 | - y \rangle . \quad (3.134)$$

L'applicazione di A su questo stato produce:

$$\begin{aligned} A|\varphi\rangle &\doteq \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c_1 + c_2 \\ c_1 + c_2 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} (c_1 + c_2) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_1 + c_2) | + \rangle , \end{aligned} \quad (3.135)$$

in accordo con quanto ci aspettavamo.

Capitolo 4 | Misure, osservabili e relazione di indeterminazione

Discutiamo qui la **teoria quantistica della misura**.

In meccanica quantistica, per un sistema che si trovi in un determinato stato iniziale $|\varphi\rangle$, una misura di una quantità fisica non produce, in generale, sempre lo stesso risultato. Piuttosto si possono ottenere **differenti risultati**, ciascuno con una ben **determinata probabilità**.

Se indichiamo con a_i i possibili risultati di una misura dell'osservabile A e con P_i le relative probabilità (riferite ad un sistema che si trovi nello stato $|\varphi\rangle$) possiamo scrivere il **valore medio** dei risultati di una misura di A come

$$\langle A \rangle = \sum_i a_i P_i . \quad (4.1)$$

Nella meccanica quantistica si associa ad ogni grandezza fisica A un operatore lineare che la rappresenta:

$$\begin{array}{ccc} \text{Grandezza fisica} & \longleftrightarrow & \text{Operatore} \\ A & & A \end{array} . \quad (4.2)$$

L'operatore A viene definito in maniera tale che, per un sistema che si trovi in uno stato $|\varphi\rangle$, valga la relazione

$$\langle A \rangle = \langle \varphi | A | \varphi \rangle , \quad (4.3)$$

ossia il valor medio dei possibili risultati di una misura di A è dato dal **valore di aspettazione** dell'operatore A sullo stato $|\varphi\rangle$.

Naturalmente i **valori medi di qualsiasi grandezza fisica reale, in qualunque stato, sono reali**. Questa circostanza pone determinate limitazioni alle

proprietà degli operatori che corrispondono, nella meccanica quantistica, alle grandezze fisiche. Assumiamo infatti che $\langle \varphi | A | \varphi \rangle$ sia reale per qualunque scelta del vettore di stato $|\varphi\rangle$. Consideriamo poi un vettore $|\varphi\rangle$ della forma

$$|\varphi\rangle = \alpha|u\rangle + \beta|v\rangle, \quad (4.4)$$

dove α e β sono numeri complessi. Il valore di aspettazione di A su questo stato è dato da:

$$\begin{aligned} (\alpha^* \langle u| + \beta^* \langle v|) A (\alpha|u\rangle + \beta|v\rangle) = \\ = |\alpha|^2 \langle u|A|u\rangle + |\beta|^2 \langle v|A|v\rangle + \alpha^* \beta \langle u|A|v\rangle + \alpha \beta^* \langle v|A|u\rangle. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Per ipotesi, i primi due termini che entrano in questa espressione sono reali. Deve dunque essere reale anche la somma dei due secondi termini. Uguagliando la parte immaginaria di questa somma a zero otteniamo:

$$\alpha^* \beta (\langle u|A|v\rangle - \langle u|A^+|v\rangle) - \alpha \beta^* (\langle v|A^+|u\rangle - \langle v|A|u\rangle) = 0. \quad (4.6)$$

La precedente equazione ha la forma

$$\alpha^* \beta m - (\alpha^* \beta)^* m^* = 0, \quad (4.7)$$

dove

$$m = \langle u|A|v\rangle - \langle u|A^+|v\rangle. \quad (4.8)$$

Scegliendo allora $\alpha^* \beta$ reale oppure $\alpha^* \beta$ immaginario si ottiene rispettivamente

$$\begin{cases} \alpha^* \beta (m - m^*) = 0 \\ \alpha^* \beta (m + m^*) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} m = m^* \\ m = -m^* \end{cases} \quad (4.9)$$

che implicano necessariamente $m = 0$, ossia

$$\langle u|A|v\rangle = \langle u|A^+|v\rangle. \quad (4.10)$$

Ma poiché i vettori $|u\rangle$ e $|v\rangle$ sono arbitrari concludiamo che

$$\boxed{A = A^+}, \quad (4.11)$$

ossia **gli operatori che rappresentano le osservabili in meccanica quantistica sono operatori hermitiani.**

È vero anche il viceversa: se $A = A^+$ allora $\langle \varphi | A | \varphi \rangle$ è reale, per definizione di A^+ . In questo caso si ha infatti:

$$\langle \varphi | A | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | A^+ | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \varphi \rangle. \quad (4.12)$$

4.1 Autovalori ed autovettori di osservabili

Cerchiamo di determinare i possibili valori della grandezza A e gli stati $|a'\rangle$ nei quali tale grandezza non può avere che un solo valore determinato a' . Per tali stati lo **scarto quadratico medio**

$$\langle(\Delta A)^2\rangle \equiv \langle(A - \langle A\rangle)^2\rangle \quad (4.13)$$

deve essere nullo.

Calcoliamo allora esplicitamente il valore di aspettazione di $(\Delta A)^2$ sullo stato $|a'\rangle$, ponendo dunque $\langle A\rangle = a'$. Utilizzando la relazione di completezza per un insieme arbitrario di stati di base si ottiene:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle a'|(\Delta A)^2|a'\rangle = \langle a'|(A - a')(A - a')|a'\rangle = \\ &= \sum_i \langle a'|(A - a')|i\rangle \langle i|(A - a')|a'\rangle = \\ &= \sum_i \langle i|(A - a')|a'\rangle^* \langle i|(A - a')|a'\rangle = \sum_i |\langle i|(A - a')|a'\rangle|^2. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Poiché ciascun termine della sommatoria è positivo o nullo, questa condizione può essere soddisfatta solo se

$$\langle i|A - a'|a'\rangle = 0 \quad \text{per ogni } |i\rangle, \quad (4.15)$$

ossia il vettore di stato $(A - a')|a'\rangle$ ha proiezione nulla su tutti i vettori di stato di base. Ma questo implica evidentemente che il vettore di stato $(A - a')|a'\rangle$ è identicamente nullo, otteniamo cioè la relazione

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle. \quad (4.16)$$

Questa equazione è detta **equazione agli autovalori**. I numeri a' sono detti **autovalori** dell'operatore A ed i corrispondenti stati $|a'\rangle$ prendono il nome di **autostati** o **autovettori** dell'operatore.

Abbiamo così mostrato che **se una misura dell'osservabile A in un determinato stato produce con certezza il valore a'** , ossia in tale stato $\langle(\Delta A)^2\rangle = 0$, allora lo stato in questione è un autostato di A corrispondente all'autovalore a' .

È immediato dimostrare che vale anche il viceversa, ossia **se un sistema si trova in uno stato corrispondente ad un autostato dell'operatore A con autovalore a'** , allora una misura dell'osservabile A produce con certezza il valore a' . Per tale stato infatti

$$\begin{aligned} \langle A\rangle &= \langle a'|A|a'\rangle = a'\langle a'|a'\rangle = a', \\ \langle(\Delta A)^2\rangle &= \langle a'|(A - \langle A\rangle)^2|a'\rangle = \langle a'|(A - a')^2|a'\rangle = 0. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Come discusso nella sezione successiva, è possibile anche mostrare che **gli autovalori dell'operatore A rappresentano tutti e i soli possibili risultati di una misura della grandezza A corrispondente.**

È utile sottolineare la **distinzione tra autovalori e valori di aspettazione.** Per esempio, per una particella di spin $1/2$, i risultati di una misura della componente z dello spin possono assumere solo i valori $\pm\hbar/2$ (corrispondenti agli autovalori dell'operatore S_z) mentre il valore di aspettazione di S_z in un determinato stato può assumere in generale qualunque valore compreso tra $-\hbar/2$ e $+\hbar/2$.

4.2 Autovettori di osservabili come vettori di base

Consideriamo due **proprietà degli operatori hermitiani:**

1. Gli autovalori di un operatore hermitiano sono reali.

Indichiamo con a' un autovalore di A e con $|a'\rangle$ il corrispondente autovettore convenientemente normalizzato: $\langle a'|a'\rangle = 1$. Possiamo allora scrivere

$$\langle a'|A|a'\rangle = a'\langle a'|a'\rangle = a'. \quad (4.18)$$

D'altra parte, abbiamo già dimostrato (vedi (4.12)) che i valori di aspettazione di un operatore hermitiano sono sempre reali, da cui segue

$$\boxed{a' = a'^*}. \quad (4.19)$$

Questo risultato è consistente con l'assunzione che gli autovalori di un operatore hermitiano A rappresentano i possibili risultati di una misura della grandezza fisica reale A .

2. Gli autovettori di un operatore hermitiano corrispondenti ad autovalori distinti sono ortogonali.

Indichiamo con a' e a'' due autovalori distinti di A e con $|a'\rangle$ ed $|a''\rangle$ i corrispondenti autovettori. Si ha:

$$\begin{aligned} \langle a'|A|a''\rangle &= a''\langle a'|a''\rangle, \\ \langle a'|A|a''\rangle &= a'\langle a'|a''\rangle, \end{aligned} \quad (4.20)$$

dove nelle due precedenti equazioni si è fatto agire l'operatore hermitiano A rispettivamente sul ket a destra e sul bra a sinistra. Sottraendo allora membro a membro le due equazioni si ottiene

$$(a' - a'')\langle a'|a''\rangle = 0, \quad (4.21)$$

ossia

$$\boxed{\langle a'|a''\rangle = 0}, \quad \text{per } a' \neq a'' \quad (4.22)$$

che dimostra quanto volevamo.

Osserviamo che invece **in generale gli autostati associati ad uno stesso autovalore non sono ortogonali**. Poiché però una qualunque combinazione lineare di autostati degeneri è ancora un autostato associato allo stesso autovalore, giacché

$$A (c_1|a'_{(1)}\rangle + c_2|a'_{(2)}\rangle) = c_1 A |a'_{(1)}\rangle + c_2 A |a'_{(2)}\rangle = a' (c_1|a'_{(1)}\rangle + c_2|a'_{(2)}\rangle) , \quad (4.23)$$

risulta sempre possibile scegliere tali autostati in modo che siano a due a due ortogonali.

Per ogni operatore hermitiano A è possibile dunque definire un insieme ortonormale di autovettori che soddisfa cioè la relazione

$$\boxed{\langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''}} , \quad (4.24)$$

e che rappresenta una **base** nello spazio dei vettori di stato.

Risulta allora possibile sviluppare un vettore di stato arbitrario $|\varphi\rangle$ come combinazione lineare di autostati dell'operatore A :

$$\boxed{|\varphi\rangle = \sum_{a'} c_{a'}|a'\rangle} . \quad (4.25)$$

I coefficienti dello sviluppo si ottengono moltiplicando a sinistra per $\langle a'|$ ed utilizzando l'ortonormalità degli autostati di A :

$$\boxed{c_{a'} = \langle a'|\varphi\rangle} . \quad (4.26)$$

Cerchiamo il significato fisico delle ampiezze $c_{a'}$. In termini di queste ampiezze, il valore medio di A sullo stato $|\varphi\rangle$ si scrive:

$$\langle A \rangle = \langle \varphi|A|\varphi\rangle = \sum_{a',a''} c_{a'}^* c_{a''} \langle a'|A|a''\rangle = \sum_{a',a''} c_{a'}^* c_{a''} a'' \langle a'|a''\rangle = \sum_{a'} |c_{a'}|^2 a' . \quad (4.27)$$

D'altra parte, la condizione di normalizzazione del vettore di stato $|\varphi\rangle$ comporta:

$$\langle \varphi|\varphi\rangle = 1 = \sum_{a',a''} c_{a'}^* c_{a''} \langle a'|a''\rangle = \sum_{a'} |c_{a'}|^2 . \quad (4.28)$$

Dalle due uguaglianze:

$$\boxed{\langle A \rangle = \sum_{a'} |c_{a'}|^2 a'} , \quad \boxed{\sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1} \quad (4.29)$$

si deduce che il **modulo quadro delle ampiezze $c_{a'}$ rappresenta la probabilità di trovare, in seguito ad una misura della grandezza fisica A , il valore a' :**

$$\boxed{\text{Probabilità per } a' = |c_{a'}|^2 = |\langle a'|\varphi\rangle|^2} \quad (4.30)$$

(purché, come abbiamo visto, lo stato $|\varphi\rangle$ sia normalizzato).

Questa interpretazione è del tutto naturale, nel formalismo che stiamo sviluppando: **la quantità $\langle a'|\varphi\rangle$ rappresenta infatti l'ampiezza di probabilità che lo stato $|\varphi\rangle$ si porti nello stato $|a'\rangle$, stato in cui una misura di A produce con certezza il valore a' .**

Se su di un sistema nello stato $|\varphi\rangle$ si effettua una misura dell'osservabile A e si ottiene come risultato il valore a' , allora, per effetto della misura, il sistema *collassa* nello stato $|a'\rangle$

$$\boxed{\boxed{|\varphi\rangle \xrightarrow[a']{\text{Misura di } A} |a'\rangle}} \quad (4.31)$$

In questo senso il processo di misura, in meccanica quantistica, influisce sempre sullo stato del sistema. La sola eccezione è quando lo stato iniziale è già autostato dell'osservabile che viene misurata.

È utile osservare come l'eq. (4.27), che esprime il valore medio dell'osservabile A in termini degli autovalori a' del corrispondente operatore A , implichi anche che **tali autovalori costituiscono tutti e i soli possibili risultati della misura di A .**

4.2.1 Misure di osservabili e proiettori

Nello studio dell'esperienza di Stern-Gerlach ideale Abbiamo considerato apparecchi di Stern-Gerlach con filtri, del tipo

$$\left. \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} S \quad (4.32)$$

Siamo ora in grado di dare un'espressione esplicita dell'operatore corrispondente ad un apparecchio di questo tipo. In generale, un processo di misura che seleziona solo uno degli autostati di un'osservabile A , diciamo $|a'\rangle$, ed elimina tutti gli altri, è detto **misura selettiva**. È evidente che un tale processo è descritto matematicamente dall'**operatore di proiezione**, o semplicemente **proiettore**,

$$\boxed{\Lambda_{a'} = |a'\rangle\langle a'|} \quad (4.33)$$

Agendo su uno stato generico $|\varphi\rangle$, infatti, l'operatore produce

$$\Lambda_{a'}|\varphi\rangle = |a'\rangle\langle a'|\varphi\rangle \equiv c_{a'}|a'\rangle, \quad (4.34)$$

ossia ritorna lo stato $|a'\rangle$ qualunque sia lo stato $|\varphi\rangle$, purché questo abbia proiezione non nulla su $|a'\rangle$ (ossia $c_{a'} \equiv \langle a'|\varphi\rangle \neq 0$).

Come abbiamo discusso, in generale il processo di misura non è selettivo, e può fornire diversi possibili risultati con diverse corrispondenti probabilità. Tuttavia, **il processo di *collasso* del vettore di stato che segue la misura, indicato nell'eq. (4.31), è ancora rappresentato formalmente dall'azione sullo stato $|\phi\rangle$ del proiettore $\Lambda_{a'}$ di eq. (4.33).**

Possiamo anche mostrare come ogni operatore hermitiano A , corrispondente dunque ad un'osservabile fisica, possa essere espresso come combinazione lineare di proiettori $\Lambda_{a'}$ sui suoi autostati. Dalla relazione di completezza degli autostati di A , infatti, segue che, per ogni coppia di stati esterni $\langle\phi|$ e $|\chi\rangle$,

$$\langle\phi|A|\chi\rangle = \sum_{a'} \langle\phi|A|a'\rangle\langle a'|\chi\rangle = \sum_{a'} a' \langle\phi|a'\rangle\langle a'|\chi\rangle = \langle\phi| \left(\sum_{a'} a' |a'\rangle\langle a'| \right) |\chi\rangle, \quad (4.35)$$

da cui, per l'arbitrarietà degli stati esterni, segue per l'operatore A la rappresentazione

$$\boxed{A = \sum_{a'} a' |a'\rangle\langle a'| = \sum_{a'} a' \Lambda_{a'}}. \quad (4.36)$$

4.3 Osservabili compatibili ed operatori commutanti

Perché in uno stato due osservabili A e B abbiano simultaneamente valori ben determinati (ossia $\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle(\Delta B)^2\rangle = 0$) è necessario che tale stato sia autostato comune degli operatori A e B .

È possibile mostrare che due operatori hanno una base di autostati in comune se e solo se i due operatori, diciamo A e B , commutano tra loro:

$$\boxed{[A, B] = 0}. \quad (4.37)$$

In questo caso le due osservabili si dicono compatibili. Se $[A, B] \neq 0$, invece, le osservabili si dicono incompatibili.

Dimostriamo in primo luogo che due osservabili che ammettono una base di autostati in comune commutano tra loro. Indichiamo con $|a', b'\rangle$ tali autostati, per i quali

$$A|a', b'\rangle = a'|a', b'\rangle \quad B|a', b'\rangle = b'|a', b'\rangle. \quad (4.38)$$

Si ha allora

$$[A, B]|a', b'\rangle = (AB - BA)|a', b'\rangle = (a'b' - b'a')|a', b'\rangle = 0, \quad (4.39)$$

ossia

$$[A, B]|a', b'\rangle = 0 \quad \text{per ogni } |a', b'\rangle. \quad (4.40)$$

Poiché questa identità vale per qualunque autostato di base, allora vale anche per qualunque vettore di stato $|\varphi\rangle$. Ma allora l'operatore $[A, B]$ deve essere identicamente nullo:

$$[A, B] = 0, \quad (4.41)$$

che è quanto volevamo dimostrare.

Supponiamo ora che i due operatori A e B commutino tra loro. Dimostriamo che in questo caso ammettono una base di autostati in comune. Consideriamo l'elemento di matrice di $[A, B]$ tra due autostati dell'operatore A . Si ha:

$$0 = \langle a'|[A, B]|a''\rangle = \langle a'|(AB - BA)|a''\rangle = (a' - a'')\langle a'|B|a''\rangle. \quad (4.42)$$

Ora, se tutti gli autovalori dell'operatore A sono diversi tra loro, si avrà $(a' - a'') \neq 0$ e dunque

$$\langle a'|B|a''\rangle = 0 \quad \text{per } a' \neq a''. \quad (4.43)$$

In altri termini, nella rappresentazione degli autostati di A anche la matrice B risulta diagonale. Dunque, gli autostati $|a'\rangle, |a''\rangle, \dots$ di A sono anche autostati dell'operatore B .

Se invece la matrice A è degenere, allora in generale qualcuno degli elementi non diagonali di B può risultare diverso da zero. Tuttavia in questo caso è sempre possibile scegliere come stati di base una combinazione lineare di autostati degeneri di A in modo tale che con questa scelta la matrice B risulti diagonale.

In conclusione, abbiamo dimostrato che **la commutatività degli operatori è condizione necessaria e sufficiente perché due grandezze fisiche possano avere simultaneamente valori determinati, ossia siano simultaneamente misurabili.**

Consideriamo le misure di A e B quando le due osservabili sono compatibili. Supponiamo di misurare A per primo e ottenere il risultato a' . Successivamente possiamo misurare B ed ottenere il risultato b' . Una terza misura di A darà allora come risultato a' con certezza, cioè la seconda misura, B , non distrugge la precedente informazione contenuta nella prima misura, A . Questo è ovvio quando gli autovalori di A sono non degeneri:

$$|\varphi\rangle \xrightarrow[a']{\text{Misura di } A} |a', b'\rangle \xrightarrow[b']{\text{Misura di } B} |a', b'\rangle \xrightarrow[a']{\text{Misura di } A} |a', b'\rangle \quad (4.44)$$

Quando c'è degenerazione l'argomento è il seguente: dopo la prima misura di A , che dà a' , il sistema precipita in qualche combinazione lineare $\sum_{i=1}^n c_{a'}^{(i)} |a', b^{(i)}\rangle$, dove n è il grado di degenerazione ed i ket $|a', b^{(i)}\rangle$ sono autoket simultanei di A e B corrispondenti tutti allo stesso autovalore di A . La seconda misura, B , può selezionare proprio uno dei termini di questa combinazione lineare, diciamo $|a', b^{(j)}\rangle$, ma la terza misura di A applicata a questo stato fornisce ancora a' :

$$|\varphi\rangle \xrightarrow[a']{\text{Misura di } A} \sum_{i=1}^n c_{a'}^{(i)} |a', b^{(i)}\rangle \xrightarrow[b^{(j)}]{\text{Misura di } B} |a', b^{(j)}\rangle \xrightarrow[a']{\text{Misura di } A} |a', b^{(j)}\rangle. \quad (4.45)$$

Pertanto, indipendentemente dalla presenza o meno di degenerazione, **le misure di A e B non interferiscono. Per questa ragione le osservabili vengono dette compatibili.**

In generale si possono avere diverse osservabili mutuamente compatibili (ossia più di due), cioè:

$$\boxed{[A, B] = [B, C] = [A, C] = \dots = 0} \quad . \quad (4.46)$$

Supponiamo allora di aver trovato un insieme massimale di osservabili che commutano. In questo caso gli autovalori dei singoli operatori A, B, C, \dots possono avere degenerazione, ma se specifichiamo una combinazione (a', b', c', \dots) allora il corrispondente autostato simultaneo di A, B, C risulta univocamente determinato. In altri termini, **uno stato di un sistema risulta sempre completamente determinato dall'assegnazione di un insieme di numeri quantici di numero pari al numero massimo di osservabili mutuamente compatibili esistenti per il sistema.**

4.4 Osservabili incompatibili e relazione di indeterminazione

Le osservabili incompatibili non ammettono un insieme completo di autostati in comune.

È bene osservare, tuttavia, che possono esistere autostati simultanei di osservabili non compatibili. Tali autostati però non costituiscono un insieme completo. (Ad esempio l'autostato dei momenti angolari L^2 ed L_z corrispondente ad $l = m = 0$ è anche autostato di L_x ed L_y , sebbene L_x, L_y ed L_z non commutino tra loro).

Per quanto detto, in generale, **grandezze fisiche associate a due operatori non commutanti non possono essere determinate simultaneamente.** Se si effettuano misure successive di due osservabili A e B incompatibili, allora la seconda misura di B comporta una perdita di informazione circa lo stato del sistema a seguito della prima misura di A :

$$|\varphi\rangle \xrightarrow[a']{\text{Misura di } A} |a'\rangle \xrightarrow[b']{\text{Misura di } B} |b'\rangle \xrightarrow[a'']{\text{Misura di } A} |a''\rangle \quad . \quad (4.47)$$

Le affermazioni precedenti trovano una loro espressione quantitativa nella cosiddetta **relazione di indeterminazione generalizzata**, secondo cui, per ogni stato, vale la seguente disuguaglianza:

$$\boxed{\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4} \langle i[A, B] \rangle^2} \quad , \quad (4.48)$$

dove

$$\boxed{\Delta A \equiv A - \langle A \rangle} \quad \text{e} \quad \boxed{\Delta B \equiv B - \langle B \rangle} \quad . \quad (4.49)$$

In altri termini: **le dispersioni** (o scarti quadratici medi) **di due osservabili non commutanti non possono risultare in generale simultaneamente nulle.**

La relazione di indeterminazione non è altro che la forma generale della famosa relazione di indeterminazione di Heisenberg:

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}, \quad (4.50)$$

che costituisce l'espressione matematica del principio di indeterminazione.

Per dimostrare la relazione di indeterminazione, consideriamo uno stato $|\varphi\rangle$ della forma:

$$|\varphi\rangle = (R + i\lambda S)|\alpha\rangle, \quad (4.51)$$

dove R ed S sono due operatori hermitiani e λ una costante reale. L'ampiezza $\langle\varphi|\varphi\rangle$ è, per definizione, una quantità reale positiva o nulla. Questo implica:

$$\begin{aligned} \langle\varphi|\varphi\rangle &= \langle\alpha|(R - i\lambda S)(R + i\lambda S)|\alpha\rangle = \\ &= \langle\alpha|R^2|\alpha\rangle + i\lambda\langle\alpha|RS|\alpha\rangle - i\lambda\langle\alpha|SR|\alpha\rangle + \lambda^2\langle\alpha|S^2|\alpha\rangle \\ &= \langle\alpha|R^2|\alpha\rangle + \lambda\langle\alpha|i[R, S]|\alpha\rangle + \lambda^2\langle\alpha|S^2|\alpha\rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (4.52)$$

ossia

$$\langle R^2 \rangle + \lambda \langle i[R, S] \rangle + \lambda^2 \langle S^2 \rangle \geq 0, \quad (4.53)$$

dove i valori medi possono essere calcolati su uno stato arbitrario.

Osserviamo, incidentalmente, come l'eq. (4.53) indichi che il valore medio $\langle i[R, S] \rangle$ deve essere un numero reale. In altri termini l'operatore $i[R, S]$ è un operatore hermitiano se R ed S sono operatori hermitiani o, equivalentemente, il commutatore è un operatore antihermitiano:

$$([R, S])^+ = -[R, S] \quad \text{se} \quad R = R^+, S = S^+. \quad (4.54)$$

Questo risultato può essere anche dimostrato per verifica diretta.¹

La condizione (4.53) deve risultare soddisfatta per qualunque valore della variabile reale λ . A tale scopo è necessario richiedere che il discriminante Δ dell'equazione sia negativo o nullo, di modo che l'equazione con il segno di uguaglianza non ammetta soluzioni reali o al più ne ammetta una sola (vedi figura). Pertanto

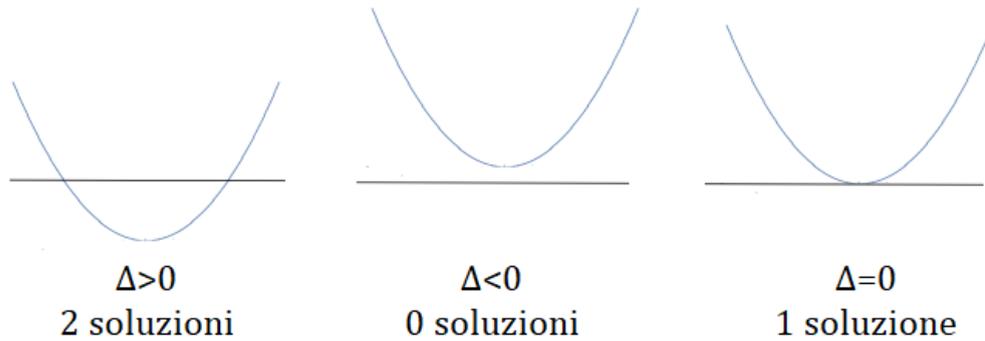
¹Si osservi, a tale scopo, che l'operazione di hermitiano coniugato su un prodotto di operatori produce:

$$(AB)^+ = B^+A^+. \quad (4.55)$$

Infatti, data una coppia arbitraria di stati esterni $|\varphi\rangle$ e $\langle\chi|$, si ha:

$$\langle\chi|(AB)^+|\varphi\rangle = \langle\varphi|AB|\chi\rangle^* = \left(\sum_i \langle\varphi|A|i\rangle\langle i|B|\chi\rangle \right)^* = \sum_i \langle\chi|B^+|i\rangle\langle i|A^+|\varphi\rangle = \langle\chi|B^+A^+|\varphi\rangle \quad (4.56)$$

da cui segue la (4.55).



$$\Delta = \langle i[R, S] \rangle^2 - 4 \langle R^2 \rangle \langle S^2 \rangle \leq 0, \quad (4.57)$$

ossia

$$\langle R^2 \rangle \langle S^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle i[R, S] \rangle^2. \quad (4.58)$$

Scegliendo infine $R = \Delta A$ ed $S = \Delta B$, ed osservando che $[\Delta A, \Delta B] = [A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle] = [A, B]$, si ottiene la relazione di indeterminazione (4.48).

4.5 Esempio: autovalori ed autovettori dello spin per particelle di spin 1/2 e relazioni di indeterminazione

Consideriamo nuovamente un sistema costituito da particelle di spin 1/2.

Abbiamo già visto che i corrispondenti stati di singola particella possono essere espressi come combinazione lineare di 2 stati di base, che qui indichiamo con $|+z\rangle$ e $|-z\rangle$, che rappresentano gli stati in cui la proiezione dello spin della particella lungo l'asse z vale rispettivamente $S_z = \pm \hbar/2$.

È evidente che in questa base l'operatore S_z è rappresentato dalla seguente matrice:

$$S_z = \begin{pmatrix} \langle +z | S_z | +z \rangle & \langle +z | S_z | -z \rangle \\ \langle -z | S_z | +z \rangle & \langle -z | S_z | -z \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.59)$$

o, equivalentemente

$$S_z \doteq \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad (4.60)$$

dove σ_z è la matrice di Pauli.

Utilizzando le proprietà generali dell'operatore di spin è possibile anche dimostrare (vedi eq. (16.14) e (16.15)) che per gli analoghi operatori S_x ed S_y valgono le

seguenti rappresentazioni:

$$\boxed{S_x \doteq \frac{\hbar}{2} \sigma_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}} \quad , \quad \boxed{S_y \doteq \frac{\hbar}{2} \sigma_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}} \quad . \quad (4.61)$$

Poiché le tre matrici di Pauli hanno determinante uguale a -1 e traccia nulla, i loro autovalori sono $+1$ o -1 . Corrispondentemente, gli autovalori della proiezione dello spin lungo un qualunque asse sono $\pm \hbar/2$.

È immediato calcolare i corrispondenti autovettori. Calcoliamo ad esempio esplicitamente l'autostato $|+x\rangle$ di S_x corrispondente all'autovalore $+\hbar/2$. Scriviamo questo stato come combinazione lineare generica di autostati di S_z :

$$|+x\rangle = c_1|+z\rangle + c_2|-z\rangle \doteq \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} . \quad (4.62)$$

Applicando l'equazione agli autovalori, $S_x|+x\rangle = \hbar/2|+x\rangle$, si ottiene:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} c_2 = c_1 \\ c_1 = c_2 \end{cases} . \quad (4.63)$$

La condizione di normalizzazione dello stato implica poi:

$$\langle +x|+x\rangle = (c_1^* \ c_2^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 , \quad (4.64)$$

che, unitamente alla condizione (4.63) implica $|c_1| = 1/\sqrt{2}$. Possiamo allora scrivere:

$$\boxed{c_1 = c_2 = \frac{e^{i\delta}}{\sqrt{2}}} \quad \Rightarrow \quad \boxed{|+x\rangle = \frac{e^{i\delta}}{\sqrt{2}}(|+z\rangle + |-z\rangle)} \quad . \quad (4.65)$$

Il fattore di fase moltiplicativo, nel vettore di stato, è completamente arbitrario, ossia non interviene mai nelle quantità fisiche che sono le probabilità ($|\langle \alpha|+x\rangle|^2$) ed i valori di aspettazione ($\langle +x|A|+x\rangle$). Una scelta possibile è ad esempio $e^{i\delta} = 1$. L'autostato $|-x\rangle$ è poi ortogonale all'autostato $|+x\rangle$. In conclusione si ha:

$$\boxed{\begin{aligned} S_x = +\frac{\hbar}{2} : \quad |+x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|+z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-z\rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ S_x = -\frac{\hbar}{2} : \quad |-x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|+z\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-z\rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned}} \quad . \quad (4.66)$$

In modo analogo possiamo calcolare gli autostati di S_y corrispondenti ai due autovalori $\pm \hbar/2$. Si trova:

$$\boxed{\begin{aligned} S_y = +\frac{\hbar}{2} : \quad | + y \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} | + z \rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} | - z \rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \\ S_y = -\frac{\hbar}{2} : \quad | - y \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} | + z \rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} | - z \rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \end{aligned}} \quad (4.67)$$

È semplice verificare anche i risultati (4.67). Ad esempio si ha:

$$S_y | - y \rangle \doteq \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ i \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} | - y \rangle. \quad (4.68)$$

Gli operatori corrispondenti alle proiezioni dello spin lungo i tre assi non commutano tra loro. Per esempio, un calcolo esplicito del commutatore di S_x ed S_y conduce a:

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= S_x S_y - S_y S_x = \frac{\hbar^2}{4} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left[\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.69)$$

ossia

$$\boxed{[S_x, S_y] = i\hbar S_z} \quad (4.70)$$

In generale, è possibile verificare che le tre relazioni di commutazione indipendenti possono essere scritte nella forma compatta

$$\boxed{[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k}, \quad (4.71)$$

dove gli indici 1,2,3 sono associati rispettivamente alle componenti x , y e z .

Le relazioni di commutazione qui derivate implicano che **le componenti dello spin lungo assi distinti non possono essere misurate simultaneamente, ossia che queste tre grandezze fisiche sono osservabili incompatibili**. Corrispondentemente, deve risultare soddisfatta una **relazione di indeterminazione**. Nel caso della misura di S_x ed S_y , per esempio, questa relazione assume la forma

$$\boxed{\langle (\Delta S_x)^2 \rangle \langle (\Delta S_y)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle i[S_x, S_y] \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \langle S_z \rangle^2} \quad (4.72)$$

Verifichiamo la validità di questa relazione per una particella che si trovi ad esempio nello stato $| + z \rangle$.

In generale, lo scarto quadratico medio di una grandezza A si esprime come

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2, \quad (4.73)$$

ossia

$$\boxed{\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}, \quad (4.74)$$

e dipende dunque dai valori medi di A e A^2 .

Nel caso di $(\Delta S_x)^2$, allora, calcoliamo in primo luogo l'operatore S_x^2 :

$$S_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} I. \quad (4.75)$$

Poiché lo stato $|+z\rangle$, su cui vogliamo verificare la relazione di indeterminazione, è uno degli stati di base, i valori medi di S_x ed S_x^2 su questo stato si ottengono direttamente dai corrispondenti elementi di matrice (elementi 1,1):

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \langle +z | S_x | +z \rangle = (S_x)_{11} = \frac{\hbar}{2} \cdot 0 = 0, \\ \langle S_x^2 \rangle &= \langle +z | S_x^2 | +z \rangle = (S_x^2)_{11} = \frac{\hbar^2}{4} \cdot 1 = \frac{\hbar^2}{4}. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Ne segue allora

$$\boxed{\langle (\Delta S_x)^2 \rangle = \langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4}}. \quad (4.77)$$

Analogamente si calcola $\langle (\Delta S_y)^2 \rangle$ (con $S_y^2 = \hbar^2/4 \cdot I$):

$$\begin{aligned} \langle S_y \rangle &= \langle +z | S_y | +z \rangle = (S_y)_{11} = \frac{\hbar}{2} \cdot 0 = 0, \\ \langle S_y^2 \rangle &= \langle +z | S_y^2 | +z \rangle = (S_y^2)_{11} = \frac{\hbar^2}{4} \cdot 1 = \frac{\hbar^2}{4}, \end{aligned} \quad (4.78)$$

da cui

$$\boxed{\langle (\Delta S_y)^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle - \langle S_y \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4}}. \quad (4.79)$$

Il secondo membro della relazione di indeterminazione (4.72) è in questo caso, a parte il fattore $\hbar^2/4$, semplicemente il valore medio di S_z al quadrato:

$$\boxed{\langle S_z \rangle^2 = (\langle +z | S_z | +z \rangle)^2 = \frac{\hbar^2}{4}}. \quad (4.80)$$

Mettendo insieme i risultati (4.77), (4.79) e (4.80) possiamo allora verificare esplicitamente la relazione di indeterminazione:

$$\langle (\Delta S_x)^2 \rangle \langle (\Delta S_y)^2 \rangle = \left(\frac{\hbar^2}{4} \right)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \langle S_z \rangle^2 = \left(\frac{\hbar^2}{4} \right)^2. \quad (4.81)$$

La relazione di indeterminazione risulta quindi soddisfatta, in questo caso, con il segno di uguaglianza. In altri termini, nello stato $|+z\rangle$ il prodotto delle indeterminazioni di S_x e S_y assume il valore minimo possibile compatibilmente con la relazione di indeterminazione.

Vediamo come infine, considerando ancora ad esempio lo stato $|+z\rangle$, i valori medi $\langle S_x \rangle$ e $\langle S_x^2 \rangle$ possano essere calcolati anche utilizzando la definizione di valore medio:

$$\langle A \rangle = \sum_i a_i P_i, \quad (4.82)$$

dove a_i sono i possibili risultati della misura di A e P_i le corrispondenti probabilità.

Utilizzando le eq. (4.66) è semplice trovare che lo stato $|+z\rangle$ si esprime come combinazione lineare degli autostati di S_x nella forma

$$\boxed{|+z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-x\rangle}. \quad (4.83)$$

I possibili risultati di una misura di S_x e le corrispondenti probabilità su questo stato sono allora

$$\begin{cases} S_x^{(1)} = +\frac{\hbar}{2}, & p_1 = \frac{1}{2}, \\ S_x^{(2)} = -\frac{\hbar}{2}, & p_2 = \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (4.84)$$

Per i valori medi di S_x ed S_x^2 si ottiene allora:

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \sum_i S_x^{(i)} P_i = +\frac{\hbar}{2} \cdot \frac{1}{2} - \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{1}{2} = 0, \\ \langle S_x^2 \rangle &= \sum_i (S_x^{(i)})^2 P_i = +\frac{\hbar^2}{4} \cdot \frac{1}{2} + \frac{\hbar^2}{4} \cdot \frac{1}{2} = \frac{\hbar^2}{4}, \end{aligned} \quad (4.85)$$

in accordo con i risultati ottenuti in eq. (4.76).

Capitolo 5 | Operatore posizione

Abbiamo assunto che le osservabili finora considerate abbiano uno spettro discreto di autovalori. In meccanica quantistica, tuttavia, vi sono **osservabili con autovalori continui**.

Un caso particolarmente importante di osservabile con spettro continuo è rappresentato dalla **posizione**. Consideriamo (per semplicità) una particella vincolata a muoversi in una dimensione e sia x l'asse lungo il quale è possibile il moto. Possiamo allora pensare di indicare con il simbolo $|x'\rangle$ **lo stato in cui la particella si trova nella posizione x'** .

Una misura di posizione per una particella che si trovi nello stato $|x'\rangle$ fornisce per definizione con certezza il valore x' . In altri termini, lo stato $|x'\rangle$ deve essere un **autostato dell'operatore posizione** corrispondente all'autovalore x' :

$$\boxed{\boxed{x|x'\rangle = x'|x'\rangle}} . \quad (5.1)$$

In questa equazione x' è semplicemente un numero mentre x rappresenta **l'operatore posizione**.

Così come uno stato qualsiasi può essere sviluppato in serie di autostati di una grandezza con spettro discreto, allo stesso modo **uno stato può essere sviluppato**, questa volta in integrale, **secondo un sistema completo di autostati di una grandezza con spettro continuo**. Nel caso degli autostati dell'operatore posizione, questo sviluppo ha la forma

$$\boxed{\boxed{|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle}} . \quad (5.2)$$

L'eq. (5.2) definisce anche la **relazione di completezza per gli autostati della posizione**:

$$\boxed{\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle \langle x'| = 1}} . \quad (5.3)$$

Contrariamente al caso di variabili con spettro discreto, il modulo quadro $|\langle x'|\alpha\rangle|^2$ non può essere interpretato come probabilità che una particella nello stato $|\alpha\rangle$ venga a trovarsi nella posizione x' . Infatti, per una variabile continua, tale probabilità è nulla.

Il significato fisico dell'ampiezza $\langle x'|\alpha\rangle$ può essere derivato nel modo seguente. Utilizzando lo sviluppo (5.2), calcoliamo il valore medio della posizione nello stato $|\alpha\rangle$

$$\langle \alpha|x|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \alpha|x|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x' |\langle x'|\alpha\rangle|^2. \quad (5.4)$$

Da questa espressione vediamo che la quantità

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' \quad (5.5)$$

rappresenta la probabilità che la particella nello stato $|\alpha\rangle$ si trovi posizionata in un intervallo di larghezza dx' attorno al punto x' .

Il prodotto scalare $\langle x'|\alpha\rangle$ prende la denominazione di **funzione d'onda** $\psi_\alpha(x')$ per lo stato $|\alpha\rangle$

$$\boxed{\psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle}. \quad (5.6)$$

Dunque, per un intervallo infinitesimo, **la probabilità che una particella nello stato $|\alpha\rangle$ si trovi compresa in un intervallo di larghezza dx' nell'intorno del punto x' è:**

$$\boxed{P(x', x' + dx') = |\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' = |\psi_\alpha(x')|^2 dx'}. \quad (5.7)$$

La probabilità di trovare la particella in un intervallo compreso tra due punti dati, a e b , è allora data da

$$\boxed{P(a, b) = \int_a^b dx' |\psi_\alpha(x')|^2}. \quad (5.8)$$

Ne segue anche che la probabilità di trovare la particella in un qualunque punto compreso tra $-\infty$ e $+\infty$ è:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\psi_\alpha(x')|^2. \quad (5.9)$$

Dall'eq. (5.2) risulta che questa probabilità è correttamente normalizzata all'unità se lo stato $|\alpha\rangle$ è normalizzato:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\psi_\alpha(x')|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\langle x'|\alpha\rangle|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \alpha|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \langle \alpha|\alpha\rangle = 1. \quad (5.10)$$

L'eq. (5.10) esprime la **condizione di normalizzazione per la funzione d'onda**

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\psi_{\alpha}(x')|^2 = 1} . \quad (5.11)$$

Utilizzando l'eq. (5.3), che definisce la relazione di completezza degli autostati della posizione, è **possibile esprimere una qualunque ampiezza $\langle \beta | \alpha \rangle$ in termini di un integrale di sovrapposizione delle funzioni d'onda per gli stati $|\beta\rangle$ ed $|\alpha\rangle$** :

$$\boxed{\langle \beta | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \beta | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi_{\beta}^*(x') \psi_{\alpha}(x')} . \quad (5.12)$$

Similmente, lo sviluppo di un vettore di stato $|\alpha\rangle$ in autostati di un osservabile con spettro discreto A ,

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \equiv \sum_{a'} C_{a'} |a'\rangle , \quad (5.13)$$

può essere espresso in termini di uno **sviluppo della funzione d'onda ψ_{α} in “autofunzioni” dell'operatore A** . Moltiplicando la precedente equazione a sinistra per il bra $\langle x' |$ si ottiene infatti:

$$\boxed{\psi_{\alpha}(x') = \sum_{a'} C_{a'} u_{a'}(x')} , \quad (5.14)$$

dove si sono introdotte le **autofunzioni** dell'operatore A corrispondenti agli autovalori a' :

$$\boxed{u_{a'}(x') = \langle x' | a' \rangle} . \quad (5.15)$$

5.1 Normalizzazione degli autostati dell'operatore posizione e funzione δ di Dirac

Più complessa che nel caso dello spettro discreto è la questione della **normalizzazione degli autostati di osservabili con spettro continuo** ed in particolare, dunque, dell'operatore posizione.

Per dedurre la condizione di normalizzazione, utilizziamo la relazione di completezza per scrivere:

$$\psi_{\alpha}(x') = \langle x' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'' \langle x' | x'' \rangle \langle x'' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'' \langle x' | x'' \rangle \psi_{\alpha}(x'') . \quad (5.16)$$

Questa equazione deve valere per $\psi_\alpha(x')$ arbitraria e deve quindi essere un'identità. A tale scopo è necessario, anzitutto, che il coefficiente di $\psi_\alpha(x'')$, cioè l'ampiezza $\langle x'|x'' \rangle$ si annulli per tutti gli $x' \neq x''$. Per $x' = x''$, questa ampiezza deve diventare infinita; viceversa l'integrale in dx'' sarebbe semplicemente nullo. In tal modo, l'ampiezza $\langle x'|x'' \rangle$ è una funzione della differenza $x' - x''$ che si annulla allorchè questa differenza è diversa da zero e diventa infinita allorchè questa è nulla. Indichiamo questa funzione con $\delta(x' - x'')$

$$\boxed{\langle x'|x'' \rangle = \delta(x' - x'')} . \quad (5.17)$$

Il modo in cui la funzione $\delta(x' - x'')$ diventa infinita per $x' - x'' = 0$ è determinato dall'eq. (5.16) che possiamo scrivere in forma generale come

$$\boxed{f(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_0) f(x)} . \quad (5.18)$$

È ovvio che a questo scopo si deve avere in particolare

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) = 1} , \quad (5.19)$$

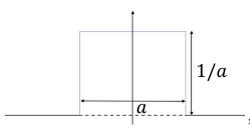
che segue dall'eq. (5.18) scegliendo $f(x) = 1$.

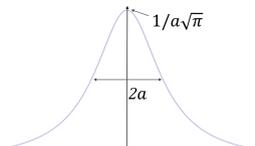
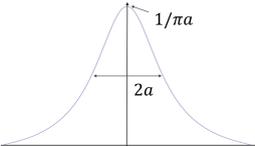
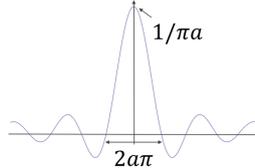
La funzione così definita si chiama **funzione δ di Dirac**. Riepiloghiamo le formule che la definiscono

$$\boxed{\begin{aligned} &\bullet \delta(x) = 0 \quad \text{per } x \neq 0; \\ &\bullet \delta(0) = \infty; \\ &\bullet \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) = 1 \end{aligned}} . \quad (5.20)$$

È ovvio che come limiti di integrazione nell'ultima equazione si possono prendere due altri valori qualsiasi tra cui è compreso il punto $x = 0$.

Presentiamo qui alcune possibili definizioni della δ di Dirac come limite di funzioni ordinarie

$$\bullet \lim_{a \rightarrow 0} \begin{cases} 1/a , & \text{per } |x| \leq a/2 \\ 0 , & \text{per } |x| > a/2 \end{cases} = \text{img}$$


- $\lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-x^2/a^2} =$  (gaussiana)
- $\lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{a}{x^2 + a^2} =$  (lorentziana)
- $\lim_{a \rightarrow 0} \frac{\sin(x/a)}{\pi x} =$ 

Dall'ultima definizione segue anche la rappresentazione integrale della δ di Dirac:

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\sin x/a}{\pi x} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{-1/a}^{+1/a} dk e^{ikx}, \quad (5.21)$$

ossia

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx} .$$

(5.22)

5.2 Operatori nella rappresentazione delle coordinate

In precedenza abbiamo discusso come una qualsiasi ampiezza $\langle \beta | \alpha \rangle$ possa esprimersi in termini di un integrale di sovrapposizione delle funzioni d'onda ψ_β e ψ_α degli stati $|\beta\rangle$ e $|\alpha\rangle$.

Esaminiamo ora come gli **elementi di matrice** $\langle \beta | A | \alpha \rangle$ possano essere scritti usando le funzioni d'onda ψ_β e ψ_α . Si ha evidentemente:

$$\begin{aligned} \langle \beta | A | \alpha \rangle &= \int dx' \int dx'' \langle \beta | x' \rangle \langle x' | A | x'' \rangle \langle x'' | \alpha \rangle = \\ &= \int dx' \int dx'' \psi_\beta^*(x') \langle x' | A | x'' \rangle \psi_\alpha(x'') \end{aligned}$$

(5.23)

L'ampiezza $\langle \beta | A | \alpha \rangle$ è dunque completamente determinata in termini di un integrale contenente le funzioni d'onda ψ_β e ψ_α e gli elementi di matrice $\langle x' | A | x'' \rangle$. Questi sono detti **elementi di matrice dell'operatore A nella rappresentazione delle coordinate** e sono, in generale, una funzione delle due variabili x' e x'' .

Una notevole semplificazione si ha quando l'osservabile A è una funzione solo dell'operatore posizione x . Consideriamo per esempio il caso in cui

$$A = x^2. \quad (5.24)$$

Abbiamo allora:

$$\langle x'|x^2|x''\rangle = x''^2 \langle x'|x''\rangle = x''^2 \delta(x' - x'') = x'^2 \delta(x' - x''), \quad (5.25)$$

dove si è usato il fatto che $|x''\rangle$ è un autostato dell'operatore x corrispondente all'autovalore x'' e la condizione di normalizzazione degli autostati di posizione. Sostituendo questo risultato nell'eq. (5.23) l'integrale doppio si riduce ad un integrale semplice in virtù delle proprietà della funzione δ :

$$\begin{aligned} \langle \beta|x^2|\alpha\rangle &= \int dx' \int dx'' \psi_\beta^*(x') x'^2 \delta(x' - x'') \psi_\alpha(x'') = \\ &= \int dx' \psi_\beta^*(x') x'^2 \psi_\alpha(x'). \end{aligned} \quad (5.26)$$

È evidente, da quanto discusso, che in generale, per un operatore funzione del solo operatore posizione x , si ha:

$$\boxed{\langle \beta|A(x)|\alpha\rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') A(x') \psi_\alpha(x')}. \quad (5.27)$$

Si noti che $A(x)$ nel primo membro di queste equazioni è un operatore, mentre $A(x')$ nel secondo membro non è un operatore ma una funzione ordinaria.

5.3 Regole di commutazione per gli operatori posizione

Le proprietà dell'operatore posizione sin qui considerate possono essere facilmente generalizzate al caso di tre dimensioni spaziali.

Possiamo indicare con il simbolo $|\vec{x}'\rangle$ **il vettore di stato di una particella che si trovi nel punto di coordinate $\vec{x}' = (x', y', z')$** .

Una misura di posizione per una particella che si trovi nello stato $|\vec{x}'\rangle$ fornisce con certezza i valori x' , y' e z' per le tre coordinate spaziali rispettivamente. In altri termini il vettore di stato $|\vec{x}'\rangle$ è autostato simultaneo delle osservabili x , y e z :

$$x|\vec{x}'\rangle = x'|\vec{x}'\rangle, \quad y|\vec{x}'\rangle = y'|\vec{x}'\rangle, \quad z|\vec{x}'\rangle = z'|\vec{x}'\rangle. \quad (5.28)$$

Sappiamo che per poter considerare un autostato simultaneo di x , y , e z dobbiamo assumere che le tre componenti del vettore posizione possano essere misurate simultaneamente con un grado di precisione arbitrario. Dobbiamo perciò avere

$$\boxed{[x_i, x_j] = 0}, \quad (5.29)$$

dove x_1 , x_2 ed x_3 stanno per x , y e z rispettivamente. In altri termini, **le diverse componenti della posizione sono osservabili compatibili**.

Capitolo 6 | Traslazioni e impulso

La stretta **connessione** esistente in meccanica classica **tra impulso e traslazioni spaziali** vale anche nella meccanica quantistica.

In meccanica quantistica, così come in meccanica classica, **per un sistema che è invariante rispetto a traslazioni lungo un determinato asse, si conserva la componente dell'impulso parallela al dato asse**. Inoltre anche in meccanica quantistica è possibile affermare che **l'impulso è il generatore delle traslazioni spaziali**.

Per introdurre il concetto di traslazione spaziale in meccanica quantistica, consideriamo un sistema che sia ben localizzato nell'intorno di un punto \vec{x}' dello spazio, e sia rappresentato pertanto dal vettore di stato $|\vec{x}'\rangle$. Consideriamo poi una trasformazione che cambia questo stato in un altro stato ben localizzato, questa volta attorno al punto $\vec{x}' + d\vec{x}'$. Tutti gli altri parametri da cui dipende lo stato del sistema restano immutati nella trasformazione. L'operatore che realizza questa trasformazione è detto **operatore di traslazione infinitesima** di $d\vec{x}'$ e lo indichiamo con $T(d\vec{x}')$. La sua azione sullo stato $|\vec{x}'\rangle$ è pertanto definita da:

$$\boxed{T(d\vec{x}')|\vec{x}'\rangle = |\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle} . \quad (6.1)$$

Questa stessa espressione definisce anche **l'azione dell'operatore $T(d\vec{x}')$ su uno stato arbitrario $|\alpha\rangle$** , giacché questo può essere sempre sviluppato in serie di autostati dell'operatore di posizione:

$$T(d\vec{x}')|\alpha\rangle = T(d\vec{x}') \int d^3x' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'|\alpha\rangle = \int d^3x' |\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'|\alpha\rangle \quad (6.2)$$

ossia, con un cambio di variabile,

$$\boxed{|\alpha'\rangle \equiv T(d\vec{x}')|\alpha\rangle = \int d^3x' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}' - d\vec{x}'|\alpha\rangle} . \quad (6.3)$$

Da questa equazione vediamo anche, allora, che la funzione d'onda corrispondente allo stato $|\alpha'\rangle$ traslato di $|\alpha\rangle$ si ottiene a partire dalla funzione d'onda dello stato $|\alpha\rangle$ mediante la sostituzione $\vec{x}' \rightarrow \vec{x}' - d\vec{x}'$, ossia:

$$\psi_{\alpha'}(\vec{x}') = \langle \vec{x}'|\alpha'\rangle = \langle \vec{x}'|T(d\vec{x}')|\alpha\rangle = \langle \vec{x}' - d\vec{x}'|\alpha\rangle = \psi_{\alpha}(\vec{x}' - d\vec{x}') . \quad (6.4)$$

Sia il vettore di stato $|\alpha\rangle$ che il vettore di stato $|\alpha'\rangle = T(d\vec{x}')|\alpha\rangle$ devono essere normalizzati, ossia

$$\langle\alpha'|\alpha'\rangle = \langle\alpha|T^+(d\vec{x}')T(d\vec{x}')|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle. \quad (6.5)$$

Ne segue che **l'operatore di traslazione deve essere unitario:**

$$\boxed{T^+(d\vec{x}')T(d\vec{x}') = 1} \quad . \quad (6.6)$$

È evidente che la condizione di unitarietà deve essere soddisfatta non solo dall'operatore di traslazione infinitesima ma anche dall'operatore di traslazione finita, così come, più in generale, da un qualunque operatore che effettua trasformazioni tra vettori di stato e deve pertanto conservarne la normalizzazione.

Nel limite di traslazione nulla l'operatore $T(d\vec{x}')$ deve ridursi ovviamente all'identità:

$$\boxed{\lim_{d\vec{x}' \rightarrow 0} T(d\vec{x}') = 1} \quad . \quad (6.7)$$

Inoltre, l'effetto combinato di due traslazioni successive, di $d\vec{x}'$ e $d\vec{x}''$ rispettivamente, deve essere equivalente ad una traslazione del vettore $d\vec{x}' + d\vec{x}''$:

$$\boxed{T(d\vec{x}'')T(d\vec{x}') = T(d\vec{x}' + d\vec{x}'')} \quad . \quad (6.8)$$

Le eq. (6.6), (6.7) e (6.8) ci consentono di scrivere, al primo ordine in $d\vec{x}'$,

$$\boxed{T(d\vec{x}') = 1 - i\vec{K} \cdot d\vec{x}'} \quad , \quad (6.9)$$

dove \vec{K} è un operatore vettore di componenti K_x , K_y e K_z .

Il fattore i , introdotto nell'eq. (6.9), comporta che **l'operatore \vec{K} è hermitiano**. Dalla condizione di unitarietà di T segue infatti

$$\begin{aligned} T^+(d\vec{x}')T(d\vec{x}') &= \left(1 + i\vec{K}^+ \cdot d\vec{x}'\right) \left(1 - i\vec{K} \cdot d\vec{x}'\right) = \\ &= 1 - i\left(\vec{K} - \vec{K}^+\right) \cdot d\vec{x}' + O(d\vec{x}'^2) = 1 \end{aligned} \quad (6.10)$$

da cui

$$\boxed{\vec{K} = \vec{K}^+} \quad . \quad (6.11)$$

L'operatore \vec{K} , così come definito dall'eq.(6.9), è detto in meccanica quantistica il **generatore delle traslazioni**.

Il significato fisico di \vec{K} può essere derivato con la seguente considerazione. Come vedremo nel capitolo 11, in meccanica quantistica, così come in meccanica classica, all'**invarianza** di un sistema rispetto ad un insieme di trasformazioni continue corrisponde una **legge di conservazione**, e la quantità conservata coincide con il generatore della trasformazione. Poiché la quantità conservata per un sistema invariante per traslazioni spaziali è l'impulso totale del sistema, siamo indotti a formulare l'ipotesi che l'operatore \vec{K} coincida, a meno di un fattore costante, con l'operatore impulso. La costante di proporzionalità deve avere le dimensioni dell'inverso di un'azione e risulta essere uguale all'inverso della costante di Planck, \hbar . Dunque:

$$\boxed{\vec{K} = \frac{\vec{p}}{\hbar}} \quad (6.12)$$

Con questa identificazione l'operatore di traslazione infinitesima si scrive

$$\boxed{T(d\vec{x}') = 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}'} \quad (6.13)$$

Il valore numerico della costante universale \hbar , che dipende peraltro dal sistema di unità di misura adottato, non può essere determinato sulla base di principi primi nella teoria quantistica ma può essere solo misurato negli esperimenti.¹

È semplice derivare, a partire dall'espressione (6.13) dell'operatore di traslazione infinitesima, la forma esplicita dell'operatore che effettua **traslazioni di una quantità finita**. Consideriamo ad esempio una traslazione finita di una quantità $\Delta x'$ nella direzione dell'asse x . Questa trasformazione può essere considerata come il prodotto di N traslazioni infinitesime di una quantità $\Delta x'/N$ nella direzione dell'asse x nel limite $N \rightarrow \infty$. Troviamo allora:

$$\begin{aligned} T(\Delta x' \hat{x}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(T \left(\frac{\Delta x'}{N} \hat{x} \right) \right)^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i p_x \Delta x'}{\hbar N} \right)^N = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left[N \log \left(1 - \frac{i p_x \Delta x'}{\hbar N} \right) \right] = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} p_x \Delta x' \right] \end{aligned} \quad (6.15)$$

o in generale, per una traslazione di $\Delta \vec{x}'$ in direzione arbitraria,

$$\boxed{T(\Delta \vec{x}') = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \Delta \vec{x}'}} \quad (6.16)$$

¹Osserviamo come in meccanica classica una traslazione infinitesima, definita da $\vec{X} = \vec{x} + d\vec{x}$ e $\vec{P} = \vec{p}$, è una trasformazione canonica ottenibile dalla funzione generatrice

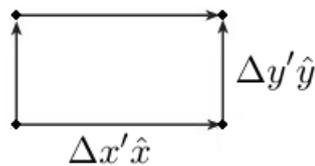
$$\Phi(\vec{x}, \vec{P}) = \vec{x} \cdot \vec{P} + \vec{P} \cdot d\vec{x}. \quad (6.14)$$

Poiché $\vec{x} \cdot \vec{P}$ è la funzione generatrice della trasformazione identità, riconosciamo che l'eq. (6.14) ha una stretta somiglianza formale con l'operatore di traslazione infinitesimo definito dall'eq. (6.13). In virtù dell'eq. (6.14), anche in meccanica classica l'impulso è definito essere il *generatore* delle traslazioni infinitesime e si conserva per sistemi invarianti rispetto a tale trasformazione.

6.1 Le regole di commutazione canoniche e la relazione di indeterminazione di Heisenberg

Poniamoci il problema di derivare le **regole di commutazione tra le diverse componenti dell'operatore impulso**.

Una proprietà fondamentale delle traslazioni è che **traslazioni successive in direzioni diverse commutano**. Così ad esempio, l'effetto combinato di una traslazione di $\Delta x'$ lungo l'asse x ed una traslazione di $\Delta y'$ lungo l'asse y è lo stesso di quello ottenuto da una traslazione di $\Delta y'$ lungo l'asse y seguita da una traslazione di $\Delta x'$ lungo l'asse x :



Matematicamente questa circostanza si esprime come:

$$T(\Delta y' \hat{y}) T(\Delta x' \hat{x}) = T(\Delta x' \hat{x}) T(\Delta y' \hat{y}), \quad (6.17)$$

o, equivalentemente

$$\boxed{[T(\Delta x' \hat{x}), T(\Delta y' \hat{y})] = 0} . \quad (6.18)$$

Espresso in termini dell'operatore impulso, il commutatore delle due traslazioni si scrive:

$$\begin{aligned} 0 &= [T(\Delta x' \hat{x}), T(\Delta y' \hat{y})] = \\ &= \left[\left(1 - \frac{ip_x \Delta x'}{\hbar} - \frac{p_x^2 \Delta x'^2}{2\hbar^2} + \dots \right), \left(1 - \frac{ip_y \Delta y'}{\hbar} - \frac{p_y^2 \Delta y'^2}{2\hbar^2} + \dots \right) \right] = \\ &= -\frac{1}{\hbar^2} [p_x, p_y] \Delta x' \Delta y' + \dots \end{aligned} \quad (6.19)$$

Ma per l'arbitrarietà degli spostamenti $\Delta x'$ e $\Delta y'$ questa condizione conduce a

$$[p_x, p_y] = 0, \quad (6.20)$$

o, più in generale,

$$\boxed{\boxed{[p_i, p_j] = 0}} . \quad (6.21)$$

Questo significa che **tutte e tre le componenti dell'impulso di una particella possono avere simultaneamente valori determinati**.

