

# Introduzione alla Meccanica Quantistica. 3

A. A. 2006/2007

## 1 Momento angolare

In termini classici il momento angolare, o momento della quantità di moto, di una particella è definito dalla relazione vettoriale

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad (1)$$

dove  $\mathbf{r}$  è il vettore di posizione della particella e  $\mathbf{p}$  la quantità di moto. Equivalentemente, esso può definirsi tramite le relazioni scalari

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad (2)$$

$$L_y = zp_x - xp_z, \quad (3)$$

$$L_z = xp_y - yp_x. \quad (4)$$

In termini quantistici, siccome posizione e quantità di moto non possono essere noti simultaneamente con precisione assoluta, la grandezza vettoriale  $\mathbf{L}$  non può essere nota esattamente. Vogliamo capire quali informazioni si possano avere su di essa, per es. se una delle componenti possa essere nota con precisione. Per prima cosa dovremo associare degli operatori alle grandezze classiche (2)-(4) e poi cercare le loro autofunzioni e i loro autovalori. Per trovare gli operatori detti basta sostituire le componenti di  $\mathbf{p}$  con gli operatori già noti. Si ha così

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (5)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (6)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (7)$$

Come abbiamo visto, l'operatore  $\hat{L}_z$  ha la forma

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (8)$$

dove  $\varphi$  è la coordinata angolare di longitudine. Le autofunzioni e gli autovalori sono

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = G(r, \vartheta)e^{im\varphi}; \quad L_z = m\hbar; \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (9)$$

dove  $G$  è una funzione arbitraria. Ovviamente lo stesso risultato deve valere per  $L_x$  e  $L_y$ . Ciò si può controllare facilmente osservando quanto segue. L'angolo  $\varphi$  può essere scritto come  $\arctg(y/x)$  e quindi le autofunzioni di  $\hat{L}_z$  sono del tipo  $\exp[i\text{marctg}(y/x)]$ . Applicando ad esse  $\hat{L}_z$  scritto nella forma (7) si verifica facilmente che esse si riproducono. Allora possiamo pensare che le autofunzioni di  $\hat{L}_x$  siano  $\exp[i\text{marctg}(z/y)]$ . E' facile verificare, usando la (5) che queste sono autofunzioni con autovalore  $m\hbar$ . Analogamente per  $\hat{L}_y$  che ha autofunzioni  $\exp[i\text{marctg}(x/z)]$ .

A questo punto forse si potrebbe pensare che, misurando successivamente le tre componenti di  $\mathbf{L}$  lungo i tre assi coordinati, il vettore momento angolare resti completamente individuato nello spazio. Abbiamo già detto però che questo sarebbe in contrasto col principio di indeterminazione. E in effetti, siccome le autofunzioni di  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  e  $\hat{L}_z$  sono diverse tra loro, se il sistema è in un autostato di  $\hat{L}_x$  esso è necessariamente in uno stato di sovrapposizione per quanto riguarda  $\hat{L}_y$  e  $\hat{L}_z$ . In altri termini, se dopo aver misurato  $\hat{L}_x$ , passiamo alla misura di  $\hat{L}_y$ , automaticamente distruggiamo l'informazione ottenuta dalla prima misura. Insomma per ogni coppia di componenti del momento angolare vale una relazione di indeterminazione. Dal punto di vista matematico, la cosa è dovuta al fatto che gli operatori  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  e  $\hat{L}_z$  non commutano fra loro. Per esempio, usando le (5), (6) si trova

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -\hbar^2 [(y\partial_z - z\partial_y)(z\partial_x - x\partial_z) - (z\partial_x - x\partial_z)(y\partial_z - z\partial_y)], \quad (10)$$

avendo posto per brevità  $\partial/\partial x = \partial_x$  e simili. Analogamente porremo  $\partial_{xy}^2 = \partial^2/(\partial x \partial y)$  e simili. Si sviluppano ora i prodotti, tenendo conto che, ad es.,  $y\partial_z(z\partial_x) = y(\partial_x + z\partial_{xz})$ , mentre  $y\partial_z(x\partial_z) = xy\partial_{zz}^2$ . Si arriva allora, dopo qualche passaggio, alla relazione

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z. \quad (11)$$

Analogamente si ottengono le relazioni

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad (12)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y. \quad (13)$$

Le relazioni precedenti vengono sintetizzate nella forma vettoriale simbolica

$$\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar\hat{\mathbf{L}}. \quad (14)$$

Esiste però un operatore che commuta con ciascuno dei precedenti. Si tratta, come si potrebbe verificare a partire dalle (5)-(7), dell'operatore

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \quad (15)$$

che può essere preso come corrispondente al quadrato della lunghezza del vettore momento angolare. Fisicamente, questo significa che esistono stati in cui sono simultaneamente determinati sia  $L^2$  che una delle componenti cartesiane di  $\mathbf{L}$ . Quindi l'informazione massima che possiamo avere sul momento angolare è quella di conoscere la sua lunghezza e la sua proiezione su un asse scelto a piacere.

Per cercare gli autostati di  $L^2$ , dobbiamo esaminare l'equazione agli autovalori per l'operatore associato. L'espressione di tale operatore si potrebbe ricavare a partire dalle (5)-(7). Il calcolo che ne risulta è lungo e oneroso. Possiamo però ottenere  $\hat{L}^2$  con un procedimento alternativo. Immaginiamo di avere un rotatore rigido sferico, cioè una particella, diciamo di massa  $\mu$ , vincolata a muoversi su una superficie sferica di raggio  $R$  (su cui non risente di altre forze). L'energia cinetica classica della particella si può scrivere

$$E_c = \frac{L^2}{2I}, \quad (16)$$

dove  $I = \mu R^2$  è il momento d'inerzia della particella rispetto all'asse istantaneo di rotazione. Siccome l'operatore associato a  $E_c$  è  $-\hbar^2 \nabla^2 / (2\mu)$ , dalla (16) segue

$$\frac{\hat{L}^2}{2\mu R^2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2, \quad (17)$$

a cui va aggiunto il vincolo che la particella si mantenga a distanza  $R$  dall'origine. Ricordiamo che, in coordinate sferiche  $r, \vartheta, \varphi$ , il Laplaciano ha l'espressione

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (18)$$

Imponendo nella (18) il vincolo  $r = R$  (per cui le derivate rispetto a  $r$  si annullano) e inserendo l'espressione risultante nella (17), otteniamo

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right], \quad (19)$$

e questa è proprio l'espressione che si ottiene, nel caso generale, col calcolo diretto a partire dalle (5)-(7).

Ne segue che l'equazione agli autovalori da risolvere è

$$-\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] F(\vartheta, \varphi) = \gamma F(\vartheta, \varphi). \quad (20)$$

Le soluzioni di questa equazione sono funzioni note, dette armoniche sferiche (vedi appendice), specificate da due interi, tradizionalmente indicati con  $l$  e  $m$ . In forma non normalizzata, esse hanno l'espressione

$$F_{lm}(\vartheta, \varphi) = P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (l = 0, 1, 2, \dots; -l \leq m \leq l) \quad (21)$$

dove le  $P_l^m$  sono le cosiddette funzioni associate di Legendre di prima specie (vedi appendice). Gli autovalori corrispondenti sono  $l(l+1)\hbar^2$ , quale che sia  $m$ . E' quanto dire che la lunghezza di  $\mathbf{L}$  può assumere solo i valori

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar; \quad (l = 0, 1, 2, \dots). \quad (22)$$

Le armoniche sferiche, contenendo il fattore  $\exp(im\varphi)$ , sono autofunzioni di  $\hat{L}_z$  con autovalore  $m\hbar$ . Siccome  $m$  al massimo vale  $l$ , la componente lungo  $z$  del momento angolare si mantiene comunque inferiore alla lunghezza del vettore. Ciò a questo punto non sorprende. Se infatti i valori di  $L_z$  e di  $L$  coincidessero, vorrebbe dire che il vettore  $\mathbf{L}$  è allineato all'asse  $z$ . Ma allora  $\mathbf{L}$  sarebbe individuato in grandezza e direzione e questo non è possibile. L'unica eccezione è costituita dal caso  $l = 0$ , in cui tanto  $L$  che  $L_z$  si annullano.

## 1.1 L'esperienza di Stern e Gerlach

Consideriamo una particella classica di carica  $q$  e di massa  $\mu$  (riserviamo il simbolo  $m$  all'indice intero che compare nelle autofunzioni (21)) che si muove su un'orbita chiusa (piana). Mediando sul periodo  $T$  di rivoluzione, il sistema è assimilabile ad una spira percorsa da una corrente di intensità

$$i = \frac{q}{T}. \quad (23)$$

A tale corrente è associato un momento magnetico  $\mathbf{M}$  dato da

$$\mathbf{M} = iS\mathbf{n}, \quad (24)$$

dove  $S$  è l'area della spira e  $\mathbf{n}$  il versore della normale al piano della spira orientata con la regola della vite. Pensando per semplicità ad una spira circolare di raggio  $R$ , confrontiamo le espressioni del momento magnetico e del momento angolare

$$|\mathbf{M}| = \frac{q\pi R^2}{T}; \quad |\mathbf{L}| = \mu v R = \mu \frac{2\pi R}{T} R = \frac{2\pi\mu R^2}{T}. \quad (25)$$

Esse mostrano che le lunghezze dei due vettori sono proporzionali. I vettori hanno lo stesso verso o verso opposto a seconda che  $q$  sia positiva o negativa. Si ha perciò

$$\mathbf{M} = \frac{q}{2\mu}\mathbf{L} = \gamma\mathbf{L}, \quad (26)$$

relazione che si può stabilire anche per orbite non circolari. Perciò, in termini classici, il momento angolare di una particella carica e il corrispondente momento magnetico, che chiamiamo orbitale, sono proporzionali. Il fattore di proporzionalità  $\gamma$  prende il nome di rapporto giromagnetico.