Stabiliamo ora le **regole di commutazione tra gli operatori impulso e gli operatori posizione**. A tale scopo, deriviamo dapprima la regola di commutazione tra l'operatore di posizione e l'operatore di traslazione infinitesima. Applicando ad un generico autostato della posizione separatamente l'operatore $\vec{x} T(d\vec{x}')$ o l'operatore $T(d\vec{x}') \vec{x}$ otteniamo:

$$\begin{aligned}\vec{x} T(d\vec{x}') |\vec{x}'\rangle &= \vec{x} |\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle = (\vec{x}' + d\vec{x}') |\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle, \\ T(d\vec{x}') \vec{x} |\vec{x}'\rangle &= \vec{x}' T(d\vec{x}') |\vec{x}'\rangle = \vec{x}' |\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle,\end{aligned}\tag{6.22}$$

da cui, sottraendo membro a membro,

$$[\vec{x}, T(d\vec{x}')] |\vec{x}'\rangle = d\vec{x}' |\vec{x}'\rangle,\tag{6.23}$$

dove a secondo membro si è posto $d\vec{x}' |\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle \simeq d\vec{x}' |\vec{x}'\rangle$, che è valida a meno di termini di ordine superiore al primo in $d\vec{x}'$. Poiché uno stato arbitrario $|\alpha\rangle$ può essere sempre espresso come combinazione lineare di autostati della posizione, la precedente equazione vale per uno stato arbitrario e può dunque essere considerata un'identità operatoriale:

$$\boxed{[\vec{x}, T(d\vec{x}')] = d\vec{x}'}. \tag{6.24}$$

In termini dell'operatore impulso il commutatore si scrive

$$\left[\vec{x}, 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}' \right] = -\frac{i}{\hbar} (\vec{x} \vec{p} \cdot d\vec{x}' - \vec{p} \cdot d\vec{x}' \vec{x}) = d\vec{x}'. \tag{6.25}$$

Consideriamo allora la componente i -esima di questa equazione vettoriale e consideriamo uno spostamento $d\vec{x}'$ nella direzione dell'asse j . Troviamo in tal modo:

$$-\frac{i}{\hbar} (x_i p_j dx'_j - p_j x_i dx'_j) = \delta_{ij} dx'_j, \tag{6.26}$$

ossia

$$\boxed{\boxed{[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}}}. \tag{6.27}$$

Questa equazione dimostra che **la coordinata e la componente dell'impulso di una particella non possono essere determinate simultaneamente lungo uno stesso asse. In altri termini, la particella non può trovarsi in un punto determinato dello spazio e, al tempo stesso, avere un impulso determinato**. D'altra parte, le precedenti relazioni di commutazione dimostrano che la coordinata della particella lungo uno degli assi può avere un valore determinato simultaneamente con le componenti dell'impulso lungo gli altri due assi.

La relazione di indeterminazione generalizzata

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle i[A, B] \rangle^2, \tag{6.28}$$

derivata precedentemente per una coppia qualunque di operatori hermitiani A e B , può essere applicata qui al caso degli operatori x e p_x per ottenere

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}}, \quad (6.29)$$

dove si è posto $\Delta x \equiv \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}$ e $\Delta p_x \equiv \sqrt{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle}$. La precedente equazione costituisce la famosa **relazione di indeterminazione di Heisenberg**, derivata da Heisenberg nel 1927.

L'insieme delle regole di commutazione

$$\boxed{[x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}}, \quad (6.30)$$

vengono dette **relazioni di commutazione canoniche** e costituiscono uno dei fondamenti della meccanica quantistica.

È evidente la somiglianza di queste relazioni con le relazioni

$$\boxed{\{x_i, x_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{x_i, p_j\} = -\delta_{ij}}, \quad (6.31)$$

valide per le **parentesi di Poisson** nella meccanica classica². Fu **Dirac** ad osservare per primo questa circostanza. Egli postulò allora che **le relazioni di commutazione della meccanica quantistica possono essere ottenute dalle corrispondenti relazioni classiche semplicemente sostituendo alle parentesi di Poisson i commutatori nel modo seguente:**

$$\boxed{\{ \quad , \quad \}_{\text{classica}} \rightarrow \frac{i}{\hbar} [\quad , \quad]}. \quad (6.32)$$

Questa ipotesi è consistente con il fatto che quando si passa al limite classico ($\hbar \rightarrow 0$) l'operatore $i[\quad , \quad]$ in prima approssimazione diventa zero.

È evidente tuttavia che l'assunzione di Dirac non consente comunque di stabilire, sulla base del limite classico, le regole di commutazione per quelle quantità, quali lo spin, che non hanno analogo classico.

²Ricordiamo che la parentesi di Poisson è definita, per una coppia di osservabili f e g , come:

$$\{f, g\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right). \quad (6.32)$$

Si veda, a tale proposito, l'appendice A di questi Appunti.

6.2 L'operatore impulso nella rappresentazione delle coordinate. Autofunzioni dell'impulso

Consideriamo ora come si esprime l'operatore **impulso nella rappresentazione delle coordinate**.

A tale scopo esaminiamo nuovamente l'azione dell'operatore di traslazione infinitesima su un generico vettore di stato $|\alpha\rangle$. Riferendoci per semplicità al caso di una singola dimensione spaziale ed indicando per convenienza con dx' lo spostamento infinitesimo, abbiamo:

$$\begin{aligned} \langle x'|T(dx')|\alpha\rangle &= \langle x'|\left(1 - \frac{i}{\hbar}p dx'\right)|\alpha\rangle = \langle x'|\left(1 + \frac{i}{\hbar}p dx'\right)^+|\alpha\rangle = \\ &= \langle x' - dx'|\alpha\rangle \simeq \langle x'|\alpha\rangle - dx' \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle \end{aligned} \quad (6.34)$$

da cui

$$\boxed{\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle} \quad (6.35)$$

Da questa equazione, scegliendo come stato $|\alpha\rangle$ un autostato della posizione, segue anche:

$$\boxed{\langle x'|p|x''\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x'')} \quad (6.36)$$

che esprime, equivalentemente alla (6.35), gli **elementi di matrice dell'operatore impulso nella rappresentazione delle coordinate**.

Dall'eq.(6.35) possiamo derivare un'espressione esplicita per gli elementi di matrice $\langle\beta|p|\alpha\rangle$ in termini della funzione d'onda degli stati $|\beta\rangle$ ed $|\alpha\rangle$:

$$\langle\beta|p|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle\beta|x'\rangle \langle x'|p|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle\beta|x'\rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\right) \langle x'|\alpha\rangle \quad (6.37)$$

ossia

$$\boxed{\langle\beta|p|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi_{\beta}^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\right) \psi_{\alpha}(x')} \quad (6.38)$$

Frequentemente si usa indicare un operatore con la sua rappresentazione nella base delle coordinate. Nel caso dell'operatore impulso questa identificazione conduce allora a

$$\boxed{p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}} \quad (6.39)$$

o, nel caso generale di tre dimensioni spaziali

$$\boxed{\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}} . \quad (6.40)$$

Questa identificazione va intesa esattamente nel senso indicato dalle eq. (6.35), (6.36) e (6.38).

Introduciamo ora gli **autostati dell'operatore impulso**, ossia gli stati per i quali l'impulso della particella ha un valore determinato. Continuando per semplicità a considerare il caso di una dimensione, questi stati soddisfano l'equazione

$$\boxed{p |p'\rangle = p' |p'\rangle} . \quad (6.41)$$

Le funzioni d'onda corrispondenti agli autostati dell'impulso, ossia le ampiezze $\langle x'|p'\rangle$, sono anche dette **autofunzioni dell'operatore impulso**. L'espressione esplicita per queste autofunzioni può essere ottenuta considerando l'eq. (6.35) nel caso in cui $|\alpha\rangle$ sia un autostato dell'impulso:

$$\langle x'|p |p'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|p'\rangle, \quad (6.42)$$

ossia

$$\boxed{-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|p'\rangle = p' \langle x'|p'\rangle} . \quad (6.43)$$

Vediamo allora che, in generale, l'autostato di un operatore e la corrispondente autofunzione soddisfano la stessa equazione purché si intenda, nel secondo caso, identificare l'operatore con la sua espressione nella rappresentazione delle coordinate, come in eq. (6.39).

La soluzione dell'equazione differenziale (6.43) per le **autofunzioni dell'operatore impulso** è

$$\boxed{\psi_{p'}(x') \equiv \langle x'|p'\rangle = N e^{\frac{i}{\hbar} p' x'}} , \quad (6.44)$$

dove N è una costante di normalizzazione da determinare. Il significato fisico di questo risultato è evidente: **la probabilità che una particella che possiede un impulso determinato si trovi in una regione dello spazio compresa tra x e $x + dx$ è una costante indipendente da x** :

$$\boxed{P(x, x + dx) = |\psi_{p'}(x)|^2 dx = |N|^2 dx} . \quad (6.45)$$

In altri termini, **in accordo con il principio di indeterminazione, una particella con impulso determinato ha un'indeterminazione totale sulla propria posizione nello spazio.**

L'equazione (6.44) fornisce anche la corretta interpretazione della **relazione di de Broglie**: una particella di impulso p è descritta da una funzione d'onda che è un'onda piana la cui lunghezza d'onda λ è legata all'impulso p dalla relazione

$$\boxed{\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}}. \quad (6.46)$$

Per determinare la costante di **normalizzazione delle autofunzioni dell'operatore impulso** utilizziamo la normalizzazione dei corrispondenti autostati. Si ha:

$$\begin{aligned} \langle p' | p'' \rangle &= \delta(p' - p'') = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle p' | x' \rangle \langle x' | p'' \rangle = \\ &= |N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-\frac{i}{\hbar}(p' - p'')x'} = |N|^2 2\pi\hbar \delta(p' - p''), \end{aligned} \quad (6.47)$$

avendo utilizzato l'espressione integrale della funzione δ di Dirac:

$$\delta(a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-ia\xi}. \quad (6.48)$$

Dunque:

$$|N|^2 2\pi\hbar = 1 \quad (6.49)$$

e, scegliendo per convenzione N reale e positivo, si ottiene infine:

$$\boxed{\psi_{p'}(x') = \langle x' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'x'}}. \quad (6.50)$$

6.3 Funzioni d'onda nella rappresentazione degli impulsi

Consideriamo lo sviluppo di un generico vettore di stato $|\alpha\rangle$ in autostati dell'operatore impulso:

$$\boxed{|\alpha\rangle = \int dp' |p'\rangle \langle p' | \alpha \rangle}. \quad (6.51)$$

I coefficienti di questo sviluppo, ossia la funzione

$$\boxed{\phi_\alpha(p') = \langle p' | \alpha \rangle}, \quad (6.52)$$

determinano dunque completamente lo stato $|\alpha\rangle$. La funzione $\phi_\alpha(p')$ è detta **funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi**, così come la funzione

$$\psi_\alpha(x') = \langle x' | \alpha \rangle \quad (6.53)$$

è la funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate.

Come $|\psi_\alpha(x')|^2 dx'$ definisce la probabilità per il sistema di avere le coordinate nell'intervallo dato dx' , così pure $|\phi_\alpha(p')|^2 dp'$ definisce **la probabilità che i valori dell'impulso appartengano all'intervallo dato dp'** :

$$\boxed{P(p', p' + dp') = |\langle p' | \alpha \rangle|^2 dp' = |\phi_\alpha(p')|^2 dp'}. \quad (6.54)$$

Questa probabilità è normalizzata correttamente. Infatti, se lo stato $|\alpha\rangle$ è normalizzato, allora

$$\boxed{\langle \alpha | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \langle \alpha | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp' |\langle p' | \alpha \rangle|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp' |\phi_\alpha(p')|^2 = 1}. \quad (6.55)$$

È semplice derivare la trasformazione che lega la funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi alla funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate. Si ha

$$\langle p' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle p' | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{i}{\hbar} p' \cdot x'} \langle x' | \alpha \rangle, \quad (6.56)$$

o, equivalentemente:

$$\boxed{\phi_\alpha(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{i}{\hbar} p' \cdot x'} \psi_\alpha(x')}. \quad (6.57)$$

In modo analogo si deriva la trasformazione inversa:

$$\boxed{\psi_\alpha(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp' e^{\frac{i}{\hbar} p' \cdot x'} \phi_\alpha(p')}. \quad (6.58)$$

Queste equazioni corrispondono matematicamente alle trasformate ed antitrasformate di Fourier.

6.4 Pacchetti d'onda gaussiani

Una particella che si propaga con impulso p' definito è descritta, nella meccanica quantistica, da una funzione d'onda:

$$\psi_{p'}(x') = \langle x' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p' \cdot x'} \quad (6.59)$$

che ha la forma di un'onda piana. La probabilità di osservare la particella in una determinata posizione è la stessa per qualunque punto dello spazio.

In una situazione fisica reale, tuttavia, una particella risulta sempre essere più o meno localizzata nello spazio. Questo comporta che anche il suo impulso non sia perfettamente determinato, o, equivalentemente, che lo stato della particella sia una sovrapposizione di stati con impulso definito. Le funzioni d'onda che descrivono tali stati vengono anche dette **pacchetti d'onda**.

Un esempio particolarmente importante di questo tipo è il **pacchetto d'onda gaussiano**, la cui funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate è data da:

$$\psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha \rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x' - \frac{x'^2}{4\sigma^2}} . \quad (6.60)$$

Per una particella che si trovi in questo stato, la distribuzione di probabilità per la coordinata x è una gaussiana con valore aspettato nullo e varianza σ^2 :

$$|\psi_\alpha(x')|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x'^2}{2\sigma^2}} . \quad (6.61)$$

Possiamo calcolare esplicitamente i **valori di aspettazione di x e x^2** :

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \langle \alpha|x|\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \alpha|x|x' \rangle \langle x'|\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x' \langle \alpha|x' \rangle \langle x'|\alpha \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x' |\psi_\alpha(x')|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x' e^{-\frac{x'^2}{2\sigma^2}} = 0 \end{aligned} \quad (6.62)$$

e

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x'^2 |\psi_\alpha(x')|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x'^2 e^{-\frac{x'^2}{2\sigma^2}} = \\ &= \frac{2\sigma^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} ds s^2 e^{-s^2} = \frac{2\sigma^2}{\sqrt{\pi}} \left(-\frac{d}{d\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{-\lambda s^2} \right)_{\lambda=1} = \\ &= \frac{2\sigma^2}{\sqrt{\pi}} \left(-\frac{d}{d\lambda} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \right)_{\lambda=1} = \sigma^2, \end{aligned} \quad (6.63)$$

ossia

$$\langle x \rangle = 0 \quad , \quad \langle x^2 \rangle = \sigma^2 . \quad (6.64)$$

Utilizzando l'espressione dell'operatore impulso nella rappresentazione delle coordinate possiamo poi calcolare i **valori di aspettazione di p e p^2** . Si ha, in

generale:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \langle \alpha | p | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle \langle x' | p | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \langle x' | \alpha \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi_{\alpha}^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \psi_{\alpha}(x') , \end{aligned} \quad (6.65)$$

da cui, sostituendo l'espressione (6.60) della funzione d'onda, troviamo

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{i}{\hbar}p_0x' - \frac{x'^2}{4\sigma^2}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) e^{\frac{i}{\hbar}p_0x' - \frac{x'^2}{4\sigma^2}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{x'^2}{2\sigma^2}} \left(p_0 + \frac{i\hbar}{2\sigma^2} x' \right) = p_0 \end{aligned} \quad (6.66)$$

In modo analogo si calcola il valore medio di p^2 . Abbiamo:

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \langle \alpha | p^2 | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle \langle x' | p (p | \alpha) \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \langle x' | p | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right)^2 \langle x' | \alpha \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi_{\alpha}^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right)^2 \psi_{\alpha}(x') , \end{aligned} \quad (6.67)$$

da cui si vede che, nella rappresentazione delle coordinate, vale la rappresentazione

$$p^2 = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right)^2 . \quad (6.68)$$

Sostituendo nell'eq. (6.67) l'espressione (6.60) del pacchetto d'onda gaussiano troviamo

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{i}{\hbar}p_0x' - \frac{x'^2}{4\sigma^2}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right)^2 e^{\frac{i}{\hbar}p_0x' - \frac{x'^2}{4\sigma^2}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{i}{\hbar}p_0x' - \frac{x'^2}{4\sigma^2}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \left(p_0 + \frac{i\hbar}{2\sigma^2} x' \right) e^{\frac{i}{\hbar}p_0x' - \frac{x'^2}{4\sigma^2}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{x'^2}{2\sigma^2}} \left(\frac{\hbar^2}{2\sigma^2} + p_0^2 - \frac{\hbar^2}{4\sigma^4} x'^2 + \frac{i\hbar p_0}{\sigma^2} x' \right) = \\ &= \frac{\hbar^2}{2\sigma^2} + p_0^2 - \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} . \end{aligned} \quad (6.69)$$

Dunque, delle eq. (6.66) e (6.69),

$$\boxed{\langle p \rangle = p_0 \quad , \quad \langle p^2 \rangle = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}} . \quad (6.70)$$

Per una particella descritta da un pacchetto d'onda gaussiano, i valori delle dispersioni della posizione e dell'impulso risultano allora:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle (\Delta x)^2 \rangle &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \sigma^2 \\ \langle (\Delta p)^2 \rangle &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} \end{aligned}} \quad (6.71)$$

Possiamo quindi verificare la **relazione d'indeterminazione di Heisenberg**. Dalle eq. (6.71), il prodotto delle indeterminazioni $\Delta x = \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}$ e $\Delta p = \sqrt{\langle (\Delta p)^2 \rangle}$ risulta dato da

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}} \quad (6.72)$$

e non dipende da σ . Così **per un pacchetto d'onda gaussiano** abbiamo una relazione di uguaglianza, anziché la più generale relazione di disuguaglianza, ed il **prodotto $\Delta x \cdot \Delta p$ assume il valore minimo possibile**.

La **funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi** per un pacchetto d'onda gaussiano è

$$\begin{aligned} \phi_\alpha(p') &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{i}{\hbar}p'x'} \psi_\alpha(x') = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{i}{\hbar}(p'-p_0)x' - \frac{x'^2}{4\sigma^2}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\left(\frac{x'}{2\sigma} + \frac{i}{\hbar}(p'-p_0)\sigma\right)^2 - \frac{(p'-p_0)^2}{\hbar^2}\sigma^2} = \\ &= \left(\frac{16\sigma^4}{4\pi^2\hbar^2 \cdot 2\pi\sigma^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{(p'-p_0)^2}{\hbar^2/\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{-s^2}, \end{aligned} \quad (6.73)$$

ossia

$$\boxed{\phi_\alpha(p') = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{(p'-p_0)^2}{\hbar^2/\sigma^2}}} \quad (6.74)$$

Per un pacchetto d'onda gaussiano, dunque, **la funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi è pure una gaussiana**. Per la densità di probabilità $|\phi_\alpha(p')|^2$, il valore di aspettazione e la varianza sono p_0 e $\hbar^2/4\sigma^2$ rispettivamente.

L'espressione ottenuta per la funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi offre una via alternativa per calcolare i valori di aspettazione di p e p^2 :

$$\boxed{\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp' p' |\phi_\alpha(p')|^2 = p_0 \\ \langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp' p'^2 |\phi_\alpha(p')|^2 = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} \end{aligned}} \quad . \quad (6.75)$$

6.5 Operatore posizione nella rappresentazione degli impulsi

Per derivare l'espressione dell'operatore posizione nella rappresentazione degli impulsi calcoliamo gli elementi di matrice $\langle p' | x | \alpha \rangle$. Si ha

$$\begin{aligned} \langle p' | x | \alpha \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle p' | x | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x' \langle p' | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x' e^{-\frac{i}{\hbar} p' x'} \langle x' | \alpha \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{i}{\hbar} p' x'} \langle x' | \alpha \rangle = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle p' | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (6.76)$$

ossia, utilizzando nuovamente la relazione di completezza,

$$\boxed{\langle p' | x | \alpha \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p' | \alpha \rangle} \quad . \quad (6.77)$$

Da questa equazione, scegliendo in particolare come stato $|\alpha\rangle$ un autostato dell'impulso, segue anche

$$\boxed{\langle p' | x | p'' \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p' - p'')} \quad . \quad (6.78)$$

Utilizzando ancora l'eq. (6.77), possiamo esprimere, utilizzando la rappresentazione degli impulsi, l'elemento di matrice dell'operatore posizione tra due stati $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ arbitrari:

$$\langle \alpha | x | \beta \rangle = \int dp' \langle \alpha | p' \rangle \langle p' | x | \beta \rangle = \int dp' \langle \alpha | p' \rangle \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \right) \langle p' | \beta \rangle, \quad (6.79)$$

ossia

$$\boxed{\langle \alpha | x | \beta \rangle = \int dp' \phi_\alpha^*(p') \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \right) \phi_\beta(p')} \quad . \quad (6.80)$$

Vediamo allora, dalle eq. (6.77), (6.78) e (6.80), che per l'**operatore posizione nella rappresentazione degli impulsi** vale la relazione

$$\boxed{x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}}, \quad (6.81)$$

in totale simmetria con l'espressione dell'operatore impulso nella rappresentazione delle coordinate,

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (6.82)$$

Capitolo 7 | Evoluzione temporale ed equazione di Schrödinger

7.1 Evoluzione temporale degli stati. Operatore Hamiltoniano ed equazione di Schrödinger

Nella meccanica quantistica il vettore di stato (o equivalentemente la funzione d'onda) determina in modo completo lo stato di un sistema fisico. Ciò significa che questo vettore, dato in un certo istante, ne definisce anche il comportamento in tutti gli istanti successivi. Il problema che ci proponiamo qui di affrontare è lo studio dell'**evoluzione temporale dei vettori di stato**.

Consideriamo un sistema fisico descritto, ad un certo istante di tempo t_0 , dal vettore di stato $|\alpha, t_0\rangle$. In generale lo stato del sistema evolverà nel tempo e sarà descritto, a ciascun istante di tempo successivo, $t > t_0$, dal vettore $|\alpha, t\rangle$.

Poiché il vettore di stato $|\alpha, t\rangle$ deve essere determinato univocamente dal vettore di stato al tempo iniziale $|\alpha, t_0\rangle$, possiamo definire una relazione tra i due vettori nella forma:

$$\boxed{|\alpha, t\rangle = U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle}, \quad (7.1)$$

dove $U(t, t_0)$ è un operatore chiamato **operatore di evoluzione temporale**.

Per la **conservazione della probabilità**, il vettore di stato deve rimanere normalizzato a tutti gli istanti di tempo:

$$\langle \alpha, t | \alpha, t \rangle = \langle \alpha, t_0 | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \alpha, t_0 \rangle = \langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle. \quad (7.2)$$

Questo comporta pertanto che l'**operatore di evoluzione temporale** debba essere **unitario**:

$$\boxed{U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) = 1}. \quad (7.3)$$

Evidentemente, nel limite di traslazione temporale nulla l'operatore di traslazione

temporale deve ridursi all'operatore identità:

$$\boxed{\lim_{t \rightarrow t_0} U(t, t_0) = 1} \quad . \quad (7.4)$$

Inoltre, l'evoluzione temporale da t_0 a t_1 seguita dall'evoluzione temporale da t_1 a t_2 deve essere equivalente all'evoluzione dal tempo t_0 al tempo t_2 direttamente:

$$\boxed{U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0)} \quad . \quad (7.5)$$

Le proprietà (7.3), (7.4) e (7.5) consentono di dedurre una semplice espressione per **l'operatore di evoluzione temporale infinitesimo**:

$$\boxed{U(t + dt, t) = 1 - i \Omega dt} \quad , \quad (7.6)$$

dove, in virtù della condizione di unitarietà di U , l'operatore Ω , detto il **generatore delle traslazioni temporali**, è un operatore hermitiano:

$$\boxed{\Omega^\dagger = \Omega} \quad . \quad (7.7)$$

In analogia con quanto già discusso nel caso di traslazioni spaziali e impulso, osserviamo che il generatore Ω è la quantità che si conserva quando il sistema è invariante per traslazioni temporali. Poiché la quantità conservata in tale circostanza è l'energia totale del sistema, siamo indotti a formulare l'ipotesi che l'operatore hermitiano Ω concida, a meno di un fattore di proporzionalità, con l'**operatore Hamiltoniano** del sistema. L'inverso della costante di proporzionalità ha le dimensioni di un'azione e risulta essere uguale alla costante di Planck, \hbar . Dunque:

$$\boxed{\Omega = \frac{H}{\hbar}} \quad , \quad (7.8)$$

e con questa identificazione¹:

$$\boxed{U(t + dt, t) = 1 - \frac{i}{\hbar} H dt} \quad . \quad (7.10)$$

¹Nella meccanica classica, una traslazione temporale infinitesima, definita da $\vec{X} = \vec{x} + \dot{\vec{x}} dt$ e $\vec{P} = \vec{p} + \dot{\vec{p}} dt$, è una trasformazione canonica, ottenibile dalla funzione generatrice:

$$\Phi(\vec{x}, \vec{P}) = \vec{x} \cdot \vec{P} + H dt \quad . \quad (7.9)$$

Ricordando che $\vec{x} \cdot \vec{P}$ è la funzione generatrice della trasformazione identità, riconosciamo che l'eq. (7.9) ha una stretta somiglianza formale con l'operatore di traslazione temporale infinitesimo definito dall'eq. (7.10). In virtù dell'eq. (7.9), anche in meccanica classica l'energia è detta *generatore* delle traslazioni temporali infinitesime e si conserva per sistemi invarianti rispetto a tale trasformazione.

L'espressione derivata per l'operatore di evoluzione temporale infinitesima può essere convenientemente posta nella forma di un'equazione differenziale per l'operatore di evoluzione temporale finita, o, equivalentemente, per il vettore di stato del sistema. A tale scopo osserviamo che:

$$\begin{aligned} U(t+dt, t_0) - U(t, t_0) &= U(t+dt, t)U(t, t_0) - U(t, t_0) = \\ &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} H dt\right) U(t, t_0) - U(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} H U(t, t_0) dt. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Dividendo entrambi i membri di questa equazione per dt e considerando il limite $dt \rightarrow 0$ si ottiene quindi:

$$\boxed{\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0)}}. \quad (7.12)$$

Questa equazione, con la condizione iniziale $U(t_0, t_0) = 1$, definisce completamente l'operatore di evoluzione temporale in termini dell'operatore Hamiltoniano del sistema.

Ad un'analogia equazione per i vettori di stato si giunge applicando entrambi i membri della (7.12) al ket $|\alpha, t_0\rangle$:

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) \right) |\alpha, t_0\rangle = H U(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle. \quad (7.13)$$

Poiché $|\alpha, t_0\rangle$ non dipende dal tempo t , possiamo esprimere questa relazione in termini del vettore di stato al tempo t , $|\alpha, t\rangle = U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$. Si ottiene così:

$$\boxed{\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle = H |\alpha, t\rangle}}. \quad (7.14)$$

Questa equazione fondamentale della meccanica quantistica è detta **equazione di Schrödinger**. Se si conosce la forma dell'operatore Hamiltoniano e il vettore di stato che descrive il sistema fisico dato al tempo iniziale, allora l'equazione di Schrödinger consente di determinare i vettori di stato del sistema a qualunque istante di tempo successivo.

7.2 Stati stazionari

L'Hamiltoniano di un sistema isolato, o di un sistema che si trova in un campo esterno costante, ossia non variabile nel tempo, non può contenere il tempo esplicitamente. Ciò risulta dal fatto che tutti gli istanti di tempo sono equivalenti per tale sistema fisico.

Per tali sistemi, la soluzione dell'equazione di Schrödinger assume una forma particolarmente semplice. L'operatore di evoluzione temporale è infatti:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0)}, \quad (7.15)$$

ed i vettori di stato si scrivono nella forma:

$$|\alpha, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0)} |\alpha, t_0\rangle. \quad (7.16)$$

Queste conclusioni possono essere verificate per sostituzione diretta nell'equazione di Schrödinger (7.12) e (7.14).

Se l'Hamiltoniano di un sistema fisico non dipende esplicitamente dal tempo, risulta possibile considerare, per tale sistema, **gli stati in cui l'energia assume un valore determinato**. Questi stati sono detti **stati stazionari** e corrispondono agli autostati dell'operatore Hamiltoniano, soddisfano cioè l'equazione agli autovalori:

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (7.17)$$

Consideriamo l'equazione di Schrödinger per uno stato stazionario:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n, t\rangle = H |n, t\rangle = E_n |n, t\rangle. \quad (7.18)$$

Questa equazione può essere **integrata direttamente rispetto al tempo**, e dà

$$|n, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n, 0\rangle, \quad (7.19)$$

dove si è considerato, per semplicità $t_0 = 0$. Allo stesso risultato si giunge ovviamente applicando l'operatore di evoluzione temporale allo stato $|n, 0\rangle$:

$$|n, t\rangle = U(t, 0) |n, 0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |n, 0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n, 0\rangle. \quad (7.20)$$

L'eq. (7.19) determina la dipendenza dal tempo degli autostati dell'operatore Hamiltoniano. Il vettore di stato varia nel tempo solo per un fattore di fase moltiplicativo, che è la ragione per cui tali stati vengono detti **stati stazionari**. Ne segue dunque che **se il sistema si trova in un determinato istante in un autostato dell'Hamiltoniano, esso resta in tale autostato per tutti gli istanti seguenti**. Equivalentemente, possiamo affermare che **se, nello stato dato, l'energia ha un valore determinato, questo valore resterà costante nel**

tempo. Questo risultato esprime in meccanica quantistica la **legge di conservazione dell'energia per i sistemi isolati, o sistemi che si trovano in campi esterni non dipendenti dal tempo.**

Calcoliamo il valore di aspettazione di una generica osservabile A in uno stato stazionario, come funzione del tempo. Utilizzando l'eq.(7.19) troviamo:

$$\langle A \rangle_t = \langle n, t | A | n, t \rangle = \langle n, 0 | e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} A e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} | n, 0 \rangle = \langle n, 0 | A | n, 0 \rangle = \langle A \rangle_0. \quad (7.21)$$

Pertanto **il valore di aspettazione di una qualunque osservabile in un autostato dell'energia non cambia nel tempo.** Si tratta, appunto, di stati stazionari.

Un generico vettore di stato $|\alpha\rangle$ può essere sviluppato in autostati dell'energia. All'istante iniziale $t = 0$ tale sviluppo ha la forma:

$$|\alpha, t = 0\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \alpha, t = 0 \rangle = \sum_n c_n(0) |n\rangle. \quad (7.22)$$

Questo sviluppo consente di derivare una semplice espressione per lo stato evoluto ad un tempo t successivo. A tale scopo è sufficiente applicare allo stato l'operatore di **evoluzione temporale**:

$$|\alpha, t\rangle = U(t, 0) |\alpha, t = 0\rangle = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |n\rangle = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle. \quad (7.23)$$

In altre parole il generico coefficiente dello sviluppo varia nel tempo come:

$$c_n(t = 0) \rightarrow c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n(0). \quad (7.24)$$

I moduli quadri $|c_n(t)|^2$ dei coefficienti dello sviluppo rappresentano, come al solito, le probabilità dei diversi valori dell'energia del sistema. La precedente equazione mostra come tali probabilità restino **costanti nel tempo.** Questo risultato può essere visto ancora come un'espressione della **legge di conservazione dell'energia.** Se l'energia al tempo iniziale non ha un valore determinato, allora le probabilità dei diversi risultati di una misura dell'energia, e dunque anche il valore medio dell'energia, restano costanti nel tempo.

Il formalismo sin qui sviluppato si estende facilmente al caso in cui gli autovalori dell'energia formino uno **spettro continuo.**

7.3 Equazione d'onda di Schrödinger

Esaminiamo l'**evoluzione temporale dei vettori di stato nella rappresentazione delle coordinate.** In altre parole studiamo il comportamento della funzione

d'onda

$$\psi(\vec{x}', t) = \langle \vec{x}' | \alpha, t \rangle \quad (7.25)$$

come funzione del tempo.

La forma specifica dell'equazione di Schrödinger di un sistema fisico è determinata dal suo Hamiltoniano, che acquista perciò un'importanza fondamentale in tutto l'apparato della meccanica quantistica.

In perfetta corrispondenza con l'espressione classica, in meccanica quantistica l'**Hamiltoniano di una particella sottoposta ad un campo esterno** è

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad , \quad (7.26)$$

dove $V(\vec{x})$ è l'energia potenziale della particella nel campo esterno.

L'equazione che determina l'evoluzione temporale della funzione d'onda si ottiene moltiplicando a sinistra per il bra $\langle \vec{x}' |$ l'equazione di Schrödinger (7.14) per i vettori di stato:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{x}' | \alpha, t \rangle = \langle \vec{x}' | H | \alpha, t \rangle. \quad (7.27)$$

Ricordando l'espressione dell'operatore impulso nella rappresentazione delle coordinate, possiamo scrivere il contributo dell'energia cinetica al secondo membro della precedente equazione nella forma

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}' | \frac{\vec{p}^2}{2m} | \alpha, t \rangle &= \frac{1}{2m} \langle \vec{x}' | \vec{p} \cdot \vec{p} | \alpha, t \rangle = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla') \cdot \langle \vec{x}' | \vec{p} | \alpha, t \rangle = \\ &= \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla')^2 \langle \vec{x}' | \alpha, t \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \psi(\vec{x}', t) \end{aligned} \quad (7.28)$$

dove ∇'^2 è l'operatore Laplaciano

$$\nabla'^2 = \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2}. \quad (7.29)$$

Quanto al contributo dell'energia potenziale si ha semplicemente:

$$\langle \vec{x}' | V(\vec{x}) | \alpha, t \rangle = V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \alpha, t \rangle = V(\vec{x}') \psi(\vec{x}', t), \quad (7.30)$$

dove $V(\vec{x}')$ non è più un operatore ma una funzione ordinaria.

Raccogliendo i vari termini otteniamo l'**equazione d'onda per una particella sottoposta ad un campo esterno**:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 + V(\vec{x}') \right) \psi \quad , \quad (7.31)$$

con $\psi = \psi(\vec{x}', t)$. Questa è l'equazione nella forma derivata da **Schrödinger** nel **1926**.

Nella rappresentazione delle coordinate, l'equazione agli autovalori che determina gli stati stazionari si scrive

$$\langle \vec{x}' | H | n \rangle = E_n \langle \vec{x}' | n \rangle . \quad (7.32)$$

Indicando con

$$\boxed{\psi_n(\vec{x}') = \langle \vec{x}' | n \rangle} \quad (7.33)$$

le **autofunzioni dell'operatore Hamiltoniano** corrispondenti agli autovalori E_n , ed assumendo per H l'espressione (7.26) otteniamo:

$$\boxed{H\psi_n = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 + V(\vec{x}') \right) \psi_n = E_n \psi_n} . \quad (7.34)$$

Questa equazione, detta **equazione d'onda di Schrödinger indipendente dal tempo**, consente di determinare con la sua risoluzione sia gli autovalori che le autofunzioni dell'energia.

Concludiamo questa sezione con un'importante osservazione sugli autovalori dell'energia. **Lo spettro degli autovalori dell'energia**, determinato dall'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo **può essere sia discreto che continuo**. **Lo stato stazionario dello spettro discreto corrisponde sempre ad un moto finito della particella**, cioè ad un moto in cui la particella non si allontana all'infinito. La condizione di normalizzazione per gli autostati dello spettro discreto implica infatti:

$$\langle n | n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{x}' \langle n | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{x}' |\psi_n(\vec{x}')|^2 = 1. \quad (7.35)$$

Ciò significa in ogni caso che $|\psi_n|^2$ decresce in modo sufficientemente rapido e si annulla all'infinito. In altri termini **le probabilità dei valori infiniti delle coordinate è nulla, cioè il sistema compie un moto finito o, come si dice ancora, si trova in uno stato legato**.

La condizione di normalizzazione

$$\langle n | n' \rangle = \delta(E_n - E_{n'}) \quad (7.36)$$

per gli autostati dello spettro continuo, implica invece che l'integrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{x}' |\psi_n(\vec{x}')|^2 \quad (7.37)$$

diverge per le autofunzioni dello spettro continuo. Il modulo quadro della funzione d'onda, $|\psi_n|^2$, non dà in questo caso direttamente la probabilità dei diversi valori delle

coordinate e deve essere considerato solamente come una grandezza proporzionale a questa probabilità. **La divergenza dell'integrale $\int d\vec{x}' |\psi_n|^2$ è sempre dovuta al fatto che $|\psi_n|^2$ non si annulla all'infinito (o comunque non si annulla con sufficiente rapidità).** Si può affermare quindi che l'integrale $\int d\vec{x}' |\psi_n|^2$ calcolato all'esterno di una superficie chiusa arbitrariamente grande ma finita, continua ancora ad essere divergente. Ciò significa che, **nello stato considerato, la particella si trova all'infinito.**

7.4 Particella libera

Per una **particella libera** l'energia potenziale è nulla e l'operatore Hamiltoniano è rappresentato dalla sola energia cinetica della particella,

$$\boxed{H = \frac{\vec{p}^2}{2m}}. \quad (7.38)$$

L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per la particella libera è dunque:

$$\boxed{H \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E \psi}. \quad (7.39)$$

Poiché l'operatore Hamiltoniano (7.38) e l'operatore impulso commutano tra loro

$$[H, \vec{p}] = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m}, \vec{p} \right] = \vec{0}, \quad (7.40)$$

ed ammettono pertanto una base di autostati in comune, possiamo scegliere come soluzioni dell'equazione di Schrödinger (7.39) le **autofunzioni dell'operatore impulso**, con $E = \vec{p}^2/2m$:

$$\psi(\vec{x}') = N e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}'}, \quad (7.41)$$

come si può stabilire per sostituzione diretta nell'equazione.

Le funzioni d'onda totali (dipendenti dal tempo) degli stati stazionari della particella libera hanno dunque la forma:

$$\boxed{\psi(\vec{x}', t) = N e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - \vec{p} \cdot \vec{x}')}} \quad , \quad \boxed{E = \frac{\vec{p}^2}{2m}}. \quad (7.42)$$

Ogni funzione di questo tipo, descrivente un'onda piana, descrive uno stato in

cui la particella ha energia E e quantità di moto \vec{p} determinate. La frequenza di quest'onda ed il suo vettore d'onda sono

$$\boxed{\omega = \frac{E}{\hbar}} \quad \text{e} \quad \boxed{\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}} \quad (7.43)$$

rispettivamente.

Lo spettro energetico di una particella libera è **quindi continuo e si estende da 0 a $+\infty$** . Ciascuno di questi autovalori (ad eccezione del valore $E = 0$) è degenero, con ordine di degenerazione infinito. Infatti a ciascun valore di E non nullo corrisponde un'infinità di autofunzioni (7.42) che si distinguono per la direzione del vettore \vec{p} di modulo fissato.

7.5 Densità di corrente ed equazione di continuità

L'integrale del modulo quadro della funzione d'onda esteso ad un volume finito è la probabilità di trovare la particella in questo volume. Pertanto la quantità

$$\boxed{\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2} \quad (7.44)$$

rappresenta in meccanica quantistica una **densità di probabilità** .

Calcoliamo la derivata di questa grandezza rispetto al tempo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (7.45)$$

Sostituiamo in queste espressione l'equazione di Schrödinger e la sua complessa coniugata:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \quad , \quad -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^*. \quad (7.46)$$

Si ottiene allora

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \left(-\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \psi^* + \frac{i}{\hbar} V\psi^* \right) \psi + \psi^* \left(\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{i}{\hbar} V\psi \right) = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*). \end{aligned} \quad (7.47)$$

Ponendo

$$\boxed{\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi)} \quad , \quad (7.48)$$

troviamo che il vettore \vec{j} e la densità di probabilità ρ soddisfano l'equazione

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0}, \quad (7.49)$$

analoga all'**equazione classica di continuità**.

Integrando l'equazione di continuità su un volume finito V ed applicando il teorema di Gauss troviamo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = - \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} dV = - \int_S \vec{j} \cdot \vec{n} dS. \quad (7.50)$$

Da qui si vede che, poiché $\int_V \rho dV$ rappresenta la probabilità di trovare la particella nel volume V , il vettore \vec{j} ha il significato di una **densità di corrente di probabilità** ed è indicato di solito semplicemente con il nome di **densità di corrente**.

L'interpretazione fisica dell'equazione di continuità può risultare più chiara se si considera che $\rho = \psi^* \psi$ può essere trattato alla stessa maniera di una **densità media di particelle**. Il vettore \vec{j} acquista allora il significato di un flusso medio di particelle che attraversano una superficie unitaria nell'unità di tempo. Si può allora considerare l'equazione di continuità come espressione della **legge di conservazione del numero di particelle**.

Consideriamo come esempio la funzione d'onda della **particella libera**, normalizzata come:

$$\boxed{\psi = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{x}')}}, \quad (7.51)$$

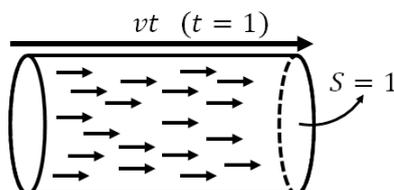
La corrispondente **densità di corrente** risulta

$$\boxed{\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi) = \frac{\vec{p}}{m}}, \quad (7.52)$$

e rappresenta la **velocità della particella**. Questa scelta della normalizzazione corrisponde ad aver fissato ad uno il numero di particelle per unità di volume:

$$\int_{V=1} \rho dV = \int_{V=1} |\psi|^2 dV = 1. \quad (7.53)$$

È immediato verificare che, con la normalizzazione di una particella per unità di volume, la densità di corrente, ossia il numero di particelle che attraversano per unità di tempo l'unità di superficie, è proprio $\vec{j} = \vec{p}/m = \vec{v}$, in accordo con l'eq. (7.52). Si veda in proposito la seguente figura:



Un'altra possibile scelta per la normalizzazione dell'onda piana è

$$\boxed{\psi = \sqrt{\frac{m}{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})}} \quad , \quad (7.54)$$

che descrive la corrente di particelle con flusso unitario, ossia una particella attraversa in media l'unità di superficie nell'unità di tempo. In questo caso la densità di corrente è infatti

$$\boxed{\vec{j} = \frac{\vec{p}}{p}} \quad , \quad (7.55)$$

ossia il vettore unitario nella direzione del moto.

Capitolo 8 | Problemi unidimensionali

8.1 Proprietà generali dell'equazione di Schrödinger

Discutiamo qui alcune proprietà generali delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger.

- **La funzione d'onda deve essere continua e monodroma**, ossia ad un solo valore, **in tutto lo spazio**.

La condizione di continuità è dettata dall'equazione di Schrödinger, per la quale devono essere definite le derivate prime e, in generale, le derivate seconde della funzione d'onda. La condizione di monodromia è richiesta invece dall'interpretazione fisica della funzione d'onda, il cui modulo quadro rappresenta la densità di probabilità spaziale.¹

- **Le derivate prime della funzione d'onda sono continue ovunque, anche su superfici di discontinuità del potenziale, eccetto il caso in cui V diventa infinito al di fuori di tali superfici.**

Dimostrazione: utilizzando l'equazione di Schrödinger, e notazione per semplicità unidimensionale, possiamo calcolare l'eventuale discontinuità della derivata prima in un generico punto x_0 . Si ha:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x_0+\varepsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x_0-\varepsilon} \right] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx \frac{d}{dx} \left(\frac{d\psi}{dx} \right) = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{2m}{\hbar^2} \right) \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx (E - V(x)) \psi(x). \end{aligned} \quad (8.1)$$

È evidente che, se il potenziale $V(x)$ non diverge nel punto x_0 , l'integrale al membro destro della precedente equazione non può che tendere a zero nel limite in cui la larghezza dell'intervallo di integrazione tende a zero. La derivata della funzione d'onda risulta allora continua nel punto x_0 (c.v.d.).

¹La condizione di monodromia implica, in particolare, che quando la funzione d'onda è espressa in coordinate polari sferiche deve risultare periodica di periodo 2π nell'angolo polare φ , ossia $\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi + 2\pi)$.

- Una particella non può penetrare in una regione dello spazio dove $V = \infty$, cioè dappertutto in questa regione la funzione d'onda è nulla. Questa condizione è dettata dall'equazione di Schrödinger, nella quale il termine $V(x)\psi(x)$ deve restare definito. La continuità delle funzione d'onda esige allora che essa si annulli sul contorno di questa regione. Quanto alle derivate della funzione d'onda esse subiscono invece, in generale, un salto.
- Se il potenziale V è ovunque finito, anche la funzione d'onda deve essere finita in tutto lo spazio (questa condizione deve essere ugualmente soddisfatta nei casi in cui V diventa infinito in un punto ma non troppo rapidamente: come $1/r^s$ con $s < 2$).
- Tutti gli autovalori dell'energia sono maggiori del minimo valore assoluto del potenziale V , cioè:

$$\boxed{E_n > V_{min}} \quad , \quad \text{per ogni } n. \quad (8.2)$$

Dimostrazione: un generico autovalore dell'energia può essere espresso nel modo seguente:

$$E_n = \langle n | H | n \rangle = \langle n | \frac{p^2}{2m} | n \rangle + \langle n | V(x) | n \rangle. \quad (8.3)$$

I due valori medi soddisfano poi:

$$\bullet \langle n | \frac{p^2}{2m} | n \rangle = \frac{1}{2m} \langle n | p p | n \rangle \equiv \frac{1}{2m} \langle \phi_n | \phi_n \rangle \geq 0, \quad (8.4)$$

$$\begin{aligned} \bullet \langle n | V(x) | n \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle n | V(x) | x' \rangle \langle x' | n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' V(x') |\psi_n(x')|^2 \geq \\ &\geq V_{min} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\psi_n(x')|^2 = V_{min}. \end{aligned} \quad (8.5)$$

Dalle eq. (8.3), (8.4) e (8.5) segue allora $E_n \geq V_{min}$ (c.v.d.).

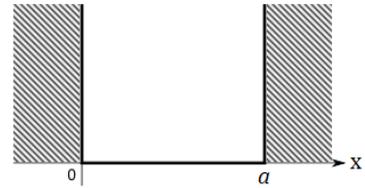
- Allo stesso tempo, una particella in meccanica quantistica può venire anche a trovarsi nelle regioni dello spazio in cui $E < V$. Anche se la probabilità $|\psi|^2$ di presenza della particella tende rapidamente a zero all'interno di tale regione, essa è però differente da zero a tutte le distanze finite.

8.2 Buca di potenziale infinita (particella su un segmento)

Consideriamo una particella nel campo di potenziale:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & , \quad x < 0 \\ 0 & , \quad 0 < x < a \\ \infty & , \quad x > a \end{cases}$$

(buca di potenziale infinita)



Il moto della particella può avvenire soltanto nel segmento $0 \leq x \leq a$, giacché non è possibile che questa penetri in una regione in cui $V = \infty$. Allora:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x < 0 \\ 0 & , \quad x > a \end{cases} . \quad (8.6)$$

All'interno della buca, dove $V(x) = 0$, l'equazione di Schrödinger ha la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi , \quad (8.7)$$

che deve essere risolta con le condizioni al contorno:

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 , \quad (8.8)$$

richieste dalla continuità della funzione d'onda in $x = 0$ e $x = a$.

È facile verificare che l'equazione non ha soluzioni corrispondenti ad $E < 0$, in accordo con la proprietà generale secondo cui gli autovalori dell'energia sono sempre maggiori del minimo del potenziale, in questo caso $V_{min} = 0$. Infatti, per $E < 0$ si può porre:

$$\lambda^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} , \quad (8.9)$$

e l'equazione di Schrödinger (8.7) diventa:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \lambda^2 \psi . \quad (8.10)$$

Le soluzioni di questa equazione sono della forma:

$$\psi(x) = A e^{\lambda x} + B e^{-\lambda x} . \quad (8.11)$$

La condizione in $\psi(0) = 0$ implica:

$$\psi(0) = A + B = 0 \quad \Rightarrow \quad B = -A , \quad (8.12)$$

ossia

$$\psi(x) = 2A \sinh(\lambda x) , \quad (8.13)$$

ma allora la condizione $\psi(a) = 0$ non risulta mai soddisfatta. Come previsto, dunque, per $E < 0$ l'equazione di Schrödinger non ammette soluzioni.

Consideriamo allora $E > 0$. Ponendo

$$\boxed{k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}} \quad , \quad (8.14)$$

otteniamo per l'equazione di Schrödinger (8.7) l'espressione:

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 \psi} \quad . \quad (8.15)$$

La soluzione generale di questa equazione è

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} . \quad (8.16)$$

La condizione $\psi(0) = 0$ richiede:

$$\psi(0) = A + B = 0 \quad \Rightarrow \quad B = -A , \quad (8.17)$$

ossia

$$\psi(x) = 2iA \operatorname{sen}(kx) . \quad (8.18)$$

La condizione in $\psi(a) = 0$ implica allora:

$$\boxed{k_n a = n \pi} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.19)$$

Questa è la condizione che determina gli **autovalori discreti dell'energia**:

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.20)$$

Le corrispondenti autofunzioni sono:

$$\psi_n(x) = 2iA_n \operatorname{sen}(k_n x) \quad \Rightarrow \quad \boxed{\psi_n(x) = A_n \operatorname{sen}(k_n x)} \quad , \quad (8.21)$$

dove abbiamo ridefinito la costante A_n ancora indeterminata. Tale costante è determinata dalla **condizione di normalizzazione**:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = 1} \quad . \quad (8.22)$$

Si trova:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_n(x)|^2 &= \int_0^a dx |A_n|^2 \text{sen}^2(k_n x) = |A_n|^2 \int_0^a dx \frac{1}{2} (1 - \cos(2k_n x))^2 = \\ &= \frac{|A_n|^2}{2} \left[a - \int_0^a dx \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right] = \frac{|A_n|^2}{2} \left[a - \frac{a}{2n\pi} \int_0^{2n\pi} d\alpha \cos \alpha \right] = \\ &= \frac{|A_n|^2 a^2}{2} = 1. \end{aligned} \quad (8.23)$$

Scegliendo la fase arbitraria della funzione d'onda in modo tale che A_n risulti reale e positivo otteniamo:

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}, \quad (8.24)$$

ossia, in definitiva:

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}(k_n x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}, \quad 0 \leq x \leq a. \quad (8.25)$$

È semplice verificare che **le autofunzioni dell'Hamiltoniano sono**, oltre che ortonormali, anche **ortogonali tra loro**, ossia

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = \frac{2}{a} \int_0^a dx \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{sen}\left(\frac{m\pi x}{a}\right) = \delta_{mn}}, \quad (8.26)$$

come previsto in generale per le autofunzioni di un operatore hermitiano.

Una qualunque funzione d'onda $\psi(x)$ per la particella nella buca di potenziale infinita può dunque essere espressa come combinazione lineare delle autofunzioni dell'Hamiltoniano:

$$\boxed{\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}(k_n x)}. \quad (8.27)$$

L'ortonormalità delle autofunzioni può essere utilizzata per esprimere **i coefficienti c_n dello sviluppo** come:

$$\boxed{c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_n^*(x) \psi(x)}. \quad (8.28)$$

Si ha infatti:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_n^*(x) \psi(x) = \sum_m c_m \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x) = c_n. \quad (8.29)$$

I moduli quadri $|c_n|^2$ rappresentano la probabilità che una misura dell'energia fornisca come risultato il valore $E = E_n$, e il valore medio dell'energia nello stato descritto dalla funzione d'onda ψ è:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) H \psi(x) = \sum_n c_m^* c_n \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_m^*(x) H \psi_n(x) = \\ &= \sum_n c_m^* c_n E_n \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_m^*(x) \psi_n(x) = \sum_n |c_n|^2 E_n \end{aligned} \quad (8.30)$$

Se $\psi(x)$ rappresenta la funzione d'onda della particella al tempo $t = 0$, la funzione d'onda ad un tempo t successivo è data da:

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x) \quad (8.31)$$

8.2.1 Buca di potenziale infinita: caso 3D

I risultati ottenuti consentono di derivare semplicemente gli autovalori dell'energia e le autofunzioni per una **buca di potenziale tridimensionale**, ossia una **particella in una scatola**, descritta dal campo:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & , \text{ per } 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, 0 \leq z \leq c \\ \infty & , \text{ fuori} \end{cases} \quad (8.32)$$

L'equazione di Schrödinger per la particella all'interno della buca di potenziale si scrive:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = E \psi \quad (8.33)$$

L' **Hamiltoniano** si separa dunque nella somma di tre termini, ciascuno dei quali è l'Hamiltoniano di una particella libera unidimensionale:

$$H = H_x + H_y + H_z \quad H_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \dots \quad (8.34)$$

In questo caso, le **autofunzioni si scompongono nel prodotto di tre autofunzioni di ciascun Hamiltoniano unidimensionale** e gli autovalori dell'energia sono dati dalla somma dei corrispondenti autovalori del caso

unidimensionale. Scrivendo esplicitamente l'equazione agli autovalori si trova infatti:

$$\begin{aligned} H\psi(x, y, z) &= (H_x + H_y + H_z) \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z) = \\ &= (E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}) \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z) = E \psi(x, y, z). \end{aligned}$$

Pertanto, le **autofunzioni della buca di potenziale infinita tridimensionale** sono date da:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) &= \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z) = \\ &= \sqrt{\frac{8}{abc}} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n_x x}{a}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n_y y}{b}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n_z z}{c}\right) \end{aligned}} \quad \text{per } \begin{cases} 0 \leq x \leq a \\ 0 \leq y \leq b \\ 0 \leq z \leq c \end{cases} \quad (8.35)$$

e $\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = 0$ fuori, e i corrispondenti **autovalori dell'energia** sono:

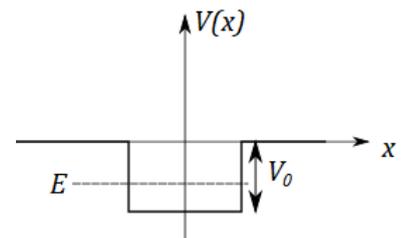
$$\boxed{E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)}, \quad n_x, n_y, n_z, = 1, 2, 3, \dots \quad (8.36)$$

8.3 Buca di potenziale finita: stati legati

Consideriamo il moto di una particella nel campo di potenziale:

$$\boxed{V(x) = \begin{cases} -V_0 & , \quad -a < x < a \\ 0 & , \quad x < -a, x > a \end{cases}}$$

(buca di potenziale finita)



Discutiamo in particolare le soluzioni dell'equazione di Schrödinger corrispondenti agli **stati legati** della particella, ossia a valori negativi dell'energia, $\mathbf{E} < 0$.

Nelle regioni in cui il potenziale è rispettivamente nullo o pari a $-V_0$ l'**equazione di Schrödinger** si scrive:

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi = \frac{2m}{\hbar^2} |E| \psi & , \quad x < -a, x > a \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi = -\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) \psi & , \quad -a < x < a. \end{cases} \quad (8.37)$$

Ponendo:

$$\boxed{\lambda^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E|} \quad , \quad \boxed{q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|)} \quad , \quad (8.38)$$

dove q e λ sono parametri reali, possiamo scrivere l'equazione di Schrödinger nella forma:

$$\boxed{\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \lambda^2 \psi & , \quad x < -a, \quad x > a \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} = -q^2 \psi & , \quad -a < x < a \end{cases}} \quad . \quad (8.39)$$

Il potenziale cui è soggetta la particella è simmetrico rispetto allo scambio $x \rightarrow -x$:

$$\boxed{V(x) = V(-x)} \quad . \quad (8.40)$$

L'operatore Hamiltoniano commuta allora con l'operatore di parità (vedi cap.9):

$$\boxed{[H, P] = 0} \quad , \quad (8.41)$$

e le autofunzioni di H possono essere scelte simultaneamente come autofunzioni dell'operatore di parità, ossia funzioni pari o dispari.

Nella regione al di fuori della buca di potenziale le soluzioni all'equazione di Schrödinger sono della forma $e^{\pm\lambda x}$. La richiesta che queste autofunzioni siano limitate all'infinito implica allora:

$$\begin{cases} \psi(x) = A e^{\lambda x} & , \quad x < -a \\ \psi(x) = A' e^{-\lambda x} & , \quad x > a . \end{cases} \quad (8.42)$$

All'interno della buca di potenziale le autofunzioni sono della forma $e^{\pm iqx}$, le cui combinazioni pari e dispari sono rispettivamente $\cos(qx)$ e $\sin(qx)$.

Consideriamo allora dapprima le **autofunzioni pari**, ossia le autofunzioni della forma:

$$\boxed{\begin{cases} \psi(x) = A e^{\lambda x} & , \quad x < -a \\ \psi(x) = B \cos(qx) & , \quad -a < x < a \\ \psi(x) = A e^{-\lambda x} & , \quad x > a \end{cases}} \quad . \quad (8.43)$$

Per la simmetria della funzione d'onda è sufficiente imporre la condizione di continuità della funzione e della sua derivata prima nel solo punto $x = -a$. Automaticamente la stessa condizione risulterà soddisfatta nel punto $x = +a$. Si ha

allora:

$$\begin{cases} A e^{-\lambda a} = B \cos(qa); \\ A \lambda e^{-\lambda a} = B q \sin(qa). \end{cases} \quad (8.44)$$

Dividendo membro a membro le due equazioni si ottiene:

$$\boxed{q \tan(qa) = \lambda} \quad (8.45)$$

Questa equazione determina implicitamente gli **autovalori dell'energia**.

Studiamo graficamente le soluzioni dell'eq. (8.45). Introduciamo la variabile adimensionale

$$\boxed{y = qa} \quad (8.46)$$

e poniamo

$$y^2 = q^2 a^2 = \frac{2m a^2}{\hbar^2} (V_0 - |E|) = k - \lambda^2 a^2, \quad (8.47)$$

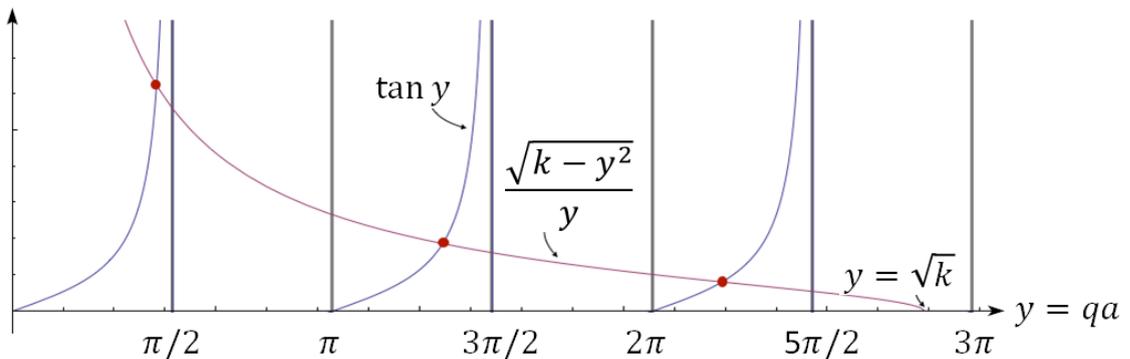
con

$$\boxed{k = \frac{2m V_0 a^2}{\hbar^2}} \quad (8.48)$$

Allora, l'eq. (8.45) si scrive come:

$$\boxed{\tan y = \frac{\sqrt{k - y^2}}{y}} \quad (y^2 \leq k). \quad (8.49)$$

Le soluzioni dell'equazione sono dunque le intersezioni delle curve $\tan y$ e $\sqrt{k - y^2}/y$. Come appare dalla figura, **i livelli di energia sono discreti**.



Si noti come il numero di intersezioni cresce al crescere di k , ossia **esistono tanti più stati legati quanto più la buca di potenziale è profonda**.

Inoltre, esiste sempre almeno un'intersezione (ed in particolare una sola per $k < \pi^2$), ossia **esiste sempre almeno uno stato legato per la particella**.

Consideriamo ora le **autofunzioni dispari**, della forma:

$$\boxed{\begin{cases} \psi(x) = A' e^{\lambda x} & , \quad x < -a \\ \psi(x) = B' \text{sen}(qx) & , \quad -a < x < a \\ \psi(x) = -A' e^{-\lambda x} & , \quad x > a \end{cases}} . \quad (8.50)$$

In questo caso le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata nel punto $x = -a$ si scrivono:

$$\begin{cases} A' e^{-\lambda a} = -B' \text{sen}(qa) \\ A' \lambda e^{-\lambda a} = B' q \cos(qa) \end{cases} \quad (8.51)$$

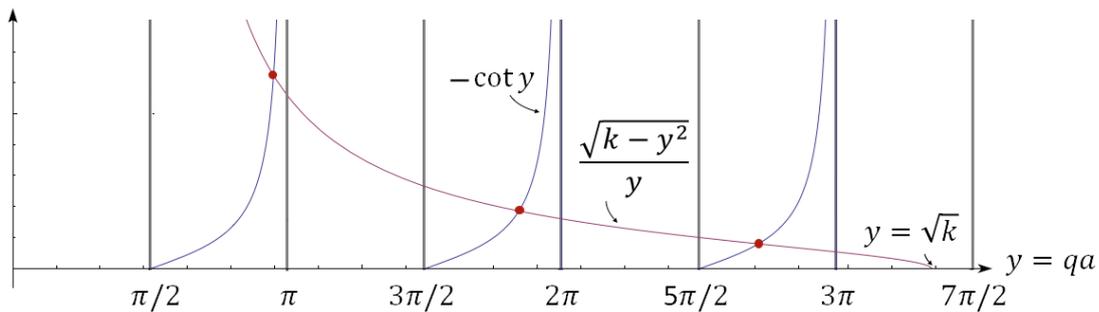
e forniscono la condizione:

$$\boxed{-q \cot(qa) = \lambda} . \quad (8.52)$$

Espressa in termini di y e k questa equazione si scrive:

$$\boxed{-\cot y = \frac{\sqrt{k - y^2}}{y}} \quad (y^2 \leq k), \quad (8.53)$$

e le soluzioni si ottengono graficamente dalle intersezioni di seguito rappresentate;



N.B. $-\cot y = \tan(y + \pi/2)$

Si noti come, anche in questo caso, il numero di intersezioni cresce al crescere di k , ossia **il numero di stati legati cresce al crescere della profondità della buca**.

Tuttavia l'eq. (8.52) **ammette soluzioni solo se $k \geq \pi^2/4$** , ossia:

$$\frac{2m V_0 a^2}{\hbar^2} \geq \frac{\pi^2}{4} \implies \boxed{V_0 \geq \frac{\hbar^2 \pi^2}{8 m a^2}} . \quad (8.54)$$

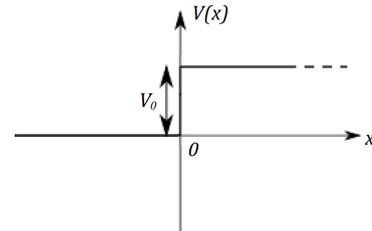
Se questa condizione non è soddisfatta, esiste solo uno stato legato corrispondente ad un'autofunzione pari.

8.4 Gradino di potenziale

Consideriamo un **campo di forze in cui il potenziale presenta una discontinuità**, della forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x < 0 \\ V_0 & , \quad x > 0. \end{cases}$$

(gradino di potenziale)



Secondo la **meccanica classica**, una particella con energia $E > V_0$, che si muove in un tale campo da sinistra verso destra, arrivata alla barriera di potenziale continua a muoversi nella stessa direzione ma con velocità minore. Se invece la sua energia è $E < V_0$, arrivata alla barriera la particella si riflette da essa e riprende il moto in direzione opposta.

Nella **meccanica quantistica** compare un fenomeno nuovo: anche per $E > V_0$ la particella può essere riflessa dalla barriera di potenziale. Ricaviamo tale risultato.

L'equazione di Schrödinger in presenza del potenziale è:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi. \quad (8.55)$$

Considerando il caso $E > V_0$ e ponendo:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad , \quad q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \quad , \quad (8.56)$$

otteniamo per l'equazione di Schrödinger nelle due regioni $x < 0$ ed $x > 0$ la forma:

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi & , \quad x < 0 \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} = -q^2\psi & , \quad x > 0 \end{cases} . \quad (8.57)$$

Se assumiamo che la particella incidente giunga da sinistra verso destra possiamo scrivere la soluzione dell'equazione di Schrödinger nella forma:

$$\begin{cases} \psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & , \quad x < 0 \\ \psi(x) = C e^{iqx} & , \quad x > 0 \end{cases} . \quad (8.58)$$

Ovviamente nella regione $x > 0$ non esiste un'onda di ritorno. Le componenti $A e^{ikx}$, $B e^{-ikx}$ e $C e^{iqx}$ rappresentano rispettivamente l'**onda incidente**, l'**onda riflessa** e l'**onda trasmessa** sul gradino di potenziale.

La funzione d'onda deve essere continua in tutto lo spazio, ed in particolare dunque nel punto $x = 0$. Inoltre, malgrado la discontinuità del potenziale nel punto $x = 0$, sappiamo che anche la derivata prima della funzione d'onda deve essere continua in questo punto, essendo il potenziale finito.

Imponendo la continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima nel punto $x = 0$ si ottiene:

$$\begin{cases} A + B = C & \Leftarrow \text{continuità di } \psi \text{ in } x = 0, \\ k(A - B) = qC & \Leftarrow \text{continuità di } \psi' \text{ in } x = 0. \end{cases} \quad (8.59)$$

Da queste due condizioni risultano determinate due costanti, B e C , mentre la terza, A , dipende dalla normalizzazione della funzione d'onda ossia dal flusso incidente.

Moltiplicando la prima equazione per q e sottraendo questa dalla seconda si ottiene:

$$(k - q)A - (k + q)B = 0, \quad (8.60)$$

da cui:

$$\boxed{B = \frac{k - q}{k + q} A}. \quad (8.61)$$

Similmente, moltiplicando la prima equazione per k e sommando a questa la seconda equazione si ottiene:

$$2kA = (k + q)C, \quad (8.62)$$

ossia:

$$\boxed{C = \frac{2k}{k + q} A}. \quad (8.63)$$

Le equazioni (8.61) e (8.63) risolvono completamente il problema posto (a meno della costante di normalizzazione della funzione d'onda).

Definiamo il **coefficiente di riflessione R** come il rapporto tra la densità di corrente dell'onda riflessa ($B e^{-ikx}$) e la densità di corrente dell'onda incidente ($A e^{ikx}$):

$$\boxed{R = \frac{|j_r|}{j_i}}. \quad (8.64)$$

Analogamente si definisce il **coefficiente di trasmissione T** come il rapporto tra la densità di corrente dell'onda trasmessa ($C e^{iqx}$) e la densità di corrente

dell'onda incidente ($A e^{ikx}$):

$$\boxed{T = \frac{j_t}{j_i}} . \quad (8.65)$$

I coefficienti di riflessione e di trasmissione rappresentano allora le probabilità che la particella incidente sul gradino di potenziale venga rispettivamente riflessa oppure trasmessa.

Per un'onda piana della forma:

$$\psi = A e^{ikx} , \quad (8.66)$$

la densità di corrente è data da:

$$j = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} . \quad (8.67)$$

Le densità di corrente delle onde incidente, riflessa e trasmessa per il problema considerato sono allora:

$$\boxed{j_i = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} , \quad j_r = -|B|^2 \frac{\hbar k}{m} , \quad j_t = |C|^2 \frac{\hbar q}{m}} . \quad (8.68)$$

Vediamo dunque, in particolare, che il valore della costante A determina il flusso di particelle incidenti, ossia il numero di particelle provenienti da $x = -\infty$ che giungono al gradino per unità di tempo.

Dalle definizioni (8.64) e (8.65), i **coefficienti di riflessione e trasmissione** risultano:

$$\boxed{R = \frac{|j_r|}{j_i} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2} . \quad (8.69)$$

$$\boxed{T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{|C|^2 q}{|A|^2 k} = \frac{4 k q}{(k+q)^2}}$$

Un valore di R differente da zero indica una corrispondente probabilità non nulla che la particella venga riflessa dal gradino di potenziale in completo contrasto con le previsioni classiche. Tuttavia, in accordo con l'intuizione, nel limite in cui l'energia della particella è molto maggiore dell'altezza del gradino, $E \gg V_0$ ossia $k \simeq q$ la probabilità di riflessione tende a zero:

$$\boxed{R \simeq 0 , \quad \text{per } E \gg V_0} . \quad (8.70)$$

Osserviamo dalle eq. (8.69) che è verificata la relazione:

$$\boxed{R + T = 1} , \quad (8.71)$$

in accordo con l'interpretazione probabilistica dei coefficienti di riflessione e trasmissione.

L'eq. (8.71) può essere derivata come conseguenza generale dell'equazione di continuità:

$$\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad (8.72)$$

che esprime appunto la conservazione della probabilità. Poiché infatti non vi è alcuna dipendenza dal tempo nel problema, questa equazione implica che $j(x)$ è indipendente da x . Quindi il flusso in $x < 0$ deve essere uguale al flusso in $x > 0$. Si ha:

$$\begin{aligned} j(x < 0) &= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_{x < 0} = \\ &= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} [(A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}) ik (A e^{ikx} - B e^{-ikx})] = \\ &= \frac{\hbar k}{m} \operatorname{Im} [i (|A|^2 - |B|^2 + AB^* e^{2ikx} - A^* B e^{-2ikx})] = \\ &= \frac{\hbar k}{m} \operatorname{Im} [i (|A|^2 - |B|^2 + 2i \operatorname{Im}(AB^* e^{2ikx}))] = \\ &= \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) = j_i - |j_r|, \end{aligned} \quad (8.73)$$

e

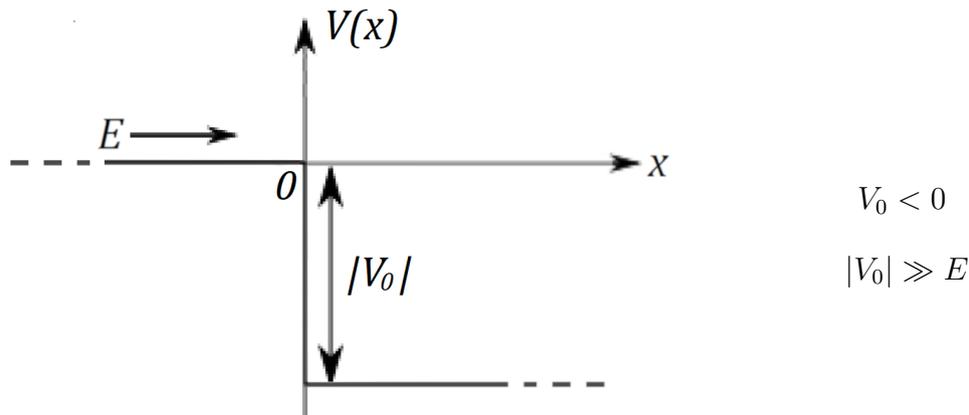
$$j(x > 0) = |C|^2 \frac{\hbar q}{m} = j_t. \quad (8.74)$$

Pertanto vale la condizione

$$\boxed{j_i = |j_r| + j_t}, \quad (8.75)$$

che equivale all'eq. (8.71) per i coefficienti di riflessione e trasmissione.

Un **fenomeno puramente quantistico** si osserva quando il potenziale V_0 è negativo ed in modulo molto grande:



Classicamente la particella proveniente da sinistra verso destra, giunta al salto di potenziale, prosegue nella sua direzione con maggiore velocità.

La previsione della meccanica quantistica è invece la seguente: poiché

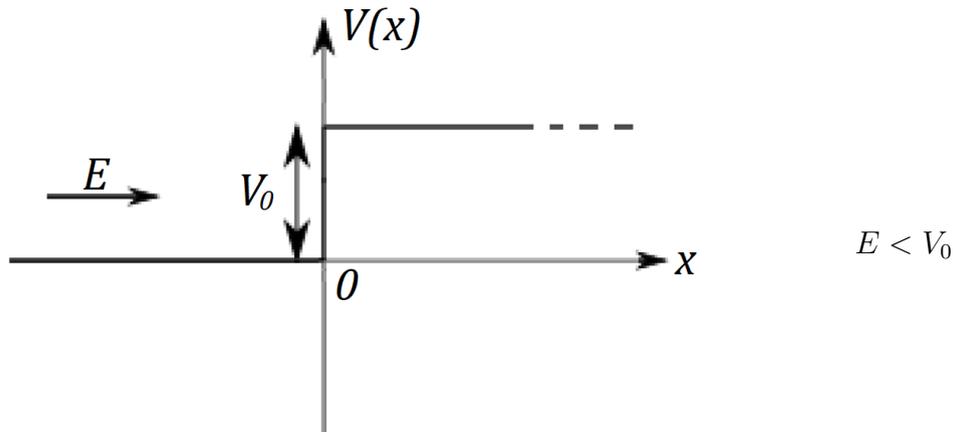
$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + |V_0|) \gg \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \quad (8.76)$$

si trova:

$$\boxed{R = \left(\frac{q-k}{q+k}\right)^2 \simeq 1} \quad \boxed{T = \frac{4qk}{(q+k)^2} \simeq 0}, \quad (8.77)$$

ossia la **particella viene riflessa** con probabilità quasi uno.

Un altro caso che interessa considerare è quello in cui la particella incide sul gradino di potenziale con energia minore dell'altezza del gradino:



In questo caso:

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) < 0, \quad (8.78)$$

ossia q è immaginario. La soluzione dell'equazione di Schrödinger, nella regione $x > 0$, è della forma:

$$\boxed{\psi(x) = C e^{-|q|x}, \quad x > 0}, \quad (8.79)$$

giacché la soluzione $C e^{+|q|x}$ diverge all'infinito.

I risultati ottenuti precedentemente per le autofunzioni di H si modificano allora per la sostituzione:

$$q \rightarrow i|q| \quad (8.80)$$

e quindi, in particolare, per i coefficienti B e C si trova:

$$B = \frac{k - i|q|}{k + i|q|} A, \quad C = \frac{2k}{k + i|q|} A. \quad (8.81)$$

Il coefficiente di riflessione R risulta allora:

$$\boxed{R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{k - i|q|}{k + i|q|} \right|^2 = 1}, \quad (8.82)$$

mentre il coefficiente di trasmissione è nullo,

$$T = 0, \quad (8.83)$$

essendo sempre nulla la densità di corrente associata ad una funzione d'onda reale.

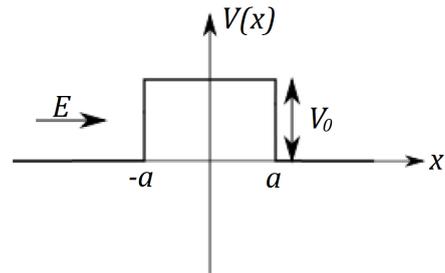
Pertanto, come in meccanica classica, si ha in questo caso **riflessione totale**, e il flusso di particelle nella regione $x > 0$ è nullo. Ciò nonostante osserviamo che la **funzione d'onda non si annulla nella regione classicamente proibita** e vi è dunque una probabilità non nulla di osservare la particella in questa regione. Come vedremo di seguito, questo fenomeno puramente quantistico di penetrazione in una regione classicamente proibita consente il cosiddetto **effetto tunnel**, ossia l'attraversamento di una barriera di potenziale che bloccherebbe completamente la particella secondo la descrizione classica.

8.5 Barriera di potenziale. Effetto tunnel

Consideriamo un campo di forze il cui potenziale ha l'andamento

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x < -a \\ V_0 & , \quad -a < x < a \\ 0 & , \quad x > a. \end{cases}$$

(barriera di potenziale)



Studiamo il moto della particella che giunge da sinistra con energia $E < V_0$. Classicamente la particella, giunta alla barriera, viene riflessa e torna indietro.

Consideriamo invece la descrizione quantistica. **L'equazione di Schrödinger**,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi, \quad (8.84)$$

nelle diverse regioni si scrive:

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = -k^2\psi & , \quad x < -a \text{ e } x > a \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi = +\lambda^2\psi & , \quad -a \leq x \leq a. \end{cases}, \quad (8.85)$$

dove si è posto

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \lambda^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E), \quad (8.86)$$

con k e λ parametri reali.

La **soluzione** delle eq.(8.85) con la condizione al contorno che le particelle giungono da $x = -\infty$ e si propagano nella direzione delle x positive è:

$$\boxed{\begin{cases} \psi(x) = e^{ikx} + A e^{-ikx} & , \quad x < -a \\ \psi(x) = B e^{\lambda x} + C e^{-\lambda x} & , \quad -a < x < a \\ \psi(x) = D e^{ikx} & , \quad x > a \end{cases}} . \quad (8.87)$$

La **normalizzazione** scelta corrisponde ad aver fissato a

$$j_i = \frac{\hbar k}{m} \quad (8.88)$$

il flusso dell'onda incidente.

Imponendo la **continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima** nei punti $x = \pm a$ si ottiene il seguente sistema di equazioni:

$$\begin{cases} e^{-ika} + A e^{ika} = B e^{-\lambda a} + C e^{\lambda a} \\ ik(e^{-ika} - A e^{ika}) = \lambda(B e^{-\lambda a} - C e^{\lambda a}) \\ B e^{\lambda a} + C e^{-\lambda a} = D e^{ika} \\ \lambda(B e^{\lambda a} - C e^{-\lambda a}) = ikD e^{ika} . \end{cases} \quad (8.89)$$

Moltiplichiamo la prima equazione per ik e sommiamo e sottraiamo la seconda equazione. Eseguiamo poi le stesse operazioni sulla terza e sulla quarta equazione. Si ottiene in tal modo:

$$\begin{cases} 2ike^{-ika} = B(ik + \lambda)e^{-\lambda a} + C(ik - \lambda)e^{\lambda a} \\ 2ikAe^{ika} = B(ik - \lambda)e^{-\lambda a} + C(ik + \lambda)e^{\lambda a} \\ B(ik + \lambda)e^{\lambda a} + C(ik - \lambda)e^{-\lambda a} = 2ikD e^{ika} \\ B(ik - \lambda)e^{\lambda a} + C(ik + \lambda)e^{-\lambda a} = 0 . \end{cases} \quad (8.90)$$

Il sistema si risolve nel modo seguente. Dalla prima e dalla quarta equazione si ricavano i coefficienti B e C . Sostituendo poi i risultati rispettivamente nella terza e seconda equazione si ricavano D ed A .

Frequentemente risulta soddisfatta la condizione

$$\boxed{2\lambda a \gg 1} . \quad (8.91)$$

Poiché

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE(V_0/E - 1)}} = \frac{\hbar/p}{\sqrt{(V_0/E - 1)}}, \quad (8.92)$$

la condizione (8.91) equivale a

$$2a \gg \frac{\hbar/p}{\sqrt{(V_0/E - 1)}}, \quad (8.93)$$

ossia la condizione risulta **soddisfatta quando la larghezza della barriera è molto maggiore della lunghezza d'onda di De Broglie della particella**, \hbar/p , divisa per il fattore $\sqrt{(V_0/E - 1)}$ (tipicamente di $O(1)$).

Risolviamo allora il sistema di equazioni (8.90) e risolviamolo nel limite $\lambda a \gg 1$ (si veda l'appendice di questo capitolo per la risoluzione esatta). Dalla quarta equazione del sistema (8.90) ricaviamo:

$$B = -\frac{(ik + \lambda)}{(ik - \lambda)} e^{-2\lambda a} C, \quad (8.94)$$

ossia B è esponenzialmente piccolo rispetto a C . Nella prima equazione possiamo quindi trascurare il termine proporzionale a $B e^{-\lambda a}$ rispetto a quello proporzionale a $C e^{\lambda a}$. Si ottiene in tal modo:

$$C = \frac{2ik}{ik - \lambda} e^{-ika} e^{-\lambda a}, \quad (8.95)$$

e dunque, combinando con l'eq. (8.94), anche

$$B = -\frac{2ik(ik + \lambda)}{(ik - \lambda)^2} e^{-ika} e^{-3\lambda a}. \quad (8.96)$$

Possiamo ora ricavare il coefficiente D utilizzando la terza delle equazioni del sistema. In questa equazione i termini $B e^{\lambda a}$ e $C e^{-\lambda a}$ sono dello stesso ordine di grandezza (entrambi proporzionali a $e^{-2\lambda a}$). Si ottiene dunque

$$\begin{aligned} 2ik D e^{ika} &= 2ik e^{-ika} e^{-2\lambda a} \left[-\frac{(ik + \lambda)^2}{(ik - \lambda)^2} + 1 \right] = \\ &= 2ik e^{-ika} e^{-2\lambda a} \frac{-(ik + \lambda)^2 + (ik - \lambda)^2}{(ik - \lambda)^2} = \\ &= 2ik e^{-ika} e^{-2\lambda a} \frac{-4ik\lambda}{(ik - \lambda)^2}, \end{aligned} \quad (8.97)$$

da cui

$$D = -\frac{4ik\lambda}{(ik - \lambda)^2} e^{-2ika} e^{-2\lambda a}. \quad (8.98)$$

Dalla seconda equazione del sistema, infine, trascurando il termine $Be^{-\lambda a}$ (di ordine $O(e^{-4\lambda a})$) rispetto al termine $Ce^{\lambda a}$ (di ordine $O(1)$) si ottiene

$$A = \frac{(ik + \lambda)}{(ik - \lambda)} e^{-2ika} . \quad (8.99)$$

La quantità che ci interessa calcolare è il **coefficiente di trasmissione**

$$T = \frac{j_t}{j_i} = |D|^2 , \quad (8.100)$$

che risulta dunque valere, utilizzando le eq. (8.86),

$$\begin{aligned} T = |D|^2 &= \left(\frac{4k\lambda}{k^2 + \lambda^2} \right)^2 e^{-4\lambda a} = \left(\frac{4\lambda/k}{1 + \lambda^2/k^2} \right)^2 e^{-4\lambda a} = \\ &= 16 \frac{(V_0/E - 1)}{(V_0/E)^2} \exp \left(-4a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \right) , \end{aligned} \quad (8.101)$$

ossia

$$T \simeq 16 \left(\frac{E}{V_0} \right) \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) \exp \left(-4a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \right) , \quad (8.102)$$

dove l'uguaglianza vale a meno di termini esponenzialmente piccoli (soppressi per un fattore $e^{-2\lambda a}$). Il risultato per questo coefficiente, diverso da zero, implica che **vi è una probabilità non nulla che la particella attraversi la barriera di potenziale**. Questo fenomeno, puramente quantistico, è noto con il nome di **effetto tunnel**.

L'eq.(8.102) mostra come la **probabilità di trasmissione** della particella attraverso la barriera di potenziale **decresca esponenzialmente con la lunghezza della barriera ($2a$) e quanto più l'altezza della barriera (V_0) eccede l'energia della particella (E).**²

Le stesse conclusioni continuano a valere in condizioni più generali. Utilizzando la cosiddetta **approssimazione WKB** (dai nomi dei fisici **Wentzel, Kramers, Brillouin**), anche detta **approssimazione quasi-classica**, è possibile derivare per il coefficiente di trasmissione l'espressione:

$$T \approx \exp \left(-2 \int_{\text{barriera}} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} \right) , \quad (8.103)$$

²Osserviamo che nel limite $2\lambda a \gg 1$ che abbiamo considerato, per il coefficiente di riflessione si ottiene: $R = |A|^2 = 1 + O(e^{-4\lambda a})$, in accordo con la relazione esatta $R = 1 - T$.

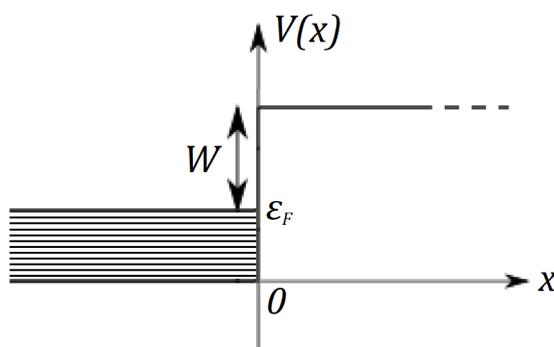
valida per potenziali $V(x)$ non troppo rapidamente variabili nello spazio.

Gli esempi di effetto tunnel sono abbastanza comuni nella fisica atomica e nucleare. Discutiamo qui di seguito due di questi esempi.

8.5.1 Emissione fredda

L'emissione fredda è un fenomeno che consiste nell' **emissione di elettroni da parte della superficie di un metallo quando all'esterno della superficie viene applicato un campo elettrico E** .

Il fenomeno può essere spiegato nel modo seguente. Gli elettroni in un metallo sono confinati all'interno da un potenziale che in prima approssimazione può essere descritto da una buca di profondità finita:

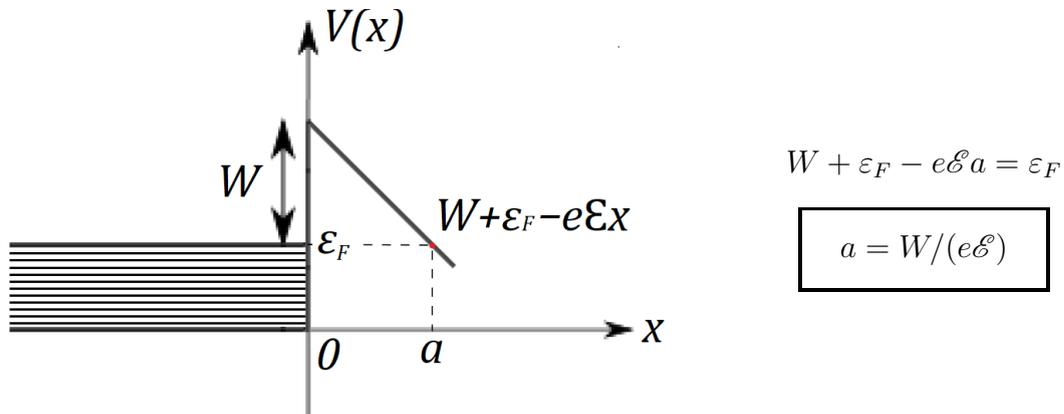


Nello stato fondamentale del metallo tutti i livelli di energia di singolo elettrone sono riempiti fino all'energia di Fermi. La differenza tra l'energia di Fermi e la cima della buca rappresenta l'energia necessaria per estrarre un elettrone dal metallo, ossia la **funzione lavoro W** .

Gli elettroni possono essere estratti dal metallo trasferendogli energia, o mediante fotoni o per riscaldamento.

Tuttavia **è anche possibile estrarre elettroni dal metallo senza fornire a questi alcuna energia** ma applicando un campo elettrico \mathcal{E} all'esterno del metallo.

In questo caso infatti, il potenziale visto da un elettrone che si trova al livello di Fermi cambia, per effetto del campo esterno, da $W + \varepsilon_F$ a $W + \varepsilon_F - e\mathcal{E}x$:



L'elettrone può allora essere emesso per **effetto tunnel**.

La probabilità di emissione è:

$$T \approx \exp \left(-2 \int_0^a dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\underbrace{W + \varepsilon_F - e\mathcal{E}x}_{V(x)} - \underbrace{\varepsilon_F}_E \right)} \right). \quad (8.104)$$

Calcoliamo l'integrale:

$$\int_0^a dx (W - e\mathcal{E}x)^{1/2} = -\frac{2}{3} \frac{1}{e\mathcal{E}} (W - e\mathcal{E}x)^{3/2} \Big|_0^a = \frac{2}{3} \frac{W^{3/2}}{e\mathcal{E}}. \quad (8.105)$$

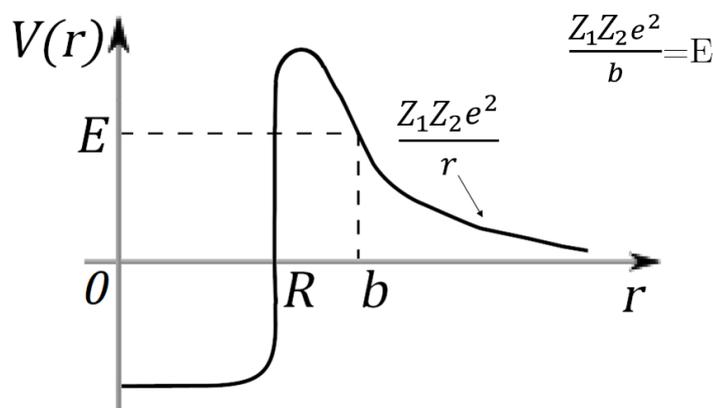
Pertanto:

$$T \approx \exp \left[-\frac{4}{3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \frac{W^{3/2}}{e\mathcal{E}} \right]. \quad (8.106)$$

8.5.2 Decadimento α

L'esperienza mostra che gli elementi di numero atomico $Z > 81$ sono radioattivi, ossia decadono emettendo particelle α (nuclei di elio) o β (elettroni) e trasformandosi così in altri elementi. Indichiamo qui un **semplice modello per descrivere i decadimenti α** le cui previsioni risultano in buon accordo con le osservazioni sperimentali.

In questo modello il decadimento del nucleo in una particella α ed un nucleo "prodotto" è descritto come l'emissione, per effetto tunnel, della particella α attraverso una barriera di potenziale causata dall'interazione coulombiana tra il nucleo prodotto e la particella α :



Il raggio R definisce le dimensioni del nucleo. Per $r < R$ la particella risente del potenziale all'interno del nucleo, schematizzato da una buca. Per $r > R$ il potenziale è coulombiano: $V(r) = Z_1 Z_2 e^2 / r$ dove Z_1 è la carica del nucleo prodotto e $Z_2 = 2$ la carica della particella α .

Affinché il decadimento α (per effetto tunnel) possa avere luogo, la particella α all'interno del nucleo in questo modello deve avere energia E positiva, ossia non deve trovarsi in uno stato legato.

La **probabilità di emissione** della particella α per effetto tunnel è:

$$T \approx \exp \left[-2 \int_R^b dr \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - E \right)} \right]. \quad (8.107)$$

Calcoliamo l'integrale:

$$\begin{aligned} \int_R^b dr \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - E \right)^{1/2} &= (Z_1 Z_2 e^2)^{1/2} \int_R^b \frac{dr}{\sqrt{r}} \left(1 - \frac{E r}{Z_1 Z_2 e^2} \right)^{1/2} = \\ &= (Z_1 Z_2 e^2)^{1/2} \int_R^b \frac{dr}{\sqrt{r}} \left(1 - \frac{r}{b} \right)^{1/2} \stackrel{s=r/b}{=} (Z_1 Z_2 e^2 b)^{1/2} \int_{R/b}^1 ds s^{-1/2} (1-s)^{1/2}. \end{aligned} \quad (8.108)$$

I tipici valori del raggio nucleare R e dell'energie E delle particelle alfa emesse (dell'ordine di 4-9 MeV), e dunque degli estremi della barriera di potenziale, sono tali per cui possiamo sostituire in prima approssimazione l'estremo inferiore di integrazione R/b con 0. L'integrale si riduce quindi ad una costante adimensionale il cui valore,

$$\int_0^1 ds s^{-1/2} (1-s)^{1/2} = \frac{\pi}{2}, \quad (8.109)$$

si può ottenere effettuando il cambio di variabile $s = \text{sen}^2 \alpha$ (ma non è comunque rilevante per quanto segue).

Si trova pertanto:

$$T \approx \exp \left[-\pi \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (Z_1 Z_2 e^2 b)^{1/2} \right] = \exp \left[-\pi \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\sqrt{E}} \right], \quad (8.110)$$

ossia

$$T \approx \exp \left(-C \frac{Z_1}{\sqrt{E}} \right), \quad (8.111)$$

che evidenzia la dipendenza della probabilità di decadimento dal numero atomico Z_1 del nucleo prodotto nel decadimento e dall'energia $E = mv^2/2$ della particella α .

La probabilità di decadimento α del nucleo, T , è inversamente proporzionale alla **vita media** τ del nucleo:

$$\tau \sim \frac{1}{T} \sim \exp \left(C \frac{Z_1}{\sqrt{E}} \right), \quad (8.112)$$

Questo andamento risulta ben confermato dalle misure sperimentali.

8.6 Appendici sulla barriera di potenziale

8.6.1 Risoluzione esatta dell'equazione di Schrödinger senza l'ipotesi $\lambda a \gg 1$

Consideriamo nuovamente il sistema di equazioni (8.90) e risolviamolo esattamente, senza assumere la condizione $\lambda a \gg 1$:

$$\begin{cases} 2ik e^{-ika} = B (ik + \lambda) e^{-\lambda a} + C (ik - \lambda) e^{\lambda a} \\ 2ik A e^{ika} = B (ik - \lambda) e^{-\lambda a} + C (ik + \lambda) e^{\lambda a} \\ B (ik + \lambda) e^{\lambda a} + C (ik - \lambda) e^{-\lambda a} = 2ik D e^{ika} \\ B (ik - \lambda) e^{\lambda a} + C (ik + \lambda) e^{-\lambda a} = 0. \end{cases} \quad (8.113)$$

La prima e la quarta di queste equazioni costituiscono un sistema di due equazioni nelle due incognite B e C . Moltiplicando la prima equazione per $(ik + \lambda)e^{-\lambda a}$ e la quarta per $(ik - \lambda)e^{\lambda a}$ e sottraendo poi la quarta dalla prima si ottiene

$$B [(ik + \lambda)^2 e^{-2\lambda a} - (ik - \lambda)^2 e^{2\lambda a}] = 2ik (ik + \lambda) e^{-(ik+\lambda)a}, \quad (8.114)$$

da cui

$$\begin{aligned} B [(-k^2 + \lambda^2 + 2ik\lambda) e^{-2\lambda a} - (-k^2 + \lambda^2 - 2ik\lambda) e^{2\lambda a}] = \\ = 2ik (ik + \lambda) e^{-(ik+\lambda)a}, \end{aligned} \quad (8.115)$$

e infine

$$B = \frac{ik (ik + \lambda) e^{-(ik+\lambda)a}}{(k^2 - \lambda^2) \sinh(2\lambda a) + 2ik\lambda \cosh(2\lambda a)} . \quad (8.116)$$

Per la simmetria del sistema (8.113), il coefficiente C si ottiene da B scambiando $\lambda \rightarrow -\lambda$:

$$C = \frac{-ik (ik - \lambda) e^{-(ik-\lambda)a}}{(k^2 - \lambda^2) \sinh(2\lambda a) + 2ik\lambda \cosh(2\lambda a)} . \quad (8.117)$$

I coefficienti A e D si ottengono infine sostituendo questi risultati nella seconda e terza equazione del sistema. Si trova

$$\begin{aligned} 2ikAe^{ika} &= B (ik - \lambda) e^{-\lambda a} + C (ik + \lambda) e^{\lambda a} = \\ &= \frac{ik (-k^2 - \lambda^2) e^{-2\lambda a} e^{-ika} - ik (-k^2 - \lambda^2) e^{2\lambda a} e^{-ika}}{(k^2 - \lambda^2) \sinh(2\lambda a) + 2ik\lambda \cosh(2\lambda a)} = \\ &= \frac{2ik (k^2 + \lambda^2) \sinh(2\lambda a) e^{-ika}}{(k^2 - \lambda^2) \sinh(2\lambda a) + 2ik\lambda \cosh(2\lambda a)} , \end{aligned} \quad (8.118)$$

e

$$\begin{aligned} 2ikDe^{ika} &= B (ik + \lambda) e^{\lambda a} + C (ik - \lambda) e^{-\lambda a} = \\ &= \frac{ik (-k^2 + \lambda^2 + 2ik\lambda) e^{-ika} - ik (-k^2 + \lambda^2 - 2ik\lambda) e^{-ika}}{(k^2 - \lambda^2) \sinh(2\lambda a) + 2ik\lambda \cosh(2\lambda a)} = \\ &= \frac{-4k^2\lambda e^{-ika}}{(k^2 - \lambda^2) \sinh(2\lambda a) + 2ik\lambda \cosh(2\lambda a)} , \end{aligned} \quad (8.119)$$

ossia:

$$A = \frac{(k^2 + \lambda^2) \sinh(2\lambda a) e^{-2ika}}{(k^2 - \lambda^2) \sinh(2\lambda a) + 2ik\lambda \cosh(2\lambda a)} , \quad (8.120)$$

e

$$D = \frac{2ik\lambda e^{-2ika}}{(k^2 - \lambda^2) \sinh(2\lambda a) + 2ik\lambda \cosh(2\lambda a)} . \quad (8.121)$$

La quantità che ci interessa calcolare è il **coefficiente di trasmissione**

$$T = \frac{j_t}{j_i} = |D|^2 , \quad (8.122)$$

che risulta dunque valere

$$T = \frac{4k^2\lambda^2}{(k^2 - \lambda^2)^2 \sinh^2(2\lambda a) + 4k^2\lambda^2 \cosh^2(2\lambda a)}, \quad (8.123)$$

ossia

$$T = \frac{4k^2\lambda^2}{(k^2 + \lambda^2)^2 \sinh^2(2\lambda a) + 4k^2\lambda^2}. \quad (8.124)$$

Possiamo verificare come, nel limite $2\lambda a \gg 1$, si riottenga il risultato derivato precedentemente. Si ha:

$$\sinh(2\lambda a) = \frac{e^{2\lambda a} + e^{-2\lambda a}}{2} \simeq \frac{1}{2}e^{2\lambda a} (1 + O(e^{-4\lambda a})). \quad (8.125)$$

Sostituendo nell'eq. (8.124), il coefficiente di trasmissione T risulta

$$T \simeq \frac{16 k^2 \lambda^2}{(k^2 + \lambda^2)^2} e^{-4\lambda a} \quad (8.126)$$

che coincide con il risultato (8.102) derivato in precedenza.

8.6.2 Risoluzione dell'equazione di Schrödinger in termini di funzioni d'onda simmetriche e anti-simmetriche

Poiché la barriera di potenziale qui considerata è simmetrica, ossia $V(-x) = V(x)$, l'equazione di Schrödinger può anche essere risolta, in modo conveniente, in termini di autofunzioni pari e dispari:

$$\psi_S(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A_S e^{-ikx} & , \quad x < -a \\ B_S \cosh(\lambda x) & , \quad -a < x < a \\ e^{-ikx} + A_S e^{ikx} & , \quad x > a. \end{cases} \quad (8.127)$$

$$\psi_A(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A_A e^{-ikx} & , \quad x < -a \\ B_A \sinh(\lambda x) & , \quad -a < x < a, \\ -e^{-ikx} - A_A e^{ikx} & , \quad x > a. \end{cases} \quad (8.128)$$

Successivamente, una volta determinate le costanti A e B mediante le condizioni di continuità sulle funzioni d'onda e sulle derivate prime, si costruisce l'opportuna combinazione lineare per il problema dato in cui nella regione $x > a$ è presente solo

un'onda trasmessa. È evidente che tale combinazione è:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{2} (\psi_S(x) + \psi_A(x)) = \\ &= \begin{cases} e^{ikx} + \frac{1}{2} (A_S + A_A) e^{-ikx} & , \quad x < -a \\ \frac{1}{2} B_S \cosh(\lambda x) + \frac{1}{2} B_A \sinh(\lambda x) & , \quad -a < x < a \\ \frac{1}{2} (A_S - A_A) e^{ikx} & , \quad x > a. \end{cases} \end{aligned} \quad (8.129)$$

Vediamo, in particolare, che $D = (A_S - A_A) / 2$. Calcoliamo allora il coefficiente D utilizzando questo metodo.

Le condizioni di continuità per la funzione d'onda simmetrica e per la sua derivata prima nel punto $x = a$ si scrivono

$$\begin{cases} B_S \cosh(\lambda a) = e^{-ika} + A_S e^{ika} \\ \lambda B_S \sinh(\lambda a) = -ik e^{-ika} + ik A_S e^{ika}. \end{cases} \quad (8.130)$$

Per la simmetria della funzione d'onda queste condizioni garantiscono anche la continuità della funzione d'onda e della sua derivata nel punto $x = -a$.

Il sistema di equazioni (8.130) può essere facilmente risolto per A_S moltiplicando la prima equazione per $\lambda \sinh(\lambda a)$, la seconda per $\cosh(\lambda a)$ e sottraendo l'una dall'altra:

$$[\lambda \sinh(\lambda a) + ik \cosh(\lambda a)] e^{-ika} + A_S [\lambda \sinh(\lambda a) - ik \cosh(\lambda a)] e^{ika} = 0, \quad (8.131)$$

da cui

$$\boxed{A_S = -\frac{\lambda \sinh(\lambda a) + ik \cosh(\lambda a)}{\lambda \sinh(\lambda a) - ik \cosh(\lambda a)} e^{-2ika}}. \quad (8.132)$$

La determinazione del coefficiente A_A della f.d.o antisimmetrica procede in modo analogo. In questo caso le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata conducono al sistema

$$\begin{cases} B_A \sinh(\lambda a) = -e^{-ika} - A_A e^{ika} \\ \lambda B_A \cosh(\lambda a) = ik e^{-ika} - ik A_A e^{ika}. \end{cases} \quad (8.133)$$

Questo sistema differisce dal sistema (8.130) per lo scambio di $\sinh(\lambda a)$ con $-\cosh(\lambda a)$. Possiamo quindi scrivere direttamente dall'eq. (8.132) la soluzione per il coefficiente A_A :

$$\boxed{A_A = -\frac{\lambda \cosh(\lambda a) + ik \sinh(\lambda a)}{\lambda \cosh(\lambda a) - ik \sinh(\lambda a)} e^{-2ika}}. \quad (8.134)$$

Dalle eq. (8.132) e (8.134) ricaviamo infine l'espressione cercata per il coefficiente D :

$$\begin{aligned}
 D &= \frac{1}{2} (A_S - A_A) = \\
 &= -\frac{1}{2} e^{-2ika} \left[\frac{(\lambda \sinh(\lambda a) + ik \cosh(\lambda a)) \cdot (\lambda \cosh(\lambda a) - ik \sinh(\lambda a))}{(\lambda \sinh(\lambda a) - ik \cosh(\lambda a)) \cdot (\lambda \cosh(\lambda a) - ik \sinh(\lambda a))} + \right. \\
 &\quad \left. - \frac{(\lambda \cosh(\lambda a) + ik \sinh(\lambda a)) \cdot (\lambda \sinh(\lambda a) - ik \cosh(\lambda a))}{(\lambda \sinh(\lambda a) - ik \cosh(\lambda a)) \cdot (\lambda \cosh(\lambda a) - ik \sinh(\lambda a))} \right] = \\
 &= -\frac{1}{2} e^{-2ika} \frac{-2ik\lambda \sinh^2(\lambda a) + 2ik\lambda \cosh^2(\lambda a)}{(\lambda^2 - k^2) \sinh(\lambda a) \cosh(\lambda a) - ik\lambda (\sinh^2(\lambda a) + \cosh^2(\lambda a))}.
 \end{aligned} \tag{8.135}$$

Utilizzando le relazioni:

$$\begin{aligned}
 \cosh^2 x - \sinh^2 x &= 1 \\
 \cosh^2 x + \sinh^2 x &= \cosh 2x \\
 2 \cosh x \sinh x &= \sinh 2x
 \end{aligned} \tag{8.136}$$

possiamo riscrivere il coefficiente D nella forma

$$\boxed{D = \frac{2ik\lambda e^{-2ika}}{(k^2 - \lambda^2) \sinh(2\lambda a) + 2ik\lambda \cosh(2\lambda a)}}, \tag{8.137}$$

che coincide con il risultato precedentemente ottenuto in eq. (8.121).

Capitolo 9 | Parità

Risulta spesso utile considerare l'operatore di parità P , definito come l'operatore unitario che effettua una **trasformazione di inversione spaziale**: $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$. L'azione dell'operatore di parità può dunque essere definita convenientemente a partire dagli autostati della posizione $|\vec{x}'\rangle$, sui quali l'operatore agisce nel modo seguente:

$$\boxed{P|\vec{x}'\rangle = |-\vec{x}'\rangle} \quad , \quad \boxed{PP^+ = 1} \quad . \quad (9.1)$$

Poiché gli autostati della posizione costituiscono un insieme completo di stati di base, l'eq. (9.1) definisce **l'azione dell'operatore di parità su uno stato arbitrario** $|\alpha\rangle$:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \int d\vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'|\alpha\rangle , \\ |\alpha'\rangle \equiv P|\alpha\rangle &= \int d\vec{x}' P|\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'|\alpha\rangle = \int d\vec{x}' |-\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'|\alpha\rangle = \int d\vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle -\vec{x}'|\alpha\rangle . \end{aligned} \quad (9.2)$$

Da questa equazione vediamo tra l'altro che se $\psi_\alpha(\vec{x}') = \langle \vec{x}'|\alpha\rangle$ è la funzione d'onda dello stato $|\alpha\rangle$, la funzione d'onda dello stato trasformato per parità, $|\alpha'\rangle$, è:

$$\boxed{\psi_{\alpha'}(\vec{x}') = \langle \vec{x}'|\alpha'\rangle = \langle \vec{x}'|P|\alpha\rangle = \langle -\vec{x}'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(-\vec{x}')} \quad , \quad (9.3)$$

o anche più brevemente, nella rappresentazione delle coordinate,

$$\boxed{P\psi_\alpha(\vec{x}') = \psi_\alpha(-\vec{x}')} \quad . \quad (9.4)$$

Applicando due volte consecutive l'operatore di parità si deve ottenere la trasformazione identità, giacche una doppia inversione spaziale non può produrre alcun cambiamento. Pertanto

$$\boxed{P^2 = 1} \quad . \quad (9.5)$$

Poiché l'operatore di parità è per definizione anche unitario, $P^+P = 1$, dal confronto con la precedente equazione segue che

$$\boxed{P = P^+} , \quad (9.6)$$

ossia l'operatore di parità è un operatore **hermitiano**.

Indichiamo con $|\alpha_\lambda\rangle$ un autostato dell'operatore parità corrispondente all'autovalore λ :

$$P|\alpha_\lambda\rangle = \lambda|\alpha_\lambda\rangle . \quad (9.7)$$

Applicando P^2 allo stato $|\alpha_\lambda\rangle$ e considerando l'eq.(9.5) troviamo

$$P^2|\alpha_\lambda\rangle = P\lambda|\alpha_\lambda\rangle = \lambda^2|\alpha_\lambda\rangle = |\alpha_\lambda\rangle , \quad (9.8)$$

ossia

$$\boxed{\lambda^2 = 1} . \quad (9.9)$$

Gli autovalori dell'operatore di parità possono dunque valere solo ± 1 :

$$\boxed{P|\alpha_\pm\rangle = \pm|\alpha_\pm\rangle} . \quad (9.10)$$

Da questo segue anche per le corrispondenti autofunzioni dell'operatore di parità che

$$\boxed{\psi_\pm(\vec{x}') = \langle \vec{x}' | \alpha_\pm \rangle = \pm \langle \vec{x}' | P | \alpha_\pm \rangle = \pm \psi_\pm(-\vec{x}')} , \quad (9.11)$$

ossia **le autofunzioni dell'operatore di parità corrispondenti agli autovalori ± 1 sono funzioni rispettivamente pari o dispari**.

Dimostriamo ora che **se una particella è soggetta ad un campo di forze esterne il cui potenziale è una funzione pari delle coordinate, allora l'Hamiltoniano che descrive la particella commuta con l'operatore di parità:**

$$\boxed{[H, P] = 0 \quad \text{se} \quad V(-\vec{x}) = V(\vec{x})} . \quad (9.12)$$

Per dimostrarlo utilizziamo la rappresentazione delle coordinate e, per semplicità, una notazione unidimensionale. Data una qualunque funzione $\psi(x)$ si ha:

$$\begin{aligned} PH\psi(x) &= P\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{d(-x)}\frac{d}{d(-x)} + V(-x)\right)\psi(-x) = \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx^2} + V(x)\right)\psi(-x) = HP\psi(x) , \end{aligned} \quad (9.13)$$

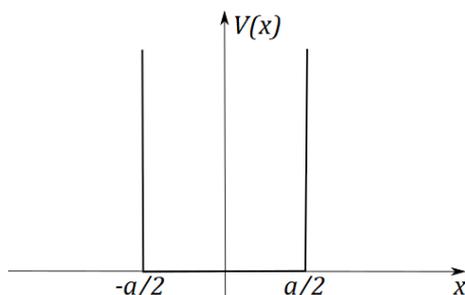
avendo utilizzato, nella penultima uguaglianza, l'ipotesi $V(-x) = V(x)$. Per l'arbitrarietà della funzione $\psi(x)$, l'eq.(9.13) implica allora $PH = HP$, ossia $[H, P] = 0$.

Sappiamo anche che se l'operatore di parità commuta con l'Hamiltoniano del sistema, allora P ed H ammettono una base di autostati in comune. Si conclude pertanto che **se il potenziale è una funzione pari delle coordinate, allora gli autostati dell'Hamiltoniano possono sempre essere scelti come autostati anche dell'operatore di parità, e le corrispondenti autofunzioni risultano essere funzioni pari o dispari delle coordinate.**

$$\boxed{H\psi_n(\vec{x}) = E_n\psi_n(\vec{x})} \quad , \quad \boxed{\psi_n(-\vec{x}) = \pm \psi_n(\vec{x})} \quad . \quad (9.14)$$

Esempio

Come esempio di quanto discusso consideriamo il caso di una buca di potenziale infinita unidimensionale centrata nell'origine delle coordinate.



$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad |x| < a/2, \\ \infty & , \quad |x| > a/2. \end{cases} \quad (9.15)$$

(bucca di potenziale infinita)

In questo caso, infatti, il potenziale è una funzione pari delle coordinate e l'operatore Hamiltoniano commuta con l'operatore di parità (1-dimensionale),

$$\boxed{[H, P] = 0} \quad . \quad (9.16)$$

Le autofunzioni di questo Hamiltoniano si possono ottenere dalle autofunzioni calcolate nel caso della buca di potenziale infinita nell'intervallo $x = [0, a]$ semplicemente trasladando di $a/2$ il valore della coordinata. Pertanto si trova

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left[\frac{n\pi}{a} \left(x + \frac{a}{2} \right) \right] = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{Im} \left[e^{i\frac{n\pi x}{a}} e^{i\frac{n\pi}{2}} \right] = \\ &= \sqrt{\frac{2}{a}} \left[\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right) + \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (9.17)$$

Si presentano allora due casi, a seconda che n sia dispari o pari:

$$\begin{cases} \psi_n(x) = (-1)^{\frac{n-1}{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \psi_n(x) = (-1)^{n/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (9.18)$$

Senza perdere di generalità possiamo omettere in queste espressioni i fattori di fase irrilevanti e scrivere dunque:

$$\boxed{\begin{cases} \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}} \quad (9.19)$$

e, ricordiamo, $\psi_n(x) = 0$ per $|x| > a/2$.

Vediamo dunque che **le autofunzioni dell'Hamiltoniano** sono funzioni pari o dispari delle coordinate, ossia **risultano simultaneamente autofunzioni dell'operatore di parità**.

Capitolo 10 | Oscillatore Armonico

Consideriamo una particella che compie piccole oscillazioni unidimensionali, il cosiddetto **oscillatore armonico**. L'energia potenziale di tale particella è uguale a $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$, dove ω rappresenta nella meccanica classica la frequenza propria delle oscillazioni. L'Hamiltoniano dell'oscillatore è quindi:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 . \quad (10.1)$$

Poiché l'energia potenziale diventa infinita per $x = \pm\infty$, la particella può compiere soltanto un moto finito e, di conseguenza, **tutto lo spettro** energetico dell'oscillatore **sarà discreto**.

I livelli energetici dell'oscillatore armonico si possono determinare risolvendo l'**equazione di Schrödinger indipendente dal tempo**:

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \psi = E\psi , \quad (10.2)$$

con le condizioni al contorno:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0 . \quad (10.3)$$

Noi invece risolviamo il problema della determinazione dei livelli energetici, e dei relativi autostati, seguendo un elegante **metodo operatoriale sviluppato da Dirac**.

A tale scopo è conveniente in primo luogo introdurre degli operatori adimensionali, dividendo entrambe i membri dell'eq. (10.1) per $\hbar\omega$:

$$\frac{H}{\hbar\omega} = \frac{p^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega x^2}{2\hbar} . \quad (10.4)$$

Definendo allora:

$$\boxed{\hat{H} = \frac{H}{\hbar\omega}} \quad , \quad \boxed{\hat{p} = \frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}}} \quad , \quad \boxed{\hat{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x} \quad , \quad (10.5)$$

possiamo scrivere la precedente equazione nella forma:

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \hat{x}^2)} \quad . \quad (10.6)$$

Calcoliamo il commutatore tra \hat{p} e \hat{x} :

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} [p, x] = \frac{1}{\hbar} (-i\hbar) \quad , \quad (10.7)$$

ossia:

$$\boxed{[\hat{p}, \hat{x}] = -i} \quad . \quad (10.8)$$

In termini degli operatori \hat{p} ed \hat{x} risulta poi conveniente definire due operatori:

$$\boxed{\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{p}) \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{p}) \end{aligned}} \quad . \quad (10.9)$$

Facendo uso della regola di commutazione canonica (10.8) possiamo calcolare il commutatore tra a e a^+ :

$$[a, a^+] = \frac{1}{2} [\hat{x} + i\hat{p}, \hat{x} - i\hat{p}] = \frac{1}{2} (i[\hat{p}, \hat{x}] - i[\hat{x}, \hat{p}]) = i[\hat{p}, \hat{x}] \quad , \quad (10.10)$$

e dunque

$$\boxed{[a, a^+] = 1} \quad . \quad (10.11)$$

Esprimiamo l'operatore \hat{H} in termini degli operatori a e a^+ . A tale scopo invertiamo le eq. (10.9) per ottenere:

$$\boxed{\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^+)} \quad , \quad \boxed{\hat{p} = \frac{-i}{\sqrt{2}} (a - a^+)} \quad . \quad (10.12)$$

Si trova allora:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \hat{x}^2) = \frac{1}{4} [-(a - a^+)^2 + (a + a^+)^2] = \frac{1}{4} (aa^+ + a^+a) \cdot 2 = \\ &= \frac{1}{2} ([a, a^+] + 2a^+a) = \frac{1}{2} (1 + 2a^+a),\end{aligned}\quad (10.13)$$

ossia:

$$\boxed{\hat{H} = a^+a + \frac{1}{2}} \quad (10.14)$$

o, equivalentemente:

$$\boxed{H = \hbar\omega \left(a^+a + \frac{1}{2} \right)} \quad (10.15)$$

Risulta utile, per quanto segue, calcolare i commutatori dell'Hamiltoniano con gli operatori a e a^+ . Calcoliamo dunque il commutatore $[H, a]$:

$$[H, a] = \hbar\omega \left[a^+a + \frac{1}{2}, a \right] = \hbar\omega [a^+a, a] = \hbar\omega [a^+, a] a = -\hbar\omega a. \quad (10.16)$$

Da questo, il commutatore di H con a^+ risulta:

$$[H, a^+] = -[H, a]^+ = \hbar\omega a^+. \quad (10.17)$$

Per comprendere il significato degli operatori a e a^+ supponiamo di conoscere un autovalore E_n dell'energia ed il corrispondente autostato $|n\rangle$:

$$\boxed{H |n\rangle = E_n |n\rangle} \quad (10.18)$$

Consideriamo quindi l'applicazione di H allo stato ottenuto applicando l'operatore a ad $|n\rangle$. Utilizzando l'eq. (10.16) si ottiene:

$$Ha |n\rangle = ([H, a] + aH) |n\rangle = (-\hbar\omega a + E_n a) |n\rangle, \quad (10.19)$$

ossia:

$$\boxed{Ha |n\rangle = (E_n - \hbar\omega) a |n\rangle} \quad (10.20)$$

Pertanto, se $|n\rangle$ è un autostato dell'Hamiltoniano con autovalore E_n , allora anche $a |n\rangle$ è un autostato dell'Hamiltoniano con autovalore $E_n - \hbar\omega$. Per questa ragione l'operatore a è anche detto operatore di distruzione.

Similmente possiamo considerare l'applicazione di H sullo stato $a^+|n\rangle$. Utilizzando l'eq. (10.17) si ottiene:

$$Ha^+|n\rangle = ([H, a^+] + a^+H) |n\rangle = (\hbar\omega a^+ + E_n a^+) |n\rangle, \quad (10.21)$$

ossia:

$$\boxed{Ha^+|n\rangle = (E_n + \hbar\omega) a^+|n\rangle} . \quad (10.22)$$

Pertanto, se $|n\rangle$ è un autostato dell'Hamiltoniano con autovalore E_n , allora anche $a^+|n\rangle$ è un autostato dell'Hamiltoniano con autovalore $E_n + \hbar\omega$. Per questa ragione l'operatore a^+ è anche detto operatore di creazione.

Questi risultati indicano che i livelli di energia sono discreti e differiscono tra loro per un numero intero di unità $\hbar\omega$.

Un'altra importante osservazione è che gli autovalori dell'energia devono essere sempre positivi, ed anzi, più precisamente, maggiori od uguali di $\hbar\omega/2$. Si ha infatti:

$$\begin{aligned} E_n &= \langle n|H|n\rangle = \hbar\omega \langle n| \left(a^+a + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar\omega \left(\langle n|a^+a|n\rangle + \frac{1}{2} \right) = \\ &= \hbar\omega \left(\underbrace{\langle n'|n'\rangle}_{|n'\rangle \equiv a|n\rangle} + \frac{1}{2} \right) \geq \frac{1}{2} \hbar\omega, \end{aligned} \quad (10.23)$$

giacché per qualunque ket $|n'\rangle$ si ha $\langle n'|n'\rangle \geq 0$.

Deve dunque esistere uno **stato fondamentale**, il cui vettore di stato indicheremo con $|0\rangle$, la cui energia E_0 è maggiore o uguale di $\hbar\omega/2$. Poiché poi l'operatore a , se applicato ad un autostato, produce l'autostato di energia inferiore, deve valere la relazione:

$$\boxed{a|0\rangle = 0} . \quad (10.24)$$

L'energia del livello fondamentale può essere facilmente calcolata. Utilizzando l'eq. (10.24) si ottiene infatti

$$H|0\rangle = \hbar\omega \left(a^+a + \frac{1}{2} \right) |0\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega |0\rangle, \quad (10.25)$$

ossia

$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega} . \quad (10.26)$$

I livelli di energia dell'oscillatore armonico, tutti separati di $\hbar\omega$, risultano dunque dati da:

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega} , \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots \quad (10.27)$$

Tali livelli sono tutti discreti, come ci si aspetta per un sistema che ammette solo stati legati, le cui funzioni d'onda cioè si annullano per $x \rightarrow \pm\infty$, e non degeneri.

L'eq. (10.15) implica che gli autostati $|n\rangle$ dell'Hamiltoniano sono autostati simultanei dell'operatore a^+a . L'espressione (10.27) per gli autovalori dell'energia E_n indica inoltre che i corrispondenti autovalori dell'operatore a^+a sono i numeri interi n . Per tale ragione l'operatore hermitiano a^+a è anche detto **operatore numero**:

$$\boxed{N = a^+a} \quad , \quad (10.28)$$

e si ha:

$$\boxed{N|n\rangle = n|n\rangle} \quad . \quad (10.29)$$

Discutiamo ora come gli **autostati** $|n\rangle$ dell'Hamiltoniano possano essere costruiti a partire dall'autostato $|0\rangle$ corrispondente allo stato fondamentale dell'oscillatore.

Il ruolo degli operatori a e a^+ come operatori di distruzione e costruzione rispettivamente implica che gli stati $a|n\rangle$ ed $a^+|n\rangle$ coincidono, a meno di una costante di normalizzazione, con gli autostati $|n-1\rangle$ ed $|n+1\rangle$. Possiamo pertanto scrivere:

$$\begin{cases} a|n\rangle = c_n|n-1\rangle, \\ a^+|n-1\rangle = d_n|n\rangle. \end{cases} \quad (10.30)$$

Per ricavare le costanti c_n e d_n osserviamo innanzitutto che:

$$d_n = \langle n|a^+|n-1\rangle = \langle n-1|a|n\rangle^* = c_n^* . \quad (10.31)$$

Inoltre, applicando l'operatore numero allo stato $|n\rangle$ troviamo:

$$N|n\rangle = n|n\rangle = a^+a|n\rangle = c_n a^+|n-1\rangle = c_n d_n |n\rangle = |c_n|^2 |n\rangle , \quad (10.32)$$

ossia:

$$|c_n|^2 = n. \quad (10.33)$$

Scegliendo per convenzione c_n reale e positivo (tale scelta essendo sempre possibile giacché i vettori di stato sono definiti a meno di un fattore di fase arbitrario) vediamo allora che $c_n = \sqrt{n}$. In definitiva, abbiamo dimostrato le relazioni:

$$\boxed{\begin{cases} a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^+|n-1\rangle = \sqrt{n}|n\rangle \end{cases}} \quad . \quad (10.34)$$

Queste relazioni consentono in particolare di costruire tutti gli **autostati dell'Hamiltoniano** applicando in successione l'operatore a^+ allo stato fondamentale

$|0\rangle$, definito dall'eq. (10.24). Otteniamo:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= a^+|0\rangle \\
 |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} a^+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^+)^2 |0\rangle \\
 |3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} a^+|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} (a^+)^3 |0\rangle \\
 &\vdots \\
 |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle
 \end{aligned}
 \tag{10.35}$$

Il metodo operatoriale di Dirac consente anche di ricavare le funzioni d'onda corrispondenti agli autostati dell'energia, ossia le **autofunzioni dell'Hamiltoniano**.