Dal punto di vista quantistico, si assume che valga la stessa proporzionalità. Pertanto gli operatori associati alle componenti del momento magnetico sono, a meno del fattore di proporzionalità, gli stessi del momento angolare. Ne segue che anche la componente del momento magnetico lungo un generico asse è quantizzata. Tenendo presente che la proiezione di  $\mathbf{L}$  è un multiplo di  $\hbar$  si vede dalla (26) che la proiezione di  $\mathbf{M}$ , per es. sull'asse  $z$ , può assumere i valori

$$M_{zm} = \frac{q\hbar}{2\mu}m; \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l). \quad (27)$$

La quantità

$$\mu_B = \frac{q\hbar}{2\mu}, \quad (28)$$

di cui  $M_z$  risulta multiplo, prende il nome di magnetone di Bohr.

Descriviamo ora un tipo di esperimento, eseguito per la prima volta da Stern e Gerlach, che permette di evidenziare il fenomeno della quantizzazione del momento magnetico. Può trattarsi, ad es., di un atomo in cui i momenti dei vari elettroni hanno somma diversa da zero. Consideriamo poi un campo magnetico non uniforme  $\mathbf{B}$  che cambi principalmente lungo l'asse  $z$  (verticale). Tale campo può prodursi, ad es., sagomando opportunamente le espansioni polari di un magnete. Quando la particella attraversa il campo magnetico subisce una forza data da

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}) = M_x \nabla B_x + M_y \nabla B_y + M_z \nabla B_z. \quad (29)$$

Siccome abbiamo assunto che  $\mathbf{B}$  cambi essenzialmente lungo  $z$ , la (29) si può approssimare con

$$\mathbf{F} = M_z \nabla B_z \simeq M_z \nabla B, \quad (30)$$

avendo trascurato le componenti di  $\mathbf{B}$  lungo  $x$  e  $y$ . Sotto l'azione di questa forza la particella subirà una deflessione, che può essere misurata e che risulta proporzionale a  $M_z$ . Classicamente, inviando nell'apparato un fascio di particelle con momento magnetico di lunghezza  $M$  e orientamento casuale, ci aspetteremmo che le particelle subissero tutte le deflessioni possibili fra quelle massime nei due versi, corrispondenti a  $M_z = M$  e  $M_z = -M$ . L'esperimento mostra invece che si ha un insieme discreto di deflessioni, in accordo colla previsione quantistica secondo la quale  $M_z$ , al pari di  $L_z$ , può assumere solo un insieme discreto di valori.

## 1.2 Lo spin

Molte particelle (elettrone, protone, neutrone) possiedono un momento magnetico e un momento angolare intrinseci, cioè indipendenti dal loro possibile moto orbitale. Qui ci riferiremo principalmente all'elettrone. Quando fu scoperta questa sua proprietà, fu proposto un modello, che poi si rivelò insostenibile, in cui l'elettrone era visto come una

sferetta rotante su sé stessa. Questa rotazione avrebbe prodotto sia il momento angolare, che per questo fu detto di spin (il verbo inglese *to spin* significa ruotare rapidamente), sia, per la rotazione della carica associata, il momento magnetico. Anche se il modello fu abbandonato, rimase il nome spin per alludere al momento angolare intrinseco. Fra il momento angolare di spin  $\mathbf{L}_s$  e il corrispondente momento magnetico  $\mathbf{M}_s$  sussiste un legame di proporzionalità analogo a quello relativo alle grandezze orbitali.

$$\mathbf{M}_s = \gamma_s \mathbf{L}_s, \quad (31)$$

dove  $\gamma_s$  prende il nome di rapporto giromagnetico di spin. Mentre il rapporto giromagnetico orbitale è  $\gamma = q/(2\mu)$ , (vedi la (26)), quello di spin dipende dalla particella. Per l'elettrone esso vale, con buona approssimazione,  $-e/\mu_e$ , essendo  $-e$  la carica dell'elettrone e  $\mu_e$  la sua massa. Per il protone e il neutrone il rapporto giromagnetico vale  $2.79 e/\mu_p$  e  $-1.91 e/\mu_n$ , rispettivamente, con ovvi simboli per le masse.

Nel caso del momento orbitale  $\mathbf{L}$  siamo partiti dalle espressioni classiche e da queste abbiamo dedotto gli operatori  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ . Per lo spin invece non esiste un analogo classico. Si pone perciò il problema di come rappresentare gli stati di un elettrone quando si tenga conto dello spin e di come trovare gli operatori associati alle componenti del momento angolare intrinseco. Prima di affrontare il problema è necessario descrivere ciò che si osserva sperimentalmente riguardo allo spin.

Ci riferiremo ad un esperimento alla Stern e Gerlach (descritto nel paragrafo precedente), o brevemente SG. Se si prende un atomo di argento si ha un sistema in cui tutti i momenti angolari (orbitali e di spin) degli elettroni si compensano, salvo il momento di spin dell'elettrone più esterno. L'atomo allora si comporta come una particella neutra dotata solo del momento di spin. Siccome essa è massiva (rispetto a un elettrone) il suo comportamento entro l'apparato di Stern e Gerlach è descrivibile classicamente per quanto riguarda la traiettoria che essa compie. L'andamento della traiettoria poi dipende dal momento magnetico associato allo spin.

Mandando entro l'apparecchio un fascio di atomi di argento con spin orientati a caso, si trova che all'uscita si formano due fasci. Se, come vogliamo supporre, la disuniformità del campo magnetico è lungo la verticale (asse  $z$ ), si trova che un fascio è deflesso verso l'alto e l'altro verso il basso. Confrontando con gli analoghi risultati per i momenti orbitali, si vede una differenza perché nel caso dei momenti orbitali il numero dei fasci è dispari. Esso infatti uguaglia il numero di valori distinti che può avere  $m$ , cioè  $2l + 1$ , se il valore di  $L$  è  $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ . La misura delle deflessioni porta a concludere che la componente del momento di spin lungo l'asse  $z$  è  $\hbar/2$  oppure  $-\hbar/2$ . Si usa dire che gli atomi deflessi verso l'alto hanno spin su e che gli altri hanno spin giù.

Supponiamo ora di selezionare il fascio degli atomi che hanno spin su rispetto a  $z$  e facciamolo passare attraverso un altro apparecchio SG in cui il campo magnetico è diretto lungo  $x$ . Ciò che accade è che all'uscita del secondo SG si hanno due fasci, di uguale intensità, deflessi orizzontalmente, corrispondenti a spin su e giù rispetto a  $x$ . E' quanto dire che il generico atomo in ingresso, che ha sicuramente spin su rispetto a  $z$ , ha la stessa

probabilità di portarsi nello stato di spin su o giù rispetto a  $x$ . Se ora si seleziona il fascio degli spin su uscente dal secondo apparecchio e lo si invia in un terzo SG avente il campo magnetico di nuovo lungo  $z$ , si ha un'ulteriore divisione in due fasci (spin su e spin giù rispetto a  $z$ ). Vediamo di riassumere. Col primo SG avevamo misurato la componente di spin lungo  $z$  e avevamo selezionato spin su. Col secondo abbiamo misurato la componente di spin lungo  $x$ . Il fatto che gli spin in ingresso fossero su rispetto a  $z$  rendeva equiprobabili i risultati su e giù rispetto a  $x$ . Avendo selezionato gli spin su all'uscita del secondo apparecchio si poteva pensare che gli atomi del fascio avessero spin su sia rispetto a  $z$  che rispetto a  $x$ . Ma il risultato ottenuto col terzo SG dimostra che non è così. In sostanza, misurando la componente di spin lungo un asse si altera in modo imprevedibile il valore delle componenti lungo gli altri assi.

Questo comportamento, che risulta sorprendente pensando l'elettrone come una particella classica, diventa meno strano se si tiene conto che l'elettrone mostra anche proprietà ondulatorie. Per rendercene conto, sfruttiamo un'analogia. Immaginiamo di avere un fascio di luce non polarizzata e di mandarlo attraverso un prisma polarizzatore (EO.6.11). All'uscita di tale dispositivo, il fascio risulta diviso in due di ugual intensità, corrispondenti a stati di polarizzazione ortogonali, diciamo orizzontale e verticale. Ora selezioniamo il fascio polarizzato verticalmente e facciamolo passare attraverso un polarizzatore ruotato di  $\pi/4$  rispetto al precedente. All'uscita di questo si avranno due fasci ugualmente intensi, uno polarizzato a  $\pi/4$  e uno a  $3\pi/4$ . Prendiamo il fascio polarizzato a  $\pi/4$  e facciamogli attraversare un polarizzatore, identico al primo, che divida la polarizzazione verticale da quella orizzontale. Alla sua uscita avremo due fasci di uguale intensità, con polarizzazione orizzontale e verticale. Questo andamento del fenomeno è perfettamente spiegabile in termini ondulatori classici. Sappiamo che, per il singolo fotone, le intensità classiche vanno interpretate probabilisticamente. Abbiamo allora un comportamento del fotone che è molto simile a quello dell'elettrone con spin (a parte il fatto che gli stati alternativi per lo spin sono in versi opposti e quelli per il fotone in direzioni ortogonali).

Particelle, come l'elettrone, il protone, il neutrone, per le quali la componente del momento di spin lungo un asse qualsiasi è  $\pm\hbar/2$ , vengono dette particelle con spin  $1/2$ . Esistono particelle con spin diverso da  $1/2$  (per es.  $0, 1, 3/2, \dots$ ) di cui non ci interesseremo.

Nella trattazione dello spin, per brevità di scrittura, si fa riferimento ad un momento di spin normalizzato, indicato con  $\sigma$  in cui si prende  $\hbar/2$  come unità di misura. In altri termini, si pone

$$\mathbf{L}_s = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} . \quad (32)$$

Il momento di spin normalizzato  $\boldsymbol{\sigma}$  dà luogo ai valori  $1$  e  $-1$  quando se ne misura la componente lungo un generico asse.

### 1.3 Cenno sugli spinori

Nei paragrafi che seguono faremo uso di certi enti matematici che si chiamano spinori, di cui qui vogliamo vedere alcuni elementi essenziali. Le motivazioni fisiche che conducono all'uso degli spinori sono legate alle proprietà dello spin e sono essenzialmente le seguenti. Abbiamo detto che se lo spin è in uno stato generico e misuriamo la sua componente lungo l'asse  $z$  possiamo trovare solo 1 o -1. Possiamo perciò dire che lo stato dello spin è individuato da due numeri, generalmente complessi, che sono le ampiezze di probabilità di spin su e spin giù lungo  $z$ . Inoltre i due stati in cui può portarsi lo spin sono mutuamente esclusivi e quindi "ortogonali", allo stesso modo in cui, ad es., sono ortogonali due autostati dell'energia dell'oscillatore armonico.

Ora lasciamo per un attimo da parte lo spin e concentriamoci sul problema geometrico. Data una retta orientata nello spazio, vogliamo trovarne una rappresentazione mediante un ente, che chiameremo spinore, specificato da due numeri complessi. Vogliamo inoltre che, definendo opportunamente un prodotto scalare fra due spinori, risulti che gli spinori associati a versi opposti su una stessa retta abbiano prodotto scalare nullo (per cui li potremo dire ortogonali). Indicheremo uno spinore generico con una lettera a cui è sovrapposto un accento circonflesso rovesciato, ad es.  $\check{u}$ . Lo spinore sarà specificato da una matrice colonna con due elementi complessi  $a$  e  $b$  come segue

$$\check{u} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (33)$$

Definiamo poi il prodotto scalare di due spinori  $\check{u}_1$  e  $\check{u}_2$  come

$$\check{u}_1 \cdot \check{u}_2 = \begin{pmatrix} a_1^* & b_1^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = a_1^* a_2 + b_1^* b_2. \quad (34)$$

Si noti che invertendo l'ordine dei fattori il prodotto si muta nel complesso coniugato. In particolare, il prodotto di uno spinore per sé stesso dà un numero reale positivo, al quale imporreemo di valere 1

$$\check{u} \cdot \check{u} = |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (35)$$

Consideriamo ora un versore  $\mathbf{r}$  dell'ordinario spazio tridimensionale individuato dalle coordinate angolari  $\vartheta$  e  $\varphi$  (colatitudine e longitudine) e vediamo come si possono esprimere  $a$  e  $b$  in funzione di  $\vartheta$  e  $\varphi$  in modo che siano soddisfatte le condizioni dette sopra. Per prima cosa, scriviamo le componenti cartesiane di  $\mathbf{r}$

$$r_x = \sin \vartheta \cos \varphi; \quad r_y = \sin \vartheta \sin \varphi; \quad r_z = \cos \vartheta. \quad (36)$$

Osserviamo che le prime due si possono combinare in un unico numero complesso del tipo  $\exp(i\varphi) \sin \vartheta$  (avendo moltiplicato la seconda per  $i$ ) per cui il versore è individuato dai due numeri  $\cos \vartheta$  e  $\exp(i\varphi) \sin \vartheta$ . Si potrebbe pensare di prendere questi due numeri come



componenti dello spinore, diciamo  $\check{r}_+$ , associato al verso positivo di  $\mathbf{r}$

$$\check{r}_+ \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} \cos \vartheta \\ e^{i\varphi} \sin \vartheta \end{pmatrix}. \quad (37)$$

Mentre con questa scelta è soddisfatta la (35), non è vero che gli spinori associati ai due versi sulla retta risultino ortogonali. Osserviamo infatti che il passaggio dal verso positivo a quello negativo corrisponde a passare da  $\vartheta$  a  $\pi - \vartheta$  e da  $\varphi$  a  $\varphi + \pi$ . Fa eccezione il caso in cui la retta  $\mathbf{r}$  sia l'asse  $z$ , dove è sufficiente passare da  $\vartheta = 0$  a  $\vartheta = \pi$ . Perciò, escludendo per ora l'asse  $z$ , lo spinore  $\check{r}_-$ , corrispondente al verso negativo, sarebbe

$$\check{r}_- \stackrel{?}{=} \begin{pmatrix} \cos(\pi - \vartheta) \\ e^{i(\varphi + \pi)} \sin(\pi - \vartheta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos \vartheta \\ -e^{i\varphi} \sin \vartheta \end{pmatrix}. \quad (38)$$

Usando la (34) si vede che il prodotto scalare di  $\check{r}_+$  e  $\check{r}_-$  risulta -1. Ci si rende conto facilmente che per soddisfare la condizione di ortogonalità bisogna sostituire  $\vartheta$  con  $\vartheta/2$ . Perciò definiamo lo spinore  $\check{r}_+$  nel seguente modo

$$\check{r}_+ = \begin{pmatrix} \cos(\vartheta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\vartheta/2) \end{pmatrix}. \quad (39)$$

Da questa definizione segue, cambiando  $\vartheta$  in  $\pi - \vartheta$  e  $\varphi$  in  $\varphi + \pi$  e lasciando da parte l'asse  $z$ , che  $\check{r}_-$  ha l'espressione

$$\check{r}_- = \begin{pmatrix} \sin(\vartheta/2) \\ -e^{i\varphi} \cos(\vartheta/2) \end{pmatrix}. \quad (40)$$

Si vede subito che il prodotto scalare di  $\check{r}_+$  e  $\check{r}_-$  si annulla, come richiesto.

Per quanto riguarda gli spinori relativi ai due versi dell'asse  $z$ , che indicheremo con  $\check{z}_+$  e  $\check{z}_-$ , essi possono essere valutati tramite la (39) ponendo  $\vartheta = 0$ ,  $\varphi = 0$  (per  $\check{z}_+$ ) e  $\vartheta = \pi$ ,  $\varphi = 0$  (per  $\check{z}_-$ ). Perciò si ha

$$\check{z}_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \check{z}_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (41)$$

Il generico spinore può esprimersi come combinazione degli spinori (41). Infatti può scriversi

$$\check{u} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = a\check{z}_+ + b\check{z}_-. \quad (42)$$

Siccome un generico spinore corrisponde, tramite la (39), ad un certo versore uscente dall'origine nella direzione  $(\vartheta, \varphi)$ , si può leggere la (42) dicendo che essa rappresenta tale versore come combinazione lineare del versore positivo e del versore negativo dell'asse  $z$ . Questo risultato è, a prima vista, abbastanza sorprendente. Abituati ad usare riferimenti tridimensionali cartesiani, penseremmo che non è possibile rappresentare tutti i vettori che

escono dall'origine e terminano in un punto generico della sfera unitaria riferendoci solo all'asse  $z$ , ma che servano anche le componenti lungo  $x$  e  $y$ . Il fatto è che le componenti dello spinore non sono componenti cartesiane, cioè proiezioni ortogonali. D'altronde, la condizione di ortogonalità fra gli spinori associati ai due versi di una retta, che avevamo imposto fin dall'inizio, serve proprio ad ottenere rappresentazioni del tipo (42).

Dobbiamo osservare che, nell'impostazione precedente, abbiamo dato un ruolo privilegiato all'asse  $z$ . Gli spinori  $\check{z}_+$  e  $\check{z}_-$  costituiscono infatti la base delle nostre rappresentazioni. Questo però può essere modificato e si possono usare come base i due spinori associati all'asse  $x$  o all'asse  $y$  (o a qualunque altra retta). Per vedere come si può ottenere ciò, cominciamo a scrivere gli spinori relativi a  $x$  e  $y$ . Basta per questo usare le (39) e (40), tenendo presente che per il verso positivo dell'asse  $x$  è  $\vartheta = \pi/2$ ,  $\varphi = 0$ , mentre per il verso positivo dell'asse  $y$  è  $\vartheta = \pi/2$ ,  $\varphi = \pi/2$ . Con ovvi simboli, si ha allora

$$\check{x}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \check{x}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (43)$$

$$\check{y}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}; \quad \check{y}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}. \quad (44)$$

E' immediato scrivere sia  $\check{x}_+$  che  $\check{x}_-$  come combinazione di  $\check{z}_+$  e  $\check{z}_-$ . Si ha infatti

$$\check{x}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{z}_+ + \check{z}_-); \quad \check{x}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{z}_+ - \check{z}_-), \quad (45)$$

da cui, per somma e differenza, si ricava

$$\check{z}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{x}_+ + \check{x}_-); \quad \check{z}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{x}_+ - \check{x}_-). \quad (46)$$

Inserendo queste nella (42) si arriva alla relazione

$$\check{u} = \frac{a+b}{\sqrt{2}} \check{x}_+ + \frac{a-b}{\sqrt{2}} \check{x}_-, \quad (47)$$

che esprime il generico spinore nella base relativa all'asse  $x$ . Analogamente si procede per l'asse  $y$ .

Aggiungiamo che l'associazione fra spinori e direzioni nello spazio può farsi in modo leggermente diverso e più simmetrico se si usa la definizione

$$\check{r}_+ = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos(\vartheta/2) \\ e^{i\varphi/2} \sin(\vartheta/2) \end{pmatrix}. \quad (48)$$

I risultati che si ottengono usando questa definizione nel trattare lo spin sono equivalenti a quelli basati sulla (39). Perciò continueremo a riferirci a quest'ultima.