Consideriamo in primo luogo lo stato fondamentale definito dall'eq. (10.24). Moltiplicando a sinistra questa equazione per il $\langle x'|$ troviamo:

$$\langle x'| a |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x'| (\hat{x} + i\hat{p}) |0\rangle = 0.
 \tag{10.36}$$

Determiniamo le espressioni degli operatori \hat{x} e \hat{p} nella rappresentazione delle coordinate. Utilizzando le eq. (10.5) si trova:

$$\begin{aligned}
 \langle x'| \hat{x} |0\rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \langle x'| x |0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x' \langle x'|0\rangle = \frac{x'}{x_0} \psi_0(x') = \xi \psi_0(\xi) \\
 \langle x'| \hat{p} |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \langle x'| p |0\rangle = -i \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx'} \langle x'|0\rangle = -i x_0 \frac{d}{dx'} \psi_0(x') = \\
 &= -i \frac{d}{d\xi} \psi_0(\xi)
 \end{aligned}
 \tag{10.37}$$

dove si è indicata con:

$$\psi_0(x') = \langle x'|0\rangle
 \tag{10.38}$$

l'autofunzione corrispondente allo stato fondamentale dell'oscillatore e si è posto

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad \text{e} \quad \xi = \frac{x'}{x_0}.
 \tag{10.39}$$

Utilizzando le eq. (10.37) si può allora riscrivere l'eq. (10.36) nella forma:

$$a \psi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_0(\xi) = 0.
 \tag{10.40}$$

Vediamo anche, allora, che **nella rappresentazione delle coordinate, in termini della variabile adimensionale $\xi = x/x_0$, gli operatori di creazione e distruzione si esprimono come:**

$$\boxed{a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right)}, \quad \boxed{a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)}. \quad (10.41)$$

L'eq. (10.40) si integra facilmente per separazione di variabili:

$$\frac{d\psi_0}{d\xi} = -\xi \psi_0 \implies \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\xi d\xi \implies \ln \psi_0 = -\frac{\xi^2}{2} + \text{cost.}, \quad (10.42)$$

ossia:

$$\boxed{\psi_0(\xi) = C e^{-\xi^2/2}}. \quad (10.43)$$

La costante C è determinata dalla **condizione di normalizzazione**:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\psi_0(x')|^2 = x_0 \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi |C|^2 e^{-\xi^2} = |C|^2 x_0 \sqrt{\pi}, \quad (10.44)$$

da cui, scegliendo C reale e positivo,

$$C = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{x_0}}. \quad (10.45)$$

Pertanto, **l'autofunzione normalizzata corrispondente allo stato fondamentale dell'oscillatore armonico è:**

$$\boxed{\psi_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{x_0}} e^{-\xi^2/2}}, \quad \boxed{\xi = \frac{x'}{x_0}}. \quad (10.46)$$

Le eq. (10.35) consentono poi di valutare le **autofunzioni dell'energia per gli stati eccitati**. Per la generica funzione d'onda dell'autostato $|n\rangle$ possiamo scrivere:

$$\psi_n(x') = \langle x'|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x'| (a^+)^n |0\rangle, \quad (10.47)$$

da cui, utilizzando la rappresentazione (10.41) per l'operatore a^+ , ricaviamo

$$\boxed{\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \psi_0(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!} x_0} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2}}. \quad (10.48)$$

Le funzioni $H_n(\xi)$ definite dall'equazione:

$$\left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2} = H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad , \quad (10.49)$$

sono dei polinomi di grado n in ξ contenenti potenze della stessa parità del numero n , Queste funzioni sono dette **polinomi di Hermite**. L'eq. (10.48) si scrive allora, in termini di questi polinomi:

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!} x_0} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad . \quad (10.50)$$

Avendo i polinomi di Hermite una parità definita, ossia $H_n(\xi)$ è pari per n pari e dispari per n dispari, ne segue che anche le autofunzioni dell'Hamiltoniano, $\psi_n(\xi)$, hanno la stessa parità. Questo è in accordo il fatto che per l'oscillatore armonico $V(x) = V(-x)$ e dunque l'Hamiltoniano commuta con l'operatore parità, ossia $[H, P] = 0$. **Gli autostati dell'Hamiltoniano sono anche autostati della parità.**

Oscillatore Armonico

Wolfram Mathematica notebook

Polinomi di Hermite

```
Do[Print["H["n",x] = ", HermiteH[n,x]], {n,0,5}]
```

$$H[0,x] = 1$$

$$H[1,x] = 2x$$

$$H[2,x] = -2 + 4x^2$$

$$H[3,x] = -12x + 8x^3$$

$$H[4,x] = 12 - 48x^2 + 16x^4$$

$$H[5,x] = 120x - 160x^3 + 32x^5$$

Funzioni d'onda

```
psi[n_,x_] := 1/Sqrt[Pi^(1/2) 2^n n!] HermiteH[n,x] Exp[-x^2/2]
```

Normalizzazione

```
n = 0;
```

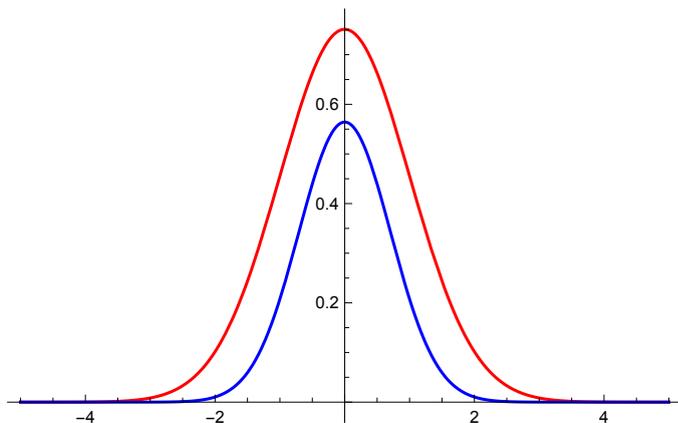
```
Integrate[Expand[psi[n,x]^2], {x, -Infinity, Infinity}]
```

```
1
```

Grafici

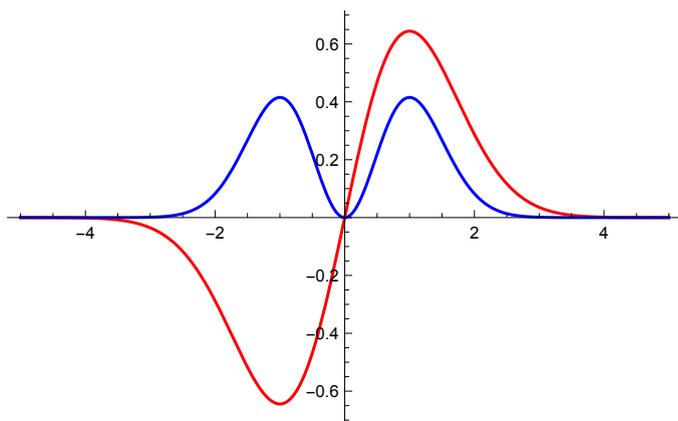
n=0;

```
Plot[{psi[n,x],psi[n,x]^2}, {x,-5,5},PlotStyle -> {RGBColor[1,0,0], RGBColor[0,0,1]}
```



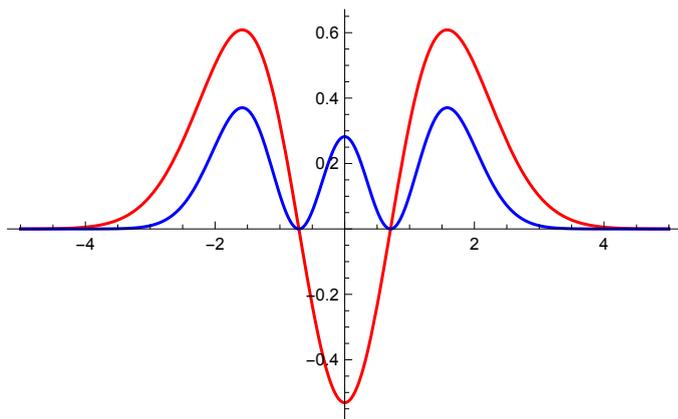
n=1;

```
Plot[{psi[n,x],psi[n,x]^2}, {x,-5,5},PlotStyle -> {RGBColor[1,0,0], RGBColor[0,0,1]}
```



n=2;

```
Plot[{psi[n,x],psi[n,x]^2}, {x,-5,5},PlotStyle -> {RGBColor[1,0,0], RGBColor[0,0,1]}
```



Capitolo 11 | Simmetrie e leggi di conservazione

11.1 Derivata di un operatore rispetto al tempo

Il concetto di derivata di una grandezza fisica rispetto al tempo non può essere definito in meccanica quantistica nel senso che esso ha in meccanica classica. Infatti, la definizione della derivata in meccanica classica è legata alla considerazione dei valori della grandezza in due istanti vicini ma differenti. Nella meccanica quantistica, invece, una grandezza avente un valore determinato in un certo istante non ha, in generale, valore determinato negli istanti successivi. In altri termini, se il vettore di stato del sistema considerato è un autostato di una determinata osservabile ad un certo istante, negli istanti successivi il vettore di stato non sarà più, in generale, autostato della stessa osservabile.

Dunque, il concetto di derivata rispetto al tempo deve essere definito in meccanica quantistica in modo diverso. **È naturale definire la derivata dA/dt di A come quella grandezza il cui valore medio è uguale alla derivata rispetto al tempo del valor medio $\langle A \rangle$.** Si ha dunque, per definizione:

$$\boxed{\left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle A \rangle} \quad (11.1)$$

Partendo da questa definizione non è difficile ottenere l'espressione dell'operatore quantistico dA/dt

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle &= \langle \alpha, t | \frac{dA}{dt} | \alpha, t \rangle = \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} \langle \alpha, t | A | \alpha, t \rangle = \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha, t | \right) A | \alpha, t \rangle + \langle \alpha, t | \frac{\partial A}{\partial t} | \alpha, t \rangle + \langle \alpha, t | A \left(\frac{\partial}{\partial t} | \alpha, t \rangle \right). \end{aligned} \quad (11.2)$$

In questa espressione $\partial A/\partial t$ è un operatore dedotto per derivazione dell'operatore A rispetto al tempo, dal quale quest'ultimo può dipendere come da un parametro.

Utilizzando l'equazione di Schrödinger per il ket $|\alpha, t\rangle$ e per il bra corrispondente $\langle\alpha, t|$,

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle = H |\alpha, t\rangle \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\alpha, t| = \langle\alpha, t| H, \end{cases} \quad (11.3)$$

otteniamo dall'eq. (11.2)

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle\alpha, t| HA |\alpha, t\rangle + \langle\alpha, t| \frac{\partial A}{\partial t} |\alpha, t\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle\alpha, t| AH |\alpha, t\rangle = \\ &= \langle\alpha, t| \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, A] \right) |\alpha, t\rangle. \end{aligned} \quad (11.4)$$

Per definizione di valore medio, l'espressione tra parentesi rappresenta l'operatore cercato dA/dt :

$$\boxed{\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, A]} \quad (11.5)$$

È istruttivo confrontare questo risultato con l'equazione del moto classica nella forma di parentesi di Poisson. **In meccanica classica**, per la derivata totale rispetto al tempo di una grandezza $f(p, q, t)$, che è funzione delle coordinate e dei momenti generalizzati del sistema e del tempo, si ha¹:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right) \quad (11.6)$$

ossia

$$\boxed{\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\}} \quad (11.7)$$

Confrontando con l'eq. (11.5), riscontriamo nuovamente che la regola di corrispondenza di Dirac

$$\boxed{\{ \quad , \quad \}_{classica} \longleftrightarrow \frac{i}{\hbar} [\quad , \quad]} \quad (11.8)$$

porta all'equazione corretta in meccanica quantistica. È bene sottolineare, tuttavia, come l'eq. (11.5) risulti valida anche quando la grandezza A non ha analogo classico.

Una classe molto importante di grandezze fisiche è costituita da **quelle grandezze i cui operatori non dipendono esplicitamente dal tempo e che, inoltre, commutano con l'Hamiltoniano**, ossia

$$\boxed{\frac{\partial A}{\partial t} = 0}, \quad \boxed{[H, A] = 0} \quad (11.9)$$

¹Vedi Appendice A, *Richiami di Meccanica Classica*.

Per tali grandezze si ha

$$\boxed{\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, A] = 0}, \quad (11.10)$$

ossia sono **grandezze conservate**. Per le grandezze conservate

$$\left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0, \quad (11.11)$$

cioè

$$\boxed{\langle A \rangle = \text{costante}}. \quad (11.12)$$

In altri termini **il valore medio della grandezza resta costante nel tempo**.

Si può ugualmente affermare che **se nello stato dato la grandezza conservata A ha un valore determinato** (cioè se lo stato è un autostato dell'operatore A) **essa avrà anche negli istanti successivi un valore determinato ed esattamente lo stesso**. Indicando infatti con $|a, t_0\rangle$ lo stato al tempo iniziale t_0 , tale che

$$A |a, t_0\rangle = a |a, t_0\rangle, \quad (11.13)$$

e considerando che $[H, A] = 0$, lo stato al tempo $t > t_0$ soddisfa

$$A |a, t\rangle = A e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} |a, t_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} A |a, t_0\rangle = a e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} |a, t_0\rangle = a |a, t\rangle, \quad (11.14)$$

ossia è ancora autostato dell'operatore A con lo stesso autovalore.

L'Hamiltoniano di un sistema isolato o di un sistema che si trova in un campo esterno costante e non variabile non può contenere il tempo esplicitamente. Ciò risulta dal fatto che tutti gli istanti sono equivalenti relativamente a tale sistema fisico. Pertanto, per un tale sistema

$$\boxed{\frac{\partial H}{\partial t} = 0}. \quad (11.15)$$

D'altra parte, poiché ogni operatore, come è ovvio, commuta con se stesso, per l'eq. (11.10) possiamo concludere che **l'energia di un sistema che non si trova in un campo esterno variabile nel tempo si conserva:**

$$\boxed{\boxed{\frac{dH}{dt} = 0}}. \quad (11.16)$$

Pertanto, **in meccanica quantistica la legge di conservazione dell'energia significa che il valore medio dell'energia resta costante nel tempo. Inoltre, se nello stato dato l'energia ha un valore determinato, questo valore resta costante nel tempo.**

11.2 Simmetrie e leggi di conservazione in meccanica quantistica

La legge di conservazione dell'energia, discussa nel paragrafo precedente, rappresenta un esempio specifico di **connessione tra simmetrie e leggi di conservazione**. Questa legge può essere infatti enunciata dicendo che, se un sistema fisico è invariante rispetto a traslazioni temporali, allora il corrispondente generatore della trasformazione, ossia l'Hamiltoniano H , è una quantità conservata.

Così come in meccanica classica, anche in meccanica quantistica la connessione tra simmetria e leggi di conservazione può essere stabilita in forma del tutto generale.

Per discutere questa connessione consideriamo una generica trasformazione che è rappresentata, in meccanica quantistica, da un operatore unitario agente sui vettori di stato:

$$\boxed{|\alpha\rangle \rightarrow U |\alpha\rangle} \quad . \quad (11.17)$$

Possiamo pensare che U rappresenti l'operatore di traslazione spaziale $T(d\vec{x})$ oppure l'operatore di evoluzione temporale $U(t, t_0)$.

Consideriamo come cambia, per effetto della trasformazione, un generico elemento di matrice di un operatore X tra due stati $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$:

$$\boxed{\langle\beta|X|\alpha\rangle \rightarrow \langle\beta|U^+XU|\alpha\rangle} \quad . \quad (11.18)$$

Vediamo allora che la trasformazione può essere pensata o come una trasformazione (11.17) sui vettori di stato, che lascia gli operatori invariati, o come trasformazione sugli operatori,

$$\boxed{X \rightarrow U^+XU} \quad , \quad (11.19)$$

lasciando invariati i vettori di stato. Formalmente i due approcci per definire la trasformazione, ossia

$$\boxed{\left\{ \begin{array}{l} |\alpha\rangle \rightarrow U |\alpha\rangle , \\ X \rightarrow X \end{array} \right.} \quad \text{o} \quad \boxed{\left\{ \begin{array}{l} |\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle , \\ X \rightarrow U^+XU \end{array} \right.} \quad (11.20)$$

sono completamente equivalenti.

Come esempio discutiamo il caso di una traslazione spaziale infinitesima operata dall'operatore $T(d\vec{x}')$. Nell'approccio utilizzato in precedenza, la trasformazione era pensata come una trasformazione sui vettori di stato che lascia invariati gli operatori.

Così ad esempio:

$$\begin{cases} |\alpha\rangle \rightarrow \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}'\right) |\alpha\rangle, \\ \vec{x} \rightarrow \vec{x}. \end{cases} \quad (11.21)$$

Tuttavia possiamo considerare la trasformazione come una trasformazione degli operatori, che lascia invariati i vettori di stato:

$$\begin{cases} |\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle, \\ \vec{x} \rightarrow \left(1 + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}'\right) \vec{x} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}'\right) \simeq \vec{x} + \frac{i}{\hbar} [\vec{p} \cdot d\vec{x}', \vec{x}] = \vec{x} + d\vec{x}'. \end{cases}, \quad (11.22)$$

dove si è considerato che, ad esempio per la componente i -esima,

$$[\vec{p} \cdot d\vec{x}', x_i] = \left[\sum_k p_k dx'_k, x_i \right] = [p_i dx'_i, x_i] = -i\hbar dx'_i \quad (11.23)$$

È immediato verificare come entrambi gli approcci (11.21) e (11.22) portino allo stesso risultato per il valore di aspettazione di \vec{x} :

$$\langle \vec{x} \rangle \rightarrow \langle \vec{x} \rangle + d\vec{x}'. \quad (11.24)$$

Nel discutere la connessione tra simmetrie e leggi di conservazione è conveniente considerare le trasformazioni come agenti sugli operatori.

Consideriamo allora una generica trasformazione operata dall'operatore unitario U e supponiamo che il sistema fisico considerato sia invariante rispetto a tale trasformazione, ossia che la trasformazione rappresenti una simmetria del sistema. In particolare, allora, dovrà risultare invariante per tale trasformazione l'Hamiltoniano H del sistema, che ne descrive la dinamica. Per quanto discusso, questo comporta

$$\boxed{U^+ H U = H}, \quad (11.25)$$

o, equivalentemente

$$\boxed{[H, U] = 0}. \quad (11.26)$$

Se consideriamo una **trasformazione infinitesima**, sappiamo che l'operatore unitario U può essere scritto nella forma

$$\boxed{U = 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} G}, \quad (11.27)$$

dove G è il generatore hermitiano della trasformazione considerata. In questo caso l'eq.(11.26) equivale a

$$\boxed{[H, G] = 0}. \quad (11.28)$$

Per l'eq. (11.5), se il generatore G non dipende esplicitamente dal tempo, si ha allora

$$\boxed{\frac{dG}{dt} = 0}, \quad (11.29)$$

e quindi G è una **grandezza conservata**. Questo risultato stabilisce la **connessione tra simmetrie e leggi di conservazione nella meccanica quantistica**.

Consideriamo ad esempio un **sistema isolato**, ossia non soggetto a campi esterni. Poiché tutte le posizioni di tale sistema in blocco sono equivalenti nello spazio, giacché lo spazio è omogeneo, si può affermare che l'Hamiltoniano del sistema non cambia in uno spostamento arbitrario del sistema. In altri termini l'Hamiltoniano commuta con l'operazione di traslazione

$$\boxed{[H, T(d\vec{x}')] = 0}. \quad (11.30)$$

Ma questo equivale a dire che **l'Hamiltoniano commuta con l'operatore impulso \vec{p}** del sistema, o ancora che **l'impulso \vec{p} del sistema è una quantità conservata**:

$$\boxed{\frac{d\vec{p}}{dt} = 0}. \quad (11.31)$$

Possiamo quindi affermare che **in meccanica quantistica, come in meccanica classica, la legge di conservazione dell'impulso di un sistema isolato è una diretta conseguenza dell'omogeneità dello spazio**.

Nel capitolo 14 mostreremo che, **come conseguenza dell'invarianza rispetto a rotazioni spaziali di un sistema isolato si conserva in meccanica quantistica, come in meccanica classica, il momento angolare del sistema**. La legge di conservazione del momento angolare è dunque una conseguenza dell'**isotropia dello spazio**, ossia del fatto che tutte le direzioni nello spazio sono equivalenti.

L'invarianza di un sistema isolato, o di un sistema soggetto a campi esterni non variabili nel tempo, rispetto a traslazioni temporali è conseguenza dell'omogeneità del tempo. La conservazione dell'energia è dunque una diretta conseguenza di tale simmetria.

Sin qui abbiamo discusso in particolare il caso delle **simmetrie continue**, ossia delle simmetrie associate a trasformazioni che possano essere ottenute applicando successivamente trasformazioni infinitesime. Esistono tuttavia trasformazioni che non godono di questa proprietà, e che sono associate a cosiddette **simmetrie discrete**. In questo caso non esiste alcun generatore hermitiano associato alla trasformazione e dunque potrebbe non esistere alcuna osservabile corrispondente ad una quantità conservata.

Per alcune simmetrie discrete, tuttavia, lo stesso operatore unitario U che opera la trasformazione è al tempo stesso un operatore hermitiano. Per l'eq. (11.26), allora, l'operatore U corrisponde ad una quantità osservabile conservata. Questo è il caso, ad esempio, della **trasformazione di inversione spaziale o parità**. Abbiamo già discusso come la parità sia infatti una quantità conservata per sistemi in cui il campo di forze esterne è descritto da un potenziale simmetrico rispetto ad inversione degli assi.

11.3 Teorema di Ehrenfest

Consideriamo l'operatore Hamiltoniano per una particella,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad . \quad (11.32)$$

Calcoliamo l'operatore velocità $\vec{v} \equiv d\vec{x}/dt$. Poichè l'operatore di posizione \vec{x} non dipende esplicitamente dal tempo, in virtù dell'eq. (11.5) si ha:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \vec{x}] \quad . \quad (11.33)$$

L'unico operatore tra i componenti di H che non commuta con l'operatore di posizione è \vec{p}^2 . Si ha allora

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{p_i^2}{2m}, x_i \right] = \frac{i}{2m\hbar} (p_i [p_i, x_i] + [p_i, x_i] p_i) = \frac{i}{2m\hbar} (-2i\hbar p_i) = \frac{p_i}{m}, \quad (11.34)$$

ossia

$$\vec{v} \equiv \frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m} \quad . \quad (11.35)$$

Calcoliamo ora l'operatore $d\vec{p}/dt$. Otteniamo facilmente il risultato cercato utilizzando per gli operatori la loro espressione nella rappresentazione delle coordinate:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{p}}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [H, \vec{p}] = \frac{i}{\hbar} [V(\vec{x}), \vec{p}] = \frac{i}{\hbar} [V(\vec{x}), -i\hbar \vec{\nabla}] = \\ &= V(\vec{x}) \vec{\nabla} - \vec{\nabla} V(\vec{x}) = V(\vec{x}) \vec{\nabla} - (\vec{\nabla} V(\vec{x})) - V(\vec{x}) \vec{\nabla}, \end{aligned} \quad (11.36)$$

ossia:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla} V(\vec{x}) \quad . \quad (11.37)$$

Le due equazioni (11.35) e (11.37) possono poi essere combinate insieme per ottenere:

$$\boxed{m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla} V(\vec{x})}, \quad (11.38)$$

che esprimono in forma operatoriale, e dunque valida in particolare per i valori medi delle osservabili, la legge di Newton. Questo risultato è noto come **teorema di Ehrenfest**.

11.4 Teorema del viriale in meccanica quantistica

Il teorema del viriale, in meccanica quantistica, afferma che **se il potenziale V è una funzione omogenea delle coordinate di grado k , ossia**

$$\boxed{\sum_i x_i \frac{\partial V}{\partial x_i} = k V}, \quad (11.39)$$

allora i valori medi dell'energia cinetica e dell'energia potenziale negli stati stazionari sono legati da

$$\boxed{\langle n | T | n \rangle = \frac{1}{2} k \langle n | V | n \rangle}. \quad (11.40)$$

Per dimostrare il teorema, consideriamo la seguente identità operatoriale:

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_i x_i p_i \right) = \sum_i \left(\frac{dx_i}{dt} p_i + x_i \frac{dp_i}{dt} \right) = \sum_i \left(\frac{p_i^2}{m} - x_i \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) = 2T - kV, \quad (11.41)$$

dove abbiamo utilizzato le eq. (11.35) e (11.37), che esprimono le derivate rispetto al tempo degli operatori posizione e impulso, e l'eq. (11.39).

Prendendo dell'eq. (11.41) il valore medio su un autostato $|n\rangle$ dell'Hamiltoniano, e considerando che per qualunque operatore A

$$\langle n | \frac{dA}{dt} | n \rangle = \frac{d}{dt} \langle n | A | n \rangle = 0, \quad (11.42)$$

si ottiene l'eq. (11.40) che volevamo dimostrare.

Due esempi importanti di applicazione del teorema del viriale sono **l'oscillatore armonico**, per il quale il potenziale è una funzione omogenea delle coordinate di grado $k = 2$, e il **potenziale coulombiano**, che è una funzione omogenea di grado $k = -1$.

11.5 Rappresentazioni di Schrödinger e di Heisenberg ed equazioni del moto di Heisenberg

Nel discutere la dinamica in meccanica quantistica, abbiamo considerato come i vettori di stato evolvono nel tempo secondo l'equazione di Schrödinger. Questo significa che abbiamo considerato la trasformazione di evoluzione temporale come una trasformazione applicata ai vettori di stato, che lascia invariati gli operatori. Questo approccio è noto come **rappresentazione di Schrödinger**.

In accordo con quanto discusso nella sezione 11.2, possiamo considerare la trasformazione di evoluzione temporale nell'approccio alternativo, e completamente equivalente, secondo cui la trasformazione è applicata agli operatori, mentre i vettori di stato restano invariati nel tempo. Questo approccio è noto come **rappresentazione di Heisenberg**.

Nella **rappresentazione di Schrödinger** dunque gli stati evolvono nel tempo e gli operatori restano invariati:

$$\boxed{\begin{cases} |\alpha, t_0\rangle_S \rightarrow |\alpha, t\rangle_S = U(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_S \\ A^{(S)} \rightarrow A^{(S)} \end{cases}}, \quad (11.43)$$

dove $U(t, t_0)$ è l'operatore di evoluzione temporale.

Nella **rappresentazione di Heisenberg**, viceversa, gli stati restano invariati e gli operatori evolvono nel tempo:

$$\boxed{\begin{cases} |\alpha\rangle_H \rightarrow |\alpha\rangle_H \\ A^{(H)}(t_0) \rightarrow A^{(H)}(t) = U^+(t, t_0) A^{(S)} U(t, t_0) \end{cases}}. \quad (11.44)$$

Per definizione i vettori di stato e gli operatori coincidono nelle rappresentazioni di Schrödinger e di Heisenberg al tempo t_0 :

$$\boxed{|\alpha\rangle_H = |\alpha, t_0\rangle_S \quad , \quad A^{(H)}(t_0) = A^{(S)}}. \quad (11.45)$$

Il valore di aspettazione di un generico operatore A su qualunque stato $|\alpha\rangle$ è ovviamente identico nelle due rappresentazioni:

$${}_S\langle\alpha, t|A^{(S)}|\alpha, t\rangle_S = {}_S\langle\alpha, t_0|U^+(t)A^{(S)}U(t)|\alpha, t_0\rangle_S = {}_H\langle\alpha|A^{(H)}(t)|\alpha\rangle_H, \quad (11.46)$$

dove si è posto per brevità di notazione, qui e nel seguito, $U(t) \equiv U(t, t_0)$.

Così come nella rappresentazione di Schrödinger l'evoluzione temporale degli stati è definita dall'equazione di Schrödinger, in modo analogo è possibile derivare nella rappresentazione di Heisenberg un'equazione fondamentale che definisce

l'evoluzione temporale degli operatori. Questa equazione può essere ricavata derivando rispetto al tempo l'operatore $A^{(H)}(t)$ nella rappresentazione di Heisenberg:

$$\frac{dA^{(H)}(t)}{dt} = \frac{d}{dt} [U^+(t) A^{(S)} U(t)] = \frac{\partial U^+(t)}{\partial t} A^{(S)} U(t) + U^+(t) A^{(S)} \frac{\partial U(t)}{\partial t}, \quad (11.47)$$

dove si è supposto che l'operatore $A^{(S)}$ non dipenda esplicitamente (ossia parametricamente) dal tempo. Utilizzando le equazioni di evoluzione temporale per l'operatore U e il suo hermitiano coniugato,

$$i\hbar \frac{\partial U(t)}{\partial t} = H U(t) \quad , \quad -i\hbar \frac{\partial U^+(t)}{\partial t} = U^+(t) H \quad , \quad (11.48)$$

ed utilizzando l'unitarietà dell'operatore U , si ottiene:

$$\begin{aligned} \frac{dA^{(H)}(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} U^+(t) H A^{(S)} U(t) - \frac{i}{\hbar} U^+(t) A^{(S)} H U(t) = \\ &= \frac{i}{\hbar} (U(t) H U^+(t)) (U(t) A^{(S)} U(t)) - \frac{i}{\hbar} (U^+(t) A^{(S)} U^+(t)) (U(t) H U(t)) = \\ &= \frac{i}{\hbar} H^{(H)} A^{(H)}(t) - \frac{i}{\hbar} A^{(H)}(t) H^{(H)} \end{aligned} \quad (11.49)$$

ossia

$$\boxed{\boxed{\frac{dA^{(H)}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H^{(H)}, A^{(H)}(t)]}} \quad . \quad (11.50)$$

Questa equazione è nota come **equazione del moto di Heisenberg**.

Osserviamo come l'equazione del moto di Heisenberg sia formalmente analoga all'eq. (11.5) ma il suo significato sia alquanto differente: l'eq. (11.5) rappresenta la definizione dell'operatore dA/dt corrispondente alla grandezza fisica dA/dt , mentre il primo membro dell'equazione del moto di Heisenberg contiene la derivata rispetto al tempo dell'operatore della grandezza stessa A .

Può essere anche utile infine osservare che, se l'operatore Hamiltoniano non dipende esplicitamente dal tempo, allora commuta con l'operatore di evoluzione temporale e pertanto coincide nelle rappresentazioni di Schrödinger e di Heisenberg: $U^+ H U = H$.

Capitolo 12 | Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo

La soluzione esatta dell'equazione di Schrödinger può essere trovata solamente per un numero relativamente piccolo di casi molto semplici.

Tuttavia, nelle condizioni del problema figurano spesso **grandezze piccole** trascurando le quali il problema si semplifica in modo tale da rendere possibile una soluzione esatta. Allora il primo passo nella risoluzione del problema fisico posto consiste nel trovare la soluzione esatta del problema semplificato e il secondo nel calcolare, in modo approssimato, le correzioni dovute ai termini piccoli trascurati nel problema semplificato.

Il metodo generale che permette di calcolare queste correzioni prende il nome di **teoria delle perturbazioni**.

Supponiamo che l'Hamiltoniano del sistema fisico considerato abbia la forma

$$\boxed{H = H_0 + V}, \quad (12.1)$$

dove V è una piccola correzione (**perturbazione**) dell'operatore “**imperturbato**” H_0 . Le condizioni necessarie perché l'operatore V possa essere considerato come “piccolo” rispetto all'operatore H_0 saranno dedotte più avanti.

La risoluzione del problema mediante la teoria delle perturbazioni dipende in maniera essenziale dalla degenerazione o meno dei livelli di energia del sistema imperturbato, descritto dall'Hamiltoniano H_0 . I due casi devono dunque essere trattati separatamente.

12.1 Caso non degenere

Supponiamo che siano noti gli autostati $|n^{(0)}\rangle$ e gli autovalori $E_n^{(0)}$ dell'operatore imperturbato H_0 , cioè che siano note le soluzioni esatte dell'equazione

$$\boxed{H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle}. \quad (12.2)$$

Assumiamo qui che **gli autovalori** $E_n^{(0)}$ appartengano allo **spettro discreto** e siano **non degeneri**. Per semplicità assumeremo dapprima che esista solamente uno spettro discreto di livelli energetici.

Il problema posto consiste nel trovare le soluzioni approssimate dell'equazione:

$$\boxed{H |n\rangle = (H_0 + V) |n\rangle = E_n |n\rangle}, \quad (12.3)$$

cioè le espressioni approssimate degli autostati $|n\rangle$ e degli autovalori E_n dell'Hamiltoniano completo H .

È comodo condurre i calcoli sin dall'inizio in forma matriciale. A tale scopo sviluppiamo gli autostati cercati $|n\rangle$ in serie di autostati $|m^{(0)}\rangle$:

$$\boxed{|n\rangle = \sum_m c_m |m^{(0)}\rangle}. \quad (12.4)$$

Sostituendo questo sviluppo nella (12.3) si ottiene:

$$\sum_m c_m (H_0 + V) |m^{(0)}\rangle = \sum_m c_m (E_m^{(0)} + V) |m^{(0)}\rangle = E_n \sum_m c_m |m^{(0)}\rangle, \quad (12.5)$$

ossia

$$\sum_m c_m (E_n - E_m^{(0)}) |m^{(0)}\rangle = \sum_m c_m V |m^{(0)}\rangle. \quad (12.6)$$

Moltiplicando quindi entrambi i membri di questa uguaglianza per il bra $\langle k^{(0)}|$ si trova:

$$(E_n - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m \langle k^{(0)}|V|m^{(0)}\rangle c_m. \quad (12.7)$$

Introduciamo, per comodità di notazione, gli elementi di matrice V_{km} della perturbazione V nella base degli autostati imperturbati:

$$\boxed{V_{km} \equiv \langle k^{(0)}|V|m^{(0)}\rangle}. \quad (12.8)$$

L'eq. (12.7) si scrive allora nella forma:

$$\boxed{(E_n - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m}. \quad (12.9)$$

Osserviamo che questa equazione, le cui incognite sono rappresentate dai coefficienti c_m dello sviluppo (12.4) e dagli autovalori E_n dell'Hamiltoniano H , è un'**equazione esatta**.

Cerchiamo ora i valori dei coefficienti c_k e dell'energia E_n sotto forma di serie:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots \\ c_k &= c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (12.10)$$

dove le quantità $E_n^{(1)}$, $c_k^{(1)}$ sono dello stesso ordine della perturbazione V , le quantità $E_n^{(2)}$, $c_k^{(2)}$ sono del secondo ordine, ecc. Allora, evidentemente, $E_n^{(0)}$ coincide con l'autovalore di energia imperturbato.

Per determinare le quantità $E_n^{(\ell)}$ e $c_k^{(\ell)}$ risolviamo l'eq. (12.9) ordine per ordine. **All'ordine zero**, si ha:

$$\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right) c_k^{(0)} = 0, \quad \text{[Ordine 0]} \quad (12.11)$$

che, considerata l'ipotesi di non degenerazione del livello $E_n^{(0)}$, fornisce evidentemente

$$c_k^{(0)} = 0, \quad \text{per } k \neq n. \quad (12.12)$$

Quanto al coefficiente c_n all'ordine zero, questo è determinato dalla condizione di normalizzazione

$$\langle n|n \rangle = \sum_m |c_m|^2 = 1. \quad (12.13)$$

Scegliendo c_n reale e positivo, questa condizione all'ordine zero fornisce

$$c_n^{(0)} = 1. \quad (12.14)$$

Consideriamo ora l'eq. (12.9) **al primo ordine** dello sviluppo perturbativo:

$$E_n^{(1)} c_k^{(0)} + \left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right) c_k^{(1)} = \sum_m V_{km} c_m^{(0)} = V_{kn}, \quad \text{[Ordine 1]} \quad (12.15)$$

dove, a secondo membro, si sono sostituiti i risultati (12.12) e (12.14) per i coefficienti di ordine zero. L'eq. (12.15) con $k = n$ dà:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \langle n^{(0)}|V|n^{(0)} \rangle. \quad (12.16)$$

Pertanto, **in prima approssimazione la correzione all'autovalore $E_n^{(0)}$ è uguale al valore medio della perturbazione nello stato $|n^{(0)}\rangle$.**

L'eq. (12.15) con $k \neq n$ fornisce:

$$c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \frac{\langle k^{(0)}|V|n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad (k \neq n). \quad (12.17)$$

Quanto al coefficiente $c_n^{(1)}$, che ricordiamo per convenzione abbiamo scelto essere reale, questo è fissato nuovamente dalla condizione di normalizzazione, che a meno di termini del secondo ordine fornisce:

$$1 = \sum_m |c_m|^2 = (1 + c_n^{(1)})^2 + \sum_{m \neq n} |c_m^{(1)}|^2 \simeq 1 + 2c_n^{(1)}, \quad (12.18)$$

ossia

$$\boxed{\boxed{c_n^{(1)} = 0}}. \quad (12.19)$$

Le eq. (12.17) e (12.19) forniscono la **correzione in prima approssimazione agli autostati dell'Hamiltoniano**.

Dalle eq. (12.16) e (12.17) possiamo dedurre anche quali sono le **condizioni di applicabilità del metodo considerato**. Precisamente, dovendo risultare i livelli di energia al primo ordine molto minori dei livelli di ordine zero e i coefficienti al primo ordine molto minori dei coefficienti di ordine zero ($c_n^{(0)} = 1$) devono valere le disuguaglianze

$$\boxed{\boxed{|V_{nn}| \ll |E_n^{(0)}|}}, \quad \boxed{\boxed{|V_{kn}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|}}, \quad (12.20)$$

cioè **gli elementi di matrice della perturbazione devono essere piccoli rispetto ai corrispondenti livelli energetici imperturbati e anche rispetto alle differenze di questi livelli**.

Determiniamo ancora la correzione in seconda approssimazione all'autovalore $E_n^{(0)}$. A tale scopo consideriamo l'eq. (12.9) per i termini del **secondo ordine**:

$$E_n^{(2)} c_k^{(0)} + E_n^{(1)} c_k^{(1)} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) c_k^{(2)} = \sum_m V_{km} c_m^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{km} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (12.21)$$

[Ordine 2]

dove abbiamo sostituito a secondo membro le espressioni (12.17) e (12.19) per i coefficienti del primo ordine. Scegliendo nell'eq. (12.21) $k = n$ si ottiene:

$$\boxed{\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}}}. \quad (12.22)$$

Possiamo allora riassumere i risultati ottenuti in eq. (12.16), (12.17), (12.19) e

(12.22) mediante le formule

$$E_n = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots \quad (12.23)$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle + \dots \quad (12.24)$$

che esprimono gli **autovalori ed autovettori dell'Hamiltoniano completo H rispettivamente al secondo ed al primo ordine nella perturbazione**. Le approssimazioni successive si possono calcolare in modo analogo.

I risultati ottenuti si generalizzano direttamente al **caso in cui l'operatore H_0 ha anche uno spettro continuo (si tratta però sempre di una perturbazione dello spettro discreto)**. A tale scopo occorre solamente aggiungere alle somme sullo spettro discreto gli integrali corrispondenti allo spettro continuo. Così, ad esempio, l'eq. (12.22) si scrive:

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \int d\nu \frac{|V_{\nu n}|^2}{E_n^{(0)} - E_\nu^{(0)}} \quad (12.25)$$

12.2 Caso degenere

Vediamo ora il caso in cui l'operatore imperturbato H_0 ha **autovalori degeneri**. Indichiamo con

$$|n^{(0)}\rangle, |n'^{(0)}\rangle, |n''^{(0)}\rangle, \dots \quad (12.26)$$

gli autostati relativi ad uno stesso autovalore $E_n^{(0)}$. Come è noto, la scelta di questi autostati non è univoca: in luogo di essi si possono scegliere s combinazioni lineari indipendenti di questi stati, dove s è l'ordine di degenerazione del livello $E_n^{(0)}$.

Il metodo perturbativo sviluppato in precedenza non è più valido quando gli autostati dell'energia sono degeneri. Nello sviluppo di questo metodo abbiamo infatti assunto l'esistenza di un unico e ben definito vettore di stato imperturbato $|n^{(0)}\rangle$ a cui tende il vettore di stato perturbato quando la perturbazione V tende a zero. In presenza di degenerazione, tuttavia, non è ovvio a priori a quale vettore di stato, combinazione lineare degli $|n'^{(0)}\rangle$, tenda il ket perturbato in questo limite.

Per determinare il vettore di stato imperturbato cui tende il ket perturbato nel limite in cui la perturbazione tende a zero, e simultaneamente le correzioni al primo

ordine dell'energia, consideriamo nuovamente l'eq. (12.9):

$$\boxed{(E_n - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m} \quad (12.27)$$

Studiamo in primo luogo l'equazione all'**ordine zero**, già ottenuta in eq. (12.11):

$$(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) c_k^{(0)} = 0. \quad \text{[Ordine 0]} \quad (12.28)$$

In presenza di degenerazione, questa fornisce, evidentemente,

$$\boxed{c_k^{(0)} = 0} \quad \text{per } k \neq n, n', \dots \quad (12.29)$$

Si ha infatti $E_n^{(0)} = E_{n'}^{(0)} = \dots$ per tutti i livelli degeneri. Dunque, all'ordine 0, risultano in generale diversi da zero tutti i coefficienti $c_n^{(0)}, c_{n'}^{(0)}, \dots$ degli autostati degeneri di H_0 .

Consideriamo quindi nell'eq. (12.27) i termini del primo ordine, ossia l'eq. (12.15):

$$E_n^{(1)} c_k^{(0)} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) c_k^{(1)} = \sum_m V_{km} c_m^{(0)} = V_{kn}, \quad \text{[Ordine 1]} \quad (12.30)$$

Ponendo in questa equazione $k = n$, e tenendo conto dell'eq. (12.29), si ottiene:

$$E_n^{(1)} c_n^{(0)} = \sum_{n'} V_{nn'} c_{n'}^{(0)}, \quad (12.31)$$

ossia

$$\boxed{\sum_{n'} (V_{nn'} - E_n^{(1)} \delta_{nn'}) c_{n'}^{(0)} = 0}, \quad (12.32)$$

dove n, n' assumono tutti i valori che numerano gli stati relativi all'operatore imperturbato $E_n^{(0)}$.

Il sistema (12.32) rappresenta un sistema di equazioni lineari omogenee che ammette, rispetto alle grandezze $c_{n'}^{(0)}$, soluzioni non nulle a condizione che il determinante formato con i coefficienti delle incognite si annulli. Si ottiene quindi l'equazione

$$\boxed{\det(V - E_n^{(1)} I) = 0}, \quad (12.33)$$

detta **equazione secolare**, dove V indica dunque la matrice rappresentativa della perturbazione nel sottospazio degenere.

L'**equazione secolare** è un'equazione di grado s in $E_n^{(1)}$ ed **ammette, in generale, s radici reali distinte, che rappresentano gli autovalori della matrice**

V nel sottospazio degenere. Sono precisamente questi autovalori che costituiscono le **correzioni agli autovalori esatti E_n in prima approssimazione.**

Sostituendo successivamente le radici dell'equazione secolare nel sistema (12.32) e risolvendo quest'ultimo, troviamo i coefficienti $c_n^{(0)}$ ed otteniamo così **gli autostati nell'approssimazione zero.** Questi autostati rappresentano le particolari **combinazioni lineari di autostati degeneri $|n'^{(0)}\rangle$ di H_0 cui si riducono gli autostati perturbati di H nel limite in cui la perturbazione V tende a zero.**

Per effetto della perturbazione, il livello energetico inizialmente degenere cessa di essere tale; le radici dell'equazione secolare sono infatti generalmente distinte. Si dice che **la perturbazione "rimuove" la degenerazione.** Questa rimozione della degenerazione può essere completa o parziale.

Per il calcolo delle **correzioni di ordine superiore** agli autovalori ed agli autostati dell'Hamiltoniano H si procede in modo analogo al caso della teoria perturbativa non degenere. Si ottengono allora per queste correzioni, le stesse espressioni ottenute nel caso non degenere, con la sola differenza che, nella sommatoria, vengono esclusi tutti gli stati dell'Hamiltoniano imperturbato che appartengono al sottospazio degenere:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \sum_{k \neq n, n', \dots} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots \quad (12.34)$$

$$|n\rangle = \sum_{n'} c_{n'}^{(0)} |n'^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq n, n', \dots} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle + \dots \quad (12.35)$$

Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo

Consideriamo qui le **perturbazioni dipendenti esplicitamente dal tempo**, in presenza delle quali, cioè, l'Hamiltoniano completo ha la forma

$$H = H_0 + V(t) \quad , \quad (13.1)$$

dove H_0 non contiene il tempo esplicitamente. Si assume inoltre risolta l'equazione di Schrödinger per $V(t) = 0$, nel senso che gli autostati dell'Hamiltoniano H_0 ed i suoi autovalori, definiti dall'equazione

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad , \quad (13.2)$$

sono noti completamente.

Notiamo che, essendo l'Hamiltoniano H dipendente dal tempo, non si può più parlare di correzioni agli autovalori e agli autostati dell'energia. **L'energia non si conserva** e gli stati stazionari non esistono. Il problema consiste qui nel calcolo approssimato degli stati del sistema nella loro evoluzione nel tempo.

Scriviamo lo stato del sistema fisico al tempo $t = 0$ nella base degli stati stazionari del sistema imperturbato, ossia come combinazione lineare di autostati di H_0 :

$$|\alpha, t = 0\rangle = \sum_k c_k(0) |k^{(0)}\rangle \quad . \quad (13.3)$$

Lo stato del sistema al tempo $t > 0$ potrà allora essere espresso come

$$|\alpha, t\rangle = \sum_k c_k(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)} t} |k^{(0)}\rangle \quad , \quad (13.4)$$

dove la dipendenza temporale degli stati stazionari $|k^{(0)}\rangle$ dovuta all'Hamiltoniano

imperturbato H_0 è stata esplicitamente separata dai coefficienti $c_k(t)$. In questo modo, l'evoluzione temporale dei coefficienti è dovuta esplicitamente alla presenza della perturbazione $V(t)$. Si dice che i coefficienti $c_k(t)$ definiscono lo sviluppo del vettore di stato $|\alpha, t\rangle$ nella **rappresentazione di interazione**.

I coefficienti $c_k(t)$ soddisfano un insieme di equazioni che può essere ottenuto applicando al vettore di stato $|\alpha, t\rangle$ l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo,

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle = H |\alpha, t\rangle} . \quad (13.5)$$

Si ottiene:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle &= \sum_k \left(i\hbar \frac{dc_k}{dt} + E_k^{(0)} c_k \right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)} t} |k^{(0)}\rangle = \\ &= H |\alpha, t\rangle = (H_0 + V) \sum_k c_k e^{-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)} t} |k^{(0)}\rangle = \\ &= \sum_k \left(E_k^{(0)} + V \right) c_k e^{-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)} t} |k^{(0)}\rangle, \end{aligned} \quad (13.6)$$

da cui segue

$$\sum_k i\hbar \frac{dc_k}{dt} e^{-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)} t} |k^{(0)}\rangle = \sum_k V c_k e^{-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)} t} |k^{(0)}\rangle. \quad (13.7)$$

Moltiplicando entrambi i membri di questa equazione per il bra $\langle n^{(0)}|$ otteniamo allora il **sistema di equazioni esatte**

$$\boxed{i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = \sum_k V_{nk}(t) c_k(t) e^{i\omega_{nk}t}} , \quad (13.8)$$

dove si è posto

$$\boxed{\omega_{nk} = \frac{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}} \quad (13.9)$$

e $V_{nk}(t)$ sono gli elementi di matrice, dipendenti esplicitamente dal tempo,

$$\boxed{V_{nk}(t) = \langle n^{(0)}|V(t)|k^{(0)}\rangle} . \quad (13.10)$$

Ci proponiamo ora di risolvere le eq. (13.8) utilizzando la **teoria delle perturbazioni**. A tale scopo sviluppiamo i coefficienti $c_n(t)$ nella serie

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots \quad (13.11)$$

dove il generico $c_n^{(s)}(t)$ è di ordine s nella perturbazione.

Sostituendo il precedente sviluppo nell'eq. (13.8) e considerando i termini di **ordine zero** si ottiene

$$i\hbar \frac{dc_n^{(0)}(t)}{dt} = 0, \quad (13.12)$$

da cui

$$c_n^{(0)}(t) = \text{costante} = c_n(0). \quad (13.13)$$

Questo risultato è consistente con l'aver definito i coefficienti $c_n(t)$ in modo tale che la loro dipendenza esplicita dal tempo sia determinata esplicitamente dalla presenza della perturbazione $V(t)$.

Considerando nell'eq. (13.8) i termini del **primo ordine** in V si ottiene poi:

$$i\hbar \frac{dc_n^{(1)}(t)}{dt} = \sum_k V_{nk}(t) c_k(0) e^{i\omega_{nk}t}, \quad (13.14)$$

avendo sostituito a secondo membro $c_k^{(0)}(t)$ con $c_k(0)$, in accordo con l'eq. (13.13). Questa equazione può essere esplicitamente integrata con la condizione al contorno $c_n^{(1)}(0) = 0$, che segue direttamente dalla (13.13): $c_n(0) = c_n^{(0)}(0)$. Si ottiene in tal modo:

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k c_k(0) \int_0^t dt' V_{nk}(t') e^{i\omega_{nk}t'}, \quad (13.15)$$

che determina lo stato del sistema al primo ordine dello sviluppo perturbativo. In molti casi pratici questa approssimazione risulta sufficiente e non ci soffermeremo qui a derivare i termini di ordine più elevato. Si veda l'Appendice I di questo capitolo per la determinazione dei coefficienti $c_n^{(2)}(t)$ al secondo ordine della perturbazione.

Nel seguito considereremo il caso in cui all'istante $t = 0$ il sistema si trova in un autostato dell'Hamiltoniana imperturbata H_0 , ossia

$$|\alpha, t = 0\rangle = |i^{(0)}\rangle \quad \text{e dunque} \quad \begin{cases} c_i(0) = 1, \\ c_k(0) = 0, \text{ per } k \neq i \end{cases}. \quad (13.16)$$

In questo caso l'eq. (13.15) per i coefficienti $c_n^{(1)}(t)$ si semplifica nella forma

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_{ni} e^{i\omega_{ni}t'} \quad (13.17)$$

Il modulo quadro del coefficiente $c_n(t)$ fornisce la probabilità che il sistema abbia effettuato, dopo un tempo t , una transizione nell'autostato $|n^{(0)}\rangle$ di H_0 :

$$P_{i \rightarrow n}(t) = |\langle n^{(0)} | \alpha, t \rangle|^2 = |c_n(t)|^2 = |c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots|^2 \quad (13.18)$$

per $n \neq i$. Al primo ordine $P_{i \rightarrow n}(t) \simeq |c_n^{(1)}(t)|^2$ e l'eq. (13.17) fornisce semplicemente

$$P_{i \rightarrow n}(t) \simeq |c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' V_{ni}(t') e^{i\omega_{ni}t'} \right|^2 \quad (13.19)$$

13.1 Transizione per effetto di una perturbazione costante e relazione di indeterminazione tempo-energia

Il metodo sviluppato è ancora valido quando **l'energia di perturbazione V non dipende esplicitamente dal tempo t** . In questo caso potremmo, se lo volessimo, trattare il sistema mediante la teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo e trovare i suoi stati stazionari. Tuttavia se ciò che vogliamo calcolare si riferisce esplicitamente al tempo, ad esempio dobbiamo calcolare la probabilità che il sistema si trovi in un certo stato ad un istante determinato, quando sia noto che esso si trovava in uno stato dato ad un altro istante iniziale, allora il metodo della teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo qui considerato risulta più conveniente.

Assumiamo dunque

$$V(t) = V \quad (\text{indipendente da } t) \quad (13.20)$$

dove l'operatore V è in generale funzione di altri operatori, quali posizione, spin e impulso.

Assumendo anche, come considerato in precedenza, che al tempo $t = 0$ il sistema si trovi nello stato stazionario $|i^{(0)}\rangle$ dell'Hamiltoniano imperturbato H_0 , troviamo dall'eq. (13.17) l'espressione al primo ordine per il coefficiente $c_n(t)$:

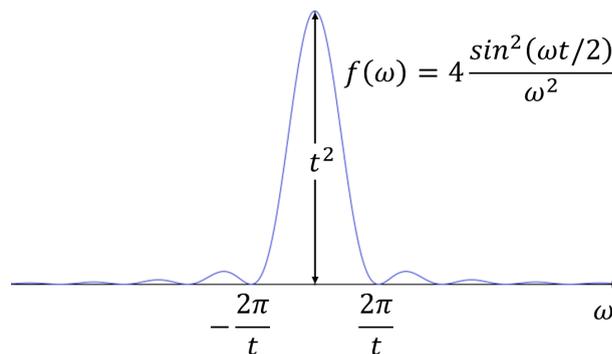
$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_{ni} e^{i\omega_{ni}t'} = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \frac{e^{i\omega_{ni}t} - 1}{i\omega_{ni}} = -\frac{2iV_{ni}}{\hbar\omega_{ni}} e^{i\omega_{ni}t/2} \text{sen}(\omega_{ni}t/2) \quad (13.21)$$

Ricordando che $\omega_{ni} = (E_n^{(0)} - E_i^{(0)})/\hbar$, la **probabilità di transizione** $P_{i \rightarrow n}(t)$, determinata **al primo ordine** dal modulo quadro $|c_n^{(1)}(t)|^2$, risulta allora:

$$P_{i \rightarrow n}(t) = \frac{4|V_{ni}|^2}{(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})^2} \text{sen}^2 \left(\frac{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}{2\hbar} t \right). \quad (13.22)$$

Come già osservato, allo stesso risultato si può giungere utilizzando la teoria delle perturbazioni indipendente dal tempo, evolvendo lo stato iniziale $|\alpha, t=0\rangle$ allo stato $|\alpha, t\rangle$. Si veda in proposito l'Appendice II di questo capitolo.

Vediamo, dall'eq. (13.22), che la probabilità di transizione dallo stato $|i^{(0)}\rangle$ allo stato $|n^{(0)}\rangle$ oltre ad essere proporzionale all'elemento di matrice modulo quadro $|V_{ni}|^2$, dipende dalla differenza delle energie imperturbate $(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})$. Per tempi sufficientemente grandi la funzione ha la forma



ossia la probabilità di transizione differisce apprezzabilmente da zero solo per quegli stati finali che soddisfano

$$|\omega| = \frac{|E_n^{(0)} - E_i^{(0)}|}{\hbar} \lesssim \frac{2\pi}{t}. \quad (13.23)$$

In altri termini, se indichiamo con Δt l'intervallo di tempo durante il quale la perturbazione ha agito sul sistema e con $\Delta E = |E_n^{(0)} - E_i^{(0)}|$ la differenza delle energie imperturbate relative agli stati finale ed iniziale, si può avere con probabilità apprezzabile una transizione solo se

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar. \quad (13.24)$$

Questa relazione è anche detta **relazione di indeterminazione tempo-energia**.

L'espressione (13.22) per la probabilità di transizione $P_{i \rightarrow n}(t)$ e la condizione (13.24) che ne segue esprimono il seguente risultato: se $E_n^{(0)}$ differisce apprezzabilmente da $E_i^{(0)}$, la probabilità di transizione $P_{i \rightarrow n}(t)$ è piccola e tale rimane per tutti i valori di t . Questo risultato è richiesto dalla **legge di conservazione dell'energia**. L'energia totale E è costante, perché l'Hamiltoniano H non dipende esplicitamente

dal tempo. Pertanto l'energia propria $E^{(0)}$, cioè l'energia che si ottiene trascurando la parte V dovuta alla perturbazione, essendo approssimativamente uguale ad E , deve essere approssimativamente costante. Ciò significa che se $E^{(0)}$ ha inizialmente il valore $E_i^{(0)}$, in qualsiasi istante successivo ci deve essere solo una probabilità piccola che esso abbia un valore considerevolmente diverso da $E_i^{(0)}$.

La relazione (13.24) ci dice anche che un'interazione, sia pure arbitrariamente debole, che agisce per un tempo Δt , può variare l'energia propria del sistema di una quantità $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$.

Questo risultato, puramente quantistico, ha un significato fisico profondo. Esso indica che **nella meccanica quantistica la legge di conservazione dell'energia può essere verificata mediante una misura soltanto a meno di una grandezza dell'ordine di $\hbar/\Delta t$, dove Δt è la durata del processo di misura.** Infatti, una sia pur debole interazione tra lo strumento di misura ed il sistema in esame, che agisce per un tempo Δt , può sempre variare l'energia del sistema di una quantità $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$.

È utile sottolineare che il **significato della relazione di indeterminazione tempo-energia è essenzialmente diverso da quello della relazione di indeterminazione $\Delta p \cdot \Delta x \sim \hbar$** , per la posizione e la quantità di moto. In quest'ultima Δp e Δx sono le indeterminazioni nei valori della quantità di moto e della posizione in uno stesso istante; essa mostra che queste due grandezze non possono avere contemporaneamente valori esattamente determinati. L'energia $E^{(0)}$, invece, può assumere valori in ogni istante determinati con la precisione voluta. La grandezza $\Delta E = E_n^{(0)} - E_i^{(0)}$ è la differenza di due valori esattamente determinati dell'energia $E^{(0)}$ in due stati, e non l'indeterminazione nei valori dell'energia in un istante determinato.

È utile mostrare che per **grandi tempi t la probabilità di transizione $P_{i \rightarrow n}(t)$** , espressa dall'eq. (13.22), **può essere considerata proporzionale a t .** A questo scopo osserviamo che vale la formula seguente:

$$\boxed{\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\text{sen}^2(\alpha t)}{\pi \alpha^2 t} = \delta(\alpha)} \quad . \quad (13.25)$$

Infatti, per $\alpha \neq 0$ questo limite è nullo, mentre per $\alpha = 0$ si ha $\text{sen}^2(\alpha t)/\alpha^2 t = t$, cosicché il limite è infinito. Integrando poi in $d\alpha$ tra $-\infty$ e $+\infty$ si ottiene (sostituendo $\alpha t = \xi$)

$$\frac{1}{\pi t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha \frac{\text{sen}^2(\alpha t)}{\alpha^2} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\text{sen}^2 \xi}{\xi^2} = 1. \quad (13.26)$$

Si veda l'Appendice III di questo capitolo per il calcolo dell'integrale. In tal modo la funzione a primo membro della (13.25) soddisfa effettivamente tutte le condizioni che definiscono una funzione δ . Il risultato espresso nell'eq. (13.25) può essere anche visualizzato dal grafico della funzione $f(\omega)$ presentato in precedenza. Al crescere del tempo t l'altezza del picco centrale della funzione cresce proporzionalmente a t^2 e la sua larghezza decresce proporzionalmente ad $1/t$. L'integrale della funzione, ossia

l'area sottesa dalla curva è proporzionale a $t^2 \cdot 1/t = t$, e dunque la funzione $f(\omega)/t$ ha, per grandi t , area costante, come richiesto dalla funzione δ .

Conformemente a quanto detto, troviamo dall'eq. (13.22) che **per grandi tempi**

$$P_{i \rightarrow n}(t) \simeq \frac{1}{\hbar^2} |V_{ni}|^2 \pi t \delta \left(\frac{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}{2\hbar} \right), \quad (13.27)$$

che, utilizzando¹

$$\delta(ax) = \frac{1}{a} \delta(x), \quad (13.29)$$

può essere anche riscritta nella forma

$$P_{i \rightarrow n}(t) \simeq \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 t \delta(E_n^{(0)} - E_i^{(0)}), \quad (13.30)$$

Questa equazione mostra che, come anticipato, la probabilità di transizione cresce linearmente con il tempo t .

È consuetudine considerare la **probabilità di transizione per unità di tempo**, definita come

$$W_{i \rightarrow n}(t) = \frac{d}{dt} P_{i \rightarrow n}(t), \quad (13.31)$$

che è dunque costante per grandi t . Dall'eq. (13.30) otteniamo allora:

$$W_{i \rightarrow n}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \delta(E_n^{(0)} - E_i^{(0)}). \quad (13.32)$$

Questo risultato, di grande importanza pratica, è chiamato **regola d'oro di Fermi** (sebbene la teoria perturbativa dipendente dal tempo sia stata di fatto sviluppata da Dirac).