## 1.4 Descrizione quantistica dello spin

Negli argomenti trattati fino a questo punto avevamo supposto che le coordinate di una particella esaurissero i suoi gradi di libertà. Vediamo adesso che, per gli elettroni, esiste un'altra variabile da prendere in considerazione. Per quanto detto, si tratta di una variabile discreta, che può assumere solo i due valori  $\pm 1$ . Supporremo che si tratti dei risultati della misura di  $\sigma_z$ . La funzione d'onda dipenderà anche da questa variabile:  $\psi = \psi(x, y, z, t; \sigma_z)$ . Equivalentemente, si può dire che esistono due funzioni d'onda,  $\psi_+$  e  $\psi_-$ . I loro moduli quadri, moltiplicati per l'elemento di volume, danno le probabilità che la particella venga trovata nell'elemento di volume con spin su lungo  $z$  e con spin giù rispettivamente. In molte situazioni d'interesse, si può concentrare l'attenzione solo sullo spin. Lo stato della particella è allora individuato da due numeri complessi che rappresentano le ampiezze di probabilità per lo spin su e lo spin giù lungo  $z$ . Ripensando agli stati selezionati con esperimenti SG, ci rendiamo conto che essi erano caratterizzati dal fatto che la misura della proiezione di  $\boldsymbol{\sigma}$  lungo una certa retta (l'asse  $z$  o un'altra retta) dava con sicurezza il valore 1 (oppure  $-1$  se avessimo selezionato i fasci con spin giù). Perciò possiamo individuare lo stato dello spin dicendo qual è la retta lungo la quale la componente di  $\boldsymbol{\sigma}$  vale con certezza 1. Si faccia attenzione al fatto che questo non significa che  $\boldsymbol{\sigma}$ , pensato come un vettore, sia allineato a tale retta. Come già si è visto per il momento angolare orbitale, anche per lo spin la lunghezza del momento angolare è maggiore del massimo valore della componente lungo un asse, diciamo  $z$ . Vedremo fra breve che per lo spin tale lunghezza è  $\sqrt{3}$  (mentre  $\sigma_z$  è  $\pm 1$ ).

Gli spinori forniscono lo strumento adatto per descrivere lo spin. Come ipotesi fondamentale supporremo che lo stato con spin su lungo la retta  $(\vartheta, \varphi)$  sia individuato dallo spinore (39) e quello con spin giù dalla (40). Vediamo le conseguenze di quest'ipotesi.

Cominciamo coll'osservare che lo spinore (39), decomposto secondo la (42), assume la forma

$$\check{u} = \cos(\vartheta/2)\check{z}_+ + e^{i\varphi} \sin(\vartheta/2)\check{z}_-. \quad (49)$$

I coefficienti  $\cos(\vartheta/2)$  e  $\exp(i\varphi) \sin(\vartheta/2)$  devono rappresentare, per il principio di sovrapposizione, le ampiezze di probabilità per spin su e spin giù lungo  $z$ . Ne segue che la probabilità che misurando  $\sigma_z$  si trovi 1 è data da  $\cos^2(\vartheta/2)$ . Questo risultato non è intuitivo e merita qualche commento. Ricordiamo la discussione fatta circa la probabilità di passaggio o di assorbimento di un fotone polarizzato linearmente secondo una retta che forma un angolo  $\vartheta$  con l'asse di trasmissione di un polarizzatore lineare. Avevamo concluso che la probabilità di passaggio è  $\cos^2 \vartheta$ . Potevamo forse aspettarci di trovare la stessa probabilità per l'evento spin su lungo  $z$ , mentre abbiamo trovato  $\cos^2(\vartheta/2)$ . In realtà questa aspettativa non era giustificata, essenzialmente per due ragioni. In primo luogo, se la probabilità di spin su fosse  $\cos^2 \vartheta$ , necessariamente (per la proprietà di chiusura) la probabilità di spin giù dovrebbe essere  $\sin^2 \vartheta$ . Allora, prendendo  $\vartheta = \pi/2$ , si avrebbe probabilità 0 di trovare spin su e probabilità 1 di trovare spin giù, mentre sappiamo dagli esperimenti che entrambe queste probabilità devono valere 1/2. Addirittura, prendendo

$\vartheta = \pi$ , cioè orientando la retta individuata da  $\mathbf{r}$  (d'ora in poi diremo brevemente la retta  $\mathbf{r}$ ) parallelamente all'asse  $z$ , nel verso negativo, verrebbe fuori che la probabilità di spin giù è 0. In secondo luogo, l'aspettativa detta si basa in realtà sull'idea che  $\boldsymbol{\sigma}$  sia lungo la retta  $\mathbf{r}$ . Come abbiamo già osservato, questo non è vero. Noi non sappiamo come è orientato  $\boldsymbol{\sigma}$ ; sappiamo solo che la sua proiezione su  $\mathbf{r}$  vale certamente 1. Si può invece pensare che  $\mathbf{r}$  sia una direzione media, in senso quantistico, del vettore  $\boldsymbol{\sigma}$ . Per vedere se questa idea è ragionevole, calcoliamo il valore atteso di  $\sigma_z$ . Visto che ai risultati 1 e -1 competono le probabilità  $\cos^2(\vartheta/2)$  e  $\sin^2(\vartheta/2)$ , il valore atteso di  $\sigma_z$  è

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \cos^2(\vartheta/2) - \sin^2(\vartheta/2) = \cos \vartheta, \quad (50)$$

cioè è esattamente uguale alla proiezione che avrebbe su  $z$  il versore  $\mathbf{r}$ . Si potrebbe vedere che lo stesso vale per la proiezione su qualunque asse.

Passiamo alle altre conseguenze importanti dell'ipotesi fondamentale che abbiamo fatto. Esse riguardano gli operatori da associare allo spin. Osserviamo per questo che la componente di  $\boldsymbol{\sigma}$  lungo la retta  $\mathbf{r}$  è una grandezza osservabile  $\sigma_r$  (che può assumere i valori 1 o -1). Ad essa sarà associato, come sempre in meccanica quantistica, un operatore. Diversamente dagli operatori differenziali che abbiamo incontrato finora, si tratta semplicemente di una matrice  $2 \times 2$ , visto che l'ente su cui deve operare, lo spinore, si esplicita in una matrice colonna a due elementi. Esso deve avere gli spinori  $\check{r}_+$  e  $\check{r}_-$  come autofunzioni, o autospinori, con autovalori +1 e -1 rispettivamente. Deve cioè aversi

$$\hat{\sigma}_r \check{r}_+ = \check{r}_+; \quad \hat{\sigma}_r \check{r}_- = -\check{r}_-. \quad (51)$$

La matrice dovrà essere hermitiana, cioè della forma

$$\hat{\sigma}_r = \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & C \end{pmatrix}, \quad (52)$$

dove  $A$ ,  $B$  e  $C$  possono essere complessi, in modo che i suoi autovalori siano sicuramente reali. Allora le (51) richiedono che sia

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ e s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ e s \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s \\ -e c \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} s \\ -e c \end{pmatrix} \quad (53)$$

dove abbiamo usato le (39) e (40) introducendo le abbreviazioni

$$c = \cos(\vartheta/2), \quad s = \sin(\vartheta/2), \quad e = \exp(i\varphi). \quad (54)$$

Sviluppando i prodotti righe per colonne nella (53) si ottengono quattro equazioni (una delle quali ridondante) per le incognite  $A$ ,  $B$  e  $C$ . Si trova facilmente che le soluzioni sono

$$A = 1 - 2s^2 = \cos \vartheta, \quad B = \frac{2sc}{e} = e^{-i\varphi} \sin \vartheta, \quad C = 1 - 2c^2 = -\cos \vartheta. \quad (55)$$

Pertanto abbiamo

$$\hat{\sigma}_r = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & e^{-i\varphi} \sin \vartheta \\ e^{i\varphi} \sin \vartheta & -\cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (56)$$

In particolare, quando  $r$  è uno degli assi coordinati  $x, y, z$  abbiamo

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (57)$$

Le matrici (57) sono note come matrici di Pauli. I loro commutatori si calcolano facilmente e risultano essere i seguenti

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z; \quad [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x; \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y. \quad (58)$$

Se si moltiplica ogni  $\hat{\sigma}_\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) per  $\hbar/2$  e si confrontano le (58) e la (14) si vede che le matrici di Pauli (moltiplicate per  $\hbar/2$ ) soddisfano le stesse regole di commutazione del momento angolare orbitale. E' anche immediato verificare che

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{I}, \quad (59)$$

dove  $\hat{I}$  è la matrice identità. Ne segue che l'operatore corrispondente al quadrato della lunghezza dello spin

$$\hat{\sigma}^2 = \hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 = 3\hat{I}, \quad (60)$$

ha qualsiasi spinore come autospinore con autovalore 3. Pertanto la lunghezza di  $\boldsymbol{\sigma}$  è  $\sqrt{3}$  e non 1. Ciò è in accordo con quanto già visto per il momento angolare orbitale, in cui, se  $L_z$  vale  $l\hbar$ ,  $L$  vale  $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ . Si ricordi infatti che per  $\boldsymbol{\sigma}$  stiamo prendendo come unità di misura  $\hbar/2$ .

Nelle applicazioni del simbolismo, è utile calcolare qual è l'effetto di  $\hat{\sigma}_x$  e  $\hat{\sigma}_y$  sugli autospinori di  $\hat{\sigma}_z$ . Applicando le (57) alle (41) si trova facilmente

$$\hat{\sigma}_x \check{z}_+ = \check{z}_-; \quad \hat{\sigma}_x \check{z}_- = \check{z}_+; \quad \hat{\sigma}_y \check{z}_+ = i\check{z}_-; \quad \hat{\sigma}_y \check{z}_- = -i\check{z}_+. \quad (61)$$

## 1.5 Spin in campo magnetico statico

Vediamo ora un'applicazione del simbolismo appena introdotto, studiando l'effetto di un campo magnetico su uno spin. Consideriamo una particella di spin 1/2 immersa in un campo magnetico statico  $\mathbf{B}$  diretto lungo  $z$ . L'energia potenziale classica di un momento magnetico  $\mathbf{M}$  in tale campo è

$$U = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B} = -M_z B. \quad (62)$$

L'hamiltoniano del sistema cambia, rispetto al caso in cui non c'è campo magnetico, per l'aggiunta del termine (62). Con un procedimento analogo a quello visto per la buca di

potenziale rettangolare infinitamente profonda (separazione delle variabili), si può vedere che, se l'energia di uno stato stazionario vale  $E_0$  in assenza di campo, le energie possibili in presenza del campo si ottengono sommando a  $E_0$  uno degli autovalori dell'operatore hamiltoniano corrispondente alla (62). Quest'ultimo si ottiene sostituendo la grandezza classica  $M_z$  con l'operatore  $\hat{M}_{sz}$  associato al momento magnetico di spin proiettato su  $z$ . Tenendo presenti le (31) e (32), troviamo

$$\hat{M}_{sz} = \gamma_s \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_{sz}, \quad (63)$$

e ciò dà per l'hamiltoniano

$$\hat{H} = -\gamma_s \frac{\hbar}{2} B \hat{\sigma}_z. \quad (64)$$

L'equazione di Schrödinger per gli stati stazionari acquista la forma

$$-\gamma_s \frac{\hbar}{2} B \hat{\sigma}_z \tilde{u} = E \tilde{u}, \quad (65)$$

dove  $\tilde{u}$  è uno spinore. Dato che  $\hat{H}$  è proporzionale a  $\hat{\sigma}_z$  gli autostati dell'energia sono gli stessi di  $\hat{\sigma}_z$ , cioè  $\tilde{z}_+$  e  $\tilde{z}_-$ . Gli autovalori corrispondenti sono (anzichè 1 e -1)

$$E_1 = -\gamma_s \frac{\hbar}{2} B; \quad E_2 = \gamma_s \frac{\hbar}{2} B, \quad (66)$$

e il livello energetico iniziale  $E_0$  si suddivide in due sottolivelli  $E_0 + E_1$  e  $E_0 + E_2$ . Quale dei due sia il superiore dipende dal segno del rapporto giromagnetico. Se, come accade per un elettrone, esso è negativo, il valore più alto per l'energia è  $E_0 + E_1$ . Esso è associato allo stato di spin su lungo la direzione del campo magnetico. Si noti che, proprio per il segno negativo di  $\gamma_s$ , nello stato di spin su ( $\tilde{z}_+$ ) la proiezione del momento magnetico è antiparallela a quella del campo. Se poi  $\gamma_s$  è positivo l'energia più alta è  $E_0 + E_2$  e corrisponde allo stato  $\tilde{z}_-$ . Anche in questo caso peraltro, essendo concordi il momento angolare e quello magnetico, quest'ultimo ha proiezione antiparallela al campo magnetico. Introducendo una pulsazione  $\omega$  definita come

$$\omega = |\gamma_s| B, \quad (67)$$

si può riassumere dicendo che sono possibili i due livelli

$$E_+ = E_0 + \frac{\hbar\omega}{2}; \quad E_- = E_0 - \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (68)$$

e che il superiore compete allo stato in cui il momento magnetico di spin ha proiezione su  $z$  antiparallela al campo magnetico.

E' interessante esaminare come cambia un generico stato di spin al passare del tempo sotto l'azione del campo magnetico. Ci limitiamo al caso di rapporto giromagnetico negativo. Se a  $t = 0$  lo stato è rappresentato da

$$\check{u}_0 = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\check{z}_+ + b\check{z}_-, \quad (69)$$

per avere lo stato al generico istante  $t$  basta, come al solito, moltiplicare gli autostati dell'energia per il loro fattore temporale. Si ha quindi

$$\check{u}(t) = ae^{-\frac{i\omega t}{2}}\check{z}_+ + be^{i\frac{\omega t}{2}}\check{z}_-. \quad (70)$$

Ricordando la forma esplicita di  $a$  e  $b$  in funzione di  $\vartheta$  e  $\varphi$ , la (70) si scrive

$$\check{u}(t) = \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-\frac{i\omega t}{2}} \check{z}_+ + \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i(\varphi + \frac{\omega t}{2})} \check{z}_- = e^{-i\frac{\omega t}{2}} \left[ \cos \frac{\vartheta}{2} \check{z}_+ + \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i(\varphi + \omega t)} \check{z}_- \right]. \quad (71)$$

L'ultima espressione, in cui  $\varphi$  è sostituito da  $\varphi + \omega t$  mostra che la retta  $\mathbf{r}$  associata allo spinore ruota con velocità angolare  $\omega$  su un cono di semiapertura  $\vartheta$ . Questo movimento, noto come precessione dello spin, è analogo a quello compiuto classicamente da un momento magnetico posto in un campo magnetico (precessione di Larmor).

Aggiungiamo che fra i due sottolivelli separati in energia di  $\hbar\omega$  è possibile indurre transizioni utilizzando radiazione elettromagnetica di pulsazione  $\omega$ . Questa possibilità è alla base della spettroscopia NMR (Nuclear Magnetic Resonance) e delle tecniche di NMI (Nuclear Magnetic Imaging). La prima è una potente tecnica d'indagine sui materiali e la seconda trova importanti applicazioni in medicina.

## 2 Quantizzazione dei campi elastici

La quantizzazione delle vibrazioni reticolari in un cristallo porta al concetto di *fonone*, l'analogo elastico del fotone. Come vedremo, le operazioni di base per arrivare al processo di quantizzazione sono piuttosto semplici. Prima di esaminarle però, dedicheremo un po' di spazio alle caratteristiche classiche della propagazione delle onde elastiche in un cristallo. Tali caratteristiche sono dovute alla natura discreta e periodica del cristallo.

Per semplificare la trattazione, ci limiteremo a modelli lineari, cioè a catene di atomi allineati su una retta, anziché a strutture cristalline tridimensionali. Per quanto simili modelli siano lontani dalla realtà, essi evidenziano alcuni aspetti della propagazione nel cristallo che si ritrovano poi anche nel caso tridimensionale.

### 2.1 Propagazione di onde elastiche in un cristallo

Consideriamo un insieme periodico di atomi puntiformi, ciascuno di massa  $M$ , posti a distanza  $P$  (periodo) l'uno dall'altro lungo una retta. La posizione di riposo dell' $n$ -esimo

atomo è  $nP$ . Quando un'onda elastica si propaga in questa struttura, ciascun atomo oscillerà intorno alla sua posizione di equilibrio. Possiamo pensare ad onde longitudinali, ma il calcolo sarebbe dello stesso tipo per onde trasversali. Indichiamo con  $\xi_n$  lo spostamento istantaneo dell' $n$ -esimo atomo. Gli spostamenti atomici fanno insorgere delle forze fra gli atomi che tendono a riportarli nelle posizioni d'equilibrio. Si può pensare che, per ciascun atomo, il contributo più importante a tali forze derivi dai due atomi immediatamente adiacenti, a destra e a sinistra. Si parla di approssimazione dei primi vicini. Supponendo che tali forze siano di natura elastica, caratterizzate da una costante  $K$ , il secondo principio della dinamica scritto per l' $n$ -esimo atomo è

$$M\ddot{\xi}_n = -K(\xi_n - \xi_{n-1}) - K(\xi_n - \xi_{n+1}) = -K(2\xi_n - \xi_{n-1} - \xi_{n+1}). \quad (72)$$

Vogliamo pensare che lo spostamento sia dovuto alla propagazione di un'onda piana, di ondulanza  $k$  e pulsazione  $\omega$ , che, in un continuo, produrrebbe uno spostamento

$$\xi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}. \quad (73)$$

Per avere lo spostamento istantaneo dalla posizione d'equilibrio dell' $n$ -esimo atomo, basta sostituire nella precedente la  $x$  con la posizione (di riposo) dell'atomo, cioè  $nP$ . Per gli indici  $n$ ,  $n - 1$ ,  $n + 1$  avremo allora le relazioni

$$\xi_n = Ae^{i(knP - \omega t)}, \quad (74)$$

$$\xi_{n-1} = Ae^{i[k(n-1)P - \omega t]} = \xi_n e^{-ikP}, \quad (75)$$

$$\xi_{n+1} = Ae^{i[k(n+1)P - \omega t]} = \xi_n e^{ikP}. \quad (76)$$

Inoltre dalla (74) segue

$$\ddot{\xi}_n = -\omega^2 \xi_n. \quad (77)$$

Sostituendo le precedenti quattro relazioni nella (72) si ottiene

$$-M\omega^2 \xi_n = -K(2 - e^{-ikP} - e^{ikP}) \xi_n, \quad (78)$$

ovvero

$$\omega^2 = 2\frac{K}{M}[1 - \cos(kP)] = 4\frac{K}{M}\sin^2\left(\frac{kP}{2}\right). \quad (79)$$

In maniera generale, la relazione che esprime  $\omega$  in funzione di  $k$  prende il nome di legge di dispersione. Estrahendo la radice (positiva come deve essere  $\omega$ ) della (79) si ottiene che, per il fenomeno in esame, la legge di dispersione, è

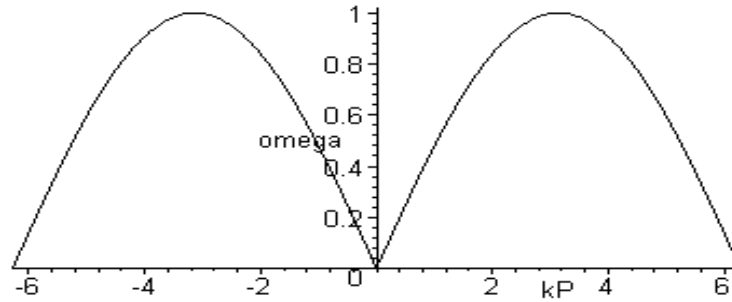
$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin\left(\frac{kP}{2}\right) \right|. \quad (80)$$



Il grafico della (80), in funzione di  $kP$  è riportato nella figura che segue, usando unità arbitrarie per  $\omega$ . Al variare di  $k$ , la  $\omega$  riassume periodicamente gli stessi valori. Per spiegare questo comportamento osserviamo che la (73) ha significato solo in corrispondenza ai valori di  $x$  multipli di  $P$  (posizioni reticolari d'equilibrio). Ora, supponiamo di passare da un fissato valore di  $k$  ad uno variato di una quantità  $\Delta k$  (positiva o negativa). Per l' $n$ -esimo atomo la parte spaziale dell'esponente della (73) passa allora da  $nkP$  a

$$n(k + \Delta k)P = nkP + n\Delta kP. \quad (81)$$

E' evidente allora che se  $\Delta kP$  vale  $2\pi$  o un suo multiplo intero, la (73) ha, per qualsiasi atomo, lo stesso valore prendendo l'ondulanza  $k$  o la  $k + \Delta k$ . Ne segue che qualunque valore di  $k$  che sia esterno all'intervallo  $(-\pi/P, \pi/P)$ , detto prima zona di Brillouin, è equivalente ad uno che cade in tale intervallo. Più esplicitamente, se  $k$  è esterno alla prima zona di Brillouin, è sufficiente sottrargli (o sommargli) un opportuno multiplo di  $2\pi/P$  per riportarlo all'interno di tale zona. In figura, la prima zona di Brillouin è quella compresa fra  $-\pi$  e  $\pi$ . L'unione degli intervalli  $(-2\pi, -\pi)$  e  $(\pi, 2\pi)$  è detta seconda zona di Brillouin e così via.