L'eq. (13.32) ha particolare rilevanza per le transizioni nello spettro continuo che, praticamente, sono sempre degeneri. In questo caso, la probabilità di transizione totale per unità di tempo si ottiene integrando l'eq. (13.32) su tutti i possibili stati finali con energia $E_n^{(0)} = E_i^{(0)}$,

$$\sum_n W_{i \rightarrow n}(t) = \int dE_n^{(0)} \rho(E_n^{(0)}) W_{i \rightarrow n}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE_n^{(0)} \rho(E_n^{(0)}) |V_{ni}|^2 \delta(E_n^{(0)} - E_i^{(0)}) \quad (13.33)$$

¹L'identità (13.29) si dimostra integrando la funzione $\delta(ax)$ con una funzione generica $f(x)$. Effettuando il cambio di variabile $y = ax$, si ha infatti:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(ax) f(x) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \delta(y) f(y/a) = \frac{1}{a} f(0) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) f(x), \quad (13.28)$$

da cui, per l'arbitrarietà della funzione $f(x)$, segue la (13.29).

dove $\rho(E)$ rappresenta la cosiddetta **densità degli stati**, ossia il numero di stati nell'intervallo di energia $(E, E + dE)$.

13.2 Transizioni per effetto di una perturbazione periodica

Consideriamo ora le transizioni indotte da una **perturbazione periodica**, della forma cioè

$$\boxed{V(t) = F e^{-i\omega t} + F^+ e^{i\omega t}}, \quad (13.34)$$

dove F è un operatore non dipendente dal tempo (funzione in generale di altri operatori, quali posizione, spin e impulso). Osserviamo che $V(t)$ è un operatore hermitiano, come deve essere.

Assumendo ancora che al tempo $t = 0$ il sistema si trovi nell'autostato $|i^{(0)}\rangle$ dell'Hamiltoniano imperturbato H_0 (per cui $c_k(0) = \delta_{ik}$) e sostituendo il potenziale (13.34) nella (13.17), si ricava:

$$\begin{aligned} c_n^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_{ni}(t') e^{i\omega_{ni}t'} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[F_{ni} e^{i(\omega_{ni}-\omega)t'} + F_{ni}^+ e^{i(\omega_{ni}+\omega)t'} \right] = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left[F_{ni} \frac{e^{i(\omega_{ni}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{ni} - \omega)} + F_{ni}^+ \frac{e^{i(\omega_{ni}+\omega)t} - 1}{i(\omega_{ni} + \omega)} \right], \end{aligned} \quad (13.35)$$

ossia

$$\boxed{c_n^{(1)}(t) = -\frac{2i}{\hbar} \left[F_{ni} e^{i\frac{(\omega_{ni}-\omega)t}{2}} \frac{\text{sen} \left(\frac{(\omega_{ni}-\omega)t}{2} \right)}{(\omega_{ni} - \omega)} + F_{ni}^+ e^{i\frac{(\omega_{ni}+\omega)t}{2}} \frac{\text{sen} \left(\frac{(\omega_{ni}+\omega)t}{2} \right)}{(\omega_{ni} + \omega)} \right]}. \quad (13.36)$$

Dai risultati del paragrafo precedente è evidente che, nel calcolo delle probabilità di transizione $P_{i \rightarrow n}(t) \simeq |c_n^{(1)}(t)|^2$, il primo termine della (13.36) fornisce, per tempi grandi, un contributo significativo solo alle transizioni verso quegli stati per i quali la differenza $\omega_{ni} - \omega$ sia piccola, aventi cioè energia $E_n^{(0)} \simeq E_i^{(0)} + \hbar\omega$. Analogamente, il secondo termine della (13.36) fornisce un contributo significativo solo alle transizioni per le quali la somma $\omega_{ni} + \omega$ è piccola, ossia verso quegli stati con energia $E_n^{(0)} \simeq E_i^{(0)} - \hbar\omega$. Infine il termine di “doppio prodotto” nel calcolo di $|c_n^{(1)}(t)|^2$ fornisce un contributo che è sempre trascurabile nel limite di tempi grandi, giacché le due condizioni $\omega_{ni} - \omega \simeq 0$ e $\omega_{ni} + \omega \simeq 0$ non sono mai simultaneamente verificate.

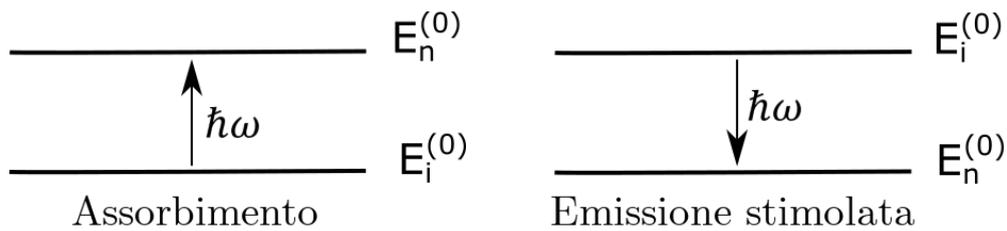
Dai risultati del paragrafo precedente possiamo dedurre direttamente l'espressione delle **probabilità di transizione per unità di tempo** valida nel limite di

grandi t :

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[|F_{ni}|^2 \delta(E_n^{(0)} - E_i^{(0)} - \hbar\omega) + |F_{ni}^+|^2 \delta(E_n^{(0)} - E_i^{(0)} + \hbar\omega) \right], \quad (13.37)$$

che esprime la **regola d'oro di Fermi** nel caso di transizioni per effetto di una perturbazione periodica.

Il significato fisico dei due termini nell'eq. (13.37) è evidente. Il primo termine corrisponde alle transizioni verso quegli stati, tipicamente nello spettro del continuo, la cui energia $E_n^{(0)}$ è accresciuta rispetto all'energia dello stato iniziale di una quantità $\hbar\omega$. Questo termine descrive dunque **l'assorbimento da parte del sistema di una quantità di energia $\hbar\omega$ dal potenziale periodico V** . Il secondo termine della (13.37) corrisponde invece alle transizioni verso quegli stati la cui energia $E_n^{(0)}$ è minore di una quantità $\hbar\omega$ rispetto all'energia dello stato iniziale $E_i^{(0)}$. Questo termine descrive il cosiddetto processo di **emissione stimolata, in cui il sistema cede una quantità $\hbar\omega$ della sua energia al campo esterno V** .



Così una perturbazione dipendente dal tempo può essere vista come una inesauribile sorgente o pozzo di energia.

Appendice I: Coefficienti $c_n(t)$ al secondo ordine

Determiniamo l'espressione per i coefficienti $c_n(t)$ al secondo ordine della teoria delle perturbazioni.

L'eq. (13.8) comporta:

$$i\hbar \frac{dc_n^{(2)}(t)}{dt} = \sum_k V_{nk}(t) c_k^{(1)}(t) e^{i\omega_{nk}t}, \quad (13.38)$$

che può essere direttamente integrata, con la condizione iniziale $c_n^{(2)}(0) = 0$, per dare:

$$c_n^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k \int_0^t dt' V_{nk}(t') c_k^{(1)}(t') e^{i\omega_{nk}t'}. \quad (13.39)$$

Sostituendo in questa espressione il risultato (13.15) per i coefficienti al primo ordine si ottiene dunque

$$c_n^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{k,k'} c_{k'}^{(1)}(0) \int_0^t dt' V_{nk}(t') e^{i\omega_{nk}t'} \int_0^{t'} dt'' V_{kk'}(t'') e^{i\omega_{kk'}t''} . \quad (13.40)$$

Appendice II: Trattazione della perturbazione costante con la teoria delle perturbazioni indipendente dal tempo

I risultati ottenuti sulla transizione per effetto di una perturbazione costante con il formalismo della teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo possono essere riottenuti, seppure con una procedura più laboriosa, utilizzando il formalismo della teoria delle perturbazioni indipendente dal tempo.

In questo contesto, l'evoluzione temporale del vettore di stato del sistema al tempo $t = 0$,

$$|\alpha, t = 0\rangle = |i^{(0)}\rangle, \quad (13.41)$$

si determina esprimendo il vettore di stato come combinazione lineare di autostati $|k\rangle$ dell'Hamiltoniano completo $H = H_0 + V$,

$$|\alpha, t = 0\rangle = \sum_k c_k |k\rangle \quad , \quad c_k = \langle k | i^{(0)} \rangle, \quad (13.42)$$

ed applicando l'operatore di evoluzione temporale:

$$|\alpha, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\alpha, t = 0\rangle = \sum_k c_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} |k\rangle. \quad (13.43)$$

L'ampiezza di probabilità $\langle n^{(0)} | \alpha, t \rangle$ che il sistema venga a trovarsi nell'autostato $|n^{(0)}\rangle$ di H_0 al tempo t è allora:

$$\langle n^{(0)} | \alpha, t \rangle = \sum_k c_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \langle n^{(0)} | k \rangle = \sum_k \langle n^{(0)} | k \rangle \langle k | i^{(0)} \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}. \quad (13.44)$$

Questa espressione è esatta.

Determiniamo ora il valore approssimato al primo ordine della teoria delle perturbazioni sostituendo al posto degli autostati $|k\rangle$ e degli autovalori E_k di H le loro approssimazioni al primo ordine:

$$|k\rangle \simeq |k^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq k} \frac{V_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^{(0)}\rangle, \quad (13.45)$$

$$E_k \simeq E_k^{(0)} + V_{kk}. \quad (13.46)$$

È evidente che per le transizioni tra stati iniziali e finali diversi, $n \neq i$, il prodotto $\langle n^{(0)}|k\rangle\langle k|i^{(0)}\rangle$ è almeno di ordine 1 nello sviluppo. Nella (13.44) possiamo allora sostituire l'autovalore E_k nell'esponenziale con la sua espressione all'ordine zero.

Quanto alle ampiezze si ha:

$$\langle n^{(0)}|k\rangle \simeq \langle n^{(0)}|k^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq k} \frac{V_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle n^{(0)}|m^{(0)}\rangle = \delta_{nk} + \frac{V_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} (1 - \delta_{nk}) . \quad (13.47)$$

Si noti, infatti, che per $n = k$ il secondo termine della precedente espressione, contenente la somma $\sum_{m \neq k}$, dà contributo nullo.

Prendendo il complesso coniugato della precedente espressione e sostituendo $n \rightarrow i$, si trova anche:

$$\langle k|i^{(0)}\rangle = \delta_{ik} + \frac{V_{ki}}{E_k^{(0)} - E_i^{(0)}} (1 - \delta_{ik}) . \quad (13.48)$$

Sostituendo allora le (13.47) e (13.48) nella (13.44) si ottiene:

$$\begin{aligned} \langle n^{(0)}|\alpha, t\rangle &= \sum_k \left[\delta_{nk} + \frac{V_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} (1 - \delta_{nk}) \right] \left[\delta_{ik} + \frac{V_{ki}}{E_k^{(0)} - E_i^{(0)}} (1 - \delta_{ik}) \right] e^{-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)} t} = \\ &= \delta_{ni} e^{-\frac{i}{\hbar} E_i^{(0)} t} + \frac{V_{ni}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} (1 - \delta_{ni}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} + \\ &\quad + \frac{V_{ni}}{E_i^{(0)} - E_n^{(0)}} (1 - \delta_{ni}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_i^{(0)} t} + O(V^2) = \\ &\stackrel{n \neq i}{=} \frac{V_{ni}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} - e^{-\frac{i}{\hbar} E_i^{(0)} t} \right) . \end{aligned} \quad (13.49)$$

Risulta utile riscrivere questo risultato utilizzando la seguente identità:

$$\begin{aligned} e^{i\alpha} - e^{i\beta} &= e^{\frac{i}{2}[(\alpha+\beta)+(\alpha-\beta)]} - e^{\frac{i}{2}[(\alpha+\beta)-(\alpha-\beta)]} = e^{\frac{i}{2}(\alpha+\beta)} \left[e^{\frac{i}{2}(\alpha-\beta)} - e^{-\frac{i}{2}(\alpha-\beta)} \right] = \\ &= e^{\frac{i}{2}(\alpha+\beta)} 2i \operatorname{sen} \left(\frac{\alpha - \beta}{2} \right) . \end{aligned} \quad (13.50)$$

Si ottiene allora:

$$\langle n^{(0)}|\alpha, t\rangle = \frac{-2i V_{ni}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} e^{-\frac{i}{2\hbar}(E_n^{(0)}+E_i^{(0)})t} \operatorname{sen} \left(\frac{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}{2\hbar} t \right) . \quad (13.51)$$

Calcolando infine il modulo quadro di questa espressione otteniamo la probabilità

$$\boxed{P_{i \rightarrow n}(t) = |\langle n^{(0)}|\alpha, t\rangle|^2 = \frac{4 |V_{ni}|^2}{\left(E_n^{(0)} - E_i^{(0)} \right)^2} \operatorname{sen}^2 \left(\frac{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}{2\hbar} t \right)} , \quad (13.52)$$

in accordo con il risultato (13.22) ottenuto con la teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo.

Appendice III: Determinazione dell'integrale di Dirichelet

Determiniamo l'integrale

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\text{sen}^2 x}{x^2} \quad (13.53)$$

In primo luogo trasformiamo l'integrale con una integrazione per parti:

$$\begin{aligned} I &= - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{x} \right) \text{sen}^2 x = - \frac{1}{x} \text{sen}^2 x \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{x} 2 \text{sen} x \cos x = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\text{sen} 2x}{x}, \end{aligned} \quad (13.54)$$

ossia, effettuando il cambio di variabile $2x \rightarrow x$,

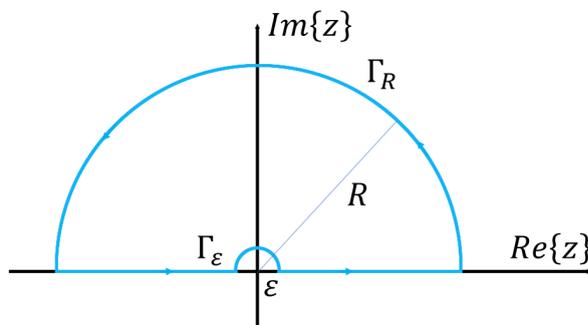
$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\text{sen} x}{x} \quad \text{[Integrale di Dirichelet]} \quad (13.55)$$

Possiamo poi trasformare l'integrale in un integrale nel piano complesso:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\text{sen} x}{x} = \text{Im} \left\{ \text{PV} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{e^{iz}}{z} \right\}, \quad (13.56)$$

dove "PV" indica il valore principale (la parte reale dell'integrale non è altrimenti definita per il polo in $z = 0$).

Per calcolare l'integrale scegliamo il seguente contorno:



Poiché la funzione integranda non ha poli all'interno del contorno possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} 0 &= \oint dz \frac{e^{iz}}{z} = \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-R}^{-\varepsilon} dz \frac{e^{iz}}{z} + \int_{\varepsilon}^R dz \frac{e^{iz}}{z} + \int_{\Gamma_\varepsilon} dz \frac{e^{iz}}{z} + \int_{\Gamma_R} dz \frac{e^{iz}}{z} \right] = \\ &= \text{PV} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{e^{iz}}{z} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\varepsilon} dz \frac{e^{iz}}{z} + \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_R} dz \frac{e^{iz}}{z}. \end{aligned} \quad (13.57)$$

L'integrale sul semicerchio esterno tende a zero nel limite $R \rightarrow \infty$:

$$\int_{\Gamma_R} dz \frac{e^{iz}}{z} \stackrel{z=R \exp(i\varphi)}{=} i \int_0^\pi d\varphi e^{iRe^{i\varphi}} = i \int_0^\pi d\varphi e^{iR \cos \varphi - R \sin \varphi} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0. \quad (13.58)$$

L'integrale su Γ_ε dà invece contributo non nullo:

$$\int_{\Gamma_\varepsilon} dz \frac{e^{iz}}{z} \stackrel{z=\varepsilon \exp(i\varphi)}{=} i \int_\pi^0 d\varphi e^{i\varepsilon e^{i\varphi}} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} i \int_\pi^0 d\varphi = -i\pi. \quad (13.59)$$

Sostituendo questo risultato nella (13.57) si ottiene

$$\text{PV} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{e^{iz}}{z} = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\varepsilon} dz \frac{e^{iz}}{z} = +i\pi. \quad (13.60)$$

L'eq. (13.56) implica allora:

$$\boxed{I = \int_{-\infty}^{-\infty} dx \frac{\text{sen}^2 x}{x^2} = \int_{-\infty}^{-\infty} dx \frac{\text{sen} x}{x} = \pi} . \quad (13.61)$$

Parte II

Capitolo 14 | Rotazioni e momento angolare

14.1 Rotazioni, momento angolare e regole di commutazione

Nella meccanica quantistica, così come nella meccanica classica, il **momento angolare è il generatore delle rotazioni infinitesime**.

Se indichiamo con $D_{\hat{n}}(d\varphi)$ l'operatore unitario che induce una rotazione di un angolo infinitesimo $d\varphi$ attorno all'asse caratterizzato dal vettore \hat{n} abbiamo allora

$$D_{\hat{n}}(d\varphi) = 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \hat{n} d\varphi, \quad (14.1)$$

dove \vec{J} è l'**operatore momento angolare**. Questa equazione può essere considerata la **definizione** nella meccanica quantistica dell'operatore momento angolare.

L'aver assunto che il momento angolare è il generatore delle rotazioni spaziali implica che, per un sistema invariante rispetto a rotazioni attorno a un determinato asse, si conserva la componente del momento angolare lungo quell'asse.

La proprietà di isotropia dello spazio (ossia l'equivalenza di tutte le direzioni nello spazio) implica poi che l'Hamiltoniano di un sistema isolato deve essere invariante rispetto a rotazioni di un angolo arbitrario attorno a un asse qualsiasi. **La legge di conservazione del momento angolare di un sistema isolato è dunque conseguenza della proprietà di isotropia dello spazio.**

Una rotazione finita si può ottenere associando successivamente rotazioni infinitesime attorno allo stesso asse. Così, ad esempio, per una rotazione finita di un angolo ϕ attorno all'asse z otteniamo

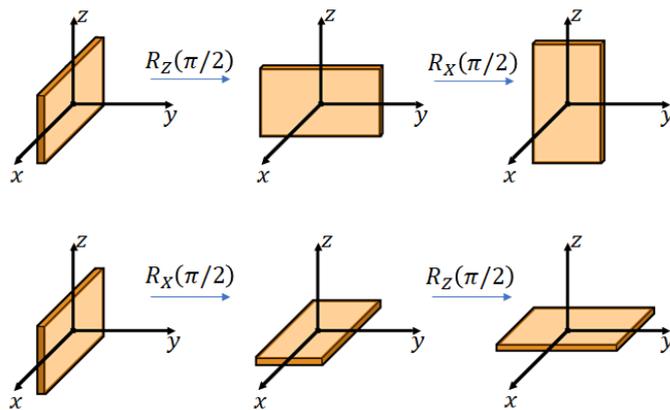
$$D_z(\phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} J_z \frac{\phi}{N} \right)^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left[N \log \left(1 - \frac{i}{\hbar} J_z \frac{\phi}{N} \right) \right] = \quad (14.2)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left[N \left(-\frac{i}{\hbar} J_z \frac{\phi}{N} \right) \right], \quad (14.3)$$

ossia

$$D_z(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} J_z \phi} . \quad (14.4)$$

È una proprietà ben nota delle rotazioni il fatto che **rotazioni attorno ad uno stesso asse commutano, mentre rotazioni attorno ad assi diversi non commutano**. Così, ad esempio, una rotazione di $\pi/2$ attorno all'asse z seguita da una rotazione di $\pi/2$ attorno all'asse x produce un risultato diverso di quello ottenuto con una rotazione di $\pi/2$ attorno all'asse x seguita da una rotazione di $\pi/2$ attorno all'asse z :



In termini dell'azione degli operatori di rotazione su un generico vettore di stato $|\alpha\rangle$ questo implica

$$D_x(\pi/2) D_z(\pi/2) |\alpha\rangle \neq D_z(\pi/2) D_x(\pi/2) |\alpha\rangle, \quad (14.5)$$

o, equivalentemente, per l'arbitrarietà dello stato $|\alpha\rangle$,

$$[D_x(\pi/2), D_z(\pi/2)] \neq 0. \quad (14.6)$$

Per stabilire quantitativamente le regole di commutazione degli operatori di rotazione attorno ad assi diversi, dobbiamo considerare con maggior dettaglio le proprietà di commutazione delle rotazioni.

A tale scopo ricordiamo che a ciascuna rotazione, diciamo di un angolo φ attorno ad un asse definito dal versore \hat{n} , può essere associata una **matrice ortogonale** $R_{\hat{n}}(\varphi)$. Il significato di questa matrice è che un vettore \vec{v} di componenti (v_x, v_y, v_z) (che può rappresentare ad esempio la posizione di una particella nello spazio) viene trasformato, a seguito della rotazione, nel vettore \vec{v}' legato a \vec{v} dalla relazione

$$\vec{v}' = R_{\hat{n}}(\varphi) \vec{v} . \quad (14.7)$$

L'ortogonalità della matrice R segue dal fatto che le rotazioni lasciano invariati i moduli dei vettori:

$$\vec{v}' \cdot \vec{v}' = \vec{v} R^T R \vec{v} = \vec{v} \cdot \vec{v} \quad \Rightarrow \quad \boxed{R^T R = 1} . \quad (14.8)$$

È semplice derivare l'espressione della matrice di rotazione associata ad una rotazione di un angolo $\delta\varphi$ attorno all'asse z . Esprimendo le componenti del vettore \vec{v} in coordinate polari,

$$\begin{cases} v_x = v \operatorname{sen} \theta \cos \varphi , \\ v_y = v \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi , \\ v_z = v \cos \theta , \end{cases} \quad (14.9)$$

si ha che il vettore \vec{v} si trasforma, per effetto della rotazione, nel vettore \vec{v}' di componenti:

$$\begin{cases} v'_x = v \operatorname{sen} \theta \cos(\varphi + \delta\varphi) = v_x \cos \delta\varphi - v_y \operatorname{sen} \delta\varphi , \\ v'_y = v \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen}(\varphi + \delta\varphi) = v_x \operatorname{sen} \delta\varphi + v_y \cos \delta\varphi , \\ v'_z = v \cos \theta = v_z . \end{cases} \quad (14.10)$$

La matrice $R_z(\delta\varphi)$ ha dunque la forma

$$R_z(\delta\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \delta\varphi & -\operatorname{sen} \delta\varphi & 0 \\ \operatorname{sen} \delta\varphi & \cos \delta\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \quad (14.11)$$

Per studiare le proprietà di commutazione delle rotazioni è conveniente considerare rotazioni infinitesime. Ponendo $\varepsilon = \delta\varphi$ e sviluppando la precedente matrice fino al secondo ordine in ε troviamo:

$$R_z(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \varepsilon^2/2 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 - \varepsilon^2/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + O(\varepsilon^3) . \quad (14.12)$$

Le corrispondenti matrici di rotazione attorno agli assi x e y si possono ottenere con permutazioni cicliche di x , y e z :

$$x \rightarrow y , \quad y \rightarrow z , \quad z \rightarrow x . \quad (14.13)$$

Si ottiene in tal modo:

$$R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \varepsilon^2/2 \end{pmatrix} + O(\varepsilon^3) , \quad (14.14)$$

$$R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \varepsilon^2/2 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \varepsilon^2/2 \end{pmatrix} + O(\varepsilon^3) . \quad (14.15)$$

Consideriamo ora una rotazione di angolo ε attorno all'asse y seguita da una rotazione di angolo ε attorno all'asse x . La corrispondente matrice di rotazione è:

$$R_x(\varepsilon) R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \varepsilon^2/2 & 0 & \varepsilon \\ \varepsilon^2 & 1 - \varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \varepsilon^2 \end{pmatrix} + O(\varepsilon^3). \quad (14.16)$$

Se consideriamo invece una rotazione di angolo ε attorno all'asse x seguita da una rotazione di angolo ε attorno all'asse y otteniamo la matrice di rotazione¹

$$R_y(\varepsilon) R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \varepsilon^2/2 & \varepsilon^2 & \varepsilon \\ 0 & 1 - \varepsilon^2/2 & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \varepsilon^2 \end{pmatrix} + O(\varepsilon^3). \quad (14.17)$$

Dal confronto di questi risultati vediamo che

$$R_x(\varepsilon) R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon) R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\varepsilon^2) - 1 + O(\varepsilon^3), \quad (14.18)$$

che definisce la proprietà di commutazione di due rotazioni successive infinitesime attorno agli assi x ed y .

Rappresentando l'eq. (14.18) una proprietà geometrica delle rotazioni, la stessa proprietà deve essere evidentemente soddisfatta dagli operatori che inducono le corrispondenti rotazioni dei vettori di stato in meccanica quantistica, ossia deve valere:

$$D_x(\varepsilon) D_y(\varepsilon) - D_y(\varepsilon) D_x(\varepsilon) = D_z(\varepsilon^2) - 1 + O(\varepsilon^3). \quad (14.19)$$

In termini degli operatori momento angolare, questa relazione implica:

$$\begin{aligned} D_x(\varepsilon) D_y(\varepsilon) - D_y(\varepsilon) D_x(\varepsilon) &= \\ &= \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} J_x - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} J_x^2 \right) \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} J_y - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} J_y^2 \right) - (x \leftrightarrow y) = \\ &= \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} J_x - \frac{i\varepsilon}{\hbar} J_y - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} J_x^2 - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} J_y^2 - \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} J_x J_y \right) - (x \leftrightarrow y) = \\ &= -\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} (J_x J_y - J_y J_x) = \\ &= D_z(\varepsilon^2) - 1 = 1 - \frac{i\varepsilon^2}{\hbar} J_z - 1 = -\frac{i\varepsilon^2}{\hbar} J_z, \end{aligned} \quad (14.20)$$

ossia

$$\boxed{[J_x, J_y] = i\hbar J_z} \quad (14.21)$$

¹La matrice $R_y R_x$ si può ottenere dalla matrice $R_x R_y$ osservando che $(R_y R_x)^T = R_x^T R_y^T = R_x R_y + (\varepsilon \rightarrow -\varepsilon)$.

Utilizzando le permutazioni cicliche di x, y e z possiamo derivare le regole di commutazione per le altre componenti del momento angolare e dunque

$$\boxed{[J_x, J_y] = i\hbar J_z} \quad , \quad \boxed{[J_y, J_z] = i\hbar J_x} \quad , \quad \boxed{[J_z, J_x] = i\hbar J_y} \quad , \quad (14.22)$$

o, in forma compatta per due componenti arbitrarie,

$$\boxed{\boxed{[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k}} \quad , \quad (14.23)$$

dove gli indici latini i, j, k assumono i valori $i = 1, 2, 3 \equiv x, y, z$ ed è sottintesa una somma sull'indice k ripetuto. Queste equazioni esprimono le **relazioni fondamentali di commutazione del momento angolare**.

Sottolineiamo come **queste relazioni di commutazione seguono solamente dall'assunzione che J_k è il generatore della rotazione attorno all'asse k -esimo e dalla proprietà di non commutatività delle rotazioni**.

Le relazioni di commutazione (14.23) implicano che, in generale, **le tre componenti del momento angolare non possono avere simultaneamente valori determinati**. A questo proposito il momento angolare differisce essenzialmente dall'impulso, le cui tre componenti sono misurabili simultaneamente.

Con gli operatori J_x, J_y e J_z formiamo l'**operatore del quadrato del momento angolare**:

$$\boxed{\boxed{J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2}} \quad . \quad (14.24)$$

Questo operatore commuta con ciascuno degli operatori J_x, J_y e J_z :

$$\boxed{\boxed{[J^2, J_k] = 0}} \quad , \quad k = 1, 2, 3. \quad (14.25)$$

Infatti, considerando ad esempio il caso $k = 3$ ed utilizzando le relazioni di commutazione (14.23) otteniamo:

$$\begin{aligned} [J^2, J_z] &= [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_z] = [J_x^2, J_z] + [J_y^2, J_z] = \\ &= J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_y, J_z] + [J_y, J_z] J_y = \\ &= J_x (-i\hbar J_y) + (-i\hbar J_y) J_x + J_y (i\hbar J_x) + (i\hbar J_x) J_y = 0. \end{aligned} \quad (14.26)$$

(avendo usato la proprietà dei commutatori $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$).

Dal punto di vista fisico, le relazioni (14.25) significano che **il quadrato del momento angolare (cioè il suo valore assoluto) può avere valori determinati contemporaneamente con una delle sue componenti**.

14.2 Autovalori, autostati ed elementi di matrice degli operatori di momento angolare

Consideriamo il problema di determinare gli autovalori e gli autovettori simultanei del quadrato del momento angolare J^2 e di una sua componente lungo un determinato asse, diciamo J_z . Indichiamo rispettivamente con a e b questi autovalori; cerchiamo cioè le soluzioni delle equazioni

$$\boxed{\begin{aligned} J^2|a, b\rangle &= a|a, b\rangle \\ J_z|a, b\rangle &= b|a, b\rangle \end{aligned}} \quad . \quad (14.27)$$

A tale scopo risulta conveniente, in luogo degli operatori J_x e J_y , introdurre le loro combinazioni complesse

$$\boxed{\boxed{J_{\pm} = J_x \pm iJ_y}} \quad . \quad (14.28)$$

Utilizzando le relazioni di commutazione (14.23) per le componenti del momento angolare possiamo calcolare

$$\begin{aligned} [J_z, J_{\pm}] &= [J_z, J_x \pm iJ_y] = [J_z, J_x] \pm i[J_z, J_y] = \\ &= i\hbar J_y \pm i(-i\hbar J_x) = \pm \hbar(J_x \pm iJ_y) = \pm \hbar J_{\pm} . \end{aligned} \quad (14.29)$$

Dunque

$$\boxed{[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}} \quad . \quad (14.30)$$

Dalle relazioni di commutazione (14.25) segue anche immediatamente che

$$\boxed{[J^2, J_{\pm}] = 0} \quad . \quad (14.31)$$

Per determinare il significato fisico degli operatori J_{\pm} esaminiamo l'azione di J_z sugli stati $J_{\pm}|a, b\rangle$:

$$J_z J_{\pm}|a, b\rangle = ([J_z, J_{\pm}] + J_{\pm} J_z)|a, b\rangle = (b \pm \hbar) J_{\pm}|a, b\rangle , \quad (14.32)$$

dove abbiamo fatto uso delle relazioni (14.30). Ciò prova che **gli stati $J_{\pm}|a, b\rangle$ sono ancora (a meno di una costante di normalizzazione) autostati dell'operatore J_z corrispondenti agli autovalori $b \pm \hbar$** . Per questa ragione gli operatori J_{\pm} sono anche noti con il nome di **operatori "a scala"**.

Applichiamo ora agli stati $J_{\pm}|a, b\rangle$ l'operatore J^2 . Considerando che, secondo l'eq. (14.31) J^2 commuta con J_{\pm} , troviamo:

$$J^2 J_{\pm}|a, b\rangle = J_{\pm} J^2|a, b\rangle = a J_{\pm}|a, b\rangle. \quad (14.33)$$

In altri termini, gli stati $J_{\pm}|a, b\rangle$ sono ancora autostati dell'operatore J^2 corrispondenti allo stesso autovalore a .

In conclusione, in virtù delle eq. (14.32) e (14.33), possiamo scrivere:

$$\boxed{J_{\pm}|a, b\rangle = c_{ab}^{\pm}|a, b \pm \hbar\rangle}, \quad (14.34)$$

dove le costanti c_{ab}^{\pm} sono determinate imponendo la corretta normalizzazione dei vettori di stato.

Supponiamo ora di applicare più volte, in successione, l'operatore J_+ ad un autostato $|a, b\rangle$. Ad ogni applicazione l'autovalore di J_z aumenta di \hbar , mentre l'autovalore di J^2 è invariato. Questo processo, tuttavia, non può continuare in modo indefinito giacché, per un fissato valore a di J^2 , deve esistere un valore massimo, b_{MAX} , per J_z . Questo segue dal fatto che la differenza $J^2 - J_z^2 = J_x^2 + J_y^2$ è l'operatore di una grandezza fisica essenzialmente positiva e i suoi autovalori non possono essere negativi:

$$\begin{aligned} \langle a, b|(J^2 - J_z^2)|a, b\rangle &= a - b^2 = \langle a, b|(J_x^2 + J_y^2)|a, b\rangle = \\ &= (\langle a, b|J_x^+)(J_x|a, b\rangle) + (\langle a, b|J_y^+)(J_y|a, b\rangle) \geq 0. \end{aligned} \quad (14.35)$$

Dunque

$$\boxed{b^2 \leq a}. \quad (14.36)$$

Deve allora esistere un b_{MAX} tale che:

$$\boxed{J_+|a, b_{MAX}\rangle = 0}. \quad (14.37)$$

Per calcolare il valore di b_{MAX} possiamo applicare l'operatore J_- alla precedente equazione ed osservare che

$$J_- J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i[J_x, J_y], \quad (14.38)$$

ossia

$$\boxed{J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z}. \quad (14.39)$$

Si ha allora:

$$\begin{aligned} 0 &= J_- J_+|a, b_{MAX}\rangle = (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|a, b_{MAX}\rangle = \\ &= (a - b_{MAX}^2 - \hbar b_{MAX})|a, b_{MAX}\rangle, \end{aligned} \quad (14.40)$$

ossia

$$\boxed{b_{MAX}(b_{MAX} + \hbar) = a} \quad . \quad (14.41)$$

Similmente, l'eq. (14.36) implica anche l'esistenza di un valore minimo di b , b_{MIN} , definito dall'equazione

$$\boxed{J_- |a, b_{MIN}\rangle = 0} \quad . \quad (14.42)$$

Tale valore si può calcolare applicando l'operatore J_+ alla precedente equazione ed osservando che

$$J_+ J_- = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 - i[J_x, J_y], \quad (14.43)$$

ossia

$$\boxed{J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z} \quad . \quad (14.44)$$

Si trova allora

$$\begin{aligned} 0 &= J_+ J_- |a, b_{MIN}\rangle = (J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) |a, b_{MIN}\rangle = \\ &= (a - b_{MIN}^2 + \hbar b_{MIN}) |a, b_{MIN}\rangle, \end{aligned} \quad (14.45)$$

da cui

$$\boxed{b_{MIN}(b_{MIN} - \hbar) = a} \quad . \quad (14.46)$$

Dal confronto delle eq. (14.41) e (14.46) (con l'ipotesi $b_{MAX} > b_{MIN}$) vediamo che

$$\boxed{b_{MIN} = -b_{MAX}} \quad , \quad (14.47)$$

e dunque i valori possibili per b sono compresi nell'intervallo

$$\boxed{-b_{MAX} \leq b \leq b_{MAX}} \quad (14.48)$$

e separati tra loro di \hbar , in accordo con l'eq. (14.34).

Osserviamo ora che l'autostato corrispondente all'autovalore massimo di J_z , $|a, b_{MAX}\rangle$, può essere ottenuto applicando un numero n intero di volte l'operatore J_+ all'autostato corrispondente all'autovalore minimo, $|a, -b_{MAX}\rangle$. Questo implica

$$b_{MAX} = -b_{MAX} + n\hbar, \quad (14.49)$$

cioè

$$\boxed{b_{MAX} = \frac{n}{2} \hbar} \quad , \quad n \text{ intero} \quad . \quad (14.50)$$

Solitamente il valore di b_{MAX} in unità \hbar è indicato con j , così che

$$j = \frac{b_{MAX}}{\hbar} = \frac{n}{2}, \quad n \text{ intero} . \quad (14.51)$$

L'eq. (14.41) indica poi che

$$a = \hbar^2 j(j+1) . \quad (14.52)$$

Definiamo anche m come il generico autovalore di J_z in unità \hbar :

$$b = m \hbar . \quad (14.53)$$

L'eq. (14.48) indica allora che il numero m può assumere tutti i valori compresi tra $-j$ e j e distanziati tra loro di 1.

Possiamo quindi riassumere i **risultati** derivati per gli autovalori di J^2 e J_z nella forma seguente:

$$\begin{cases} J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \\ J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \end{cases} , \quad (14.54)$$

dove j può assumere tutti i valori, interi o seminteri positivi, incluso lo zero,

$$j = \frac{n}{2} , \quad (14.55)$$

ed m può assumere i valori:

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j . \quad (14.56)$$

È importante osservare come la **quantizzazione del momento angolare** è una diretta conseguenza delle sole regole di commutazione del momento angolare che a loro volta discendono dalle proprietà delle rotazioni e dalla definizione di \vec{J} come generatore delle rotazioni.

Per concludere questo studio **deduciamo le espressioni per gli elementi di matrice delle componenti J_x e J_y del momento angolare nella base degli autostati di J^2 e J_z .**

È conveniente a tale proposito considerare dapprima gli elementi di matrice degli operatori a scala J_+ e J_- . Scriviamo allora le eq. (14.34) nella forma:

$$\begin{cases} J_+ |j, m\rangle = c_{jm}^+ |j, m+1\rangle , \\ J_- |j, m\rangle = c_{jm}^- |j, m-1\rangle . \end{cases} \quad (14.57)$$

Poiché $J_- = (J_+)^+$, i coefficienti c_{jm}^+ e c_{jm}^- sono legati tra loro. Si ha infatti:

$$c_{jm}^+ = \langle j, m+1 | J_+ | j, m \rangle = \langle j, m | J_- | j, m+1 \rangle^* = (c_{j, m+1}^-)^* \quad (14.58)$$

Inoltre, utilizzando le eq. (14.39) e (14.58), otteniamo:

$$\begin{aligned} J_- J_+ | j, m \rangle &= c_{jm}^+ J_- | j, m+1 \rangle = c_{jm}^+ c_{j, m+1}^- | j, m+1 \rangle = |c_{jm}^+|^2 | j, m+1 \rangle = \\ &= (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) | j, m \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] | j, m \rangle \end{aligned} \quad (14.59)$$

da cui segue

$$|c_{jm}^+|^2 = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)], \quad (14.60)$$

Questa equazione determina il coefficiente c_{jm}^+ , e dunque c_{jm}^- dalla (14.58), a meno di un fattore di fase. In generale si usa scegliere c_{jm}^+ e c_{jm}^- reali e positivi, definendo in tal modo la fase (arbitraria) degli autostati $|j, m\rangle$ di J^2 e J_z . Si trova quindi:

$$\boxed{\begin{aligned} J_+ | j, m \rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} | j, m+1 \rangle \\ J_- | j, m \rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} | j, m-1 \rangle \end{aligned}} \quad (14.61)$$

Poiché le componenti J_x e J_y del momento angolare sono legate agli operatori a scala dalle semplici relazioni:

$$J_x = \frac{1}{2} (J_+ + J_-), \quad J_y = \frac{1}{2i} (J_+ - J_-) \quad (14.62)$$

le equazioni (14.61) ci consentono di ricavare immediatamente le espressioni cercate per gli **elementi di matrice di J_x e J_y** . Si trova così:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle j, m-1 | J_x | j, m \rangle &= \langle j, m | J_x | j, m-1 \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \\ \langle j, m-1 | J_y | j, m \rangle &= -\langle j, m | J_y | j, m-1 \rangle = \frac{i\hbar}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \end{aligned}} \quad (14.63)$$

Tutti gli altri elementi di matrice sono invece nulli.

Osserviamo in particolare che nelle matrici J_x e J_y gli elementi diagonali sono tutti nulli. Poiché l'elemento di matrice diagonale dà il valore medio delle grandezze nello stato corrispondente, ciò significa che **negli stati con valori determinati di J_z i valori medi di J_x e J_y sono nulli**:

$$\boxed{\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0} \quad (14.64)$$

Capitolo 15 | Momento angolare orbitale

15.1 Gli operatori del momento angolare orbitale

Abbiamo introdotto il momento angolare definendolo come il generatore delle rotazioni infinitesime. Ma quando il momento angolare di spin è nullo (o comunque può essere ignorato) il momento angolare per una particella coincide con il **momento angolare orbitale**, definito da:

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \quad (15.1)$$

Per il momento angolare orbitale, le **regole di commutazione** fondamentali,

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \quad (15.2)$$

seguono direttamente dalle regole di commutazione degli operatori di posizione ed impulso. Si ha, ad esempio,

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [y p_z - z p_y, z p_x - x p_z] = [y p_z, z p_x] + [z p_y, x p_z] = \\ &= y p_x [p_z, z] + x p_y [z, p_z] = i\hbar (-y p_x + x p_y) = i\hbar L_z, \end{aligned} \quad (15.3)$$

e analoghe per le altre componenti.

Possiamo mostrare esplicitamente come l'operatore momento angolare, definito dall'eq. (15.1), coincida, per particelle di spin nullo, con il **generatore delle rotazioni infinitesime**. Applichiamo infatti l'operatore

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi L_z\right) \quad (15.4)$$

su un autostato arbitrario della posizione e mostriamo come lo stato risultante sia ancora un autostato della posizione ma ruotato, rispetto allo stato di partenza, di

un angolo $\delta\varphi$ attorno all'asse z . Questo risultato segue dalla considerazione che l'impulso è il generatore delle traslazioni infinitesime. Si ha infatti:

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi L_z\right) |x', y', z'\rangle = \left[1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi (x' p_y - y' p_x)\right] |x', y', z'\rangle = \\ = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \delta\vec{x}'\right) |x', y', z'\rangle = |x' - y' \delta\varphi, y' + x' \delta\varphi, z'\rangle \quad (15.5)$$

avendo posto, nel passaggio intermedio, $\delta\vec{x}' = (-y' \delta\varphi, x' \delta\varphi, 0)$. Ricordando l'espressione della matrice di rotazione infinitesima $R_z(\delta\varphi)$, vediamo che lo stato ottenuto è effettivamente ruotato, rispetto all'autostato iniziale della posizione, di un angolo $\delta\varphi$ attorno all'asse z :

$$R_z(\delta\varphi) \vec{x}' = \begin{pmatrix} 1 & -\delta\varphi & 0 \\ \delta\varphi & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' - y' \delta\varphi \\ y' + x' \delta\varphi \\ z' \end{pmatrix} \quad (15.6)$$

Lo stesso risultato (15.5) può essere convenientemente espresso utilizzando, per definire l'autostato della posizione, un sistema di coordinate polari:

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi L_z\right) |r, \theta, \varphi\rangle = |r, \theta, \varphi + \delta\varphi\rangle \quad (15.7)$$

Proponiamoci ora di derivare l'espressione dell'operatore L_z nella rappresentazione delle coordinate. Utilizzando sempre un sistema di coordinate polari, e tenendo conto dell'eq. (15.7), troviamo:

$$\langle r, \theta, \varphi | \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi L_z\right) |\alpha\rangle = \langle r, \theta, \varphi | \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi L_z\right)^\dagger |\alpha\rangle = \langle r, \theta, \varphi - \delta\varphi | \alpha\rangle = \\ = \langle r, \theta, \varphi | \alpha\rangle - \delta\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle r, \theta, \varphi | \alpha\rangle, \quad (15.8)$$

ossia, semplificando,

$$\langle r, \theta, \varphi | L_z | \alpha\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle r, \theta, \varphi | \alpha\rangle \quad (15.9)$$

Questo risultato implica che, nella rappresentazione delle coordinate,

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (15.10)$$

Allo stesso risultato si può giungere utilizzando l'espressione nella rappresentazione delle coordinate dell'operatore impulso. In coordinate cartesiane si ha infatti:

$$L_z = x p_y - y p_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) . \quad (15.11)$$

Effettuando il cambio di variabile da coordinate cartesiane a coordinate polari sferiche si ottiene nuovamente l'espressione (15.10). I calcoli espliciti sono riportati in Appendice I. Nella stessa appendice sono anche riportate le analoghe derivazioni delle **espressioni nella rappresentazione delle coordinate degli operatori L_x , L_y e del quadrato L^2** . In coordinate cartesiane si ha

$$\begin{aligned} L_x &= y p_z - z p_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ L_y &= z p_x - x p_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned} , \quad (15.12)$$

da cui segue, in coordinate polari,

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_y &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned} . \quad (15.13)$$

Quanto al quadrato del momento angolare orbitale, $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$, questo risulta espresso da

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] . \quad (15.14)$$

Osserviamo che, a meno di un fattore moltiplicativo, L^2 coincide con la parte angolare dell'operatore di Laplace ∇^2 (vedi eq. (19.23)).

15.2 Autovalori del momento angolare orbitale e armoniche sferiche

Consideriamo gli autostati simultanei degli operatori L^2 e L_z , definiti dalle equazioni:

$$\begin{aligned} L^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \\ L_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle \end{aligned} . \quad (15.15)$$

Seguendo una pratica usuale abbiamo qui indicato con l il numero quantico j riferito al momento angolare orbitale. La componente z del momento angolare può quindi assumere i valori definiti da

$$m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l \quad . \quad (15.16)$$

L'assegnazione dei valori l ed m non definisce completamente lo stato della particella. Ciò è evidente già dal fatto che le espressioni degli operatori L^2 e L_z , in coordinate polari, contengono solamente gli angoli θ e φ , così che le loro autofunzioni possono contenere un fattore arbitrario dipendente da r . In questo contesto ci limitiamo allora solo a considerare la parte dipendente dagli angoli θ e φ degli autostati di posizione. In altri termini, indicheremo con $|\theta, \varphi\rangle$ il vettore di stato di una particella che si trova in un punto dello spazio individuato dagli angoli θ e φ , ma a distanza r arbitraria dall'origine delle coordinate.

Moltiplichiamo scalarmente entrambi i membri delle eq. (15.15) per il bra $\langle\theta, \varphi|$:

$$\begin{aligned} \langle\theta, \varphi| L^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) \langle\theta, \varphi|l, m\rangle \\ \langle\theta, \varphi| L_z |l, m\rangle &= \hbar m \langle\theta, \varphi|l, m\rangle \end{aligned} \quad . \quad (15.17)$$

Le funzioni

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \langle\theta, \varphi|l, m\rangle \quad (15.18)$$

sono dunque le **autofunzioni simultanee degli operatori L^2 ed L_z** e sono note con il nome di **armoniche sferiche**. Fisicamente, queste funzioni rappresentano l'**ampiezza di probabilità che un sistema, caratterizzato dai valori l ed m dei numeri quantici del momento angolare, si trovi in una posizione la cui direzione è definita dai valori θ e φ degli angoli delle coordinate polari.**

Le espressioni derivate in precedenza per gli operatori del momento angolare nella rappresentazione delle coordinate ci consentono di scrivere esplicitamente le **equazioni agli autovalori che definiscono le armoniche sferiche:**

$$\begin{aligned} L^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \\ &= \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \\ L_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad . \quad (15.19)$$

Dalla condizione di normalizzazione degli autostati $|l, m\rangle$ e dalla completezza degli autostati $|\theta, \varphi\rangle$ della posizione, segue la condizione di normalizzazione delle

armoniche sferiche:

$$\langle l', m' | l, m \rangle = \int d\Omega \langle l', m' | \theta, \varphi \rangle \langle \theta, \varphi | l, m \rangle = \delta_{l'l'} \delta_{mm'}, \quad (15.20)$$

ossia

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) Y_{l',m'}^*(\theta, \varphi) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \delta_{l'l'} \delta_{mm'}. \quad (15.21)$$

Le equazioni differenziali (15.19), che definiscono le armoniche sferiche, ammettono una soluzione per separazione delle variabili, θ e φ , della forma:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\varphi), \quad (15.22)$$

dove le funzioni $\Theta_{l,m}(\theta)$ e $\Phi_m(\varphi)$ sono separatamente normalizzate, in accordo con la (15.21):

$$\int_0^{2\pi} d\varphi |\Phi_m(\varphi)|^2 = 1 \quad , \quad \int_{-1}^1 d(\cos \theta) |\Theta_{l,m}(\theta)|^2 = 1. \quad (15.23)$$

La seconda delle eq. (15.19) indica che le funzioni Φ_m sono in particolare le autofunzioni della componente z del momento angolare, mentre le funzioni $\Theta_{l,m}$ non sono di per sè autofunzioni di qualche operatore del momento angolare.

La seconda delle eq. (15.19), che possiamo scrivere nella forma

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi_m(\varphi) = m \Phi_m(\varphi), \quad (15.24)$$

ha come soluzioni normalizzate le funzioni

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (15.25)$$

La condizione che la funzione d'onda sia monodroma (ossia ad un solo valore) implica in particolare

$$\Phi_m(0) = \Phi_m(2\pi), \quad (15.26)$$

e dunque l'autovalore m può assumere solo valori interi (positivi o negativi):

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (15.27)$$

Poiché i valori di m sono anche definiti dall'eq. (15.16), ne segue che anche **il numero l può assumere solo valori interi** (positivi, incluso lo zero):

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (15.28)$$

Sottolineiamo come le regole di commutazione del momento angolare implicano soltanto la condizione che j (o l) e, dunque, m siano numeri interi o semi-interi. La condizione che l ed m siano invece numeri interi è una condizione aggiuntiva valida specificatamente per il momento angolare orbitale e che non si applica pertanto al momento angolare di spin.

La determinazione delle funzioni $\Theta_{l,m}(\theta)$ può essere effettuata risolvendo l'equazione agli autovalori per l'operatore L^2 , ossia la prima delle eq. (15.19), e sostituendo per $\Phi_m(\varphi)$ la sua espressione (15.25). Si trova, in tal modo, che la dipendenza dall'angolo θ delle funzioni armoniche sferiche è rappresentata da una classe speciale di polinomi in $\cos \theta$, detti **polinomi associati di Legendre**, indicati solitamente con il simbolo $P_l^m(\cos \theta)$. In particolare, per i valori di m positivi si ha

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad \text{per } m \geq 0 \quad (15.29)$$

Le armoniche sferiche con valori negativi di m si possono poi scrivere, in termini delle armoniche sferiche con m positivo, nella forma

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{|m|} (Y_{l|m|}(\theta, \varphi))^* \quad , \quad \text{per } m < 0 \quad (15.30)$$

In Appendice II di questo capitolo riportiamo un calcolo esplicito delle funzioni $\Theta_{l,m}(\theta)$ che segue un procedimento più conveniente rispetto alla risoluzione dell'eq. (15.19), basato su un metodo matriciale analogo a quello discusso per le autofunzioni dell'oscillatore armonico.

Appendice I: rappresentazione degli operatori di momento angolare orbitale in coordinate polari

In questa appendice deriviamo le espressioni in coordinate polari degli operatori di momento angolare orbitale L_x , L_y , L_z e del quadrato L^2 a partire dalle analoghe espressioni in coordinate cartesiane. Considerando dapprima la componente L_z si ha

$$L_z = x p_y - y p_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (15.31)$$

Esprimiamo questo risultato utilizzando un sistema di coordinate polari. Dalle relazioni

$$\begin{cases} x = r \operatorname{sen} \theta \cos \varphi \\ y = r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases}, \quad \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta = \arctan \left(\sqrt{(x^2 + y^2)/z^2} \right) \\ \varphi = \arctan (y/x) \end{cases} \quad (15.32)$$

si derivano, con una semplice algebra, le relazioni¹

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \\ = \operatorname{sen} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \cos \theta \cos \varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\operatorname{sen} \varphi}{r \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \\ = \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \cos \theta \operatorname{sen} \varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}. \end{cases} \quad (15.33)$$

Dall'eq. (15.31) si ottiene pertanto

$$\begin{aligned} L_z = -i\hbar \left[r \operatorname{sen} \theta \cos \varphi \left(\operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \cos \theta \operatorname{sen} \varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) - \right. \\ \left. - r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi \left(\operatorname{sen} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \cos \theta \cos \varphi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\operatorname{sen} \varphi}{r \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right], \quad (15.34) \end{aligned}$$

ossia

$$\boxed{L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}}, \quad (15.35)$$

in accordo con quanto ricavato precedentemente.

In modo analogo si possono derivare le **espressioni degli operatori L_x e L_y nella rappresentazione delle coordinate**. Risulta conveniente, a tale scopo, derivare prima di queste le **espressioni per gli operatori a scala L_{\pm}** :

$$\begin{aligned} L_{\pm} = L_x \pm i L_y = (y p_z - z p_y) \pm i (z p_x - x p_z) = \\ = \mp i (x \pm i y) p_z \pm i z (p_x \pm i p_y) = \\ = \mp \hbar \left[(x \pm i y) \frac{\partial}{\partial z} - z \left(\frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} \right) \right], \quad (15.36) \end{aligned}$$

¹ Si ricordi che $\frac{\partial}{\partial x} \arctan x = \frac{1}{1+x^2}$

da cui, sostituendo le coordinate polari:

$$\begin{aligned}
 L_{\pm} &= \mp \hbar \left[r \operatorname{sen} \theta e^{\pm i\varphi} \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \right. \\
 &\quad \left. - r \cos \theta \left(\operatorname{sen} \theta e^{\pm i\varphi} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r} e^{\pm i\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} \pm \frac{i e^{\pm i\varphi}}{r \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] = \\
 &= \mp \hbar e^{\pm i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} \mp i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \tag{15.37}
 \end{aligned}$$

ossia, infine

$$\boxed{L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)}. \tag{15.38}$$

Da questo risultato è poi immediato ricavare le espressioni degli operatori L_x ed L_y nella rappresentazione delle coordinate. Ricordando le relazioni:

$$\boxed{L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-)} \quad \boxed{L_y = \frac{1}{2i} (L_+ - L_-)}, \tag{15.39}$$

si ottiene

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 L_x &= i\hbar \left(\operatorname{sen} \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
 L_y &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \operatorname{sen} \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)
 \end{aligned}
 }. \tag{15.40}$$

Risulta infine utile determinare l'espressione, nella rappresentazione delle coordinate, del quadrato del momento angolare orbitale. È conveniente partire dalla relazione (14.39) che si scrive, nel caso del momento angolare orbitale,

$$\boxed{L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z}. \tag{15.41}$$

Ricavando L^2 da questa relazione e sostituendovi le espressioni (15.35) e (15.38) per

L_z ed L_{\pm} , otteniamo:

$$\begin{aligned}
 L^2 &= L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z = \\
 &= \hbar^2 \left[e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) - \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - i \frac{\partial}{\partial\varphi} \right] = \\
 &= \hbar^2 \left[\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) - \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - i \frac{\partial}{\partial\varphi} \right] = \\
 &= \hbar^2 \left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - i \left(\frac{\partial \cot\theta}{\partial\theta} \right) \frac{\partial}{\partial\varphi} - i \cot\theta \frac{\partial^2}{\partial\theta \partial\varphi} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} - \right. \\
 &\quad \left. - i \cot^2\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} + i \cot\theta \frac{\partial^2}{\partial\theta \partial\varphi} - \cot^2\theta \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - i \frac{\partial}{\partial\varphi} \right] = \\
 &= \hbar^2 \left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} - (1 + \cot^2\theta) \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - i \left(1 + \cot^2\theta + \frac{\partial \cot\theta}{\partial\theta} \right) \frac{\partial}{\partial\varphi} \right].
 \end{aligned} \tag{15.42}$$

Considerando le relazioni

$$\begin{aligned}
 1 + \cot^2\theta &= 1 + \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta} = \frac{1}{\sin^2\theta}, \\
 \frac{\partial \cot\theta}{\partial\theta} &= \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta} \right) = \frac{-\sin^2\theta - \cos^2\theta}{\sin^2\theta} = -\frac{1}{\sin^2\theta},
 \end{aligned} \tag{15.43}$$

troviamo infine

$$\boxed{L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)}, \tag{15.44}$$

o, equivalentemente:

$$\boxed{\boxed{L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]}}. \tag{15.45}$$

Appendice II: calcolo delle funzioni $\Theta_{l,m}(\theta)$ e polinomi di Legendre

In questa Appendice riportiamo il calcolo esplicito delle funzioni $\Theta_{l,m}(\theta)$ che segue un procedimento più semplice rispetto alla risoluzione diretta dell'equazione agli autovalori (15.19). Il calcolo è basato su un metodo matriciale, analogo a quello discusso per le autofunzioni dell'oscillatore armonico.

Consideriamo in primo luogo l'autostato corrispondente ad $m = l$. Questo soddisfa l'equazione

$$\boxed{L_+ |l, l\rangle = 0}, \tag{15.46}$$

la cui espressione nella rappresentazione delle coordinate si ottiene moltiplicando l'equazione per il bra $\langle \theta, \varphi |$ ed utilizzando per l'operatore L_+ la sua rappresentazione (15.38). Si ottiene in tal modo:

$$\boxed{L_+ Y_{l,l}(\theta, \varphi) = \hbar e^{i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] Y_{l,l}(\theta, \varphi) = 0} \quad . \quad (15.47)$$

Sostituendo nella (15.47)

$$Y_{l,l}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} \Theta_{l,l}(\theta) , \quad (15.48)$$

otteniamo per $\Theta_{l,l}(\theta)$ l'equazione

$$\boxed{\frac{d\Theta_{l,l}(\theta)}{d\theta} - l \cot \theta \Theta_{l,l}(\theta) = 0} \quad , \quad (15.49)$$

la cui soluzione si ricava facilmente:

$$\begin{aligned} \frac{d\Theta_{l,l}}{\Theta_{l,l}} &= l \cot \theta \, d\theta \quad \Rightarrow \\ \Rightarrow \log \Theta_{l,l} &= l \int d\theta \frac{\cos \theta}{\sin \theta} + \text{cost} = l \int \frac{d(\sin \theta)}{\sin \theta} + \text{cost} = l \log \sin \theta + \text{cost} , \end{aligned} \quad (15.50)$$

ossia

$$\boxed{\Theta_{l,l}(\theta) = c_l \sin^l \theta} \quad . \quad (15.51)$$

La costante c_l si ricava (a meno di una fase arbitraria) dalla condizione di normalizzazione:

$$1 = \int_{-1}^1 d(\cos \theta) |\Theta_{l,l}(\theta)|^2 = |c_l|^2 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) (\sin \theta)^{2l} = |c_l|^2 \int_0^\pi d\theta (\sin \theta)^{2l+1} . \quad (15.52)$$

Per determinare il valore dell'integrale effettuiamo in primo luogo un'integrazione per parti:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\theta (\sin \theta)^{2l+1} &= \int_0^\pi d\theta \sin \theta (\sin \theta)^{2l} = \\ &= -\cos \theta (\sin \theta)^{2l} \Big|_0^\pi + 2l \int_0^\pi d\theta \cos^2 \theta (\sin \theta)^{2l-1} = \\ &= 2l \int_0^\pi d\theta (\sin \theta)^{2l-1} - 2l \int_0^\pi d\theta (\sin \theta)^{2l+1} . \end{aligned} \quad (15.53)$$

Vediamo allora che

$$\int_0^\pi d\theta (\text{sen } \theta)^{2l+1} = \frac{2l}{2l+1} \int_0^\pi d\theta (\text{sen } \theta)^{2l-1}. \quad (15.54)$$

Applicando ricorsivamente questa formula otteniamo:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\theta (\text{sen } \theta)^{2l+1} &= \frac{2l(2l-2)}{(2l+1)(2l-1)} \int_0^\pi d\theta (\text{sen } \theta)^{2l-3} = \\ &= \frac{2l(2l-2)\dots 2}{(2l+1)(2l-1)\dots 3} \int_0^\pi d\theta \text{sen } \theta = \frac{[2l(2l-2)\dots 2]^2}{(2l+1)(2l)(2l-1)\dots 2 \cdot 1} \cdot 2 = \\ &= \frac{2[2^l l(l-1)(l-2)\dots 1]^2}{(2l+1)!} = \frac{2(2^l l!)^2}{(2l+1)!}. \end{aligned} \quad (15.55)$$

L'inverso di questo integrale è pari a $|c_l|^2$. La fase di c_l è scelta per convenzione uguale a $(-1)^l$, così che in definitiva si ottiene

$$\Theta_{l,l}(\theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \text{sen}^l \theta, \quad (15.56)$$

e per l'autofunzione completa l'espressione

$$Y_{l,l}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} e^{il\varphi} \text{sen}^l \theta. \quad (15.57)$$

Le autofunzioni $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ con $m < l$ possono essere determinate mediante successive applicazione dell'operatore a scala L_- . Dalla relazione

$$L_- |l, m+1\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m\rangle, \quad (15.58)$$

vediamo che

$$\begin{aligned} (L_-)^2 |l, m+2\rangle &= L_- \hbar \sqrt{(l-m-1)(l+m+2)} |l, m+1\rangle = \\ &= \hbar^2 \sqrt{(l-m-1)(l-m)(l+m+1)(l+m+2)} |l, m\rangle = \\ &= \hbar^2 \sqrt{\frac{(l-m)!(l+m+2)!}{(l-m-2)!(l+m)!}} |l, m\rangle, \end{aligned} \quad (15.59)$$

e dunque

$$(L_-)^{l-m} |l, l\rangle = \hbar^{l-m} \sqrt{\frac{(l-m)!(2l)!}{(l+m)!}} |l, m\rangle. \quad (15.60)$$

Moltiplicando scalarmente questa relazione per il bra $\langle \theta, \varphi |$, ed utilizzando l'eq. (15.57), otteniamo per le autofunzioni del momento angolare

$$\begin{aligned}
 Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= \frac{(L_-)^{l-m}}{\hbar^{l-m}} \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!(2l)!}} Y_{l,l}(\theta, \varphi) = \\
 &= \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \frac{(L_-)^{l-m}}{\hbar^{l-m}} e^{il\varphi} (\text{sen } \theta)^l .
 \end{aligned}
 \tag{15.61}$$

Questa formula, insieme all'espressione (15.38) dell'operatore L_- nella rappresentazione delle coordinate, risolve completamente il problema posto.