Vediamo di dare un'interpretazione intuitiva di tutto ciò, riferendoci alle lunghezze d'onda. Entro la prima zona di Brillouin, la lunghezza d'onda  $2\pi/|k|$  assume il suo minimo valore ai bordi ( $k = \pm\pi/P$ ), in corrispondenza ai quali essa vale  $2P$ . In questa situazione, fra un atomo e l'altro l'onda (73) compie mezza oscillazione spaziale. Supponiamo ora di prendere un  $k$  che superi quello di bordo per una quantità  $2\pi/P$ , quindi un  $k$  pari a  $3\pi/P$ . La lunghezza d'onda corrispondente è  $2\pi/(3\pi/P) = 2P/3$ . Allora, fra un atomo e l'altro l'onda (73) compie tre mezza oscillazioni spaziali. Solo che fra gli atomi c'è il vuoto e dire che fra i due l'onda ha compiuto mezza oscillazione oppure tre (o anche 5, 7, 9,...) mezza oscillazioni è esattamente la stessa cosa perché l'onda (73) acquista significato solo in corrispondenza alle posizioni atomiche. In conclusione, è sufficiente considerare solo l'intervallo di valori di  $k$  che corrisponde alla prima zona di Brillouin.

Il rapporto  $\omega/k$  è la velocità di fase dell'onda. In un mezzo continuo non dispersivo essa sarebbe costante, per cui il grafico di  $\omega$  in funzione di  $k$  sarebbe, sia per  $k$  positivi che per  $k$  negativi, una semiretta per l'origine. Nel caso della (80) un comportamento di questo tipo si ha per piccoli  $k$ , cioè quando la lunghezza d'onda è così grande rispetto alla distanza interatomica che il sistema discreto di atomi è assimilabile ad un continuo.

Possiamo servirci di questo per valutare l'ordine di grandezza della massima  $\omega$  che può propagarsi nel cristallo. Per piccoli  $k$ , la (80) può approssimarsi con

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{M}} |kP|, \quad (82)$$

da cui, limitandoci a  $k$  positivi, segue che la velocità di fase per grandi lunghezze d'onda, che indichiamo con  $v_0$ , è

$$v_0 = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{K}{M}} P. \quad (83)$$

La velocità delle onde elastiche nei solidi è nota e, tipicamente, è dell'ordine del migliaio di metri al secondo. Il massimo valore di  $\omega$ , secondo la (80) è

$$\omega_{\text{Max}} = 2\sqrt{\frac{K}{M}}. \quad (84)$$

Usando la (83) possiamo scrivere

$$\omega_{\text{Max}} = 2\frac{v_0}{P}. \quad (85)$$

Prendiamo per la distanza interatomica  $P$  un valore tipico dell'ordine del decimo di nanometro e per  $v_0$  un valore di  $10^3$  m/s. Allora dalla (85) segue la stima

$$\omega_{\text{Max}} \cong 2 \times 10^{13} \text{ rad/s}. \quad (86)$$

Aggiungiamo qualcosa circa la velocità di gruppo, data da  $d\omega/dk$ . Come risulta dalla (80), essa diminuisce, a partire da  $k = 0$ , fino ad annullarsi ai bordi della zona. L'origine di questo annullamento è da ricercare nel fatto che, quando fra un atomo e l'altro entra mezza lunghezza d'onda, si ha un fenomeno di riflessione alla Bragg (EO.9.9), per cui nel cristallo si propagano due onde di uguale ampiezza, una progressiva ed una regressiva, che danno origine ad un'onda stazionaria.

## 2.2 Catena biatomica

Esaminiamo ora il caso in cui, lungo la catena atomica, si alternano atomi di due diverse masse,  $M$  e  $m$ . Immagineremo che gli atomi di massa  $M$  si trovino nelle posizioni d'indice dispari e quelli di massa  $m$  in quelle d'indice pari. Le equazioni del moto per i due tipi di atomi sono allora del tipo

$$M\ddot{\xi}_{2n+1} = -K(2\xi_{2n+1} - \xi_{2n} - \xi_{2n+2}), \quad (87)$$

$$m\ddot{\xi}_{2n} = -K(2\xi_{2n} - \xi_{2n-1} - \xi_{2n+1}). \quad (88)$$

Anche in questo caso, supporremo che gli spostamenti degli atomi siano dovuti ad un'onda piana di ondulanza  $k$  e pulsazione  $\omega$ . Tuttavia, data la differenza fra le due masse,

dovremo ammettere che gli spostamenti atomici prodotti dall'onda abbiano ampiezza diversa. Scriveremo perciò

$$\xi_{2n+1} = Ae^{i[k(2n+1)P-\omega t]}, \quad (89)$$

$$\xi_{2n} = Be^{i[k(2n)P-\omega t]}, \quad (90)$$

Abbiamo continuato ad indicare con  $P$  la distanza fra due atomi contigui. Si noti però che adesso il periodo del cristallo è  $2P$ . Sfruttando le espressioni precedenti nelle equazioni del moto, analogamente a quanto fatto per la catena di atomi uguali, si arriva a

$$-\omega^2 MA = -2KA + 2KB \cos(kP), \quad (91)$$

$$-\omega^2 mB = 2KA \cos(kP) - 2KB, \quad (92)$$

ovvero

$$(\omega^2 M - 2K)A + [2K \cos(kP)]B = 0, \quad (93)$$

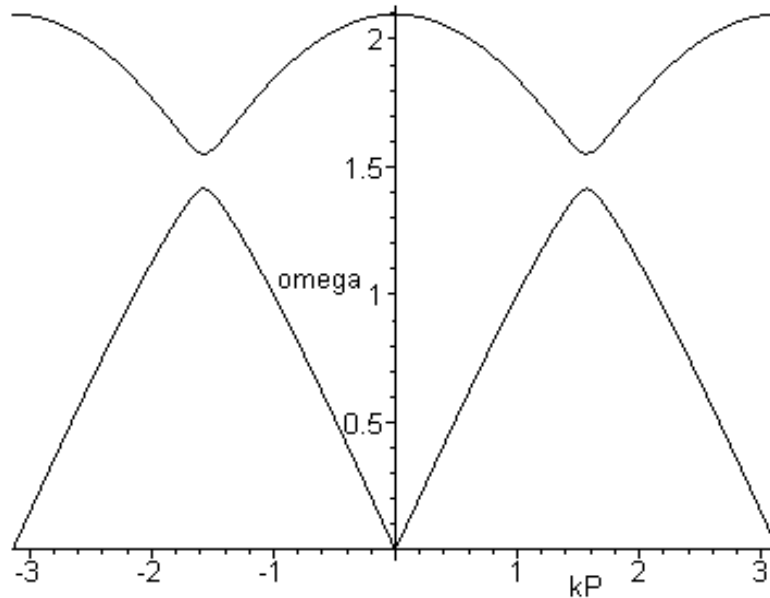
$$[2K \cos(kP)]A + (\omega^2 m - 2K)B = 0. \quad (94)$$

Affinché questo sistema di due equazioni lineari omogenee in  $A$  e  $B$  ammetta soluzioni non banali si deve annullare il determinante dei coefficienti. Imponendo questa condizione, si ottiene l'equazione biquadratica in  $\omega$

$$(\omega^2 M - 2K)(\omega^2 m - 2K) - 4K^2 \cos^2(kP) = 0, \quad (95)$$

le cui soluzioni sono

$$\omega^2 = \frac{K}{mM} \left[ m + M \pm \sqrt{(m + M)^2 - 4mM \sin^2(kP)} \right]. \quad (96)$$



Il secondo termine sotto radice assume al massimo il valore  $4mM$ , in corrispondenza al quale il radicando diventa  $(m - M)^2$ . In altri termini, il radicando è comunque positivo e dunque, per ogni  $k$ , esistono due possibili valori di  $\omega$ . Perciò il grafico della legge di dispersione si divide in due rami. Il ramo inferiore viene chiamato branca acustica e quello superiore branca ottica. Si noti che la prima zona di Brillouin termina (sui  $k$  positivi) per  $kP = \pi/2$ , anziché per  $kP = \pi$  come accade nella catena monoatomica. Ciò è dovuto al fatto che il periodo è  $2P$ . Posto

$$\omega_1^2 = \frac{K}{m}; \quad \omega_2^2 = \frac{K}{M}, \quad (97)$$

la (96) può scriversi

$$\omega^2 = \omega_1^2 + \omega_2^2 \pm \sqrt{\omega_1^4 + \omega_2^4 + 2\omega_1^2\omega_2^2[1 - 2\sin^2(kP)]}. \quad (98)$$

In figura è riportato il grafico della (98) nel caso  $m/M = 1.2$ , usando unità arbitrarie per  $\omega$ . Si noti che le due branche sono separate (se  $m \neq M$ ) da un intervallo di valori proibiti per  $\omega$ .

## 2.3 Quantizzazione

Discutiamo ora il procedimento che si può seguire per arrivare alla quantizzazione delle onde elastiche. Riprendiamo in considerazione la catena di atomi uguali e supponiamo che sia costituita da un numero finito, diciamo  $N$ , di atomi di massa  $M$  posti, all'equilibrio, a distanza  $P$  l'uno dall'altro e che numeriamo da zero a  $N - 1$ . A qualunque temperatura diversa dallo zero assoluto (cioè a qualunque temperatura fisicamente realizzabile), gli atomi oscilleranno intorno alle posizioni reticolari. L'equazione (72), che qui riscriviamo,

$$M\ddot{\xi}_n = -K(2\xi_n - \xi_{n-1} - \xi_{n+1}), \quad (99)$$

vale per tutti gli  $n$  che vanno da 1 a  $N - 2$ . Per completare il modello dobbiamo precisare qual è la situazione dei due atomi estremi (corrispondenti a  $n = 0$  e a  $n = N - 1$ ). Per es., essi potrebbero essere fissati. L'ipotesi che facciamo (e che è quella normalmente adottata) è che la catena si ripeta periodicamente. Ciò equivale a pensare che il cristallo sia chiuso su sé stesso ad anello (come nel rotatore rigido). In questa ipotesi  $\xi_{-1}$ , che compare nella (99) quando si pone  $n = 0$ , va identificato con  $\xi_{N-1}$  e  $\xi_N$ , che compare nella (99) quando si pone  $n = N - 1$ , è la stessa cosa che  $\xi_0$ .

Usando queste condizioni al contorno (note come condizioni di Born-Von Karman) la (99) vale per tutti gli  $n$ . Gli  $\xi_n$  sono funzioni del tempo e ciò che vogliamo mostrare è che le  $N$  equazioni accoppiate (99) si possono trasformare in  $N$  equazioni di oscillatori armonici disaccoppiati (indipendenti). Faremo ciò attraverso un'opportuna analisi di Fourier. Per capire quale tipo di analisi di Fourier ci occorre, osserviamo che, al generico istante  $t$ , gli

$\xi_n(t)$  sono semplicemente una  $N$ -pla di numeri. Ora, rappresentare alla Fourier  $N$  numeri significa usare la trasformata di Fourier discreta. Perciò scriveremo

$$\xi_n(t) = \sum_{m=0}^{N-1} X_m(t) \exp\left(2\pi i \frac{nm}{N}\right); \quad (n = 0, 1, \dots, N-1), \quad (100)$$

dove le componenti della trasformata di Fourier discreta sono date da

$$X_m(t) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \xi_n(t) \exp\left(-2\pi i \frac{nm}{N}\right); \quad (m = 0, 1, \dots, N-1). \quad (101)$$

Sostituendo la (100) nella (99) otteniamo

$$M \sum_{m=0}^{N-1} \ddot{X}_m e^{2\pi i nm/N} = -2K \sum_{m=0}^{N-1} X_m e^{2\pi i nm/N} \left[1 - \cos\left(2\pi \frac{m}{N}\right)\right], \quad (102)$$

che implica

$$\ddot{X}_m = -4 \frac{K}{M} \sin^2\left(\frac{\pi m}{N}\right) X_m; \quad (m = 0, 1, \dots, N-1). \quad (103)$$

Abbiamo ottenuto quanto volevamo. Infatti le (103) sono proprio le equazioni di  $N$  oscillatori armonici indipendenti.

Osserviamo ora che ponendo

$$\omega_m = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin\left(\frac{\pi m}{N}\right) \right|; \quad (m = 0, 1, \dots, N-1), \quad (104)$$

alle soluzioni delle (103) si può dare la forma

$$X_m(t) = A_m e^{-i\omega_m t}. \quad (105)$$

Se inoltre poniamo

$$k_m = m \frac{2\pi}{NP}; \quad (m = 0, 1, \dots, N-1). \quad (106)$$

possiamo scrivere le (100) come

$$\xi_n(t) = \sum_{m=0}^{N-1} A_m(t) \exp[ik_m(nP) - i\omega_m t]; \quad (n = 0, 1, \dots, N-1), \quad (107)$$

che rappresentano gli spostamenti atomici come dovuti alla sovrapposizione di  $N$  onde progressive (valutate in corrispondenza alle posizioni reticolari  $nP$ ). Queste onde costituiscono i cosiddetti modi normali della catena.

La quantizzazione del campo elastico si attua ora quantizzando ciascuno degli oscillatori armonici (103) associati ai modi normali. L'energia del campo è associata ai quanti

d'energia degli oscillatori. Sviluppando l'argomento, si trova che questi quanti d'energia presentano comportamenti analoghi a pseudo-particelle, dette fononi.

Vale la pena di aggiungere un confronto con quanto già visto per la catena monoatomica infinita. Le pulsazioni (104) degli  $N$  oscillatori armonici indipendenti hanno la struttura della (80), con la differenza che qui si ha un insieme discreto e finito. Corrispondentemente, anche i  $k$  hanno valori discreti (106). Dato che  $N$  è da pensare come un numero molto grande (anche solo su un millimetro ci sono 10 milioni di atomi) i valori di  $k$  sono molto prossimi l'uno all'altro. Essi vanno da zero ad un massimo di  $2\pi(N-1)/(NP)$ , cioè circa  $2\pi/P$ , valore doppio di quello al margine destro della prima zona di Brillouin. Naturalmente essi possono essere tutti riportati entro la prima zona se, a quelli che cadono oltre il margine destro, si sottrae  $2\pi/P$ .

### 3 Elettrone in un cristallo

L'analisi degli autostati dell'energia per un elettrone che si trovi all'interno di un cristallo è fondamentale per lo studio delle proprietà di conduzione dei solidi. Vogliamo vedere qui alcuni aspetti di base. Ci limiteremo alla schematizzazione unidimensionale di un cristallo, descritto da un modello che fu proposto da Kronig e Penney. Ciò semplifica la trattazione e consente comunque di raggiungere importanti risultati che vengono confermati da analisi più complete.

Un elettrone che si trovi all'interno di un cristallo è soggetto all'interazione sia con gli ioni posti nelle posizioni reticolari, sia con gli altri elettroni. Si dovrebbe quindi esaminare un sistema a molte particelle. Per avere un problema più facilmente trattabile si fa riferimento ad un singolo elettrone e si ammette che, per l'effetto complessivo di tutte le altre cariche, esso sia soggetto ad un'energia potenziale la cui caratteristica fondamentale è quella di essere periodica, con periodo, diciamo  $P$ , pari al lato della cella cristallina (in una dimensione). Per il momento assumeremo che il cristallo sia di lunghezza infinita. Si potrebbe pensare che anche le autofunzioni dell'energia fossero periodiche. Questo non è vero. Sussiste tuttavia un importante risultato, noto come teorema di Bloch, sulla forma delle autofunzioni. Il teorema di Bloch, che prenderemo per valido senza dimostrazione, asserisce che, in virtù della natura periodica del potenziale, quale che sia la sua forma particolare, è sempre possibile dare alle autofunzioni la forma:

$$u(x) = e^{ikx}v_k(x), \quad (108)$$

dove  $k$  è una quantità reale e  $v_k(x)$  è una funzione periodica di periodo  $P$ , la cui forma dipende da  $k$ . Perciò le autofunzioni si presentano come onde piane ( $e^{ikx}$ ), modulate periodicamente dalla funzione  $v_k(x)$ . Dalla (108) segue in particolare:

$$u(x+P) = e^{ik(x+P)}v_k(x+P) = e^{ikP} [e^{ikx}v_k(x)] = e^{ikP}u(x), \quad (109)$$

avendo tenuto conto della periodicità di  $v_k$ .

Come già detto useremo un modello dovuto a Kronig e Penney. Più precisamente, ci riferiremo ad un caso limite di tale modello, in cui il potenziale è semplicemente una serie di  $\delta$ , la cui ampiezza indichiamo con  $Q$ , poste in  $0, \pm P, \pm 2P, \dots$ , mentre, fra una  $\delta$  e l'altra, è nullo. Allora, all'interno di ciascun periodo il potenziale  $U$  è nullo e quindi le soluzioni saranno combinazioni di un'onda progressiva e di una retrograda. In casi analoghi precedenti abbiamo sempre indicato l'ondulanza di tali onde con simboli del tipo  $k$  o  $k_0$ , ma in questo caso il simbolo  $k$  è usato nell'esponenziale che compare nel teorema di Bloch, per cui indichiamo con  $\alpha$  l'ondulanza delle due onde. Vedremo in seguito che l'uso di  $k$  nell'esponenziale di Bloch non è casuale. L'energia (cinetica) associata alle due onde è legata ad  $\alpha$  dalla solita relazione

$$E = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad (110)$$

a cui corrisponde per  $\alpha$  l'espressione

$$\alpha = \sqrt{2mE}/\hbar. \quad (111)$$

Scriviamo la generica autofunzione nel periodo a destra dell'origine come:

$$u(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}, \quad (0 < x < P), \quad (112)$$

dove  $A$  e  $B$  sono ampiezze incognite. Nel periodo a sinistra dell'origine la soluzione avrà la stessa forma funzionale, ma le costanti  $A$  e  $B$  saranno sostituite da altre due:

$$u(x) = Ce^{i\alpha x} + De^{-i\alpha x}, \quad (-P < x < 0). \quad (113)$$

E' il teorema di Bloch che ci consente di trovare il legame fra  $A$ ,  $B$  e  $C$ ,  $D$ . Infatti, possiamo usare la (109), che segue dal teorema e che qui riscriviamo nella forma

$$e^{ikP}u(x) = u(x + P). \quad (114)$$

Scegliamo la  $x$  nel periodo di sinistra e quindi scriviamo la  $u(x)$  a primo membro usando la (113). Il punto  $x + P$  cade invece nel periodo di destra, per cui l'espressione di  $u(x + P)$  a secondo membro va scritta usando la (112). Perciò la (114) diventa:

$$e^{ikP} (Ce^{i\alpha x} + De^{-i\alpha x}) = Ae^{i\alpha(x+P)} + Be^{-i\alpha(x+P)}, \quad (115)$$

e da questa, uguagliando i coefficienti di  $\exp(i\alpha x)$  e  $\exp(-i\alpha x)$ , deduciamo:

$$C = Ae^{i(\alpha-k)P}, \quad D = Be^{-i(\alpha+k)P}. \quad (116)$$

Ciò permette di scrivere l'espressione di  $u(x)$  nell'intervallo di sinistra come segue:

$$u(x) = Ae^{i(\alpha-k)P}e^{i\alpha x} + Be^{-i(\alpha+k)P}e^{-i\alpha x}, \quad (-P < x < 0). \quad (117)$$