È anche possibile derivare una formula esplicita per l'applicazione successiva dell'operatore L_- . Una singola applicazione dell'operatore L_- alla generica funzione $e^{il\varphi} f(\theta)$ produce:

$$\begin{aligned}
 \frac{L_-}{\hbar} (e^{il\varphi} f(\theta)) &= e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) (e^{il\varphi} f(\theta)) = \\
 &= -e^{i(l-1)\varphi} \left(\frac{d}{d\theta} + l \cot \theta \right) f(\theta) = -\frac{e^{i(l-1)\varphi}}{(\text{sen } \theta)^l} \frac{d}{d\theta} ((\text{sen } \theta)^l f(\theta)) = \\
 &= \frac{e^{i(l-1)\varphi}}{(\text{sen } \theta)^{l-1}} \frac{d}{d \cos \theta} ((\text{sen } \theta)^l f(\theta)) .
 \end{aligned}
 \tag{15.62}$$

Applicando questa formula ricorsivamente si ottiene

$$\frac{(L_-)^2}{\hbar^2} (e^{il\varphi} f(\theta)) = \frac{e^{i(l-2)\varphi}}{(\text{sen } \theta)^{l-2}} \frac{d^2}{(d \cos \theta)^2} ((\text{sen } \theta)^l f(\theta))
 \tag{15.63}$$

e dunque

$$\frac{(L_-)^{l-m}}{\hbar^{l-m}} (e^{il\varphi} f(\theta)) = \frac{e^{im\varphi}}{(\text{sen } \theta)^m} \frac{d^{l-m}}{(d \cos \theta)^{l-m}} ((\text{sen } \theta)^l f(\theta)) .
 \tag{15.64}$$

Utilizzando questo risultato nell'eq. (15.61) si ottiene allora

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi (l-m)!}} \frac{e^{im\varphi}}{(\text{sen } \theta)^m} \frac{d^{l-m}}{(d \cos \theta)^{l-m}} (\text{sen } \theta)^{2l} .
 \tag{15.65}$$

La successiva applicazione dell'operatore $(d/d \cos \theta)$ a secondo membro dell'eq. (15.65) produce dei polinomi in $\text{sen } \theta$ e $\cos \theta$ denominati **polinomi associati di Legendre**. Questi polinomi sono definiti equivalentemente dalle equazioni

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} (1-x^2)^{-m/2} \frac{d^{l-m}}{dx^{l-m}} (1-x^2)^l
 \tag{15.66}$$

o

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (1-x^2)^l . \quad (15.67)$$

Le **armoniche sferiche** (15.65) possono dunque essere espresse in termini dei polinomi associati di Legendre nella forma

$$\begin{aligned}
 Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad , \quad \text{per } m > 0 \\
 Y_{lm}(\theta, \varphi) &= (-1)^{|m|} (Y_{l|m|}(\theta, \varphi))^* \quad , \quad \text{per } m < 0
 \end{aligned}
 \quad (15.68)$$

che coincide con quanto riportato in eq. (15.29) e (15.30).

Armoniche Sferiche e Polinomi di Legendre

Wolfram Mathematica notebook

Armoniche Sferiche

- `SphericalHarmonicY[l, m, θ , ϕ]` gives the spherical harmonic $Y_l^m(\theta, \phi)$.
- The spherical harmonics are orthogonal with respect to integration over the surface of the unit sphere.
- For $l \geq 0$, $Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{(2l+1)/(4\pi)} \sqrt{(l-m)!/(l+m)!} P_l^m(\cos(\theta)) e^{im\phi}$ where P_l^m is the associated Legendre function.
- For $l \leq -1$, $Y_l^m(\theta, \phi) = Y_{-(l+1)}^m(\theta, \phi)$.

$l = 0$

```
Print["Y[0,0] = ", SphericalHarmonicY[0,0, $\theta$ , $\phi$ ]]
```

$$Y_{0,0} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$l = 1$

```
Do[Print["Y[1,"m,"] = ", SphericalHarmonicY[1,m, $\theta$ , $\phi$ ]], {m,1,-1,-1}]
```

$$Y_{1,1} = -\frac{1}{2} e^{i\phi} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin[\theta]$$

$$Y_{1,0} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos[\theta]$$

$$Y_{1,-1} = \frac{1}{2} e^{-i\phi} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin[\theta]$$

$l = 2$

```
Do[Print["Y[2,"m,"] = ", SphericalHarmonicY[2,m,θ,φ]], {m,2,-2,-1}]
```

$$Y[2,2] = \frac{1}{4} e^{2i\phi} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2[\theta]$$

$$Y[2,1] = -\frac{1}{2} e^{i\phi} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos[\theta] \sin[\theta]$$

$$Y[2,0] = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (-1 + 3 \cos^2[\theta])$$

$$Y[2,-1] = \frac{1}{2} e^{-i\phi} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos[\theta] \sin[\theta]$$

$$Y[2,-2] = \frac{1}{4} e^{-2i\phi} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2[\theta]$$

Polinomi associati di Legendre

- LegendreP[n, x] gives the Legendre polynomial $P_n(x)$.
- LegendreP[n, m, x] gives the associated Legendre polynomial $P_n^m(x)$.

- The Legendre polynomials satisfy the differential equation

$$(1 - x^2) (d^2 y / dx^2) - 2x(dy / dx) + n(n + 1) y = 0.$$

- The Legendre polynomials are orthogonal with unit weight function.
- The associated Legendre polynomials are defined by

$$P_n^m(x) = (-1)^m (1 - x^2)^{m/2} (d^m / dx^m) P_n(x)$$

$l = 0$

```
Print["P[0,0] = ", LegendreP[0,0,x]]
```

$$P[0,0] = 1$$

$l = 1$

```
Do[Print["P[1,"m,"] = ", LegendreP[1,m,x]], {m,1,0,-1}]
```

$$P[1,1] = -\sqrt{1 - x^2}$$

$$P[1,0] = x$$

$l = 2$

```
Do[Print["P[2,"m,"] = ", LegendreP[2,m,x]], {m,2,0,-1}]
```

$$P[2,2] = -3(-1+x^2)$$

$$P[2,1] = -3x\sqrt{1-x^2}$$

$$P[2,0] = \frac{1}{2}(-1+3x^2)$$

Orbitali momento angolare

```
In[*]:= Y2[l_, m_] = Expand[SphericalHarmonicY[l, m,  $\theta$ ,  $\phi$ ] * SphericalHarmonicY[l, m,  $\theta$ ,  $-\phi$ ]]
```

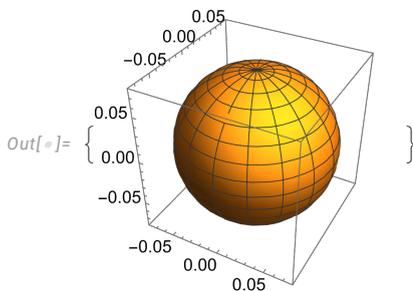
$l = 0; m = 0$

```
In[*]:= ll = 0;
```

```
Table[Y2[ll, mm], {mm, ll, 0, -1}]
```

```
Table[SphericalPlot3D[Y2[ll, mm], { $\theta$ , 0, Pi}, { $\phi$ , 0, 2 Pi}], {mm, ll, 0, -1}]
```

```
Out[*]= {  $\frac{1}{4 \pi}$  }
```



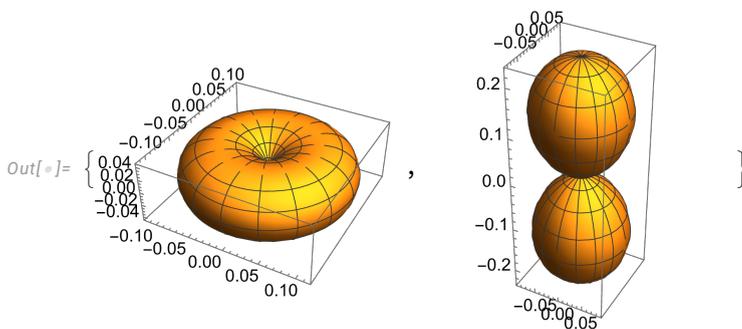
$l = 1; m = 1, 0$

```
In[*]:= ll = 1;
```

```
Table[Y2[ll, mm], {mm, ll, 0, -1}]
```

```
Table[SphericalPlot3D[Y2[ll, mm], { $\theta$ , 0, Pi}, { $\phi$ , 0, 2 Pi}], {mm, ll, 0, -1}]
```

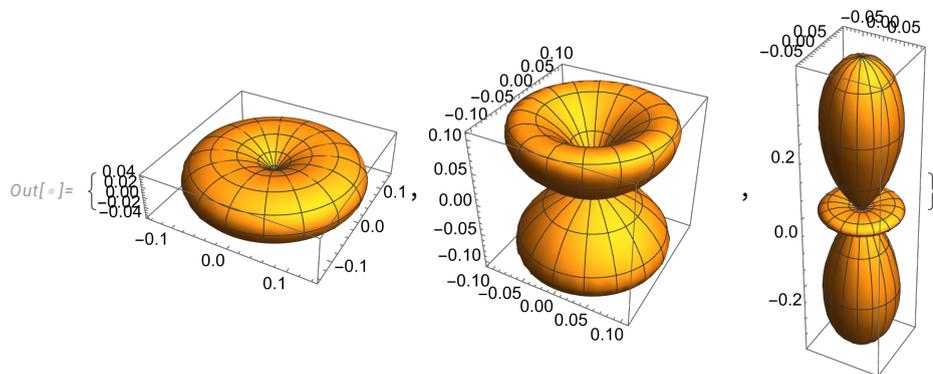
```
Out[*]= {  $\frac{3 \sin[\theta]^2}{8 \pi}$ ,  $\frac{3 \cos[\theta]^2}{4 \pi}$  }
```



$l = 2; m = 2, 1, 0$

```
In[*]:= ll = 2;
Table[Y2[ll, mm], {mm, ll, 0, -1}]
Table[SphericalPlot3D[Y2[ll, mm], {θ, 0, Pi}, {φ, 0, 2 Pi}], {mm, ll, 0, -1}]
```

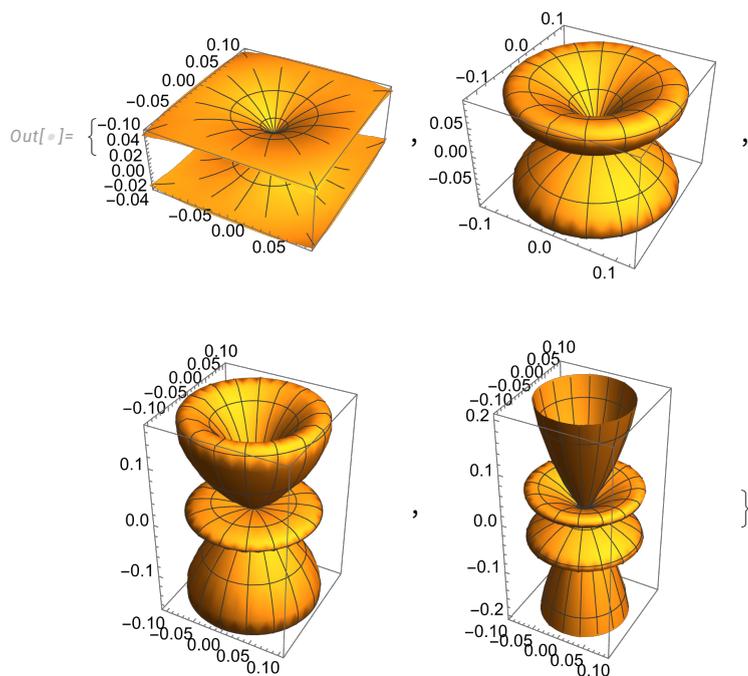
$$Out[*] = \left\{ \frac{15 \sin^4[\theta]}{32 \pi}, \frac{15 \cos^2[\theta] \sin^2[\theta]}{8 \pi}, \frac{5(-1 + 3 \cos^2[\theta])^2}{16 \pi} \right\}$$



$l = 3; m = 3, 2, 1, 0$

```
In[*]:= ll = 3;
Table[Y2[ll, mm], {mm, ll, 0, -1}]
Table[SphericalPlot3D[Y2[ll, mm], {θ, 0, Pi}, {φ, 0, 2 Pi}], {mm, ll, 0, -1}]
```

$$Out[*] = \left\{ \frac{35 \sin^6[\theta]}{64 \pi}, \frac{105 \cos^2[\theta] \sin^4[\theta]}{32 \pi}, \frac{21(-1 + 5 \cos^2[\theta])^2 \sin^2[\theta]}{64 \pi}, \frac{7(-3 \cos[\theta] + 5 \cos^3[\theta])}{16 \pi} \right\}$$



Capitolo 16 | Spin

Nella meccanica quantistica si deve assegnare ad ogni particella un **momento angolare intrinseco** non legato al suo moto nello spazio. Questa **proprietà** della materia è **squisitamente quantistica**, essa scompare nel limite $\hbar \rightarrow 0$ e di conseguenza non ammette un'interpretazione classica.

Il momento angolare intrinseco di una particella è chiamato **spin** della particella, a differenza del momento angolare orbitale legato al moto della particella nello spazio.

Gli operatori delle componenti del momento angolare di spin, usualmente indicati con la lettera \vec{S} , trattandosi di operatori di momento angolare soddisfano le regole di commutazione

$$\boxed{[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k}, \quad (16.1)$$

con tutte le conseguenze fisiche che ne derivano.

In particolare gli **autovalori del quadrato dello spin, S^2** , sono uguali a:

$$\boxed{\hbar^2 s(s+1)}, \quad (16.2)$$

dove s può essere un numero intero (compreso lo zero) o semintero.

Per un dato s la componente S_z dello spin può prendere i valori

$$\boxed{-s, -s+1, \dots, s-1, s}, \quad (16.3)$$

in unità \hbar , in totale $2s + 1$ valori.

Poichè s è per ogni tipo di particella un numero dato, nel passaggio al limite classico ($\hbar \rightarrow 0$) il momento angolare di spin $\hbar s$ si annulla. Per il momento angolare orbitale questo ragionamento non si applica, poichè l può avere valori arbitrari. Il passaggio alla meccanica classica significa che, contemporaneamente \hbar tende a zero ed l all'infinito, cosicchè il prodotto $\hbar l$ resta finito.

Per le particelle aventi uno spin, la descrizione dello stato mediante la funzione d'onda deve determinare non soltanto la probabilità delle

sue diverse posizioni nello spazio, ma anche la probabilità delle diverse orientazioni possibili del suo spin. In altre parole, la funzione d'onda deve dipendere non soltanto da tre variabili continue, cioè dalle coordinate della particella, ma anche da una variabile di spin discreta, che indicheremo con la lettera σ , che determina il valore della proiezione dello spin su una direzione scelta nello spazio (asse z) e suscettibile di un valore limitato di valori discreti. Tale funzione d'onda si scrive

$$\boxed{\psi_\sigma(\vec{x}') = \langle \vec{x}', \sigma | \psi \rangle} \quad (16.4)$$

Essa rappresenta sostanzialmente un insieme di funzioni delle coordinate che corrispondono a diversi valori di σ . Queste funzioni sono dette **componenti di spin della funzione d'onda**.

Frequentemente, le diverse componenti di spin della funzione d'onda sono arrangiate in un vettore colonna, detto anche **spinore**:

$$\boxed{\begin{pmatrix} \psi_{\sigma_1}(\vec{x}') \\ \psi_{\sigma_2}(\vec{x}') \\ \vdots \\ \psi_{\sigma_{2s+1}}(\vec{x}') \end{pmatrix}} \quad (16.5)$$

Il modulo quadro

$$\boxed{|\psi_\sigma(\vec{x}')|^2} \quad (16.6)$$

rappresenta, in accordo con l'eq. (16.4), la **densità di probabilità di trovare la particella nella posizione \vec{x}' con un determinato valore di σ** . Pertanto la probabilità che la particella abbia un determinato valore di σ è determinata dall'integrale

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{x}' |\psi_\sigma(\vec{x}')|^2} \quad (16.7)$$

Quanto alla probabilità della particella di trovarsi nell'elemento di volume $d\vec{x}'$, ma con un valore arbitrario di σ , essa è:

$$\boxed{\sum_{\sigma} |\psi_\sigma(\vec{x}')|^2 d\vec{x}'} \quad (16.8)$$

È evidente come, per una particella dotata di spin, la condizione di normalizzazione della funzione d'onda si scriva nella forma:

$$\boxed{\sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{x}' |\psi_\sigma(\vec{x}')|^2 = \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{x}' \langle \psi | \vec{x}', \sigma \rangle \langle \vec{x}', \sigma | \psi \rangle = 1} \quad (16.9)$$

Questo risultato segue anche dalla relazione di completezza

$$\boxed{\sum_{\sigma} \int d\vec{x}' |\vec{x}', \sigma\rangle \langle \vec{x}', \sigma| = 1}, \quad (16.10)$$

valida per i vettori di stato rappresentativi di particelle con spin.

16.1 Operatori di spin e formalismo di Pauli per spin 1/2

In questo capitolo non ci interesseremo, e non indicheremo pertanto esplicitamente, la dipendenza dalle coordinate spaziali dei vettori di stato.

Gli operatori di spin agiscono sulla variabile di spin σ e si possono rappresentare in forma di **matrici di dimensione $2s + 1$** .

Consideriamo gli elementi di matrice degli operatori di spin nella base in cui il quadrato dello spin S^2 e la sua componente lungo l'asse z , S_z , sono diagonali. Questa base è definita dagli autostati $|s, \sigma\rangle$ che soddisfano:

$$\boxed{\begin{aligned} S^2 |s, \sigma\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |s, \sigma\rangle \\ S_z |s, \sigma\rangle &= \hbar \sigma |s, \sigma\rangle \end{aligned}}. \quad (16.11)$$

Gli elementi di matrice degli operatori S_x e S_y in questa base si derivano come discusso nella teoria generale del momento angolare. In particolare, gli operatori a scala $S_{\pm} = S_x \pm i S_y$ hanno elementi di matrice definiti dalle relazioni

$$\boxed{\begin{aligned} S_+ |s, \sigma\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - \sigma(\sigma+1)} |s, \sigma+1\rangle \\ S_- |s, \sigma\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - \sigma(\sigma-1)} |s, \sigma-1\rangle \end{aligned}}. \quad (16.12)$$

Da questi seguono poi direttamente gli elementi di matrice di $S_x = (S_+ + S_-)/2$ e $S_y = -i(S_+ - S_-)/2$.

Nel caso più importante in cui lo **spin è uguale a 1/2** le matrici rappresentative degli operatori di spin hanno dimensione 2. Dalle eq. (16.12) segue che per gli operatori a scala queste matrici hanno la forma

$$\boxed{S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}. \quad (16.13)$$

da cui segue che gli operatori di spin sono espressi da

$$\boxed{\vec{S} \doteq \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}} \quad , \quad (16.14)$$

dove

$$\boxed{\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}} \quad . \quad (16.15)$$

Le matrici $\vec{\sigma}$ si chiamano **matrici di Pauli**.

Le matrici di Pauli soddisfano la seguente relazione:

$$\boxed{\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k} \quad , \quad (16.16)$$

ossia il quadrato di una matrice di Pauli è la matrice identità ($\sigma_i^2 = 1$) e il prodotto di due matrici distinte $\sigma_i \sigma_j$ coincide a meno di un fattore $\pm i$ con la terza matrice σ_k (ossia, ad esempio $\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z$).

La precedente equazione implica anche che, in accordo con le regole (16.1), le matrici di Pauli soddisfano le **relazioni di commutazione**

$$\boxed{[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \varepsilon_{ijk} \sigma_k} \quad , \quad (16.17)$$

e le **relazioni di anticommutazione**

$$\boxed{\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2 \delta_{ij}} \quad . \quad (16.18)$$

Dalle eq. (16.17) seguono poi per gli operatori di spin le relazioni di commutazione (16.1), in accordo con la teoria generale del momento angolare.

Quanto all'operatore S^2 , la sua rappresentazione in questa base risulta:

$$\boxed{S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4} \hbar^2 I = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}} \quad , \quad (16.19)$$

in accordo con il fatto che per una particella di spin 1/2 gli autostati $|s, \sigma\rangle$ sono autostati dell'operatore S^2 con autovalore $\hbar^2 s(s+1) = 3/4 \hbar^2$.

Gli autostati $|s, \sigma\rangle$ per una particella di spin 1/2 corrispondenti agli autovalori $\sigma = \pm \hbar/2$ vengono frequentemente indicati con i simboli $|+\rangle$ e $|-\rangle$ o anche $|\uparrow\rangle$ e

$|\downarrow\rangle$. Quanto alla loro rappresentazione matriciale, nella base da essi stessi costituita, questa è ovviamente

$$\boxed{\boxed{|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+, \quad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_-}}, \quad (16.20)$$

e per i corrispondenti vettori bra:

$$\boxed{\boxed{\langle +| \doteq (1 \ 0) \equiv \chi_+^\dagger, \quad \langle -| \doteq (0 \ 1) \equiv \chi_-^\dagger}}}. \quad (16.21)$$

Un generico vettore di stato $|\alpha\rangle$ è esprimibile come combinazione lineare dei due stati di base $|+\rangle$ e $|-\rangle$ nella forma

$$\boxed{\boxed{|\alpha\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle \doteq \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = c_+\chi_+ + c_-\chi_-}}, \quad (16.22)$$

dove i coefficienti complessi corrispondono alle ampiezze di probabilità

$$\boxed{c_+ = \langle +|\alpha\rangle}, \quad \boxed{c_- = \langle -|\alpha\rangle}. \quad (16.23)$$

Il vettore colonna $\begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$ è chiamato **spinore** a due componenti. Nel caso generale, ricordiamo, le componenti dello spinore sono funzioni delle coordinate spaziali, $c_\pm(\vec{x}')$, come espresso in eq. (16.5).

Capitolo 17 | Composizione dei momenti angolari

Consideriamo un sistema composto da due parti. Il momento angolare totale di questo sistema, \vec{J} , può essere scritto come la somma dei momenti angolari \vec{J}_1 e \vec{J}_2 delle sue parti:

$$\boxed{\boxed{\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2}} . \quad (17.1)$$

La determinazione del momento angolare totale \vec{J} del sistema risulta spesso di maggiore interesse rispetto alla conoscenza dei momenti angolari \vec{J}_1 e \vec{J}_2 delle due parti. Ad esempio, se le due parti che costituiscono il sistema interagiscono tra loro, la legge di conservazione del momento angolare si applica soltanto al momento angolare totale \vec{J} , e non ai momenti angolari \vec{J}_1 e \vec{J}_2 presi separatamente.

Considerazioni analoghe possono essere effettuate per un sistema con momento angolare di spin \vec{S} diverso da zero. Per un tale sistema la legge di conservazione del momento angolare si applica (in generale) soltanto al momento angolare totale del sistema, composto dalla componente orbitale e dalla componente di spin:

$$\boxed{\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}} . \quad (17.2)$$

Nello studio di tali sistemi si pone quindi il problema della **legge di composizione dei momenti angolari**. Quali sono i valori possibili di j dati i valori di j_1 e j_2 ?

Quanto alla **legge di composizione delle proiezioni del momento angolare**, essa è evidente: dal fatto che $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ segue anche che

$$\boxed{\boxed{m = m_1 + m_2}} . \quad (17.3)$$

Per dedurre la legge di composizione dei quadrati dei momenti angolari ragioniamo nel modo seguente. Osservando che gli operatori \vec{J}_1 e \vec{J}_2 , agendo su diversi sottospazi, commutano tra loro, **prendiamo come sistema completo di grandezze**

fisiche le grandezze

$$\boxed{J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}} \quad , \quad (17.4)$$

e una serie di altre grandezze che, con le quattro indicate, costituiscono un sistema completo. Poiché queste altre grandezze non intervengono nei ragionamenti successivi, per abbreviare le espressioni non le considereremo affatto.

Ogni stato sarà determinato allora dai numeri j_1, j_2, m_1, m_2 e lo indicheremo pertanto con

$$\boxed{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle} \quad . \quad (17.5)$$

Per j_1 e j_2 dati, i numeri m_1 e m_2 assumono rispettivamente $(2j_1 + 1)$ e $(2j_2 + 1)$ valori, cosicché **si hanno in tutto**

$$\boxed{N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)} \quad (17.6)$$

stati diversi con gli stessi j_1 e j_2 .

In luogo delle quattro grandezze indicate si possono prendere anche, come sistema completo, le quattro grandezze

$$\boxed{J^2, J_z, J_1^2, J_2^2} \quad . \quad (17.7)$$

Si trova infatti che, ad esempio, l'operatore J_1^2 commuta con J^2 , come risulta evidente dall'espressione:

$$J^2 = (\vec{J}_1 + \vec{J}_2)^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2(J_{1x}J_{2x} + J_{1y}J_{2y} + J_{1z}J_{2z}) \quad . \quad (17.8)$$

In questo caso ogni stato sarà caratterizzato da valori dei numeri j, m, j_1, j_2 e lo indicheremo con

$$\boxed{|j, m, j_1, j_2\rangle} \quad . \quad (17.9)$$

Dati j_1 e j_2 si debbono avere, ovviamente, come prima $N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ stati diversi, cioè dati j_1 e j_2 la coppia di numeri j ed m può prendere $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ coppie di valori. Il ragionamento seguente permette di determinare questi valori.

Il valore massimo possibile di m , in accordo con l'eq. (17.3), è $m = j_1 + j_2$ e a questo corrisponde un solo stato $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ (coppia di valori m_1, m_2). Pertanto, il valore massimo possibile di m negli stati $|j, m, j_1, j_2\rangle$ e, di conseguenza, il valore massimo di j è $j_1 + j_2$:

1)	m_1	m_2	m	j	1)
	j_1	j_2	$j_1 + j_2$	$j_1 + j_2$	
	Stato $ j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$		Stato $ j, m, j_1, j_2\rangle$		

Esistono inoltre due stati $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ con $m = j_1 + j_2 - 1$. Di conseguenza, ci debbono essere ugualmente due stati $|j, m, j_1, j_2\rangle$ con questo valore di m . Uno di essi è lo stato con $j = j_1 + j_2$ (con $m = j - 1$) e l'altro con $j = j_1 + j_2 - 1$ (con $m = j$)

	m_1	m_2	m	j	
1)	j_1	$j_2 - 1$	$j_1 + j_2 - 1$	$j_1 + j_2$	1)
2)	$j_1 - 1$	j_2		$j_1 + j_2 - 1$	2)

Stati $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ Stati $|j, m, j_1, j_2\rangle$

Per il valore $m = j_1 + j_2 - 2$ esistono tre diversi stati $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$. Ciò significa che oltre ai valori $j = j_1 + j_2$ e $j = j_1 + j_2 - 1$ è possibile anche il valore $j = j_1 + j_2 - 2$:

	m_1	m_2	m	j	
1)	j_1	$j_2 - 2$	$j_1 + j_2 - 2$	$j_1 + j_2$	1)
2)	$j_1 - 1$	$j_2 - 1$		$j_1 + j_2 - 1$	2)
3)	$j_1 - 2$	j_2		$j_1 + j_2 - 2$	3)

Stati $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ Stati $|j, m, j_1, j_2\rangle$

Questo ragionamento si può continuare nello stesso modo finché diminuendo m di 1 aumenta di 1 il numero di stati con il dato valore di m . È facile capire che ciò si verifica finché, assumendo ad esempio $j_1 \geq j_2$, m non raggiunge il valore $j_1 - j_2$ ed m_2 , tra i suoi possibili valori, il valore minimo $m_2 = -j_2$. Diminuendo ulteriormente m , il numero di stati cessa di crescere, restando uguale a $2j_2 + 1$; il valore di m_2 infatti, non può essere minore di $-j_2$. Ciò significa che $j_1 - j_2$, o in generale $|j_1 - j_2|$, è il valore minimo possibile di j .

Così siamo giunti al risultato che, **dati j_1 e j_2 , il numero j può prendere i valori:**

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 \quad , \quad (17.10)$$

cioè in totale $2j_2 + 1$ valori diversi (supponendo $j_2 \leq j_1$).

Tenendo conto che per ogni valore di j esistono $(2j + 1)$ stati $|j, m, j_1, j_2\rangle$, corrispondenti ai diversi possibili valori di m , possiamo verificare che il numero totale di stati è (per $j_2 \leq j_1$):

$$\begin{aligned} N &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j + 1) = \sum_{k=0}^{2j_2} [2(k + j_1 - j_2) + 1] = \quad [k = j - (j_1 - j_2)] \\ &= 2 \sum_{k=1}^{2j_2} k + [2(j_1 - j_2) + 1] (2j_2 + 1) = \\ &= 2 \frac{2j_2(2j_2 + 1)}{2} + [2(j_1 - j_2) + 1] (2j_2 + 1) = (2j_1 + 1) (2j_2 + 1), \quad (17.11) \end{aligned}$$

in accordo con il risultato (17.6).

Il risultato ottenuto per i possibili valori di j (eq. (17.10)) può essere illustrato mediante il cosiddetto **modello vettoriale**. Se introduciamo due vettori \vec{J}_1 e \vec{J}_2 con moduli j_1 e j_2 , i valori di j saranno rappresentati come moduli interi dei vettori \vec{J} , ottenuti componendo vettorialmente \vec{J}_1 e \vec{J}_2 . Il valore massimo ($j_1 + j_2$) di j si ottiene allorché \vec{J}_1 e \vec{J}_2 sono paralleli, e il valore minimo $|j_1 - j_2|$ allorché essi sono antiparalleli¹.

17.1 Coefficienti di Clebsch-Gordan

Consideriamo la trasformazione unitaria che connette la base degli autostati di $J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}$ alla base degli autostati di J^2, J_z, J_1^2, J_2^2 .

$$\boxed{|j, m, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2\rangle} \quad (17.12)$$

Per scrivere questa relazione abbiamo utilizzato la relazione di completezza

$$\sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2| = 1, \quad (17.13)$$

dove il secondo membro è l'operatore di identità nello spazio dei vettori di stato con j_1 e j_2 assegnati.

Gli elementi di matrice unitaria che effettua il cambiamento di base, ossia le grandezze

$$\boxed{\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2\rangle}, \quad (17.14)$$

sono detti **coefficienti di Clebsch-Gordan**.

Dalle leggi di composizione del momento angolare totale e della sua componente z segue ovviamente che i **coefficienti di Clebsch-Gordan sono zero a meno che**

$$\boxed{m = m_1 + m_2} \quad \text{e} \quad \boxed{|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2} \quad (17.15)$$

¹Si noti, tuttavia, come tale modello sia puramente euristico. In meccanica quantistica, infatti, il momento angolare \vec{J} non può essere pensato come un vettore che possiede un'orientazione definita nello spazio, giacché se una sua componente, ad esempio J_z , ha un valore determinato, le altre due componenti, J_x e J_y non lo hanno. Inoltre, il modulo di \vec{J} non è pari a j , giacché J^2 ha autovalore $\hbar^2 j(j+1)$ (e non $\hbar^2 j^2$).

Per convenzione, i coefficienti di Clebsch-Gordan sono definiti reali, e dunque:

$$\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle = \langle j, m, j_1, j_2 | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle \quad (17.16)$$

La condizione di ortogonalità degli autostati $|j, m, j_1, j_2\rangle$ applicata all'eq. (17.12) fornisce:

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j', m', j_1, j_2 | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (17.17)$$

che coincide con la condizione di unitarietà della matrice dei coefficienti di Clebsch-Gordan. In particolare, per $j = j'$ ed $m = m'$ si ottiene:

$$\sum_{m_1, m_2} |\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle|^2 = 1 \quad (17.18)$$

che non è altro che la condizione di normalizzazione degli stati $|j, m, j_1, j_2\rangle$.

Un **metodo** conveniente per determinare i coefficienti di Clebsch-Gordan consiste nell'utilizzare gli operatori a scala, secondo la seguente procedura. Come abbiamo visto, nella composizione di due momenti angolari \vec{J}_1 e \vec{J}_2 lo stato corrispondente al valore massimo della componente J_z del momento angolare, ossia $m = j_1 + j_2$, e dunque $j = j_1 + j_2$, coincide necessariamente, a meno di un fattore di fase, con lo stato avente $m_1 = j_1$ e $m_2 = j_2$. Il fattore di fase è posto per convenzione uguale ad 1. Allora

$$|j = j_1 + j_2, m = m_1 + m_2, j_1, j_2\rangle = |j_1, j_2, m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle \quad (17.19)$$

Applicando ad entrambi i membri di questa equazione l'operatore $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ si può determinare lo stato con $j = j_1 + j_2$ ed $m = j_1 + j_2 - 1$ in termini degli stati con $m_1 = j_1 - 1, m_2 = j_2$ e $m_1 = j_1, m_2 = j_2 - 1$. Lo stato con lo stesso valore di m ma $j = j_1 + j_2 - 1$ è poi costruito imponendo l'ortogonalità con il precedente. Applicando iterativamente questa procedura si possono determinare tutti i coefficienti di Clebsch-Gordan del sistema considerato. Illustriamo questa procedura in dettaglio discutendo un esempio specifico importante.

17.2 Composizione di due momenti angolari di spin 1/2. Stati di tripletto e di singoletto

Consideriamo la composizione angolare di spin per due particelle di spin 1/2, ossia $s_1 = s_2 = 1/2$. Il momento angolare di spin totale delle due particelle,

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad (17.20)$$

può assumere in questo caso solo due valori, corrispondenti a

$$\boxed{s = 0, 1} \quad , \quad (17.21)$$

in accordo con la legge di composizione (17.10).

Nella base degli autostati comuni degli operatori $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ esistono $N = (2s_1 + 1)(2s_2 + 1) = 4$ vettori di stato che possiamo indicare con

$$\boxed{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle} \quad , \quad (17.22)$$

dove, ad esempio,

$$|++\rangle \equiv |s_1 = 1/2, s_2 = 1/2, \sigma_1 = 1/2, \sigma_2 = 1/2\rangle, \quad (17.23)$$

e analoghe.

Corrispondentemente esistono 4 stati di base autostati degli operatori S^2, S_z, S_1^2, S_2^2 . Possiamo indicare questi stati con

$$\boxed{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle} \quad , \quad (17.24)$$

dove

$$|1, 1\rangle \equiv |s = 1, \sigma = 1, s_1 = 1/2, s_2 = 1/2\rangle, \quad (17.25)$$

ecc.

Gli stati corrispondenti al momento angolare di spin $s = 1$ sono detti **stati di tripletto**. Lo stato corrispondente al momento angolare di spin $s = 0$ è detto **stato di singoletto**.

Calcoliamo i coefficienti di Clebsch-Gordan che consentono di esprimere gli autostati di S^2 ed S_z in termini degli autostati di $S_1^2, S_{1z}, S_2^2, S_{2z}$. Lo stato $\sigma = 1$ si può ottenere solo per $\sigma_1 = \sigma_2 = 1/2$. Pertanto:

$$|1, 1\rangle = |++\rangle. \quad (17.26)$$

Applichiamo ora ad entrambi i membri di questa equazione l'operatore a scala S_- :

$$\begin{aligned} S_-|1, 1\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - \sigma(\sigma-1)} |1, 0\rangle = \hbar \sqrt{2} |1, 0\rangle = \\ &= (S_{1-} + S_{2-}) |++\rangle = \\ &= \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - 1 \right)} (|+-\rangle + |-+\rangle) = \\ &= \hbar (|+-\rangle + |-+\rangle), \end{aligned} \quad (17.27)$$

ossia

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle). \quad (17.28)$$

Lo stato $|1, -1\rangle$ si può ottenere mediante una seconda applicazione dell'operatore a scala. Ma in questo caso si ottiene evidentemente:

$$|1, -1\rangle = |--\rangle. \quad (17.29)$$

Infine, lo stato $|0, 0\rangle$ si può ottenere imponendo l'ortogonalità con lo stato $|1, 0\rangle$. Si trova allora:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle). \quad (17.30)$$

In definitiva, abbiamo trovato:

$$\left\{ \begin{array}{l} |1, 1\rangle = |++\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |1, -1\rangle = |--\rangle \end{array} \right. \quad \underline{\text{Tripletto}} \quad (17.31)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \end{array} \right. \quad \underline{\text{Singoletto}}$$

Capitolo 18 | Particelle identiche

Nella **meccanica classica** le particelle identiche, ossia particelle di una stessa specie (per esempio elettroni), malgrado l'identità delle loro proprietà fisiche, non perdono tuttavia una loro "individualità": si può immaginare di numerare in un certo istante le particelle di un sistema fisico dato e seguire poi il moto di ciascuna di esse lungo la sua traiettoria. Sarà allora possibile identificare ciascuna particella in qualsiasi istante.

Nella **meccanica quantistica**, invece, la situazione è diversa. In virtù del principio di indeterminazione, il concetto di traiettoria della particella perde di significato. Di conseguenza, se anche fossero localizzate e numerate le particelle ad un certo istante, questo non ci darebbe la possibilità di identificarle negli istanti successivi.

Così **nella meccanica quantistica non esiste, nemmeno in linea di principio, alcuna possibilità di seguire separatamente ciascuna delle particelle identiche, e quindi di distinguerle. L'identità delle particelle relativa alle loro proprietà fisiche ha quindi un significato molto profondo: essa porta all'indistinguibilità totale delle particelle.** Questo **principio di indistinguibilità** delle particelle identiche ha un ruolo fondamentale nella teoria quantistica dei sistemi formati da particelle identiche.

Consideriamo, per iniziare, un **sistema formato da due particelle identiche**. Siano $|a\rangle, |b\rangle, \dots$ i vettori di stato di ciascuna particella considerata da sola come un sistema dinamico. Possiamo ottenere un vettore di stato per il sistema costituito dalle due particelle prendendo il prodotto dei ket di ciascuna particella considerata da sola. Per esempio

$$|a\rangle|b\rangle \tag{18.1}$$

rappresenta lo stato in cui la prima particella si trova nello stato $|a\rangle$ e la seconda particella nello stato $|b\rangle$.

Nella (18.1) possiamo scambiare il ruolo delle due particelle e ottenere un altro vettore di stato per il sistema costituito dalle due particelle, ossia il vettore di stato:

$$|b\rangle|a\rangle. \tag{18.2}$$

Questo rappresenta lo stato in cui la prima particella si trova nello stato $|b\rangle$ e la seconda nello stato $|a\rangle$.

Il processo di scambiare tra loro le due particelle è rappresentato da un **operatore lineare** che può essere applicato ai vettori di stato del sistema costituito dalle due particelle. Indicando con P_{12} questo operatore si ha ad esempio:

$$P_{12} |a\rangle|b\rangle = |b\rangle|a\rangle . \quad (18.3)$$

È evidente che l'operatore P_{12} , come ogni operatore che trasforma vettori di stato ben normalizzati in vettori di stato ben normalizzati, è un operatore unitario,

$$\boxed{P_{12}^+ P_{12} = 1} . \quad (18.4)$$

Inoltre, scambiando ancora una volta nell'eq. (18.3) le due particelle si deve riottenere, evidentemente, lo stato iniziale. L'operatore P_{12} soddisfa cioè:

$$\boxed{P_{12}^2 = 1} . \quad (18.5)$$

Dal confronto delle eq. (18.4) e (18.5) segue poi che l'operatore P_{12} è anche un operatore hermitiano,

$$\boxed{P_{12}^+ = P_{12}} . \quad (18.6)$$

Supponiamo di effettuare una misura sul sistema costituito dalle due particelle, e di trovare che una particella si trova nello stato a e l'altra nello stato b . Tuttavia non sappiamo a priori se lo stato sia $|a\rangle|b\rangle$ o $|b\rangle|a\rangle$ oppure una qualsiasi combinazione lineare dei due, della forma:

$$|\psi\rangle = c_1 |a\rangle|b\rangle + c_2 |b\rangle|a\rangle . \quad (18.7)$$

In altri termini, tutti i vettori di stato della forma (18.7) portano allo stesso insieme di autovalori quando si esegue la misura. Questa circostanza è nota come **degenerazione di scambio**.

La degenerazione di scambio sembra rappresentare una difficoltà, poiché, contrariamente al caso di una particella singola, l'assegnazione degli autovalori di un insieme completo di osservabili non determina completamente il vettore di stato.

Tuttavia, **il principio di indistinguibilità delle particelle identiche implica che gli stati del sistema che si ottengono l'uno dall'altro semplicemente scambiando le due particelle devono essere fisicamente del tutto equivalenti**. Questo significa che, come risultato dello scambio, il vettore di stato del sistema può variare soltanto di un fattore di fase inessenziale. Ossia:

$$\boxed{P_{12} |\psi\rangle = e^{i\alpha} |\psi\rangle} , \quad (18.8)$$

dove α è una costante reale. L'applicazione dell'operatore P_{12}^2 allo stato $|\psi\rangle$ equivale a moltiplicare il vettore di stato per $e^{2i\alpha}$. Dall'eq. (18.5) segue allora che $e^{2i\alpha} = 1$, ossia $e^{i\alpha} = \pm 1$. Di conseguenza:

$$\boxed{P_{12} |\psi\rangle = \pm |\psi\rangle} \quad (18.9)$$

Siamo quindi giunti al risultato fondamentale che esistono in tutto due possibilità: o il vettore di stato di un sistema costituito da due particelle identiche è simmetrico, cioè non cambia nello scambio delle due particelle, o esso è antisimmetrico, cioè nello scambio cambia di segno. Le due combinazioni corrispondono rispettivamente agli stati:

$$\boxed{\begin{aligned} |\psi_S\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle|b\rangle + |b\rangle|a\rangle) \\ |\psi_A\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle|b\rangle - |b\rangle|a\rangle) \end{aligned}} \quad (18.10)$$

Questo risultato si generalizza immediatamente ai **sistemi formati da un numero qualsiasi di particelle identiche**. Infatti, a causa dell'identità delle particelle, è chiaro che se una coppia di queste particelle goda della proprietà di poter essere descritta, per esempio, da vettori di stato simmetrici, tutte le altre coppie di particelle avranno la stessa proprietà. Quindi **il vettore di stato delle particelle identiche deve o restare assolutamente immutato per lo scambio di qualsiasi coppia di particelle, o cambiare di segno per lo scambio di ogni coppia**.

È evidente, inoltre, che **i vettori di stato rappresentativi di tutti gli stati dello stesso sistema devono godere della stessa simmetria**. Se così non fosse, infatti, il vettore di stato che rappresenta la sovrapposizione di stati con diverse simmetrie, che per il principio di sovrapposizione sarebbe ancora uno stato ammissibile per il sistema, non sarebbe né simmetrico né antisimmetrico. Dunque, **le proprietà del sistema di poter essere descritto da vettori di stato simmetrici o antisimmetrici dipende dalla natura, ossia dalla specie, delle particelle che lo compongono**. Delle particelle descritte da vettori di stato simmetrici, si dice che ubbidiscono alla **statistica di Bose-Einstein**, o che sono **bosoni**, delle particelle descritte da vettori di stato antisimmetrici, si dice che ubbidiscono alla **statistica di Fermi-Dirac**, ovvero che sono **fermioni**. Così, indicando con P_{ij} l'operatore che scambia la i -esima e la j -esima particella, si ha:

$$\boxed{\begin{aligned} P_{ij} |N_{\text{bosoni identici}}\rangle &= + |N_{\text{bosoni identici}}\rangle \\ P_{ij} |N_{\text{fermioni identici}}\rangle &= - |N_{\text{fermioni identici}}\rangle \end{aligned}} \quad (18.11)$$

Utilizzando le leggi della meccanica quantistica relativistica è possibile mostrare che **la statistica cui obbediscono le particelle è univocamente legata al loro spin: le particelle con spin intero sono bosoni, quelle con spin semintero sono fermioni.**

È semplice generalizzare le espressioni (18.10) al caso di sistemi con un numero arbitrario di particelle identiche.

Nel caso generale di un sistema con un numero arbitrario di **N bosoni identici**, il vettore di stato normalizzato è:

$$|\psi_S\rangle = \left(\frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_{perm.} |p^1\rangle_1 |p^2\rangle_2 \dots |p^N\rangle_N, \quad (18.12)$$

dove $|p^k\rangle_i$ rappresenta il ket della particella i -esima che si trova nello stato p^k , la somma è estesa a tutte le permutazioni distinte degli indici p^1, \dots, p^N , ed N_k indica il numero di particelle che si trovano nello stesso stato p^k (ossia quante volte il valore p^k compare nella combinazione sotto il segno di somma).

Per un sistema di **N fermioni identici** il vettore di stato è la combinazione antisimmetrica dei prodotti $|p^1\rangle_1 \dots |p^N\rangle_N$. Questa combinazione può essere scritta nella forma di determinante:

$$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |p^1\rangle_1 & |p^1\rangle_2 & \dots & |p^1\rangle_N \\ |p^2\rangle_1 & |p^2\rangle_2 & \dots & |p^2\rangle_N \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |p^N\rangle_1 & |p^N\rangle_2 & \dots & |p^N\rangle_N \end{vmatrix}. \quad (18.13)$$

Allo scambio di due particelle corrisponde in questo caso lo scambio di due colonne dal determinante, ciò che causa il cambiamento di segno di quest'ultimo e dunque del vettore di stato.

Dall'espressione (18.13) segue un risultato importante: se fra gli indici p_1, p_2, \dots ve ne sono due uguali, due righe del determinante risulteranno uguali e quindi esso si annulla identicamente. Di conseguenza, **in un sistema di fermioni identici due (o più) particelle non possono trovarsi in uno stesso stato.** Questo è il cosiddetto **principio di Pauli**. Nel caso particolare di un sistema costituito da due soli fermioni identici, ad esempio, l'espressione (18.10) mostra come il vettore di stato antisimmetrico si annulli identicamente quando i due fermioni si trovano nello stesso stato: $|a\rangle = |b\rangle$.

Il **principio di Pauli** gioca un ruolo fondamentale nel definire le proprietà di molti sistemi fisici importanti. Negli atomi a molti elettroni, impone che gli elettroni si trovino tutti in stati diversi, proprietà da cui segue la struttura regolare

della tavola periodica degli elementi. Nella materia, il principio di Pauli impone che le molecole non possano collassare una sull'altra nello stesso punto, generando un termine repulsivo nel potenziale efficace intermolecolare che, opponendosi al potenziale attrattivo delle forze elettromagnetiche di dipolo, garantisce la stabilità della materia. Nelle densissime stelle di neutroni e nane bianche, che sono stelle fredde, il principio di Pauli garantisce l'equilibrio della stella, impedendone il collasso gravitazionale.

È evidente che **la proprietà di simmetria di un vettore di stato per un sistema di particelle identiche deve conservarsi invariata nel tempo**. Così, ad esempio, un vettore di stato simmetrico all'istante iniziale $t=0$ deve risultare simmetrico a qualunque istante di tempo successivo. Questa circostanza è garantita dal fatto che **l'operatore Hamiltoniano per un sistema composto da N particelle identiche commuta con l'operatore di scambio P_{ij} di una coppia qualunque di particelle i e j del sistema**:

$$\boxed{\boxed{[H, P_{ij}] = 0}} . \quad (18.14)$$

Per dimostrare questa relazione limitiamoci a considerare, per semplicità, un sistema costituito da una sola coppia di particelle identiche. Indichiamo con ξ_1 e ξ_2 gli insiemi delle tre coordinate spaziali e della proiezione dello spin di ciascuna delle particelle e introduciamo la funzione d'onda del sistema

$$\boxed{\psi_\alpha(\xi_1\xi_2) = \langle \xi_1, \xi_2 | \alpha \rangle} . \quad (18.15)$$

L'espressione dell'Hamiltoniano del sistema nella rappresentazione delle coordinate e dello spin sarà della forma:

$$\boxed{H(\xi_1, \xi_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + V(\xi_1) + V(\xi_2) + U(\xi_1, \xi_2)} . \quad (18.16)$$

È evidente che, **in virtù dell'identità delle particelle, l'operatore $H(\xi_1, \xi_2)$ dovrà essere simmetrico rispetto allo scambio simultaneo delle coordinate spaziali e delle variabili di spin delle due particelle**, ossia

$$\boxed{H(\xi_1, \xi_2) = H(\xi_2, \xi_1)} . \quad (18.17)$$

Questa proprietà comporta allora:

$$P_{12} H(\xi_1, \xi_2) \psi(\xi_1, \xi_2) = H(\xi_2, \xi_1) \psi(\xi_2, \xi_1) = H(\xi_1, \xi_2) P_{12} \psi(\xi_1, \xi_2) . \quad (18.18)$$

Poiché questa relazione risulta valida per una funzione d'onda arbitraria $\psi(\xi_1, \xi_2)$, essa deve corrispondere ad un'identità operatoriale, che possiamo scrivere quindi nella forma:

$$\boxed{\boxed{[H, P_{12}] = 0}} . \quad (18.19)$$

In virtù di questa relazione, per un vettore di stato al tempo generico t , ottenuto evolvendo un vettore di stato rispettivamente simmetrico o antisimmetrico al tempo iniziale $t = 0$, troviamo

$$P_{12} |\psi_{S,A}(t)\rangle = P_{12} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\psi_{S,A}(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} P_{12} |\psi_{S,A}(0)\rangle = \pm e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\psi_{S,A}(0)\rangle, \quad (18.20)$$

ossia:

$$\boxed{P_{12} |\psi_{S,A}(t)\rangle = \pm |\psi_{S,A}(t)\rangle} . \quad (18.21)$$

La proprietà di simmetria dei vettori di stato resta dunque costante nel tempo.

18.1 Funzioni d'onda per un sistema composto da due particelle identiche ed interazione di scambio

Consideriamo la funzione d'onda $\psi_{S,A}(\xi_1, \xi_2)$ per un sistema composto da due particelle identiche rispettivamente bosoni o fermioni. Possiamo osservare che valgono le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned} \psi_S(\xi_2, \xi_1) &= \langle \xi_2, \xi_1 | \psi_S \rangle = \langle \xi_1, \xi_2 | P_{12} | \psi_S \rangle = \langle \xi_1, \xi_2 | \psi_S \rangle = \psi_S(\xi_1, \xi_2), \\ \psi_A(\xi_2, \xi_1) &= \langle \xi_2, \xi_1 | \psi_A \rangle = \langle \xi_1, \xi_2 | P_{12} | \psi_A \rangle = -\langle \xi_1, \xi_2 | \psi_A \rangle = -\psi_A(\xi_1, \xi_2), \end{aligned} \quad (18.22)$$

ossia

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_S(\xi_2, \xi_1) &= +\psi_S(\xi_1, \xi_2) \\ \psi_A(\xi_2, \xi_1) &= -\psi_A(\xi_1, \xi_2) \end{aligned}} . \quad (18.23)$$

Pertanto le funzioni d'onda corrispondenti agli stati simmetrici ed antisimmetrici dei sistemi costituiti da una coppia di particelle identiche risultano rispettivamente simmetriche ed antisimmetriche rispetto allo scambio simultaneo delle coordinate spaziali e delle variabili di spin delle due particelle.

Consideriamo ora **un sistema di particelle identiche per le quali l'Hamiltoniano non dipende dagli operatori di spin.** In questo caso, l'equazione di Schrödinger è soddisfatta da ogni componente di spin della funzione d'onda. In altre parole, le autofunzioni dell'Hamiltoniano possono essere scritte in forma di prodotto di una funzione $\varphi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots)$, dipendente soltanto dalle coordinate delle particelle, e di una funzione $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots)$ dipendente soltanto dallo spin. Per un sistema di due particelle si ha ad esempio:

$$\boxed{\psi(\xi_1, \xi_2) = \varphi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2)} \quad (18.24)$$

e l'equazione di Schrödinger determina soltanto la funzione delle coordinate φ .

Mostriamo ora come, **sebbene l'interazione delle particelle sia indipendente dal loro spin, esiste tuttavia una dipendenza peculiare dell'energia del sistema dal suo spin totale che è originata, in ultima analisi, dal principio di indistinguibilità delle particelle identiche.**

Consideriamo il sistema composto da due particelle identiche. Risolvendo l'equazione di Schrödinger troviamo una serie di livelli energetici a ciascuno dei quali corrisponde una determinata funzione d'onda delle coordinate simmetrica o antisimmetrica:

$$\varphi_{S,A}(\vec{x}_2, \vec{x}_1) = \pm \varphi_{S,A}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \quad . \quad (18.25)$$

Infatti, a causa dell'identità delle particelle, l'Hamiltoniano è invariante rispetto allo scambio di esse, dunque commuta con l'operatore di scambio P_{12} e le autofunzioni di H sono anche autofunzioni di P_{12} .

Supponiamo dapprima che le particelle abbiano **spin 0**. Il fattore di spin per tali particelle non esiste affatto, e la funzione d'onda si riferisce alla sola funzione delle coordinate $\varphi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$, che deve essere simmetrica poiché le particelle ubbidiscono alla **statistica di Bose**. **Così non tutti i livelli energetici che si ottengono dalla soluzione formale dell'equazione di Schrödinger possono realmente esistere. Quelli di essi a cui corrispondono funzioni φ_A antisimmetriche sono impossibili per il sistema considerato.**

Supponiamo ora che il sistema sia costituito da due particelle con **spin 1/2** (per esempio da elettroni). Allora la funzione d'onda totale del sistema, cioè il prodotto della funzione $\varphi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ con la funzione di spin $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$, deve essere necessariamente antisimmetrica rispetto allo scambio delle due particelle. **Quindi, se la funzione delle coordinate è simmetrica la funzione di spin deve essere antisimmetrica e viceversa.**

Sappiamo che per un sistema costituito da due particelle di spin 1/2 la funzione d'onda di spin simmetrica descrive un sistema con spin totale uguale ad 1 (**tripletto**) e la funzione antisimmetrica corrisponde allo spin 0 (**singoletto**). Si hanno quindi le seguenti possibilità:

$$\begin{aligned} \varphi_S(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \chi_A(\sigma_1, \sigma_2) \quad , \quad \chi_A &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+ \chi_- - \chi_- \chi_+) \\ \varphi_A(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \chi_S(\sigma_1, \sigma_2) \quad , \quad \chi_S &= \begin{cases} \chi_+ \chi_+ , \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_+ \chi_- + \chi_- \chi_+) \\ \chi_- \chi_- \end{cases} \quad . \quad (18.26) \end{aligned}$$

In altri termini, i livelli energetici cui corrispondono le soluzioni simmetriche dell'equazione di Schrödinger possono di fatto esistere se lo spin totale del sistema è uguale a zero, mentre i livelli energetici corrispondenti a funzioni antisimmetriche richiedono che lo spin totale sia uguale ad 1.

La circostanza per cui i valori energetici possibili di un sistema di elettroni risultano dipendenti dallo spin totale, anche quando l'Hamiltoniana non dipende dallo spin, ci permette di parlare di una interazione peculiare delle particelle che porta questa dipendenza. Tale interazione si chiama **interazione di scambio**.

Osserviamo infine che se anche l'Hamiltoniano del sistema dipende dagli operatori di spin ma per un termine indipendente dalle coordinate spaziali della particella, ossia l'Hamiltoniano ha la forma $H = H_x + H_{spin}$, allora la funzione d'onda del sistema si scrive ancora nella forma di prodotto di una parte dipendente dalle coordinate spaziali e una parte dipendente dalle coordinate di spin, come in eq. (18.24). Quanto detto a proposito della simmetria delle due parti della funzione d'onda si applica allora ugualmente anche in questa circostanza.

Capitolo 19 | Atomo di idrogeno

19.1 Il problema dei due corpi e il moto in un campo centrale

Consideriamo un **atomo idrogenoide**, costituito cioè da un nucleo di carica positiva Ze ($Z=1$ per l'**atomo di idrogeno**) ed un elettrone di carica $-e$ che interagiscono dunque mediante il potenziale coulombiano

$$\boxed{V(r) = -\frac{Ze^2}{r}}, \quad (19.1)$$

dove r è la distanza tra le due particelle.

Nella meccanica quantistica, il problema del **moto di due particelle interagenti** può essere ridotto al problema di una sola particella in moto in un campo centrale, in modo analogo a come può essere fatto in meccanica classica.

L'**Hamiltoniana** non relativistica delle due particelle, con masse m_1 ed m_2 , ha la forma

$$\boxed{H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}. \quad (19.2)$$

Poichè la trattazione in questa sezione rimane valida per una qualunque legge di interazione tra le particelle, la forma del potenziale $V(r)$ verrà di seguito mantenuta generica.

19.1.1 Moto del centro di massa e moto relativo

Introduciamo in luogo dei raggi vettori delle particelle, \vec{r}_1 ed \vec{r}_2 , le nuove variabili

$$\boxed{\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}}, \quad \boxed{\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2}, \quad (19.3)$$

dove \vec{R} è il raggio vettore del centro di massa della particella ed \vec{r} è il vettore della distanza relativa.

Con un semplice calcolo possiamo ottenere le espressioni dell'operatore di energia cinetica in termini degli impulsi coniugati alle variabili \vec{R} ed \vec{r} . Si ha:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial R_x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial R_x} + \frac{\partial r_x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial r_x} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial R_x} + \frac{\partial}{\partial r_x} \quad (19.4)$$

e dunque

$$\vec{\nabla}_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_R + \vec{\nabla}_r. \quad (19.5)$$

Analogamente si trova

$$\vec{\nabla}_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_R - \vec{\nabla}_r. \quad (19.6)$$

Prendendo il quadrato di queste espressioni otteniamo per i laplaciani:

$$\begin{aligned} \nabla_1^2 &= \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \nabla_R^2 + \nabla_r^2 + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_R \cdot \vec{\nabla}_r, \\ \nabla_2^2 &= \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \nabla_R^2 + \nabla_r^2 - \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_R \cdot \vec{\nabla}_r. \end{aligned} \quad (19.7)$$

Allora

$$\frac{1}{m_1} \nabla_1^2 + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 = \frac{1}{m_1 + m_2} \nabla_R^2 + \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \nabla_r^2. \quad (19.8)$$

L'**Hamiltoniano delle due particelle** prende allora, in termini delle variabili del centro di massa e del moto relativo, la forma:

$$\boxed{H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)}, \quad (19.9)$$

dove

$$\boxed{\vec{P} = -i\hbar \vec{\nabla}_R}, \quad \boxed{\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}_r}, \quad (19.10)$$

ed abbiamo introdotto la **massa totale** del sistema

$$\boxed{M = m_1 + m_2} \quad (19.11)$$

e la **massa ridotta**

$$\boxed{m = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^{-1} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}}. \quad (19.12)$$

Nel caso di protone ed elettrone, per i quali $m_p \gg m_e$ ($m_p \simeq 938$ MeV, $m_e \simeq 0.51$ MeV) si ha $M \simeq m_p$ ed $m \simeq m_e$.

L'Hamiltoniano (19.9) si scompone quindi nella somma di due parti indipendenti. Partendo da questo fatto **si può cercare la soluzione dell'equazione di Schrödinger del sistema nella forma:**

$$\boxed{\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{R}) \psi(\vec{r})}, \quad (19.13)$$

dove la funzione $\varphi(\vec{R})$ descrive il moto del centro di massa, come moto libero di una particella di massa $M = m_1 + m_2$, e $\psi(\vec{r})$ descrive il moto relativo delle particelle come moto di una particella di massa m in un campo a simmetria centrale, $V = V(r)$.

La funzione $\varphi(\vec{R})$ che descrive il moto del centro di massa soddisfa l'equazione di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \varphi(\vec{R}) = E_{CM} \varphi(\vec{R}) \quad (19.14)$$

ed ha dunque la forma di un'onda piana,

$$\boxed{\varphi(\vec{R}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{P}\cdot\vec{R}/\hbar}}, \quad (19.15)$$

con $E_{CM} = \vec{P}^2/2M$.

L'equazione di Schrödinger del moto relativo corrisponde invece al moto di una particella nel campo a simmetria centrale ed ha la forma

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})}. \quad (19.16)$$

In questa equazione $E = E_{tot} - \vec{P}^2/2M$ è l'energia interna del sistema delle due particelle, ossia l'energia restante a seguito della sottrazione dell'energia cinetica associata al moto traslatorio del sistema nel suo insieme.

19.1.2 Moto relativo in coordinate polari

Risulta conveniente studiare l'eq. (19.16) in coordinate polari. A tale scopo deriviamo in primo luogo una **relazione tra l'operatore laplaciano ed il quadrato L^2 del momento angolare orbitale**. Utilizzando la convenzione per cui indici ripetuti sono sommati tra loro, senza che sia indicato esplicitamente il simbolo di sommatoria, si ha:

$$\begin{aligned} L^2 &= (\vec{r} \wedge \vec{p})^2 = -\hbar^2 (\vec{r} \wedge \vec{\nabla})^2 = -\hbar^2 (\vec{r} \wedge \vec{\nabla})_i (\vec{r} \wedge \vec{\nabla})_i = \\ &= -\hbar^2 \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} r_j \partial_k r_l \partial_m = -\hbar^2 (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) r_j \partial_k r_l \partial_m = \\ &= -\hbar^2 (r_j \partial_k r_j \partial_k - r_j \partial_k r_k \partial_j). \end{aligned} \quad (19.17)$$

Utilizziamo ora nella (19.17) la relazione

$$\partial_k r_j = r_j \partial_k + \delta_{kj} \quad (19.18)$$

per avvicinare a secondo membro termini con indici uguali ed ottenere:

$$\begin{aligned} L^2 &= -\hbar^2 [r_j (r_j \partial_k + \delta_{kj}) \partial_k - (\partial_k r_j - \delta_{kj}) r_k \partial_j] = \\ &= -\hbar^2 [r_j r_j \partial_k \partial_k + r_j \partial_j - \partial_k r_k r_j \partial_j + r_j \partial_j] = \\ &= -\hbar^2 [r^2 \nabla^2 + 2 \vec{r} \cdot \vec{\nabla} - (r_k \partial_k + \delta_{kk}) r_j \partial_j] = \\ &= -\hbar^2 [r^2 \nabla^2 - (\vec{r} \cdot \vec{\nabla})^2 - \vec{r} \cdot \vec{\nabla}]. \end{aligned} \quad (19.19)$$

Il prodotto scalare $\vec{r} \cdot \vec{\nabla}$ coincide, a meno di un fattore moltiplicativo r , con la proiezione dell'operatore gradiente nella direzione del raggio vettore \vec{r} , ossia con la derivata rispetto ad r . Si ha infatti:

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial r} \frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{r} \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{\nabla}, \quad (19.20)$$

ossia

$$\boxed{\vec{r} \cdot \vec{\nabla} = r \frac{\partial}{\partial r}} \quad (19.21)$$

Sostituendo questa relazione nella (19.19), giungiamo infine all'espressione del laplaciano in coordinate polari in termini dell'operatore L^2 ,

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r^2} [(\vec{r} \cdot \vec{\nabla})^2 + (\vec{r} \cdot \vec{\nabla})] - \frac{L^2/\hbar^2}{r^2} = \frac{1}{r^2} \left[\left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] - \frac{L^2/\hbar^2}{r^2} = \\ &= \frac{1}{r^2} \left[r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial}{\partial r} \right] - \frac{L^2/\hbar^2}{r^2} = \frac{1}{r^2} \left[r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \right) \frac{\partial}{\partial r} \right] - \frac{L^2/\hbar^2}{r^2}, \end{aligned} \quad (19.22)$$

ossia

$$\boxed{\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2/\hbar^2}{r^2}} \quad (19.23)$$

L'equazione di Schrödinger del moto di una particella nel campo a simmetria centrale, eq. (19.16), si scrive allora nella forma:

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(\frac{L^2}{2mr^2} + V(r) - E \right) \right] \psi = 0} \quad (19.24)$$

Tutta la dipendenza dagli angoli delle coordinate polari, in questa equazione, è contenuta nell'operatore L^2 , che dunque **commuta con l'Hamiltoniano**.

Per la stessa ragione, l'Hamiltoniano commuta anche separatamente con le componenti L_x , L_y , L_z . Dunque:

$$\boxed{\boxed{[H, L^2] = 0 \quad , \quad [H, L_i] = 0}} \quad . \quad (19.25)$$

Ne segue pertanto che **nel moto in un campo a simmetria centrale il momento angolare orbitale si conserva**, ossia si conservano il quadrato del momento angolare orbitale L^2 e separatamente le componenti L_x , L_y , L_z .

Poiché l'Hamiltoniano non dipende dallo spin, l'Hamiltoniano commuta anche con gli operatori di spin, da cui segue che anche **il momento angolare di spin si conserva**. Inoltre, dalla conservazione separatamente del momento angolare orbitale e del momento angolare di spin segue anche **la conservazione del momento angolare totale, $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, del sistema**. La legge di conservazione del momento angolare totale è, come sappiamo, la conseguenza dell'invarianza del sistema rispetto a rotazioni spaziali (lungo qualunque asse), che risulta infatti verificata per il moto in un campo a simmetria centrale¹.

19.1.3 Equazione radiale

Consideriamo ora le autofunzioni simultanee dell'Hamiltoniano e dell'operatore L^2 , ossia le funzioni d'onda degli stati stazionari del sistema con valori determinati del momento angolare l e della sua proiezione lungo l'asse z . Queste funzioni sono della forma

$$\boxed{\boxed{\psi(\vec{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi)}} \quad , \quad (19.26)$$

dove Y_{lm} sono le funzioni armoniche sferiche.

Poiché $L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$, per la funzione d'onda radiale $R(r)$ si ottiene dalla (19.24) l'equazione:

$$\boxed{\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right] R(r) = 0}} \quad , \quad (19.27)$$

Questa equazione non contiene affatto il valore di $L_z = \hbar m$, da cui segue che **i livelli di energia sono $(2l+1)$ volte degeneri rispetto alle direzioni del momento angolare**.

¹Quando nella trattazione dell'atomo di idrogeno si prendono in considerazione le correzioni relativistiche, come discusso nel capitolo 20, interviene nell'Hamiltoniano un'interazione detta di "spin-orbita", proporzionale al prodotto scalare $\vec{L} \cdot \vec{S}$. In questa circostanza, i momenti angolari orbitali e di spin non si conservano più separatamente per l'atomo, ma si conserva comunque il momento angolare totale \vec{J} , come conseguenza dell'invarianza del sistema rispetto a rotazioni spaziali.

Effettuiamo nell'equazione d'onda per il moto radiale la sostituzione:

$$\boxed{R(r) = \frac{1}{r} \chi(r)} \quad . \quad (19.28)$$

Poiché

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \chi}{\partial r} \frac{1}{r} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \chi}{\partial r} - \chi \right) = \\ &= \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \frac{\partial \chi}{\partial r} - \frac{\partial \chi}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} \end{aligned} \quad (19.29)$$

l'equazione radiale si riduce a:

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right] \chi(r) = 0} \quad . \quad (19.30)$$

Questa equazione coincide formalmente con l'**equazione di Schrödinger unidimensionale** per il moto in un campo con energia potenziale

$$\boxed{V_l(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}} \quad , \quad (19.31)$$

uguale alla somma dell'energia $V(r)$ e del termine

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = \frac{L^2}{2mr^2} \quad , \quad (19.32)$$

che si può chiamare **energia centrifuga**. Il problema del moto in un campo a simmetria centrale si riduce, quindi, al problema unidimensionale in una regione semilimitata, $r > 0$.

Se l'energia potenziale $V(r)$ è ovunque finita, allora la funzione d'onda, e in particolare la sua parte radiale $R(r)$, deve essere ovunque finita. Ne segue che $\chi(r) = r R(r)$ deve annullarsi per $r = 0$,

$$\boxed{\chi(0) = 0} \quad . \quad (19.33)$$

Questa condizione vale anche per un campo $V(r)$ che, come il campo coulombiano, per $r \rightarrow 0$ diventa infinito.

Carattere unidimensionale ha anche la condizione di normalizzazione della funzione $\chi(r)$, che è definita dall'integrale:

$$\boxed{\int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2 = \int_0^\infty dr |\chi(r)|^2} \quad . \quad (19.34)$$

È possibile dimostrare (si veda l'appendice alla fine del capitolo) che nel moto unidimensionale in una regione limitata o semilimitata, con la condizione al contorno (19.33) per $r = 0$, i livelli energetici non sono degeneri. Si può allora affermare che l'assegnazione del valore dell'energia determina completamente la parte radiale della funzione d'onda. Tenendo anche conto che la parte angolare della funzione d'onda è data completamente dai valori di l ed m , concludiamo che **nel moto in un campo a simmetria centrale la funzione d'onda spaziale è definita completamente dai valori di E , l , m** . A questi, per specificare la funzione d'onda completa, si deve poi aggiungere il valore della proiezione dello spin della particella. In altri termini **l'energia, il quadrato del momento angolare, la sua proiezione e la proiezione dello spin costituiscono un sistema completo di grandezze fisiche per tale moto**.

19.2 Campo coulombiano

19.2.1 Potenziale efficace ed equazione radiale

La trattazione sin qui sviluppata è valida per un'interazione $V(r)$ tra le due particelle di forma arbitraria. Per la risoluzione dell'equazione radiale (19.27), torniamo ora a considerare il caso specifico del potenziale coulombiano,

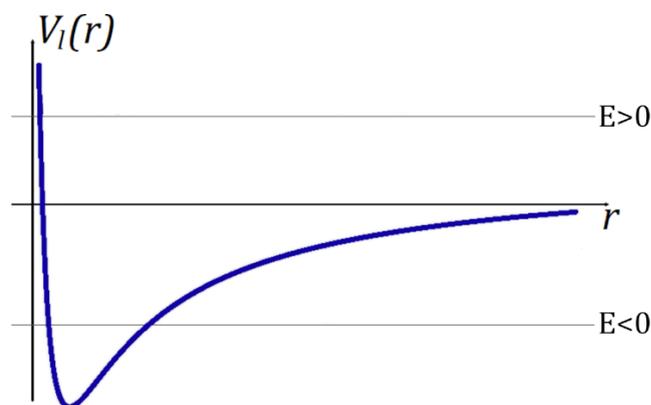
$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (19.35)$$

con $Z = 1$ per l'atomo di idrogeno.

Dalle considerazioni fatte e dall'eq. (19.31) sappiamo che il moto si riduce formalmente ad un moto unidimensionale con energia potenziale efficace

$$V_l(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (19.36)$$

Riportiamo qui il grafico di tale potenziale:



Si vede allora che lo spettro degli autovalori negativi dell'energia corrisponde agli stati legati del sistema ed è dunque discreto, mentre per le energie positive il moto si estende da zero all'infinito e lo spettro è continuo.

Consideriamo qui in particolare il caso dello spettro discreto, ossia degli stati legati degli atomi idrogenoidi.

L'equazione di Schrödinger per le funzioni radiali, eq. (19.27), si scrive:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} - E \right] R(r) = 0 \quad (19.37)$$

Per risolvere questa equazione risulta conveniente introdurre in primo luogo delle variabili adimensionali. Dalla precedente equazione risultano evidenti le seguenti uguaglianze "dimensionali":

$$[E] = \left[\frac{Ze^2}{r} \right] = \left[\frac{\hbar^2}{mr^2} \right], \quad (19.38)$$

da cui²

$$\left[r \right] = \left[\frac{\hbar^2}{mZe^2} \right], \quad \left[E \right] = \left[\frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2} \right]. \quad (19.39)$$

Introduciamo allora, in luogo dell'energia, una nuova variabile adimensionale n definita da

$$E = -\frac{1}{2n^2} \frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2}. \quad (19.40)$$

Per energie negative n è un numero reale positivo.

In luogo del raggio r introduciamo poi la variabile adimensionale ρ definita da

$$r = n \frac{\hbar^2}{mZe^2} \rho. \quad (19.41)$$

Sostituendovi le (19.40) e (19.41), l'eq. (19.37) diventa:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{mZe^2}{n\hbar^2} \right)^2 \left(\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) + \frac{m(Ze^2)^2}{n\hbar^2} \frac{1}{\rho} - \frac{m(Ze^2)^2}{2n^2\hbar^2} \right] R = 0, \quad (19.42)$$

²Dalla trattazione del modello di Bohr dell'atomo di idrogeno nel capitolo 1, sappiamo che la quantità $a_0 = \hbar^2/me^2$ che compare nella prima delle eq. (19.39) è il **raggio di Bohr**. La costante $R = e^2/2a_0 = me^4/2\hbar^2$ che compare, a meno del fattore 1/2, nella seconda delle eq. (19.39) è la **costante di Rydberg**.

ossia, dividendo per $m(Ze^2)^2 / (2n^2\hbar^2)$ ed esplicitando le derivate:

$$\boxed{\boxed{\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2n}{\rho} - 1 \right] R = 0}} \quad (19.43)$$

19.2.2 Soluzioni asintotiche

Consideriamo dapprima le **soluzioni asintotiche** dell'eq. (19.43) valide per $\rho \rightarrow 0$ (che è un punto singolare) e $\rho \rightarrow \infty$.

Nel limite $\rho \rightarrow 0$ l'eq. (19.43) si riduce a:

$$\boxed{\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R = 0} \quad (19.44)$$

Cerchiamo una soluzione di questa equazione della forma

$$\boxed{R(\rho) = \text{costante} \cdot \rho^s} \quad (19.45)$$

Sostituendo questa espressione nell'eq. (19.44) si ottiene:

$$s(s-1) + 2s - l(l+1) = 0, \quad (19.46)$$

ossia

$$\boxed{s(s+1) = l(l+1)}, \quad (19.47)$$

che ha come soluzioni

$$s = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4l(l+1)}}{2} = \frac{-1 \pm (2l+1)}{2} = \begin{cases} l \\ -(l+1) \end{cases} \quad (19.48)$$

La soluzione $s = -(l+1)$ deve essere scartata perché conduce ad una funzione d'onda divergente nell'origine. **Nell'intorno dell'origine**, ossia per $\rho \rightarrow 0$, si ha quindi

$$\boxed{\boxed{R(\rho) \simeq \rho^l}} \quad (19.49)$$

Osserviamo che **questo risultato rimane valido per ogni potenziale che nell'origine diverge più lentamente del potenziale centrifugo**, ossia più lentamente di $1/r^2$. Il suo significato è che quanto più grande è il valore del momento

angolare, tanto più piccola è la probabilità di trovare la particella nell'origine. Questo risultato è in accordo anche con le previsioni classiche.

Studiamo ora l'equazione per grandi ρ , ossia nel limite $\rho \rightarrow \infty$. In tale approssimazione l'eq. (19.43) si riduce a:

$$\boxed{\frac{d^2 R}{d\rho^2} - R = 0} \quad (19.50)$$

la cui soluzione è

$$R(\rho) = e^{\pm\rho}. \quad (19.51)$$

La soluzione che si annulla all'infinito, la sola fisicamente accettabile, è:

$$\boxed{R(\rho) = e^{-\rho}}. \quad (19.52)$$

In definitiva concludiamo che la soluzione cercata è della forma

$$\boxed{R(\rho) = \rho^l e^{-\rho} w(\rho)}, \quad (19.53)$$

dove $w(\rho)$ è una funzione da determinare che deve divergere all'infinito non più rapidamente di una potenza finita di ρ e deve essere finita e diversa da zero per $\rho = 0$.

19.2.3 Soluzione esatta

Sostituendo la funzione d'onda (19.53) nell'equazione radiale (19.43), e considerando che

$$\frac{dR}{d\rho} = \rho^{l-1} e^{-\rho} [(l - \rho) w + \rho w'] \quad (19.54)$$

e

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} = \rho^{l-2} e^{-\rho} [\rho^2 w'' + 2(l - \rho) \rho w' + (l(l - 1) - 2l\rho + \rho^2) w], \quad (19.55)$$

otteniamo per w l'equazione

$$\boxed{\rho w'' + 2(l + 1 - \rho) w' + 2(n - l - 1) w = 0}. \quad (19.56)$$

Cerchiamo per la soluzione $w(\rho)$ un'espressione per serie, poniamo cioè

$$\boxed{w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k} \quad (19.57)$$

con $w(0) = a_0 \neq 0$. Sostituendo nell'equazione di w otteniamo:

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k [k(k-1)\rho^{k-1} + 2(l+1)k\rho^{k-1} - 2k\rho^k + 2(n-l-1)\rho^k] = 0, \quad (19.58)$$

ossia, effettuando il cambio di variabile $k \rightarrow k+1$ nei primi due termini,

$$\sum_{k=0}^{\infty} [k(k+1)a_{k+1} + 2(l+1)(k+1)a_{k+1} - 2ka_k + 2(n-l-1)a_k] \rho^k = 0$$

(19.59)

Perché la serie sia nulla per ogni valore di ρ devono essere separatamente nulli i coefficienti di ogni potenza di ρ , si deve cioè avere

$$a_{k+1} = \frac{2[k - (n-l-1)]}{(k+1)(k+2l+2)} a_k$$

(19.60)

In questo modo, la funzione radiale $w(\rho)$ risulta completamente determinata. Ciascun coefficiente a_{k+1} della serie (19.57) è infatti determinato in termini del coefficiente precedente a_k dall'eq. (19.60) e il primo di questi coefficienti, a_0 , è determinato dalla condizione di normalizzazione della funzione d'onda.

Dobbiamo tuttavia ancora verificare che la funzione $w(\rho)$ così risultante abbia nel limite $\rho \rightarrow \infty$ un comportamento tale da non modificare l'andamento asintotico proporzionale a $e^{-\rho}$ previsto per la funzione d'onda complessiva, in accordo con l'eq. (19.53). L'andamento della funzione $w(\rho)$ per grandi valori di ρ è determinato dall'andamento asintotico dei coefficienti della serie (19.57) per grandi valori di k . Dall'eq. (19.60) risulta che, per grandi valori di k ,

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \simeq \frac{2}{k} \quad (19.61)$$

e pertanto

$$a_{k+1} = \frac{a_{k+1}}{a_k} \frac{a_k}{a_{k-1}} \frac{a_{k-1}}{a_{k-2}} \dots \frac{a_1}{a_0} a_0 \simeq \frac{2}{k} \frac{2}{k-1} \frac{2}{k-2} \dots a_0 \simeq \frac{2^k a_0}{k!} \quad (19.62)$$

Ma in questo caso

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \approx a_0 \sum_k \frac{(2\rho)^k}{k!} \approx a_0 e^{2\rho} \quad (19.63)$$

e la funzione $w(\rho)$ così trovata non soddisfa la condizione al contorno all'infinito. Perché invece $w(\rho)$ diverga all'infinito al più come una potenza finita di ρ , vediamo dall'eq. (19.60) che deve essere $(n-l-1)$ un numero intero positivo o nullo. In tal caso infatti la serie viene interrotta e $w(\rho)$ si riduce ad un polinomio di grado

$(n-l-1)$. Si giunge così alla conclusione che il numero n deve essere un intero positivo e, per n dato, si deve avere

$$\boxed{\boxed{l \leq n - 1}} . \quad (19.64)$$

Ricordando la definizione (19.40) del parametro n troviamo per gli **autovalori dell'energia** l'espressione

$$\boxed{\boxed{E_n = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2}}} \quad n = 1, 2, \dots \quad (19.65)$$

Lo spettro discreto in un campo coulombiano è costituito dunque da un'infinità di livelli compresi tra il livello fondamentale

$$\boxed{\boxed{E_1 = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \simeq -Z^2 (13.6 \text{ eV})}} \quad (19.66)$$

e zero. Gli intervalli tra due livelli consecutivi diminuiscono al crescere di n . I livelli si infittiscono man mano che ci si avvicina al valore $E = 0$, dove lo spettro discreto si connette con quello continuo. L'energia E_1 , in modulo, rappresenta dunque anche l'energia di ionizzazione dell'atomo.

Il numero intero n è detto **numero quantico principale**. In accordo con l'eq. (19.64), per un numero quantico principale dato, il numero l può assumere i valori

$$\boxed{\boxed{l = 0, 1, \dots, n - 1}} , \quad (19.67)$$

in totale n valori diversi.

Nell'espressione dell'energia entra solo il numero n . Pertanto tutti gli stati con l diversi, ma con uguali n , hanno la stessa energia. Ogni autovalore è quindi degenere non soltanto rispetto al numero quantico m (come per qualsiasi moto in un campo a simmetria centrale) ma anche rispetto al numero l . Quest'ultima **degenerazione**, detta **accidentale**, è specifica del campo coulombiano. Ad ogni valore di l dato corrispondono $2l + 1$ valori differenti di m . Pertanto **l'ordine di degenerazione $\text{deg}(E_n)$ dell' n -esimo livello energetico è**, considerando anche un fattore 2 per la degenerazione di spin:

$$\text{deg}(E_n) = 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2 \left[2 \frac{(n-1)n}{2} + n \right], \quad (19.68)$$

ossia

$$\boxed{\boxed{\text{deg}(E_n) = 2n^2}} . \quad (19.69)$$

I polinomi che si ottengono interrompendo la serie che esprime $w(\rho)$ sono i cosiddetti **polinomi generalizzati di Laguerre**. Le funzioni d'onda radiali complete normalizzate con la condizione

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{nl}(r)^2 = 1 \quad , \quad (19.70)$$

hanno la forma

$$R_{nl}(\rho) = \frac{2^{l+1}}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} e^{-\rho} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \quad , \quad (19.71)$$

dove L_n^a sono i polinomi generalizzati di Laguerre e

$$\rho = \frac{Z}{n} \frac{r}{a_0} \quad \text{con} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad . \quad (19.72)$$

La grandezza a_0 , detta **raggio di Bohr**, vale

$$a_0 \simeq 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad . \quad (19.73)$$

La decrescita esponenziale delle funzioni d'onda radiali indica che $\rho \sim 1$, ossia

$$r \sim \frac{n}{Z} a_0 \quad , \quad (19.74)$$

rappresenta la **tipica dimensione radiale delle orbite stazionarie** per un dato valore del numero quantico principale n . Le orbite sono tanto più vicine al nucleo quanto più è piccolo il numero quantico principale e quanto più è alta la carica elettrica Z del nucleo.

A partire dalla dimensione tipica del raggio delle orbite, $r \sim a_0$, possiamo derivare, utilizzando il principio di indeterminazione, la tipica **velocità dell'elettrone**. Si ha:

$$r \sim \frac{n}{Z} a_0 = \frac{n}{Z} \frac{\hbar^2}{me^2} \quad \Rightarrow \quad v = \frac{p}{m} \sim \frac{1}{m} \frac{\hbar}{r} \sim \frac{\hbar}{m} \frac{Z}{n} \frac{me^2}{\hbar^2} = \frac{Z}{n} \frac{e^2}{\hbar} \quad . \quad (19.75)$$

Equivalentemente, possiamo esprimere la tipica velocità dell'elettrone nell'atomo in unità della velocità della luce,

$$\frac{v}{c} \sim \frac{Z}{n} \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{Z}{n} \alpha \quad \text{con} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad . \quad (19.76)$$

La costante adimensionale α è detta **costante di struttura fine**. La velocità dell'elettrone nell'atomo di idrogeno ($Z = 1$), nello stato fondamentale ($n = 1$), è dunque circa α volte più piccola della velocità della luce. Le **correzioni relativistiche** nell'Hamiltoniano dell'atomo, che qui sono state trascurate, portano dunque ad effetti dell'ordine di $v^2/c^2 \sim \alpha^2 \sim 10^{-4}$.

Appendice: degenerazione dei livelli nel moto unidimensionale

In questa appendice dimostriamo che per il moto unidimensionale in una regione limitata, tale per cui cioè $\psi(x) \rightarrow 0$ per $x \rightarrow \pm\infty$, i livelli di energia, appartenenti in questo caso allo spettro discreto, sono tutti non degeneri. I livelli sono non degeneri anche quando la funzione d'onda si annulla asintoticamente solo in una direzione, ad esempio per $x \rightarrow +\infty$, o anche se il moto avviene in una regione semilimitata, ad esempio $x > x_0$, con la condizione al bordo $\psi(x_0) = 0$. Quest'ultimo, come abbiamo visto, è il caso della funzione d'onda radiale $\chi(r)$, con $r > 0$, per il moto in un campo a simmetria centrale.

Per dimostrare quanto enunciato, supponiamo che sia vero il contrario, ossia che, in una delle condizioni sopra elencate, esistano due autofunzioni distinte dell'Hamiltoniana, ψ_1 e ψ_2 , corrispondenti ad uno stesso autovalore degeneri E di energia. Le equazioni di Schrödinger unidimensionali indipendenti dal tempo per le due autofunzioni sono allora

$$\psi_1'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi_1 \quad , \quad \psi_2'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi_2 \quad (19.77)$$

dove l'apice indica la derivazione rispetto ad x . Dalle eq. (19.77), si ottiene $\psi_1''/\psi_1 = \psi_2''/\psi_2$ o, equivalentemente,

$$\psi_1'' \psi_2 - \psi_1 \psi_2'' = 0 \quad . \quad (19.78)$$

Integrando l'eq. (19.78) si trova:

$$\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2' = C \quad (19.79)$$

dove C è una costante. Se la funzione d'onda si annulla per $x \rightarrow +\infty$ o $x \rightarrow -\infty$, o in entrambi i limiti, oppure il moto avviene in una regione semilimitata con la condizione al bordo $\psi(x_0) = 0$, allora la costante a secondo membro dell'eq. (19.79) deve essere $C = 0$, ossia si deve avere:

$$\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2' = 0 \quad . \quad (19.80)$$

Questa equazione può essere nuovamente integrata. Dividendo entrambi i membri per ψ_2^2 , si ha:

$$\frac{\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2'}{\psi_2^2} = \left(\frac{\psi_1}{\psi_2} \right)' = 0 \quad , \quad (19.81)$$

da cui segue

$$\psi_1 = c \cdot \psi_2 , \tag{19.82}$$

con c costante. Ma per le condizioni di normalizzazione delle funzioni d'onda si deve avere $|c| = 1$. Le autofunzioni ψ_1 e ψ_2 differiscono allora al più per un fattore di fase moltiplicativo e rappresentano pertanto lo stesso stato, ossia non c'è degenerazione. Questo implica che i livelli di energia sono tutti non degeneri, come si voleva dimostrare.

F.d.o Radiali e Polinomi di Laguerre

Wolfram Mathematica notebook

Funzioni d'onda Radiali $R[n, l]$

- `LaguerreL[n, x]` gives the Laguerre polynomial $L_n(x)$.
- `LaguerreL[n, a, x]` gives the generalized Laguerre polynomial $L_n^a(x)$.
- The Laguerre polynomials are orthogonal with weight function $x^a e^{-x}$.
- They satisfy the differential equation $x y'' + (a + 1 - x) y' + n y = 0$.

```
R[n_, l_, r_] := 2/n^2 Sqrt[(n - l - 1)! / (n + l)!] *  
Exp[-r/n] ((2 r/n)^l) LaguerreL[n - l - 1, 2 l + 1, 2 r/n]
```

$n = 1$

```
n = 1; Do[Print["R[" , n, ", ", l, "] = ", R[n, l, r]], {l, 0, n - 1}]  
R[1,0] = 2 e-r
```

$n = 2$

```
n = 2; Do[Print["R[" , n, ", ", l, "] = ", R[n, l, r]], {l, 0, n - 1}]  
R[2,0] =  $\frac{e^{-r/2} (2 - r)}{2 \sqrt{2}}$   
R[2,1] =  $\frac{e^{-r/2} r}{2 \sqrt{6}}$ 
```

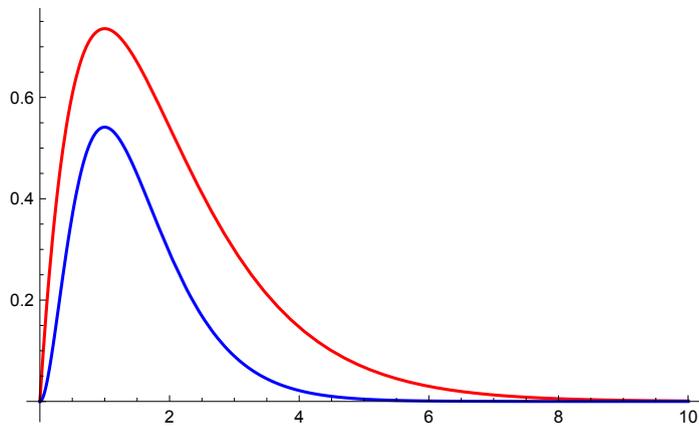
$n = 3$

```
n = 3; Do[Print["R[" , n, ", ", l, "] = ", R[n, l, r]], {l, 0, n - 1}]  
R[3,0] =  $\frac{2 e^{-r/3} (27 - 18 r + 2 r^2)}{81 \sqrt{3}}$   
R[3,1] =  $\frac{1}{27} \sqrt{\frac{2}{3}} e^{-r/3} \left(4 - \frac{2 r}{3}\right) r$   
R[3,2] =  $\frac{2}{81} \sqrt{\frac{2}{15}} e^{-r/3} r^2$ 
```

Grafici

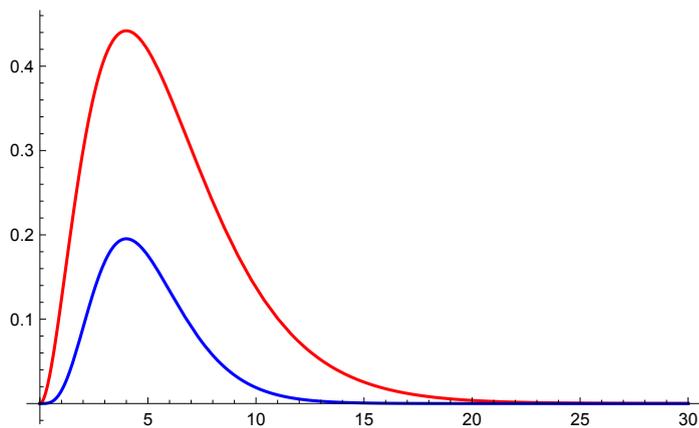
$n = 1$

```
n = 1; l = 0;
Plot[{r R[n, l, r], r^2 R[n, l, r]^2}, {r, 0, 10},
  PlotStyle -> {RGBColor[1, 0, 0], RGBColor[0, 0, 1]}]
```

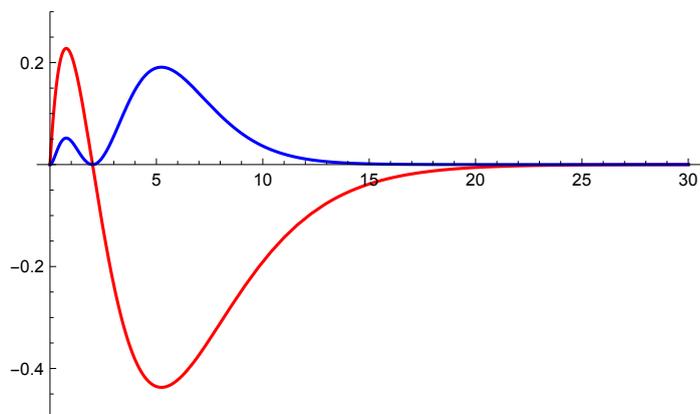


$n = 2$

```
n = 2; l = 1;
Plot[{r R[n, l, r], r^2 R[n, l, r]^2}, {r, 0, 30},
  PlotStyle -> {RGBColor[1, 0, 0], RGBColor[0, 0, 1]}]
```



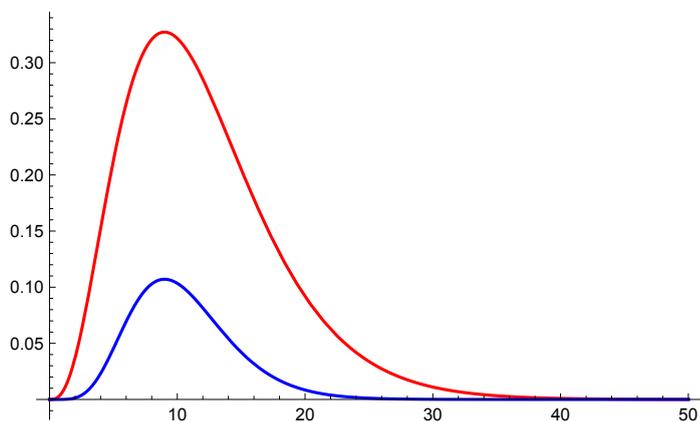
```
n = 2; l = 0;
Plot[{r R[n, l, r], r^2 R[n, l, r]^2}, {r, 0, 30},
  PlotStyle -> {RGBColor[1, 0, 0], RGBColor[0, 0, 1]}, PlotRange -> {-0.5, 0.3}]
```



$n = 3$

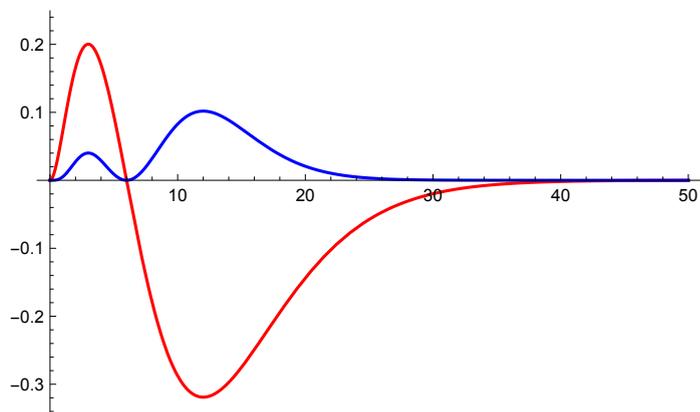
$n = 3; l = 2;$

```
Plot[{r R[n, l, r], r^2 R[n, l, r]^2}, {r, 0, 50},
  PlotStyle -> {RGBColor[1, 0, 0], RGBColor[0, 0, 1]}]
```

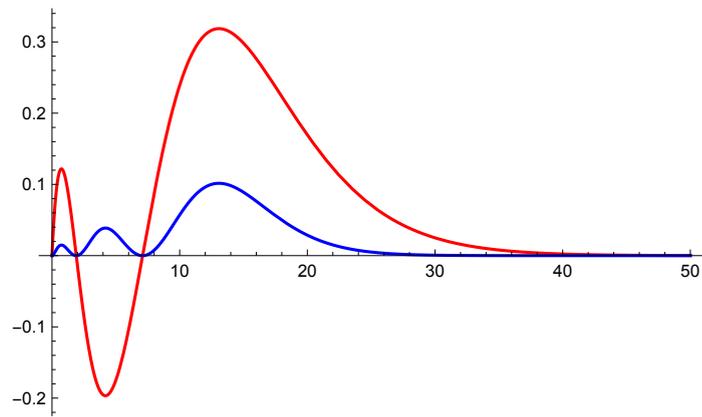


$n = 3; l = 1;$

```
Plot[{r R[n, l, r], r^2 R[n, l, r]^2}, {r, 0, 50},
  PlotStyle -> {RGBColor[1, 0, 0], RGBColor[0, 0, 1]}, PlotRange -> {-0.35, 0.25}]
```



```
n = 3; l = 0;  
Plot[{r R[n, l, r], r^2 R[n, l, r]^2}, {r, 0, 50},  
PlotStyle -> {RGBColor[1, 0, 0], RGBColor[0, 0, 1]}]
```

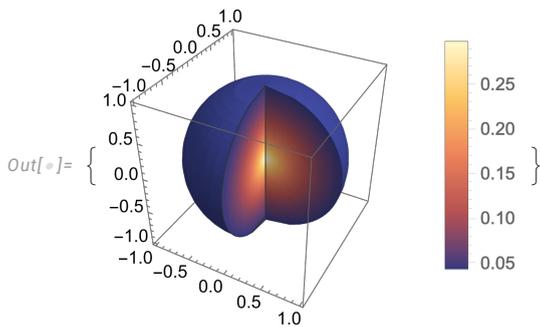
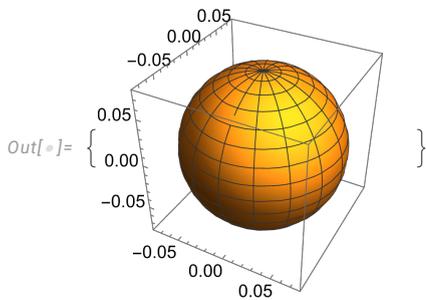


Orbitali dell'atomo di idrogeno

Plot

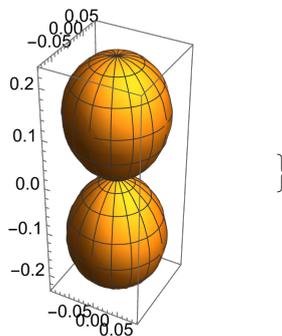
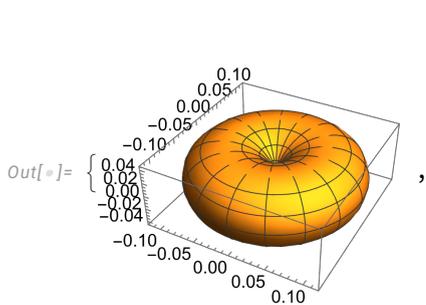
$n=1; l=0; m=0$

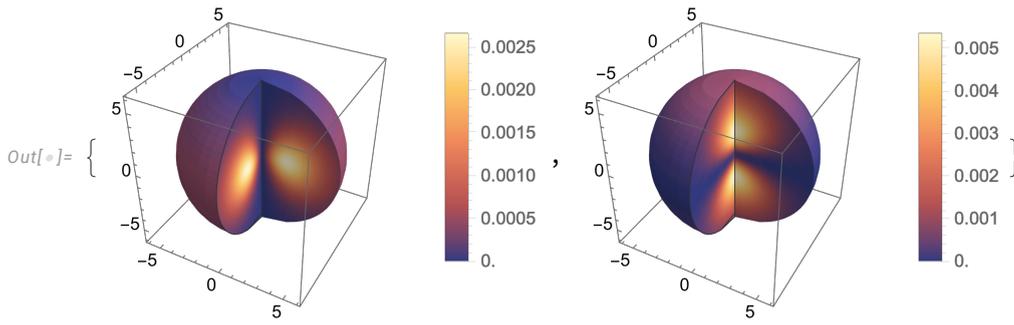
$$\text{Out[*]} = \left\{ \frac{1}{4\pi} \right\}$$



$n=2; l=1; m=1,0$

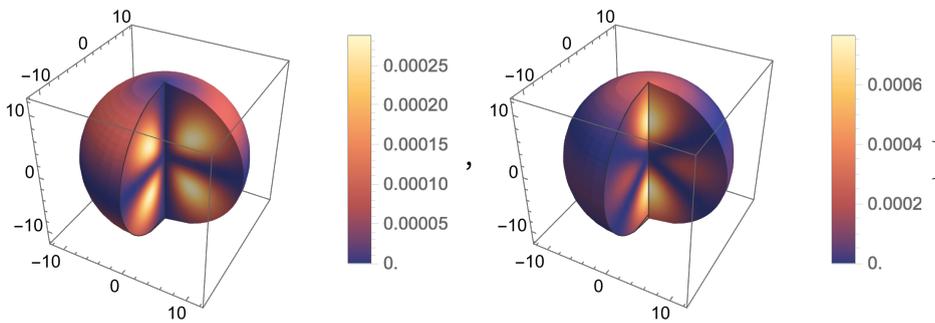
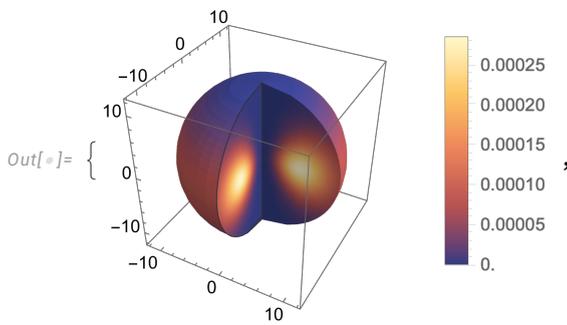
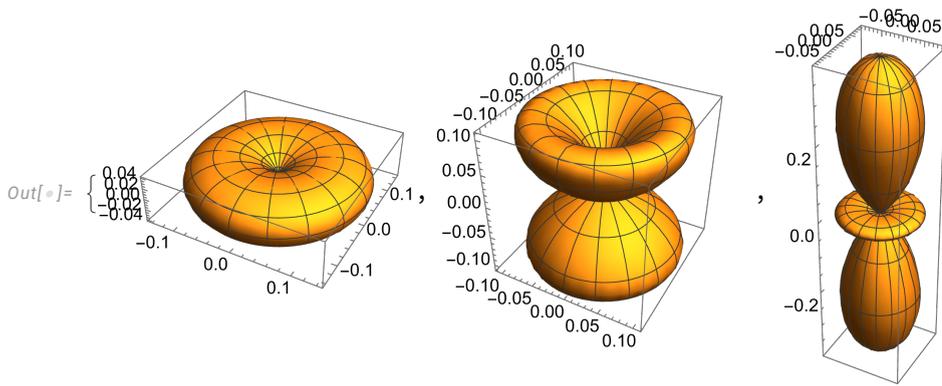
$$\text{Out[*]} = \left\{ \frac{3 \text{Sin}[\theta]^2}{8\pi}, \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{4\pi} \right\}$$





$n=3; l=2; m=2,1,0$

$$Out[*]= \left\{ \frac{15 \sin^4[\theta]}{32 \pi}, \frac{15 \cos^2[\theta] \sin^2[\theta]}{8 \pi}, \frac{5 (-1 + 3 \cos^2[\theta])^2}{16 \pi} \right\}$$



Parte III

[NON IN PROGRAMMA]

Correzioni relativistiche all'atomo di idrogeno

La trattazione dell'atomo di idrogeno sviluppata nel capitolo 19 era basata sull'Hamiltoniano

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \quad (20.1)$$

($Z = 1$ per l'atomo di idrogeno). In una trattazione più accurata è necessario prendere in considerazione diverse **correzioni** dovute ad **effetti relativistici**.

20.1 Termine cinetico

L'espressione dell'**energia cinetica** dell'elettrone si modifica quando si considerano **correzioni relativistiche**. Nella meccanica relativistica l'energia cinetica è data da:

$$\begin{aligned} E &= \sqrt{m^2c^4 + c^2\vec{p}^2} = mc^2\sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{m^2c^2}} \simeq mc^2\left(1 + \frac{\vec{p}^2}{2m^2c^2} - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^4c^4} + \dots\right) = \\ &= mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3c^2} + \dots \end{aligned} \quad (20.2)$$

Il termine della massa a riposo rappresenta una costante additiva irrilevante in questo contesto nella definizione dell'energia. La prima correzione relativistica è allora data dal termine

$$H_1 = -\frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3c^2}, \quad (20.3)$$

che deve essere aggiunto all'Hamiltoniano H_0 .

Una stima dell'effetto di questa correzione sui livelli di energia dell'atomo può essere ottenuto utilizzando il principio di indeterminazione ed assumendo come valore approssimato del raggio dell'orbita elettronica il valore a_0/Z . Si ottiene in tal

modo

$$\frac{\langle H_1 \rangle}{\langle H_0 \rangle} \approx \frac{\vec{p}^2}{m^2 c^2} \simeq \frac{\hbar^2 Z^2}{m^2 c^2 a_0^2} = \frac{\hbar^2 Z^2}{m^2 c^2} \left(\frac{m e^2}{\hbar^2} \right)^2 = \frac{Z^2 e^4}{\hbar^2 c^2}, \quad (20.4)$$

ossia

$$\boxed{\frac{\langle H_1 \rangle}{\langle H_0 \rangle} \approx \frac{\vec{p}^2}{m^2 c^2} \approx \left(\frac{v}{c} \right)^2 \approx (Z\alpha)^2}, \quad (20.5)$$

dove

$$\boxed{\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}} \quad (20.6)$$

è la cosiddetta **costante di struttura fine**. Così, per l'atomo di idrogeno, questa correzione relativistica è dell'ordine di grandezza relativo di $\sim 10^{-4}$. La velocità dell'elettrone, in unità della velocità della luce, è dell'ordine di $v/c \sim \alpha \sim 10^{-2}$.

20.2 Accoppiamento spin-orbita

L'esistenza dello **spin dell'elettrone** implica un'altra **correzione dello stesso ordine di grandezza**. Questa può essere qualitativamente compresa col seguente ragionamento: se l'elettrone fosse in quiete rispetto al protone, risentirebbe solo di un campo elettrico generato dalla carica del protone. Questo è il termine del potenziale di Coulomb che appare in H_0 . Poiché l'elettrone è però in movimento vi sono effetti addizionali.

Nel sistema di riferimento dell'elettrone, il protone è in moto così che è presente una corrente e l'elettrone risente di un campo magnetico. Questo campo magnetico interagisce con lo spin dell'elettrone, o, più precisamente, con il momento magnetico dell'elettrone.

Se il moto relativo del protone rispetto all'elettrone fosse rettilineo, il campo magnetico visto dall'elettrone sarebbe dato da:

$$\boxed{\vec{B}' = -\gamma \frac{\vec{v}}{c} \wedge \vec{E} \simeq -\frac{\vec{v}}{c} \wedge \vec{E}}, \quad (20.7)$$

dove \vec{E} è il campo elettrico nel sistema di quiete del protone.

Poiché l'elettrone ha un momento magnetico intrinseco proporzionale al suo spin, dalla forma

$$\boxed{\vec{\mu} = -\frac{e}{mc} \vec{S}} \quad (20.8)$$

ci aspettiamo che l'interazione con il campo magnetico effettivo risulti data da

$$\begin{aligned}
 H_2 &= -\vec{\mu} \cdot \vec{B}' = \frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B}' = -\frac{e}{mc^2} \vec{S} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{E}) = \\
 &= +\frac{e}{m^2 c^2} \vec{S} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{\nabla} \phi) = \frac{e}{m^2 c^2} \vec{S} \cdot \left(\vec{p} \wedge \frac{\vec{r}}{r} \frac{d\phi}{dr} \right) = \\
 &= -\frac{e}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \vec{S} \cdot (\vec{r} \wedge \vec{p}) = \frac{1}{m^2 c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) \vec{S} \cdot \vec{L}, \quad (20.9)
 \end{aligned}$$

dove $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ è il momento angolare orbitale dell'elettrone e $V = -e\phi = -Ze^2/r$ è il potenziale cui è soggetto l'elettrone.

In realtà il moto dell'elettrone non è rettilineo uniforme, ed il risultato ottenuto risulta troppo grande di un fattore 2 (questo effetto è noto come **precessione di Thomas**). Il termine di interazione corretto ha dunque la forma

$$\boxed{H_2 = \frac{1}{2m^2 c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) \vec{S} \cdot \vec{L}}, \quad (20.10)$$

con

$$\boxed{V = -\frac{Ze^2}{r}}. \quad (20.11)$$

Anche in questo caso è semplice ottenere una **stima della correzione** indotta dal termine aggiuntivo nell'Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
 \frac{\langle H_2 \rangle}{\langle H_0 \rangle} &\approx \frac{1}{m^2 c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{Ze^2}{r^2} \right) \vec{S} \cdot \vec{L} \left(\frac{Ze^2}{r} \right)^{-1} \approx \\
 &\approx \frac{\vec{S} \cdot \vec{L}}{m^2 c^2 r^2} \approx \frac{\hbar^2 Z^2}{m^2 c^2 a_0^2} = \frac{\hbar^2 Z^2}{m^2 c^2} \left(\frac{me^2}{\hbar^2} \right)^2 = \frac{Z^2 e^4}{\hbar^2 c^2}, \quad (20.12)
 \end{aligned}$$

ossia

$$\boxed{\frac{\langle H_2 \rangle}{\langle H_0 \rangle} \approx (Z\alpha)^2}. \quad (20.13)$$

L'interazione spin-orbita induce pertanto una correzione relativa ai livelli energetici dell'atomo che è dello stesso ordine di grandezza della correzione relativistica dovuta al termine cinematico ($\sim 10^{-4}$ per $Z = 1$).

20.3 Calcolo perturbativo delle correzioni

L'effetto stimato delle correzioni ai livelli energetici degli atomi idrogenoidi, indotto dalla correzione relativistica all'energia cinetica e dall'accoppiamento spin-orbita, è

sufficientemente piccolo da poter essere trattato, con ottima approssimazione, nella **teoria delle perturbazioni**.

Consideriamo come Hamiltoniano imperturbato l'Hamiltoniano H_0 dell'eq. (20.1) e come perturbazione V la somma degli Hamiltoniani H_1 e H_2 definiti in eq. (20.3) e (20.10):

$$V = H_1 + H_2 = -\frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{2m^2c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (20.14)$$

Proponiamoci quindi di calcolare le **correzioni ai livelli energetici imperturbati, al primo ordine nella perturbazione V** .

I livelli di energia dell'Hamiltoniano imperturbato H_0 , corrispondenti ad un determinato valore del numero quantico principale n , hanno un grado di degenerazione pari a $2n^2$. Gli stati degeneri differiscono per i diversi valori dei numeri quantici l, m_l ed m_s definiti dagli autovalori di L^2, L_z ed S_z . Per tutti gli stati con $n > 1$ risulta quindi necessario applicare la **teoria delle perturbazioni nel caso degenere**.

Il calcolo risulta estremamente semplificato se, per quanto concerne la dipendenza delle variabili angolari e di spin delle funzioni d'onda imperturbate, si considerano gli **autostati di**

$$J^2, J_z, L^2, S^2 \quad (20.15)$$

dove $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ è il momento angolare totale dell'elettrone, in luogo degli autostati di L^2, L_z, S^2, S_z .

Le perturbazioni H_1 ed H_2 possono infatti essere scritte convenientemente nella forma

$$H_1 = -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} \right)^2 = -\frac{1}{2mc^2} \left(H_0 + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \quad (20.16)$$

e

$$H_2 = \frac{1}{4m^2c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) \left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right) \quad (20.17)$$

Da queste espressioni risulta infatti evidente che **gli operatori H_1 ed H_2 commutano con gli operatori in (20.15), cosicché, nella corrispondente base, la perturbazione risulta già diagonale**. (È bene sottolineare, tuttavia, che le perturbazioni H_1 ed H_2 non commutano, ovviamente, con l'Hamiltoniano imperturbato H_0 . Pertanto H_1 ed H_2 risultano diagonali solo nel sottospazio degli autostati degeneri di H_0 corrispondenti a diversi valori di J^2, J_z ed L^2).

Le correzioni al primo ordine ai livelli energetici dell'atomo si ottengono allora direttamente calcolando i valori di aspettazione della perturbazione V sugli autostati di H_0 , J^2 , J_z , L^2 , S^2 . Indichiamo questi autostati con

$$\boxed{|n, l, j, m_j\rangle} . \quad (20.18)$$

Per un determinato valore del numero quantico orbitale l , il numero quantico j può assumere i valori

$$\boxed{j = l \pm 1/2} . \quad (20.19)$$

Le corrispondenti autofunzioni sono della forma

$$\boxed{\psi_{n,l,j,m_j} = R_{nl}(r) \mathcal{Y}_{j=l\pm 1/2,m_j}} , \quad (20.20)$$

dove $R_{nl}(r)$ sono le autofunzioni radiali dell'atomo e \mathcal{Y}_{j,m_j} le autofunzioni di J^2 e J_z .

Cominciamo con il calcolare, su questi stati, i valori medi della perturbazione H_1 indotta dalle correzioni relativistiche all'energia cinetica. Utilizzando l'eq. (20.16) troviamo:

$$\begin{aligned} \langle n, l, j, m_j | H_1 | n, l, j, m_j \rangle &= \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \langle n, l, j, m_j | \left(H_0 + \frac{Ze^2}{r} \right) \left(H_0 + \frac{Ze^2}{r} \right) | n, l, j, m_j \rangle = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \langle n, l, j, m_j | \left(E_n + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 | n, l, j, m_j \rangle = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left(E_n^2 + 2E_n Ze^2 \langle 1/r \rangle_{nl} + (Ze^2)^2 \langle 1/r^2 \rangle_{nl} \right), \end{aligned} \quad (20.21)$$

dove si sono definiti i valori medi

$$\boxed{\langle 1/r^k \rangle_{nl} = \langle n, l, j, m_j | \frac{1}{r^k} | n, l, j, m_j \rangle = \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{r^k} R_{nl}(r)^2} . \quad (20.22)$$

Per questi valori medi sono note delle formule generali, che qui riportiamo:

$$\boxed{\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} &= \left(\frac{Z}{a_0} \right) \frac{1}{n^2}, \\ \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} &= \left(\frac{Z}{a_0} \right)^2 \frac{1}{n^3 (l + 1/2)}, \\ \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} &= \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \frac{1}{n^3 l (l + 1/2) (l + 1)} \quad (l \neq 0) \end{aligned}} . \quad (20.23)$$

(Il valor medio $\langle 1/r^3 \rangle_{nl}$ risulterà utile nel calcolo della correzione indotta dall'accoppiamento spin-orbita).

Sostituendo i valori medi (20.23) nell'eq. (20.21) ed utilizzando le espressioni

$$E_n = -\frac{mc^2 (Z\alpha)^2}{2n^2} \quad (20.24)$$

per l'energia dei livelli imperturbati e

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar^2 c^2}{e^4} \frac{e^2}{mc^2} = \frac{e^2}{mc^2 \alpha^2} \quad (20.25)$$

per il raggio di Bohr, otteniamo:

$$\begin{aligned} \langle H_1 \rangle_{nljm_j} &= -\frac{1}{2mc^2} \left[\frac{m^2 c^4 (Z\alpha)^4}{4n^4} - \frac{mc^2 (Z\alpha)^2 Z e^2 mc^2 \alpha^2 Z}{n^4 e^2} + \right. \\ &\quad \left. + (Ze^2)^2 \frac{1}{n^3(l+1/2)} \left(\frac{mc^2 \alpha^2}{e^2} \right)^2 Z^2 \right] = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} (m^2 c^4) (Z\alpha)^4 \left[\frac{1}{4n^4} - \frac{1}{n^4} + \frac{1}{n^3(l+1/2)} \right], \end{aligned} \quad (20.26)$$

ossia

$$\boxed{\langle H_1 \rangle_{nljm_j} = -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \left[\frac{1}{n^3(l+1/2)} - \frac{3}{4n^4} \right]} \quad (20.27)$$

Questa correzione risulta dell'ordine di grandezza aspettato: più piccola di circa un fattore $(Z\alpha)^2$ rispetto ai livelli di energia imperturbati.

Calcoliamo ora la **correzione**, al primo ordine dello sviluppo perturbativo, **indotto** sui livelli di energia imperturbati **dall'interazione spin-orbita**. Utilizzando l'eq. (20.17) otteniamo:

$$\begin{aligned} \langle H_2 \rangle_{nljm_j} &= \langle n, l, j, m_j | H_2 | n, l, j, m_j \rangle = \\ &= \frac{1}{4m^2 c^2} \langle n, l, j, m_j | \left(\frac{Ze^2}{r^3} \right) (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) | n, l, j, m_j \rangle = \\ &= \frac{\hbar^2 Ze^2}{4m^2 c^2} \langle 1/r^3 \rangle_{nl} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right]. \end{aligned} \quad (20.28)$$

Il fattore tra parentesi quadre che entra in questa espressione, nei due casi $j = l \pm 1/2$, vale

$$\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right]_{j=l+1/2} = \left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} = l \quad (20.29)$$

e

$$\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right]_{j=l-1/2} = \left(l - \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{1}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} = -(l+1). \quad (20.30)$$

Sostituendo questi risultati nell'eq. (20.28), insieme al valore medio $\langle 1/r^3 \rangle_{nl}$ dato nell'eq. (20.23), si ottiene:

$$\boxed{\langle H_2 \rangle_{nljm_j} = \frac{1}{4} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3 (l+1/2)} \left(\frac{\delta_{j,l+1/2}}{l+1} - \frac{\delta_{j,l-1/2}}{l} \right)}, \quad (20.31)$$

valida per $l \neq 0$. La correzione di spin-orbita, proporzionale a $\vec{S} \cdot \vec{L}$, è ovviamente nulla per $l = 0$.

Le due correzioni, fornite dalle eq. (20.27) e (20.31), possono essere infine combinate per ottenere la **correzione totale**, al primo ordine nella perturbazione, ai livelli di energia degli atomi idrogenoidi. Nei due casi, corrispondenti a $j = l \pm 1/2$ si ottiene:

$$\begin{aligned} (\Delta E)_{j=l+1/2} &= (\langle H_1 \rangle + \langle H_2 \rangle)_{j=l+1/2} = \\ &= -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} - \frac{1}{2(l+1/2)(l+1)} \right] = \\ &= -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{l+1-1/2}{(l+1/2)(l+1)} - \frac{3}{4n} \right] = \\ &= -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{1}{l+1} - \frac{3}{4n} \right] = \\ &= -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right] \end{aligned} \quad (20.32)$$

e

$$\begin{aligned} (\Delta E)_{j=l-1/2} &= (\langle H_1 \rangle + \langle H_2 \rangle)_{j=l-1/2} = \\ &= -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} - \frac{1}{2l(l+1/2)} \right] = \\ &= -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{l+1/2}{l(l+1/2)} - \frac{3}{4n} \right] = \\ &= -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{1}{l} - \frac{3}{4n} \right] = \\ &= -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right]. \end{aligned} \quad (20.33)$$

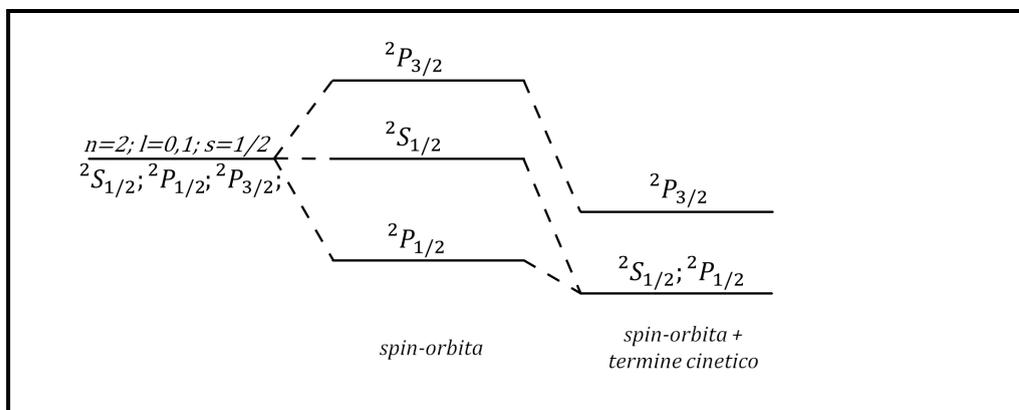
In conclusione, possiamo scrivere:

$$\boxed{\Delta E = \langle H_1 + H_2 \rangle_{nljm_j} = -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right]}, \quad (20.34)$$

valida per entrambi i valori $j = l \pm 1/2$.

Utilizzando l'equazione relativistica di Dirac è possibile mostrare che il risultato ottenuto è corretto anche nel caso $l = 0$.

Lo splitting dei livelli è rappresentato, per il caso $n = 2$, nello schema sottostante:



Gli stati con $l = 1$ (stati p) possono avere $j = 1/2$ e $j = 3/2$ mentre gli stati con $l = 0$ (stati s) corrispondono necessariamente a $j = 1/2$. È interessante osservare come le correzioni dovute allo spin-orbita e al termine cinetico si sommino in modo tale da rendere degeneri gli stati ${}^2S_{1/2}$ e ${}^2P_{1/2}$. Una trattazione più accurata, basata sull'equazione relativistica di Dirac, non altera questo risultato. Tuttavia, nel 1947, un accurato esperimento condotto da Lamb e Rutherford ha mostrato una sottile separazione tra i due livelli ${}^2S_{1/2}$ e ${}^2P_{1/2}$ (**Lamb-shift**). Questo effetto è spiegabile soltanto nel contesto della completa teoria quantistica relativistica ed è originato dalle fluttuazioni quantistiche del campo dell'elettrone.

Particella in un campo elettromagnetico esterno

Nella **teoria classica** l'Hamiltoniano di una particella di carica elettrica e ($e < 0$ per l'elettrone) in un campo elettromagnetico esterno ha la forma:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi, \quad (21.1)$$

dove ϕ è il potenziale scalare ed \vec{A} è il potenziale vettore del campo.

L'espressione (21.1) per l'Hamiltoniano può essere ottenuta, a partire dall'Hamiltoniano $H = \vec{p}^2/2m$ per la particella libera, effettuando la **sostituzione minimale**

$$E \rightarrow E - e\phi, \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}. \quad (21.2)$$

Se la particella non ha spin il passaggio alla meccanica quantistica avviene nel modo solito: la quantità di moto generalizzata \vec{p} va sostituita con l'operatore

$$\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}. \quad (21.3)$$

Sviluppando il quadrato $(\vec{p} - e/c\vec{A})^2$ occorre tener presente che l'operatore \vec{p} non commuta in generale, con il potenziale vettore \vec{A} che è funzione delle coordinate. Si deve quindi scrivere:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi. \quad (21.4)$$

Calcoliamo il commutatore tra \vec{p} ed \vec{A} . Si ha:

$$\vec{p} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + i\hbar \vec{A} \cdot \vec{\nabla} = -i\hbar (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - i\hbar \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + i\hbar \vec{A} \cdot \vec{\nabla}, \quad (21.5)$$

ossia

$$\boxed{\vec{p} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{A}} \quad . \quad (21.6)$$

Così \vec{p} ed \vec{A} commutano se $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}$ è uguale a zero.

La divergenza di \vec{A} si annulla, in particolare, per un **campo esterno costante** se definiamo il suo potenziale vettore nel modo seguente:

$$\boxed{\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \wedge \vec{r}} \quad . \quad (21.7)$$

Questa definizione è consistente giacché conduce a:

$$(\vec{\nabla} \wedge \vec{A})_i = \frac{1}{2} \left[\vec{\nabla} \wedge (\vec{B} \wedge \vec{r}) \right]_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} \partial_j B_l r_m \stackrel{\partial_j B_l = 0}{=} \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klj} B_l = B_i, \quad (21.8)$$

ossia

$$\boxed{\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}} \quad . \quad (21.9)$$

Inoltre, calcolando la divergenza del potenziale vettore definito dall'eq. (21.7) otteniamo:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = \frac{1}{2} \vec{\nabla} \cdot (\vec{B} \wedge \vec{r}) = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \partial_i B_j r_k \stackrel{\partial_i B_j = 0}{=} \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} B_j \delta_{ik} = 0, \quad (21.10)$$

ossia

$$\boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0} \quad . \quad (21.11)$$

Sostituendo allora il potenziale vettore \vec{A} dato dalla (21.7) nell'eq. (21.4) per l'Hamiltoniano, ed osservando che vale la relazione

$$\vec{A} \cdot \vec{p} = \frac{1}{2} (\vec{B} \wedge \vec{r}) \cdot \vec{p} = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} B_j r_k p_i = \frac{1}{2} \vec{B} \cdot (\vec{r} \wedge \vec{p}) = \frac{1}{2} \vec{B} \cdot \vec{L}, \quad (21.12)$$

dove \vec{L} è il momento angolare orbitale della particella, otteniamo:

$$\boxed{H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{e^2}{8mc^2} (\vec{B} \wedge \vec{r})^2 + e\phi} \quad . \quad (21.13)$$

Nella fisica atomica, il termine quadratico nel campo magnetico esterno \vec{B} risulta tipicamente trascurabile rispetto al termine lineare nel campo.

Quanto al termine lineare nel campo, questo mostra che **una particella carica priva di spin, in moto in un campo magnetico esterno, possiede un**

momento magnetico $\vec{\mu}$, proporzionale al suo momento angolare orbitale, dato da:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L} \quad (21.14)$$

Il rapporto tra il momento magnetico $\vec{\mu}$ e il momento angolare orbitale \vec{L} è pari ad $e/2mc$, risultato identico a quello che si ottiene in meccanica classica. Per l'elettrone il valore di questo rapporto, moltiplicato per la costante di Planck \hbar , definisce una grandezza chiamata **magnetone di Bohr**,

$$\mu_B = \frac{|e| \hbar}{2 m_e c} = 0.927 \cdot 10^{-20} \text{ erg/gauss} \quad (21.15)$$

La teoria sin qui considerata resta tuttavia incompleta se non si tiene conto del fatto che le particelle possiedono, in generale, oltre ad un momento angolare orbitale, anche un momento angolare intrinseco, lo **spin**. È dimostrato sperimentalmente che, in conseguenza di ciò, gli elettroni, ad esempio, possiedono anche un **momento magnetico intrinseco**, legato allo spin \vec{S} dalla relazione:

$$\vec{\mu} = -\frac{|e|}{m_e c} \vec{S} \quad (21.16)$$

Tale risultato trova una spiegazione solo nell'ambito della **teoria relativistica**. Si osservi in particolare come questa relazione differisca dall'analogia relazione (21.14) per il **fattore 2** al denominatore.

Il coefficiente di proporzionalità tra il momento magnetico intrinseco e lo spin di una particella varia, in generale, da particella a particella. Per il protone, ad esempio, questo coefficiente vale circa $(2.79 e/m_p c)$, dove m_p è la massa del protone, mentre per il neutrone vale $(-1.91 e/m_p c)$.

L'esistenza di un momento magnetico intrinseco, per le particelle dotate di spin, richiede l'aggiunta all'Hamiltoniano (21.13), di un termine che descrive **l'interazione della particella con il campo magnetico esterno**. Per l'elettrone, tale termine è dato, in accordo con l'eq. (21.16), da:

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{|e|}{m_e c} \vec{S} \cdot \vec{B} \quad (21.17)$$

L'**Hamiltoniano completo che descrive l'elettrone in un campo elettromagnetico esterno omogeneo** ha dunque la forma:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{|e|}{2m_e c} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} + \frac{e^2}{8m_e c} (\vec{B} \wedge \vec{r})^2 - |e| \phi \quad (21.18)$$

Capitolo 22 | Atomo in un campo elettrico

22.1 Effetto Stark quadratico e lineare

Se un atomo viene sottoposto ad un campo elettrico esterno, i suoi livelli energetici cambiano. Questo fenomeno è detto **effetto Stark**.

Supporremo che il campo elettrico sia sufficientemente debole perché l'energia addizionale ad esso dovuta sia piccola rispetto alle distanze fra i livelli energetici vicini dell'atomo. Allora, per calcolare gli spostamenti dei livelli in un campo elettrico, si può ricorrere alla **teoria delle perturbazioni**.

Ci proponiamo di calcolare, facendo uso della teoria delle perturbazioni, le correzioni al primo ordine da apportare ai livelli energetici dell'**atomo di idrogeno**.

Scegliendo la direzione ed il verso dell'asse z parallelo al campo elettrico \mathcal{E} possiamo scrivere l'Hamiltoniano del sistema perturbato come

$$\boxed{H = H_0 + V} \quad , \quad (22.1)$$

dove

$$\boxed{H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}} \quad , \quad (22.2)$$

($Z = 1$ per l'atomo di idrogeno) è l'Hamiltoniano imperturbato e

$$\boxed{V = +e\mathcal{E}z} \quad (22.3)$$

è la perturbazione introdotta.

In assenza della perturbazione lo stato dell'elettrone nell'atomo di idrogeno è, negli stati stazionari, individuato da tre numeri quantici n, l, m . Indichiamo tali stati con $|n, l, m\rangle$.

Consideriamo inizialmente la **correzione** da apportare **al livello energetico dello stato fondamentale**. Tale stato non è degenero e possiamo allora scrivere

$$E_{100}^{(1)} = V_{11} = \langle 100|V|100\rangle = +e\mathcal{E} \langle 100|z|100\rangle \quad . \quad (22.4)$$

Questa correzione è nulla. Essa può essere infatti scritta in termini di un integrale della forma

$$E_{100}^{(1)} = e\mathcal{E} \int d^3r |\phi_{100}(\vec{r})|^2 z = 0 \quad , \quad (22.5)$$

in virtù della simmetria sferica della funzione d'onda nello stato fondamentale. **In prima approssimazione**, allora, **il campo elettrico non altera il livello energetico fondamentale**.

La **correzione** al livello energetico dello stato fondamentale **risulta non nulla al secondo ordine della teoria delle perturbazioni**. Questa correzione è espressa dalla sommatoria

$$E_{100}^{(2)} = e^2 \mathcal{E}^2 \sum_{k \neq (100)} \frac{|\langle k^{(0)}|z|100\rangle|^2}{E_{100}^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad , \quad (22.6)$$

estesa non solo agli stati legati $|n, l, m\rangle$ (con $n > 1$) ma anche agli stati del continuo con energia positiva dell'atomo di idrogeno.

La sommatoria che compare nell'espressione (22.6) può essere calcolata esattamente e si trova:

$$E_{100}^{(2)} = -\frac{9}{4} \mathcal{E}^2 \left(\frac{a_0}{Z}\right)^3 \quad , \quad (22.7)$$

dove a_0 è il raggio di Bohr. (Osserviamo che $\int d^3r \mathcal{E}^2$ è un'energia, cosicché un'analisi dimensionale implica che comunque $E_{100}^{(2)} \sim \mathcal{E}^2 (a_0/Z)^3$).

Poiché lo spostamento del livello energetico fondamentale dell'atomo di idrogeno risulta proporzionale al quadrato del campo elettrico esterno, tale effetto viene indicato con il nome di **effetto Stark quadratico**.

Consideriamo ora l'**effetto del campo elettrico sugli stati corrispondenti al primo livello eccitato dell'atomo di idrogeno ($n = 2$)**.

In questo caso, come si sa, il livello energetico è **quattro volte degenero**. I possibili valori dei numeri quantici sono:

$$\begin{array}{cccc}
 & & & m = 1 \bullet \\
 & & & \vdots \\
 & & l = 1 & \dots m = 0 \bullet \\
 & & \vdots & \vdots \\
 n = 2 & \dots & & m = -1 \bullet \\
 & \vdots & & \vdots \\
 & & l = 0 & \dots m = 0 \bullet
 \end{array} \quad . \quad (22.8)$$

Gli spostamenti del livello energetico sono allora determinati, in accordo con le formule della teoria delle perturbazioni nel caso degenero, dagli autovalori della matrice della perturbazione V nel sottospazio degli autostati imperturbati degeneri. Ordiniamo gli elementi di questa matrice secondo il seguente schema:

$$V = \begin{pmatrix} & 200 & 210 & 211 & 21-1 \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \quad (22.9)$$

Osserviamo, innanzitutto, che l'operatore $V = e \mathcal{E} z$ è invariante per rotazioni attorno all'asse z , ossia la perturbazione commuta con l'operatore proiezione sull'asse z del momento angolare L_z :

$$\boxed{[V, L_z] = 0} \quad . \quad (22.10)$$

Ne segue che **gli elementi della matrice V tra stati con diverso valore di m sono nulli**. Infatti

$$\begin{aligned}
 0 &= \langle n, l, m | [V, L_z] | n, l', m' \rangle = \langle n, l, m | (V L_z - L_z V) | n, l', m' \rangle = \\
 &= (m' - m) \langle n, l, m | V | n, l', m' \rangle
 \end{aligned} \quad (22.11)$$

da cui

$$\boxed{\langle n, l, m | V | n, l', m' \rangle = 0 \quad , \quad \text{per } m \neq m'} \quad . \quad (22.12)$$

Nel sottospazio degli stati degeneri corrispondenti ad $n = 2$ la matrice V ha allora la forma

$$V = \begin{pmatrix} & 200 & 210 & 211 & 21-1 \\ \bullet & \bullet & 0 & 0 \\ \bullet & \bullet & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bullet & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bullet \end{pmatrix} \quad . \quad (22.13)$$

È semplice dimostrare, inoltre, che **la perturbazione V anticommuta con l'operatore di parità**. Utilizzando per gli operatori la loro espressione nella rappresentazione delle coordinate, si ha infatti:

$$PV\phi(\vec{r}) = e\mathcal{E}Pz\phi(\vec{r}) = -e\mathcal{E}z\phi(-\vec{r}) = -VP\phi(\vec{r}), \quad (22.14)$$

ossia:

$$\boxed{\{P, V\} = 0} \quad . \quad (22.15)$$

Ne segue che **gli elementi di matrice della perturbazione tra stati con uguale parità sono nulli**. Considerando infatti due stati con parità p_1 e p_2 si ha:

$$0 = \langle p_1 | \{P, V\} | p_2 \rangle = \langle p_1 | (PV + VP) | p_2 \rangle = (p_1 + p_2) \langle p_1 | V | p_2 \rangle \quad (22.16)$$

da cui

$$\boxed{\langle p_1 | V | p_2 \rangle = 0 \quad , \quad \text{per } p_1 = p_2} \quad . \quad (22.17)$$

Possiamo ora mostrare che **gli autostati $|n, l, m\rangle$ sono anche autostati dell'operatore parità**.

L'operatore di parità P , infatti, commuta con l'operatore momento angolare orbitale \vec{L} ,

$$\boxed{[P, \vec{L}] = 0} \quad , \quad (22.18)$$

giacché $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$, e sia \vec{r} sia \vec{p} sono dispari per parità. Così:

$$P\vec{L}\phi(\vec{r}) = P(\vec{r} \wedge \vec{p})\phi(\vec{r}) = (-\vec{r}) \wedge (-\vec{p})\phi(-\vec{r}) = (\vec{r} \wedge \vec{p})\phi(-\vec{r}) = \vec{L}P\phi(\vec{r}) \quad (22.19)$$

da cui segue la (22.18).

Dall'eq. (22.18) segue anche che l'operatore di parità commuta con il quadrato del momento angolare orbitale

$$\boxed{[P, L^2] = 0} \quad . \quad (22.20)$$

Le eq. (22.18) e (22.20) implicano dunque che gli autostati di L^2 ed L_z sono anche autostati dell'operatore di parità. (Si veda l'appendice di questo capitolo per il calcolo della parità di questi autostati).

Ricordando l'eq. (22.17), siamo quindi portati a concludere che **gli elementi di matrice diagonali della perturbazione V , per i quali dunque $p_1 = p_2$, sono nulli**. Siamo allora giunti, per la matrice V , alla seguente espressione:

$$V = \begin{pmatrix} 200 & 210 & 211 & 21-1 \\ 0 & \bullet & 0 & 0 \\ \bullet & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (22.21)$$

Poiché la matrice è hermitiana, ci resta solo da calcolare l'elemento

$$\langle 210|V|200\rangle = \langle 200|V|210\rangle^* = \int dr r^2 d\Omega \phi_{210}^*(\vec{r}) V \phi_{200}(\vec{r}) \quad , \quad (22.22)$$

dove le funzioni d'onda rilevanti sono date dalle espressioni

$$\phi_{210}(\vec{r}) = R_{21}(r) Y_{10}(\theta, \varphi) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad (22.23)$$

$$\phi_{200}(\vec{r}) = R_{20}(r) Y_{00}(\theta, \varphi) = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} 2 \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad (22.24)$$

(per gli atomi idrogenoidi si deve sostituire $a_0 \rightarrow a_0/Z$).

Esprimiamo il potenziale V in coordinate sferiche,

$$V = e \mathcal{E} z = e \mathcal{E} r \cos \theta, \quad (22.25)$$

e calcoliamo l'integrale (22.22):

$$\begin{aligned} & \int dr r^2 d\Omega e \mathcal{E} r \cos \theta \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \left(\frac{r}{a_0}\right) \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/a_0} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \cos \theta = \\ & = \frac{2}{3} e \mathcal{E} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^3 \int_0^\infty dr r^3 \left(\frac{r}{a_0}\right) \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/a_0} \int d\Omega |Y_{10}(\theta, \varphi)|^2 = \\ & = \frac{1}{12} e \mathcal{E} a_0 \int_0^\infty ds s^4 \left(1 - \frac{1}{2}s\right) e^{-s} = \frac{1}{12} e \mathcal{E} a_0 \left(4! - \frac{1}{2}5!\right) = -3 e \mathcal{E} a_0, \quad (22.26) \end{aligned}$$

ossia

$$\langle 210|V|200\rangle = \langle 200|V|210\rangle^* = -3 e \mathcal{E} a_0 \quad . \quad (22.27)$$

La matrice della perturbazione V nel sottospazio degli autostati degeneri corrispondenti agli stati con $n = 2$ ha dunque la forma

$$V = -3 e \mathcal{E} a_0 \begin{pmatrix} & 200 & 210 & 211 & 21-1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad . \quad (22.28)$$

Gli autovalori di questa matrice rappresentano le correzioni, al primo ordine nella perturbazione, ai livelli energetici imperturbati corrispondenti agli stati con $n = 2$. Questi **autovalori** sono:

$$E^{(1)} = 0, \pm 3 e \mathcal{E} a_0 \quad , \quad (22.29)$$

con l'autovalore nullo avente molteplicità 2. Si osservi come la sottomatrice 2×2 da diagonalizzare è proporzionale alla matrice di Pauli σ_1 .

Gli **autostati** corrispondenti agli autovalori $E^{(1)} = \pm 3 e \mathcal{E} a_0$, nel sottospazio di dimensione 2 di interesse, sono dati da

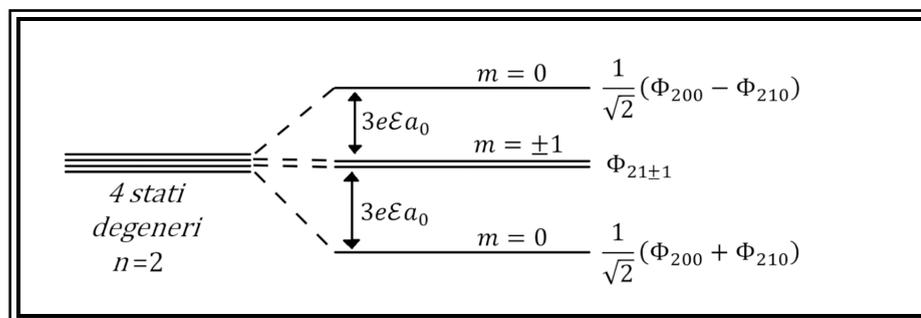
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (22.30)$$

e corrispondono dunque alle combinazioni lineari

$$\boxed{\frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{200} - \phi_{210})}, \quad E^{(1)} = 3 e \mathcal{E} a_0, \quad (22.31)$$

$$\boxed{\frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{200} + \phi_{210})}, \quad E^{(1)} = -3 e \mathcal{E} a_0. \quad (22.32)$$

In conclusione, i livelli corrispondenti ad $n = 2$ si separano, per effetto del campo elettrico, come indicato nello schema sottostante



Poiché lo spostamento dei livelli, in prima approssimazione, è proporzionale al campo elettrico esterno \mathcal{E} , si parla in questo caso di **effetto Stark lineare**.

Osserviamo che, **in presenza del campo elettrico, gli autostati dell'Hamiltoniano non sono più autostati di L^2** . Ad esempio, nel sottospazio degli stati con $n = 2$, abbiamo ottenuto combinazioni lineari di stati corrispondenti ad $l = 0$ ed $l = 1$. La ragione è che, in presenza del campo elettrico esterno, **il sistema non è più invariante per rotazioni arbitrarie, e l'Hamiltoniano non commuta più con l'operatore momento angolare L^2** .

Tuttavia, **il sistema è ancora invariante per rotazione attorno all'asse z , che definisce la direzione del campo esterno. L'Hamiltoniano perturbato commuta con la proiezione L_z del momento angolare orbitale e gli autostati di H sono simultaneamente autostati di L_z** .

Appendice: Parità degli autostati del momento angolare orbitale

In questa Appendice determiniamo esplicitamente la parità degli autostati del momento angolare orbitale.

Poichè, come indicato dalle eq. (22.18) e (22.20), l'operatore di parità commuta con gli operatori L^2 ed L_z , tali operatori hanno autostati in comune e si deve avere

$$P |l, m\rangle = \lambda_{l,m} |l, m\rangle \quad . \quad (22.33)$$

In virtù dell'eq. (22.18), inoltre, l'operatore di parità commuta anche con gli operatori a scala L_{\pm} . Da questo segue che gli stati con stesso valore di l e diverso valore di m devono avere la stessa parità. Infatti

$$\begin{aligned} PL_- |l, m\rangle &= P c_- |l, m-1\rangle = c_- \lambda_{l,m-1} |l, m-1\rangle = \\ &= L_- P |l, m\rangle = L_- \lambda_{l,m} |l, m\rangle = c_- \lambda_{l,m} |l, m-1\rangle, \end{aligned} \quad (22.34)$$

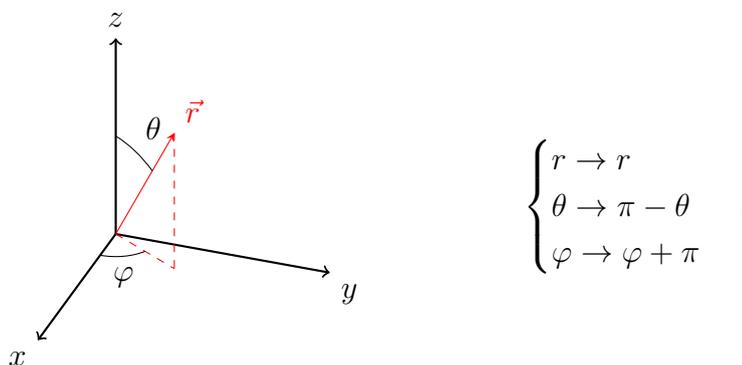
ossia

$$\lambda_{l,m} = \lambda_{l,m-1}. \quad (22.35)$$

Possiamo scrivere allora

$$P |l, m\rangle = \lambda_l |l, m\rangle \quad . \quad (22.36)$$

Per determinare la parità λ_l osserviamo che una trasformazione di parità in coordinate polari è realizzata dalla trasformazione



L'effetto di una trasformazione di parità è facilmente calcolabile sugli stati con $m = l$, giacché in questo caso le corrispondenti autofunzioni hanno una forma particolarmente semplice:

$$Y_{l,l}(\theta, \varphi) = A_l (\text{sen } \theta)^l e^{il\varphi}. \quad (22.37)$$

Si ha allora:

$$\begin{aligned} P Y_{l,l}(\theta, \varphi) &= P A_l (\text{sen } \theta)^l e^{il\varphi} = A_l (\text{sen}(\pi - \theta))^l e^{il(\varphi+\pi)} = \\ &= A_l (\text{sen } \theta)^l e^{il\varphi} e^{i\pi l} = (-1)^l Y_{l,l}(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (22.38)$$

da cui, in definitiva:

$$\boxed{P|l, m\rangle = (-1)^l |l, m\rangle}. \quad (22.39)$$

Capitolo 23 | Atomo in un campo magnetico

Consideriamo un atomo di idrogeno o idrogenoide in un **campo magnetico omogeneo**. Trascurando i termini quadratici nel campo esterno, l'**Hamiltoniano** si può scrivere nella forma:

$$H = H_0 + H_{LS} + H_B, \quad (23.1)$$

dove

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_c(r) \quad (23.2)$$

è l'Hamiltoniano dell'atomo in assenza di campo esterno e nel limite in cui si trascurano le correzioni di struttura fine,

$$H_{LS} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (23.3)$$

rappresenta l'**interazione spin-orbita**, e

$$H_B = \frac{e}{2mc} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} \quad (23.4)$$

rappresenta l'**accoppiamento tra il momento magnetico dell'atomo e il campo esterno**.

In questa trattazione ometteremo di considerare esplicitamente la correzione relativistica di struttura fine all'energia cinetica dell'elettrone in quanto non gioca alcun ruolo rilevante. Si può pensare di includere questa interazione nell'Hamiltoniano H_0 .

23.1 Effetto Zeeman

Supponiamo che il **campo magnetico** sia così **debole** che l'interazione H_B tra il momento magnetico dell'atomo e il campo esterno risulti piccola rispetto alle

distanze fra i livelli energetici dell'atomo nonché rispetto agli intervalli della struttura fine dei livelli.

In questo caso il termine H_B dell'Hamiltoniano si può considerare come una perturbazione e lo spostamento dei livelli ΔE sarà determinato dal valore medio della perturbazione sugli stati "imperturbati" dell'Hamiltoniano $H_0 + H_{LS}$, ossia sugli autostati di J^2, J_z, L^2, S^2 :

$$\Delta E_B = \langle \psi_{j m_j l} | H_B | \psi_{j m_j l} \rangle = \frac{eB}{2mc} \langle \psi_{j m_j l} | (L_z + 2S_z) | \psi_{j m_j l} \rangle = \frac{eB}{2mc} \langle \psi_{j m_j l} | (J_z + S_z) | \psi_{j m_j l} \rangle, \quad (23.5)$$

dove si è scelto l'asse z orientato nella direzione del campo esterno.

Il valore medio di J_z coincide semplicemente con l'autovalore dato da $J_z = \hbar m_j$.

Quanto al valore medio di S_z , questo può essere calcolato esplicitamente utilizzando le seguenti espressioni per le autofunzioni di J^2, J_z, L^2, S^2 in termini delle autofunzioni di L^2, L_z, S^2, S_z :

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=m+1/2} &= \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{lm} \chi_+ + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{l,m+1} \chi_-, \\ \mathcal{Y}_{j=l-1/2, m_j=m+1/2} &= -\sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{lm} \chi_+ + \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{l,m+1} \chi_- \end{aligned}, \quad (23.6)$$

dimostrate nell'Appendice di questo capitolo. Così per $j = l + 1/2$ si ottiene:

$$\langle S_z \rangle_{j=l+1/2, m_j=m+1/2} = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{l+m+1}{2l+1} - \frac{l-m}{2l+1} \right) = \frac{\hbar}{2} \frac{2m+1}{2l+1} = \frac{\hbar m_j}{2l+1}, \quad (23.7)$$

e per $j = l - 1/2$:

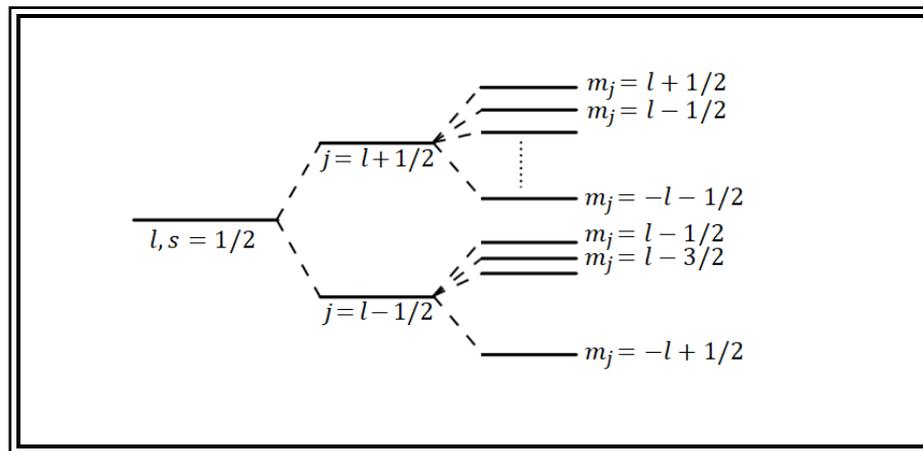
$$\langle S_z \rangle_{j=l-1/2, m_j=m+1/2} = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{l-m}{2l+1} - \frac{l+m+1}{2l+1} \right) = -\frac{\hbar}{2} \frac{2m+1}{2l+1} = -\frac{\hbar m_j}{2l+1}. \quad (23.8)$$

In questo modo, sostituendo le eq. (23.7) e (23.8) nell'eq. (23.5) otteniamo, per gli spostamenti dei livelli dovuti al campo magnetico la formula

$$\Delta E_B = \mu_B B m_j \left(1 \pm \frac{1}{2l+1} \right), \quad j = l \pm 1/2, \quad (23.9)$$

detta **formula di Landè**, dove $\mu_B = e\hbar/2mc$ è il magnetone di Bohr.

Così il campo magnetico rimuove completamente la degenerazione dei livelli rispetto alle direzioni del momento angolare totale, come indicato nello schema sottostante:



La separazione dei livelli indotta dal campo magnetico è nota come **effetto Zeeman**.

Talvolta si parla anche di effetto Zeeman **anomalo**. Questa denominazione, impropria, è dovuta storicamente al fatto che ci si aspettava una separazione dei livelli determinata da $\Delta E_B = \mu_B B m$ in luogo della (23.9).

23.2 Effetto Paschen-Back

In **campi magnetici intensi**, in cui $\mu_B B$ è paragonabile agli intervalli della struttura fine o è addirittura più grande, la separazione dei livelli non segue quella prevista dall'eq. (23.9). Questo fenomeno è detto **effetto Paschen-Back**.

Il calcolo dell'energia di separazione è assai semplice nel caso in cui la **separazione dei livelli è grande rispetto agli intervalli della struttura fine**, ma sempre piccola rispetto alle distanze dei livelli in assenza di campo esterno.

In queste caso è possibile trascurare, in prima approssimazione, l'accoppiamento spin-orbita e considerare $H_0 + H_B$ come Hamiltoniano imperturbato. Questo Hamiltoniano commuta con gli operatori L_z ed S_z , proiezioni del momento angolare orbitale e dello spin nella direzione individuata dal campo esterno, che rappresentano pertanto **due buoni numeri quantici**.

Lo spostamento dei livelli allora può essere facilmente calcolato:

$$\Delta E_B = \langle \phi_{l m_l m_s} | H_B | \phi_{l m_l m_s} \rangle = \frac{eB}{2mc} \langle \phi_{l m_l m_s} | (L_z + 2S_z) | \phi_{l m_l m_s} \rangle \quad , \quad (23.10)$$

ossia

$$\Delta E_B = \mu_B B (m_l + 2m_s) \quad . \quad (23.11)$$

La degenerazione dei livelli che si aveva con l'Hamiltonano H_0 è ora ridotta dal campo magnetico agli stati che hanno lo stesso valore di $(m_l + 2m_s)$.

La struttura fine si sovrappone alla separazione nel campo magnetico. Essa viene determinata dal valore medio dell'operatore H_{LS} rispetto agli stati con m_l ed m_s determinati:

$$\Delta E_{LS} = \langle \phi_{l m_l m_s} | H_{LS} | \phi_{l m_l m_s} \rangle = \frac{1}{2mc^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle \langle l m_l m_s | \vec{L} \cdot \vec{S} | l m_l m_s \rangle . \quad (23.12)$$

Utilizzando l'identità:

$$\begin{aligned} \vec{L} \cdot \vec{S} &= L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z = \\ &= \frac{1}{4} (L_+ + L_-) (S_+ + S_-) - \frac{1}{4} (L_+ - L_-) (S_+ - S_-) + L_z S_z = \\ &= \frac{1}{2} (L_+ S_- + L_- S_+) + L_z S_z, \end{aligned} \quad (23.13)$$

otteniamo

$$\Delta E_{LS} = \frac{\hbar^2}{2mc^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle m_l m_s . \quad (23.14)$$

Appendice: Composizione dei momenti angolari orbitale e di spin per una particella di spin 1/2

In questa Appendice discutiamo la **composizione dei momenti angolari orbitale e di spin** per una **particella di spin 1/2** e deriviamo i valori dei coefficienti di Clebsch-Gordan riportati in eq. (23.6).

Se la particella di spin 1/2 si trova in un autostato del quadrato del momento angolare orbitale corrispondente al numero quantico l , allora i valori possibili per il numero quantico j , corrispondente al momento angolare totale $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, sono dati da

$$j = l \pm 1/2, \quad (l > 0). \quad (23.15)$$

Il caso $l = 0$, ossia assenza di momento angolare orbitale, corrisponde semplicemente a $\vec{J} = \vec{S}$ e non verrà qui considerato.

Determiniamo i coefficienti di Clebsch-Gordan che definiscono lo sviluppo delle autofunzioni \mathcal{Y}_{j, m_j} di J^2 e J_z in termini delle autofunzioni $Y_{l, m}$ di L^2 , L_z e χ_{\pm} di S^2 ed S_z .

La proiezione

$$m_j = m + m_s, \quad \begin{cases} m = -l, -l + 1, \dots, l, \\ m_s = \pm 1/2, \end{cases} \quad (23.16)$$

del momento angolare totale può assumere evidentemente solo valori seminteri. In particolare, un determinato valore $m_j = m + 1/2$ può essere ottenuto solo dalle combinazioni $l_z = m, s_z = 1/2$ o $l_z = m + 1, s_z = -1/2$. Devono allora valere gli sviluppi ortogonali

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=m+1/2} &= c_+ Y_{l,m} \chi_+ + c_- Y_{l,m+1} \chi_- \\ \mathcal{Y}_{j=l-1/2, m_j=m+1/2} &= -c_- Y_{l,m} \chi_+ + c_+ Y_{l,m+1} \chi_- \end{aligned} \quad (23.17)$$

I coefficienti c_{\pm} rappresentano i **coefficienti di Clebsch-Gordan** cercati.

Per determinare questi coefficienti, consideriamo in partenza lo stato in cui la proiezione J_z del momento angolare totale assume il suo valore massimo: $m_j = l + 1/2$. Questo stato corrisponde evidentemente alla combinazione:

$$\mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l+1/2} = Y_{l,l} \chi_+ \quad (23.18)$$

Applichiamo ad entrambi i membri di questa equazione l'operatore a scala $J_- = L_- + S_-$. Ricordando il risultato¹

$$J_- \mathcal{Y}_{j,m_j} = \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j - 1)} \mathcal{Y}_{j,m_j-1} = \sqrt{(j+m_j)(j-m_j+1)} \mathcal{Y}_{j,m_j-1}, \quad (23.19)$$

e le espressioni analoghe per L_- ed S_- , otteniamo dal primo membro dell'eq. (23.18)

$$J_- \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l+1/2} = \sqrt{2l+1} \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l-1/2}. \quad (23.20)$$

Per ottenere l'autofunzione corrispondente a $m_j = m + 1/2$ dobbiamo applicare $(l - m)$ volte l'operatore J_- . Una seconda applicazione di J_- all'eq. (23.20) fornisce:

$$\begin{aligned} (J_-)^2 \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l+1/2} &= \sqrt{(2l+1)} J_- \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l-1/2} = \\ &= \sqrt{(2l+1) \cdot 2 \cdot 2l} \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l-3/2}, \end{aligned} \quad (23.21)$$

ed una terza applicazione di J_- conduce a:

$$\begin{aligned} (J_-)^3 \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l+1/2} &= \sqrt{2 \cdot (2l+1) \cdot 2l} J_- \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l-3/2} = \\ &= \sqrt{2 \cdot 3 \cdot (2l+1) \cdot (2l) \cdot (2l-1)} \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l-5/2}. \end{aligned} \quad (23.22)$$

Risulta allora chiaro come il coefficiente che si ottiene applicando J_- un numero k di volte sulla autofunzione iniziale $\mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l+1/2}$ sia:

$$\sqrt{2 \cdot 3 \dots k \cdot (2l+1) \cdot (2l) \cdot (2l-1) \dots (2l+2-k)} = \sqrt{\frac{k! (2l+1)!}{(2l+1-k)!}}, \quad (23.23)$$

¹Per semplicità di notazione, in questa appendice, poniamo $\hbar = 1$.

ossia

$$(J_-)^k \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l+1/2} = \sqrt{\frac{k! (2l+1)!}{(2l+1-k)!}} \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l+1/2-k}. \quad (23.24)$$

In particolare, scegliendo $k = l - m$, si trova:

$$(J_-)^{l-m} \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=l+1/2} = \sqrt{\frac{(l-m)! (2l+1)!}{(l+m+1)!}} \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=m+1/2}. \quad (23.25)$$

Dobbiamo ora considerare l'applicazione dell'operatore $(J_-)^{l-m} = (L_- + S_-)^{l-m}$ sul secondo membro dell'eq. (23.18).

A tale scopo osserviamo che l'applicazione successiva dell'operatore (S_-) un numero ≥ 2 di volte sullo stato χ_+ produce un risultato nullo:

$$(S_-)^2 \chi_+ = 0 \quad (23.26)$$

Si ha pertanto:

$$\begin{aligned} (L_- + S_-)^{l-m} Y_{l,l} \chi_+ &= [(L_-)^{l-m} + (l-m) (L_-)^{l-m-1} S_-] Y_{l,l} \chi_+ = \\ &= (L_-)^{l-m} Y_{l,l} \chi_+ + (l-m) (L_-)^{l-m-1} Y_{l,l} \chi_-. \end{aligned} \quad (23.27)$$

L'eq. (23.24), con la sostituzione $l \rightarrow l - 1/2$, ci fornisce direttamente il risultato dell'applicazione dell'operatore $(L_-)^k$ sull'autofunzione $Y_{l,l}$. Si ha:

$$(L_-)^k Y_{l,l} = \sqrt{\frac{k! (2l)!}{(2l-k)!}} Y_{l,l-k}. \quad (23.28)$$

Utilizzando questo risultato, possiamo allora riscrivere l'eq. (23.27) nella forma:

$$\begin{aligned} (L_- + S_-)^{l-m} Y_{l,l} \chi_+ &= \\ &= \sqrt{\frac{(l-m)! (2l)!}{(l+m)!}} Y_{l,m} \chi_+ + (l-m) \sqrt{\frac{(l-m-1)! (2l)!}{(l+m+1)!}} Y_{l,m+1} \chi_-. \end{aligned} \quad (23.29)$$

I coefficienti di Clebsch-Gordan definiti dall'eq. (23.17) si ottengono in definitiva applicando ad entrambi i membri dell'eq. (23.18) l'operatore $(J_-)^{l-m} = (L_- + S_-)^{l-m}$ ed utilizzando i risultati (23.25) e (23.29). In tal modo si trova:

$$\begin{aligned} c_+ &= \sqrt{\frac{(l-m)! (2l)!}{(l+m)!}} \cdot \sqrt{\frac{(l+m+1)!}{(l-m)! (2l+1)!}} = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}, \\ c_- &= (l-m) \sqrt{\frac{(l-m-1)! (2l)!}{(l+m+1)!}} \cdot \sqrt{\frac{(l+m+1)!}{(l-m)! (2l+1)!}} = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}. \end{aligned} \quad (23.30)$$

da cui risulta:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Y}_{j=l+1/2, m_j=m+1/2} &= \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{l,m} \chi_+ + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{l,m+1} \chi_- \\
 \mathcal{Y}_{j=l-1/2, m_j=m+1/2} &= -\sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{l,m} \chi_+ + \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{l,m+1} \chi_-
 \end{aligned}
 \tag{23.31}$$

È immediato verificare come queste autofunzioni siano ortogonali tra loro e correttamente normalizzate.

Parte IV

APPENDICI

Appendice A | Richiami di Meccanica Classica

A.1 Parentesi di Poisson

Sia $f(p, q, t)$ una funzione delle coordinate, $q = (q_1, \dots, q_n)$, degli impulsi, $p = (p_1, \dots, p_n)$, e del tempo t e calcoliamone la sua derivata totale rispetto al tempo:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right). \quad (\text{A.1})$$

Utilizzando le equazioni di Hamilton,

$$\boxed{\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}} \quad , \quad (\text{A.2})$$

possiamo scrivere

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right), \quad (\text{A.3})$$

ossia

$$\boxed{\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\}} \quad , \quad (\text{A.4})$$

dove si è introdotta la **parentesi di Poisson** definita, in generale, come

$$\boxed{\{f, g\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right)} \quad . \quad (\text{A.5})$$

Se $f(p, q, t)$ è una **costante del moto**, allora

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\} = 0. \quad (\text{A.6})$$

Se l'integrale del moto non dipende esplicitamente dal tempo, allora

$$\boxed{\{H, f\} = 0} \quad , \quad (\text{A.7})$$

ossia la sua parentesi di Poisson con l'Hamiltoniana deve annullarsi.

Come esempio specifico consideriamo il caso in cui la funzione f è la stessa Hamiltoniana H del sistema. Si ha

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + \{H, H\} = \frac{\partial H}{\partial t} \quad (\text{A.8})$$

Per un sistema isolato, l'Hamiltoniana H , in virtù dell'omogeneità del tempo, non dipende esplicitamente dal tempo: $\partial H/\partial t = 0$. In questo caso risulta allora

$$\frac{dH}{dt} = 0 \quad (\text{A.9})$$

sui sistemi isolati, che esprime la legge di conservazione dell'energia.

Consideriamo la parentesi di Poisson di una funzione f con una componente delle coordinate e degli impulsi:

$$\begin{aligned} \{f, q_k\} &= \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial q_k}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial q_k}{\partial p_i} \right) = \frac{\partial f}{\partial p_k}, \\ \{f, p_k\} &= \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial p_k}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial p_k}{\partial p_i} \right) = -\frac{\partial f}{\partial q_k}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Da queste segue allora anche:

$$\boxed{\{q_i, q_k\} = 0 \quad , \quad \{p_i, p_k\} = 0 \quad , \quad \{p_i, q_k\} = \delta_{ik}} \quad . \quad (\text{A.11})$$

A.2 Trasformazioni Canoniche

Nel formalismo lagrangiano la scelta delle coordinate non è limitata da alcuna condizione: la loro funzione può essere determinata da N grandezze qualsiasi che definiscono univocamente la posizione del sistema nello spazio. La forma delle equazioni di Lagrange non dipende da questa scelta. In altri termini, in luogo di un insieme di coordinate q che soddisfano le equazioni:

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad (\text{A.12})$$

posso scegliere un differente insieme Q , dove in generale

$$\boxed{Q_i = Q_i(q, t)} \quad . \quad (\text{A.13})$$

In termini della nuova lagrangiana L' , definita dall'equazione

$$L'(Q, \dot{Q}, t) = L'(Q(q, t), \dot{Q}(q, \dot{q}, t), t) = L(q, \dot{q}, t), \quad (\text{A.14})$$

valgono ancora le equazioni di Eulero-Lagrange¹

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_i \frac{\partial L'}{\partial \dot{Q}_i} \right) - \frac{\partial L'}{\partial Q_i} = 0. \quad (\text{A.15})$$

Queste trasformazioni lasciano inoltre evidentemente invariata anche la forma delle equazioni di Hamilton giacché queste possono essere dedotte a partire dalle equazioni di Eulero-Lagrange.

Nel **formalismo hamiltoniano**, tuttavia, le coordinate e gli impulsi sono variabili indipendenti. È possibile allora considerare, in luogo delle trasformazioni (A.13), una classe di trasformazioni più ampia, della forma:

$$\boxed{Q_i = Q_i(p, q, t) \quad , \quad P_i = P_i(p, q, t)} \quad . \quad (\text{A.16})$$

La possibilità di allargare la classe delle trasformazioni ammissibili rappresenta uno dei vantaggi sostanziali della formulazione hamiltoniana della meccanica. In generale, tuttavia, trasformazioni della forma (A.16) non conducono ad equazioni di Hamilton nella forma canonica, ossia

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i} \quad , \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial H'}{\partial Q_i} \quad , \quad (\text{A.17})$$

con una nuova H' .

La classe di trasformazioni (A.16) per le quali ciò invece accade sono dette **trasformazioni canoniche**. Stabiliamo le condizioni per le quali le trasformazioni (A.16) risultano essere trasformazioni canoniche. Poiché $L = \sum_i p_i \dot{q}_i - H$, le equazioni di Hamilton possono essere derivate dal principio di minima azione scritto nella forma:

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_i p_i \dot{q}_i - H \right] dt = \delta \int \left[\sum_i p_i dq_i - H dt \right] = 0. \quad (\text{A.18})$$

Considerando le variazioni $p_i \rightarrow p_i + \delta p_i$, $q_i \rightarrow q_i + \delta q_i$ si ha infatti:

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left[\delta p_i \dot{q}_i + p_i \delta \dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i \right] dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left[\delta p_i \dot{q}_i - \dot{p}_i \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i \right] dt + \sum_i p_i \delta q_i \Big|_{t_1}^{t_2} = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left[\left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i \right] dt = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

¹Per la dimostrazione si utilizzano le relazioni $\frac{d}{dt} \frac{\partial Q_i}{\partial q_k} = \frac{\partial \dot{Q}_i}{\partial q_k}$ e $\frac{\partial \dot{Q}_i}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial Q_i}{\partial q_k}$, che segue da $\dot{Q}_i = \frac{\partial Q_i}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial Q_i}{\partial t}$.

da cui

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} . \quad (\text{A.20})$$

Se le nuove variabili P_i e Q_i sono definite da trasformazioni canoniche, ossia soddisfano le equazioni di Hamilton, allora devono soddisfare anche un principio di minima azione della forma:

$$\delta \int \left[\sum_i P_i dQ_i - H' dt \right] = 0 \quad (\text{A.21})$$

Le eq. (A.18) e (A.21) possono risultare simultaneamente soddisfatte solo se le espressioni integrande differiscono al più per il differenziale totale di una funzione F degli impulsi, delle coordinate e del tempo. In tal caso la differenza tra i due integrali, ossia la differenza dei valori della funzione F nei limiti di integrazione, sarà una costante ininfluente ai fini della variazione. Si ha pertanto:

$$\sum_i p_i dq_i - H dt = \sum_i P_i dQ_i - H' dt + dF . \quad (\text{A.22})$$

Ogni trasformazione canonica è caratterizzata da una sua funzione F , detta **funzione generatrice della trasformazione**. Riscrivendo la precedente equazione nella forma

$$dF = \sum_i p_i dq_i - \sum_i P_i dQ_i + (H' - H) dt \quad , \quad (\text{A.23})$$

vediamo che

$$p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i} \quad , \quad P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i} \quad , \quad H' = H + \frac{\partial F}{\partial t} \quad , \quad (\text{A.24})$$

dove si è posto che la funzione generatrice è data come funzione delle vecchie e delle nuove coordinate del tempo:

$$F = F(q, Q, t) \quad . \quad (\text{A.25})$$

Osserviamo che se la funzione generatrice non dipende esplicitamente dal tempo,

$$\frac{\partial F}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad H' = H , \quad (\text{A.26})$$

ossia la nuova hamiltoniana H' si ottiene semplicemente da H sostituendo le vecchie variabili p e q in termini delle nuove variabili P e Q .

Può essere utile esprimere la funzione generatrice non in termini delle variabili q e Q ma in termini delle coordinate q e dei nuovi impulsi P . Questo si ottiene effettuando una trasformata di Legendre nella (A.23):

$$d\Phi \equiv d(F + \sum_i P_i Q_i) = \sum_i p_i dq_i + \sum_i Q_i dP_i + (H' - H) dt. \quad (\text{A.27})$$

e si ha in questo caso:

$$\boxed{p_i = \frac{\partial \Phi}{\partial q_i} \quad , \quad Q_i = \frac{\partial \Phi}{\partial P_i} \quad , \quad H' = H + \frac{\partial \Phi}{\partial t}} \quad , \quad (\text{A.28})$$

con

$$\boxed{\Phi = \Phi(q, P, t)} \quad . \quad (\text{A.29})$$

Analogamente si possono definire funzioni generatrici dipendenti dalle variabili (p, Q) o (p, P) .

Come esempio particolare di trasformazione canonica, consideriamo il caso in cui la funzione generatrice è:

$$F(q, Q) = \sum_i q_i Q_i. \quad (\text{A.30})$$

Si ha allora

$$p_i = \frac{\partial F}{\partial q_i} = Q_i \quad , \quad P_i = -\frac{\partial F}{\partial Q_i} = -q_i. \quad (\text{A.31})$$

La trasformazione

$$Q_i = p_i \quad , \quad P_i = -q_i \quad (\text{A.32})$$

è dunque una trasformazione canonica, che corrisponde essenzialmente ad invertire tra loro il ruolo delle coordinate e degli impulsi.

A.3 Trasformazioni canoniche infinitesime e generatori

Un caso particolarmente importante di **trasformazioni canoniche** è quello delle trasformazioni **infinitesime** (di contatto), in cui cioè le nuove coordinate differiscono dalle vecchie solo per quantità infinitesime:

$$\boxed{Q_i = q_i + \delta q_i \quad , \quad P_i = p_i + \delta p_i} \quad . \quad (\text{A.33})$$

È evidente che in questo caso la funzione generatrice differirà solo per una quantità infinitesima dalla funzione corrispondente alla trasformazione identità. È semplice verificare, allora, che la funzione generatrice si può scrivere in generale nella forma:

$$\boxed{\Phi(q, P, t) = \sum_i q_i P_i + \varepsilon G(q, P)} \quad , \quad (\text{A.34})$$

dove ε è un certo parametro infinitesimo della trasformazione. Utilizzando le eq. (A.28) si ottiene infatti:

$$p_i = \frac{\partial \Phi}{\partial q_i} = P_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \quad , \quad Q_i = \frac{\partial \Phi}{\partial P_i} = q_i + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i} . \quad (\text{A.35})$$

Nel limite $\varepsilon \rightarrow 0$ la funzione (A.34) si riduce alla funzione generatrice della trasformazione identità e per ε infinitesimo ma diverso da zero la funzione (A.34) genera una trasformazione data da (A.33) con

$$\boxed{\delta q_i = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_i} \quad , \quad \delta p_i = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_i}} . \quad (\text{A.36})$$

La funzione G è detta **generatore** della trasformazione canonica infinitesima.

Consideriamo ora alcuni **esempi importanti di trasformazioni infinitesime**.

Un esempio sono le **traslazioni spaziali** lungo una direzione, definite dalle trasformazioni

$$\boxed{\delta p_i = 0 \quad , \quad \delta q_i = \varepsilon \quad , \quad \delta q_j = 0 \text{ per } j \neq i} \quad , \quad (\text{A.37})$$

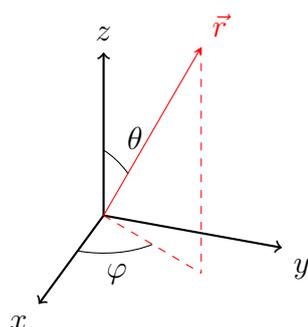
dove ε rappresenta dunque lo spostamento infinitesimo nella direzione i . Dalle eq. (A.36) è evidente che il generatore che produce questa trasformazione è

$$\boxed{G = p_i} . \quad (\text{A.38})$$

Dunque, il momento p_i coniugato alla variabile q_i , è il generatore delle **traslazioni spaziali nella direzione di q_i** .

Consideriamo, come altro esempio di trasformazioni infinitesime, le **rotazioni spaziali** di un angolo $d\varphi$ attorno all' asse z .

Introducendo un sistema di coordinate polari,



$$\begin{cases} x = r \text{ sen } \theta \cos \varphi \\ y = r \text{ sen } \theta \text{ sen } \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} ,$$

possiamo scrivere la trasformazione nella forma:

$$\begin{cases} x' = r \text{ sen } \theta \cos(\varphi + d\varphi) \simeq x - r \text{ sen } \theta \text{ sen } \varphi d\varphi = x - y d\varphi , \\ y' = r \text{ sen } \theta \text{ sen}(\varphi + d\varphi) \simeq y + r \text{ sen } \theta \cos \varphi d\varphi = y + x d\varphi , \\ z' = r \cos \theta = z . \end{cases} \quad (\text{A.39})$$

Quanto ai momenti, questi si trasformano, rispetto alle rotazioni, allo stesso modo delle componenti della posizione. Si ha infatti:

$$\begin{cases} p'_x = m\dot{x}' = m\dot{x} - m\dot{y} d\varphi = p_x - p_y d\varphi, \\ p'_y = m\dot{y}' = m\dot{y} + m\dot{x} d\varphi = p_y + p_x d\varphi, \\ p'_z = m\dot{z}' = m\dot{z} = p_z. \end{cases} \quad (\text{A.40})$$

La variazione infinitesima delle coordinate e dei momenti è allora

$$\boxed{\begin{aligned} \delta x &= -\varepsilon y, \quad \delta y = +\varepsilon x, \quad \delta z = 0, \\ \delta p_x &= -\varepsilon p_y, \quad \delta p_y = +\varepsilon p_x, \quad \delta p_z = 0 \end{aligned}}, \quad (\text{A.41})$$

avendo uguagliato ad ε l'angolo infinitesimo di rotazione.

La funzione generatrice di questa trasformazione è

$$\boxed{\boxed{G = x p_y - y p_x = L_z}}, \quad (\text{A.42})$$

dove L_z è la componente lungo z del **momento angolare**. È immediato verificare l'espressione di G per sostituzione diretta nelle eq. (A.36). Così, **il momento angolare lungo un determinato asse è il generatore delle rotazioni spaziali attorno a quell'asse**.

Come ultimo esempio, consideriamo le **traslazioni temporali** infinitesime, ossia le trasformazioni che cambiano i valori delle coordinate e dei momenti al tempo t nei valori che coordinate e momenti assumono al tempo $t + dt$. La forma di queste trasformazioni è definita dagli incrementi:

$$\boxed{\begin{aligned} \delta q_i &= q_i(t + dt) - q_i(t) \simeq \dot{q}_i dt = \frac{\partial H}{\partial p_i} dt, \\ \delta p_i &= p_i(t + dt) - p_i(t) \simeq \dot{p}_i dt = -\frac{\partial H}{\partial q_i} dt \end{aligned}}. \quad (\text{A.43})$$

Per confronto con le eq. (A.36), ponendo $\varepsilon = dt$, vediamo che

$$\boxed{\boxed{G = H(p, q)}}, \quad (\text{A.44})$$

ossia **il generatore delle traslazioni temporali è l'Hamiltoniana del sistema**.

A.4 Simmetrie e leggi di conservazione

Stabiliamo ora un'importante **connessione tra simmetrie e leggi di conservazione**. Calcoliamo come varia una generica funzione $u(p, q)$ dei momenti e delle coordinate a seguito di una trasformazione infinitesima con generatore G . Utilizzando

le eq. (A.36) e ricordando la definizione di parentesi di Poisson, troviamo:

$$\begin{aligned} du &= u(p + \delta p, q + \delta q) - u(p, q) = \sum_i \left(\frac{\partial u}{\partial p_i} \delta p_i + \frac{\partial u}{\partial q_i} \delta q_i \right) = \\ &= \varepsilon \sum_i \left(-\frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} + \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} \right) = -\varepsilon \{u, G\}. \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

Scegliendo in particolare come funzione u l'Hamiltoniana del sistema, e ricordando la relazione tra le parentesi di Poisson di una determinata funzione con l'Hamiltoniana e la derivata totale rispetto al tempo di detta funzione, otteniamo:

$$\boxed{\delta H = -\varepsilon \{H, G\} = -\varepsilon \frac{dG}{dt}}. \quad (\text{A.46})$$

Risulta cioè che se un sistema fisico è simmetrico rispetto ad una determinata trasformazione, ossia se l'Hamiltoniana del sistema non cambia per effetto di tale trasformazione ($\delta H = 0$), allora il generatore di questa trasformazione è una quantità conservata:

$$\boxed{\frac{dG}{dt} = 0}. \quad (\text{A.47})$$

Questo risultato costituisce il contenuto del **teorema di Noether** nel formalismo hamiltoniano.

Riassumiamo quindi in uno schema le trasformazioni infinitesime qui considerate e i corrispondenti generatori ossia le quantità conservate in presenza di simmetria:

TRASFORMAZIONE	GENERATORE
Traslazioni spaziali	Impulso
Rotazioni spaziali	Momento angolare
Traslazioni temporali	Hamiltoniana/Energia

Appendice B | Valori delle costanti fondamentali

B.1 Trucchi con le costanti fondamentali

In luogo delle costanti fondamentali c , \hbar , e , m , dove m indica la massa dell'elettrone, può risultare conveniente utilizzare¹:

- $c \simeq 3 \cdot 10^{10}$ cm/s - Velocità della luce nel vuoto.
- $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$ - Costante di struttura fine.
- $mc^2 \simeq 0.511$ MeV - Massa a riposo dell'elettrone.
- $r_0 = \frac{e^2}{mc^2} \simeq 2.82 \cdot 10^{-13}$ cm - Raggio classico dell'elettrone.

Vediamo alcuni esempi:

- Livelli di energia dell'atomo di idrogeno:

$$E_n = -\frac{me^4}{2n^2\hbar^2} = -\frac{1}{2n^2} mc^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = -\frac{1}{2n^2} mc^2 \alpha^2 = \\ \simeq -\frac{1}{n^2} \frac{0.511}{2(137)^2} \text{ MeV} = -\frac{1}{n^2} 13.6 \text{ eV}.$$

- Raggio di Bohr:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = \left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^2 \frac{e^2}{mc^2} = \frac{r_0}{\alpha^2} \simeq \\ \simeq (137)^2 \cdot 2.82 \cdot 10^{-13} = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ cm} (= 0.529 \text{ \AA})$$

¹In questo corso utilizziamo il sistema di unità CGS Gaussiano, in cui la costante di Coulomb, che nel sistema internazionale vale $k_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ (SI), e la costante che entra nella legge di Ampere, $k_2 = \frac{\mu_0}{4\pi}$ (SI), valgono rispettivamente $k_1 = 1$ (GAUSS) e $k_2 = \frac{1}{c^2}$ (GAUSS) (in qualunque sistema si ha $k_1/k_2 = c^2$). Osserviamo che nel sistema SI la costante di struttura fine α e il raggio classico dell'elettrone r_0 , qui definite, sono espresse da $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$ (SI) e $r_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}$ (SI).

- **Lunghezza d'onda Compton dell'elettrone:**

$$\lambda_e = \frac{\hbar}{mc} = \frac{\hbar c}{e^2} \frac{e^2}{mc^2} = \frac{r_0}{\alpha} \simeq \\ \simeq 137 \cdot 2.82 \cdot 10^{-13} \text{ cm} = 3.86 \cdot 10^{-11} \text{ cm}$$

- **Costante di Planck:**

$$\hbar = \frac{\hbar c}{e^2} \frac{e^2}{mc^2} \frac{mc^2}{c} = \frac{r_0}{\alpha} \frac{mc^2}{c} \simeq \\ \simeq 137 \cdot 2.82 \cdot 10^{-13} \frac{0.511}{3 \cdot 10^{10}} \text{ MeV} \cdot \text{s} \simeq 6.58 \cdot 10^{-22} \text{ MeV} \cdot \text{s}$$

B.2 Il raggio classico dell'elettrone

Consideriamo un **modello** in cui si schematizza l'elettrone come una sfera di raggio a sulla cui superficie è distribuita una carica e .

Il campo elettrico generato dalla carica è allora:

$$E = \begin{cases} 0 & , \text{ per } r < a, \\ \frac{e}{r^2} & , \text{ per } r > a. \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

La densità di energia associata al campo è:

$$U = \frac{E^2}{8\pi} = \begin{cases} 0 & , \text{ per } r < a, \\ \frac{e^2}{8\pi r^4} & , \text{ per } r > a. \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

e l'energia totale è dunque

$$E_{el} = \int U dV = \int_a^\infty \frac{e^2}{8\pi r^4} 4\pi r^2 dr = \frac{e^2}{2} \int_a^\infty \frac{dr}{r^2} = \frac{e^2}{2a}. \quad (\text{B.3})$$

Se uguagliamo questa energia all'energia di riposo dell'elettrone, $E = mc^2$, ricaviamo il raggio dell'elettrone

$$a = \frac{1}{2} \frac{e^2}{mc^2} = \frac{1}{2} r_0, \quad (\text{B.4})$$

dove r_0 è il **raggio classico dell'elettrone**. Il fattore $1/2$, ottenuto nell'eq. (B.4), è una conseguenza dei dettagli del modello e segue in particolare dall'aver scelto la carica distribuita solo sulla superficie della sfera (e non, ad esempio, all'interno della sfera stessa). Notiamo anche che l'energia associata ad una carica puntiforme ($a = 0$) risulta infinita.

Riferimenti bibliografici

Per gli argomenti trattati in questi *Appunti* si suggerisce la seguente bibliografia:

- J.J. Sakurai, Jim Napolitano, *Meccanica Quantistica Moderna*, seconda edizione, Zanichelli. [S]
- R.P. Feynman et al., *La Fisica di Feynman*, Volume III, Masson. [F]
- L. Landau e E. Lifschitz, *Meccanica Quantistica*, Editori Riuniti. [LL]
- S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, J.Wiley & Sons. [G]

Nell'elenco seguente viene riportato, per ciascun capitolo degli *Appunti*, il riferimento ai testi indicando, ad esempio, con S 1.6 il paragrafo 1.6 del libro di Sakurai.

PARTE I

1. **Crisi della fisica classica:** G 1
2. **Onde e particelle:** F 1; LL 1
3. **Vettori di stato ed operatori:** F 5,8.1,8.2; S 1.1,1.2,1.3,1.5; LL 2,3,4,11,12
4. **Misure ed osservabili:** S 1.4; LL 7
5. **Operatore di posizione:** S 1.6,1.7; LL 5
6. **Traslazioni e impulso:** S 1.6,1.7; LL 5,15,16
7. **Evoluzione temporale ed equazione di Schrödinger:** S 2.1,2.4; LL 8,10,17,19; G 3
8. **Parità:** S 4.2; LL 30; G 4
9. **Problemi unidimensionali:** G 4,5; LL 18,21,22,25; S B.2,B.3
10. **Oscillatore armonico:** S 2.3; G 7,5; LL 23
11. **Simmetrie e leggi di conservazione:** S2.2; LL13.
12. **Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo:** LL 38,39; S 5.1,5.2; G 16
13. **Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo:** S 5.5,5.7; LL 40,42,43,44; G 21

PARTE II

14. **Rotazioni e momento angolare:** S 3.1,3.5; LL 26,27
15. **Momento angolare orbitale:** S 3.6; LL 26,27,28; G 11
16. **Spin:** S 3.2; LL 54,55; G 14
17. **Composizione di momenti angolari:** S 3.8; LL 31; G 15
18. **Particelle identiche:** S 7.1,7.2,7.3; LL 61,62; G 8
19. **Atomo di idrogeno:** S 3.7,B.6; LL 32,36; G 10,12,1

PARTE III

20. **Hamiltoniana di una particella in campo elettromagnetico esterno:**
LL111,113; S2.6, 5.3
21. **Atomo in un campo elettrico:** S5.1-5.2; G16
22. **Atomo in un campo magnetico:** S5.3; LL113; G17
23. **Correzioni relativistiche all'Hamiltoniano dell'atomo di idrogeno:** S5.3;
G17