Siamo ora in grado d'imporre le condizioni in  $x = 0$ . Esse richiedono che la (112) e la (117) si raccordino. Quanto alle loro derivate prime, ricordiamo che la presenza della  $\delta$  determina la discontinuità

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{0^+} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{0^-} = \frac{2mQ}{\hbar^2}u(0). \quad (118)$$

Imponendo tali condizioni otteniamo:

$$A + B = Ae^{i(\alpha-k)P} + Be^{-i(\alpha+k)P}, \quad (119)$$

$$(A - B) - [Ae^{i(\alpha-k)P} - Be^{-i(\alpha+k)P}] = \frac{2mQ}{i\alpha\hbar^2}(A + B). \quad (120)$$

Le (119) e (120) danno un sistema di due equazioni omogenee nelle incognite  $A$  e  $B$ . Poniamo per brevità:

$$e^{i(\alpha-k)P} = R, \quad e^{-i(\alpha+k)P} = S, \quad \frac{2mQ}{i\alpha\hbar^2} = T. \quad (121)$$

Allora le (119) e (120) si scrivono:

$$A(1 - R) + B(1 - S) = 0, \quad (122)$$

$$A(1 - R - T) - B(1 - S + T) = 0. \quad (123)$$

Affinché esistano soluzioni non banali delle (122), (123) occorre che si annulli il determinante dei coefficienti:

$$(1 - R)(1 - S + T) + (1 - S)(1 - R - T) = 0, \quad (124)$$

Da qui, sviluppando i prodotti e semplificando, otteniamo:

$$1 - R - S + RS + (S - R)T/2 = 0, \quad (125)$$

Se in questa reinseriamo le espressioni esplicite di  $R$ ,  $S$  e  $T$  (vedi (121)) abbiamo:

$$1 - e^{i(\alpha-k)P} - e^{-i(\alpha+k)P} + e^{-2ikP} + (e^{-i(\alpha+k)P} - e^{i(\alpha-k)P})\frac{mQ}{i\alpha\hbar^2} = 0 \quad (126)$$

e da qui, moltiplicando per  $e^{ikP}$  e dividendo per 2:

$$\cos kP - \cos \alpha P - \frac{mQ}{\alpha\hbar^2} \sin \alpha P = 0. \quad (127)$$

La (127) viene generalmente scritta nella forma:

$$\cos kP = \cos \alpha P + G \frac{\sin \alpha P}{\alpha P}, \quad (128)$$

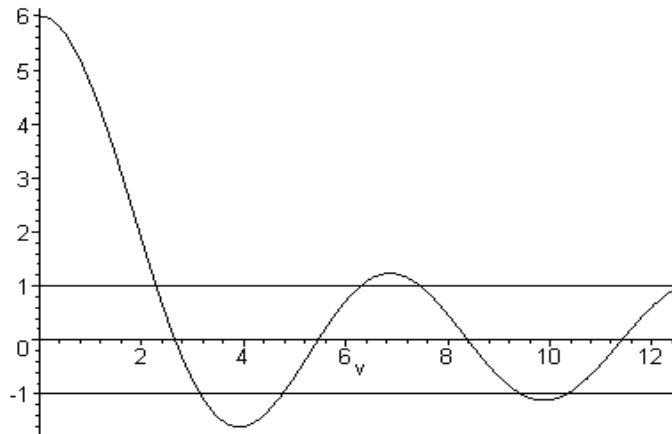


dove

$$G = \frac{mQP}{\hbar^2}. \quad (129)$$

Siccome il primo membro è compreso fra  $-1$  e  $1$ , la (128) ammette soluzioni solo se anche il secondo membro sta in tale intervallo. La figura che segue mostra il grafico del secondo membro in funzione della variabile  $v = \alpha P$ , per  $G = 5$ . Sono indicate le rette  $y = \pm 1$ . Quindi la (128) può essere soddisfatta solo per certi intervalli di valori di  $\alpha$ . Il fatto che per  $\alpha$  esistano intervalli di valori possibili e intervalli proibiti, comporta che anche l'energia  $E$  dell'elettrone, legata a  $\alpha$  dalla (110), può assumere valori solo in certi intervalli. Questi costituiscono le cosiddette bande d'energia permesse, che sono separate da bande di energie proibite.

Abbiamo finora supposto che il cristallo avesse lunghezza infinita. Se si toglie questa ipotesi, oltre alla (128), va soddisfatta una condizione ai bordi del cristallo, per es., alla Born-Von Karman. Ciò porta ad una quantizzazione dei valori possibili per le energie. Le bande permesse diventano allora insiemi di livelli energetici discreti, che si presentano in numero pari a quello degli atomi del cristallo. Tuttavia la differenza di energia fra due livelli contigui entro una banda è molto piccola se (come normalmente accade) il numero degli atomi del cristallo è elevato.



### 3.1 Effetto Hall

Discutiamo qui un fenomeno, noto come effetto Hall, che si verifica quando un conduttore percorso da corrente è immerso in un campo magnetico. Supponiamo che il conduttore abbia sezione rettangolare con lati  $a$  e  $b$ , disposti rispettivamente lungo gli assi  $y$  e  $z$  di un opportuno riferimento. Supponiamo inoltre che la corrente, di intensità  $i$ , fluisca nel verso positivo dell'asse  $x$  e che, nel verso positivo delle  $y$ , sia applicato un campo di induzione magnetica  $\mathbf{B}$ . Si riscontra allora che fra le facce ortogonali a  $z$  esiste una differenza di

potenziale:

$$V_H = R_H \frac{iB}{a}, \quad (130)$$

dove  $R_H$  è una costante, che varia da un conduttore all'altro, nota come costante di Hall.

Vogliamo vedere un'interpretazione classica del fenomeno. Consideriamo una delle particelle cariche che, con il loro moto lungo il conduttore, danno origine alla corrente elettrica. Indicando con  $q$  la sua carica, possiamo dire che la forza agente su di essa a causa del campo elettrico, diciamo  $\mathbf{E}$ , che produce la corrente e di quello magnetico è:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (131)$$

dove  $\mathbf{v}$  è la velocità con cui avanza la carica (si tratta della cosiddetta velocità di trascinamento). Supponendo che la carica  $q$  sia positiva, la forza di Lorentz  $q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  è diretta nel verso positivo dell'asse  $z$ . Ciò, durante un periodo transitorio, a partire dall'istante in cui la corrente comincia a scorrere (o dall'accensione del campo magnetico), porta a incurvare la traiettoria della carica verso l'alto. Si produce allora un addensamento di cariche positive sulla faccia superiore e di cariche negative su quella inferiore. Questo dà luogo ad un campo elettrico trasversale, detto campo di Hall, diretto nel verso negativo delle  $z$ , e conseguentemente ad una forza sulla carica, diretta verso il basso. L'addensamento delle cariche sulle due facce va avanti finché la forza dovuta al campo di Hall non bilancia quella di Lorentz. Se indichiamo con  $E_H$  l'intensità del campo di Hall, il bilanciamento si ha quando:

$$qE_H = qvB. \quad (132)$$

La differenza di potenziale di Hall è allora:

$$V_H = E_H b = vBb. \quad (133)$$

Teniamo ora conto del fatto che la densità di corrente entro il conduttore ha modulo dato da:

$$j = nqv, \quad (134)$$

dove  $n$  è la densità volumetrica di portatori liberi nel conduttore. Essendo poi  $i = jab$ , abbiamo:

$$nqv = \frac{i}{ab}, \quad (135)$$

per cui, ricavando  $v$  dalla (135) e sostituendo nella (133), ricaviamo:

$$V_H = \frac{1}{qn} \frac{iB}{a}. \quad (136)$$

Confrontando questa con la legge sperimentale (130), si vede che l'accordo è completo e che la costante di Hall è espressa da:

$$R_H = \frac{1}{qn}. \quad (137)$$

L'importanza dell'effetto Hall ai nostri fini è dovuta ai seguenti fatti. Riferendoci ai conduttori metallici, si trova sperimentalmente che, per la maggior parte di essi, la costante di Hall è negativa. Ciò si interpreta dicendo che le cariche libere di muoversi entro un metallo (e quindi in grado di dare correnti elettriche) sono gli elettroni. Questo d'altronde è suggerito dai modelli atomici e da altre evidenze sperimentali (si pensi all'effetto fotoelettrico). Esistono tuttavia dei metalli, come zinco, ferro, cadmio, in cui la costante di Hall è positiva, come se la corrente fosse costituita da un flusso di cariche positive. La cosa è inspiegabile sulla base di modelli classici, in quanto non risulta che in un metallo ci siano portatori liberi con carica positiva. Vedremo nel prossimo paragrafo che il fenomeno è invece spiegato dalla teoria quantistica sviluppata nel paragrafo precedente.

### 3.2 Struttura delle bande, massa efficace

La forma delle autofunzioni dettata dal teorema di Bloch è caratterizzata da una struttura d'onda piana, rappresentata dal termine  $e^{ikx}$ . Ciò suggerisce di provare a vedere se si può descrivere il comportamento dell'elettrone nel cristallo come quello d'una particella libera che procede con impulso  $\hbar k$ . Per renderci conto del vantaggio di una simile descrizione, pensiamo al caso in cui, studiando i processi di conduzione elettrica, si debba determinare l'effetto di un campo elettrico applicato al cristallo. Se si può costruire il modello ad elettrone libero, ci si ritroverà nel caso di una particella sottoposta ad una forza costante (già trattato in precedenza) e questo semplificherà molto le cose.

Naturalmente, siccome in realtà è presente un potenziale periodico, il modello ad elettrone libero richiederà qualche modifica delle caratteristiche dell'elettrone. Come vedremo fra breve, il modello può essere costruito a patto di attribuire all'elettrone una massa opportuna, che prende il nome di massa efficace.

Per ricordare che la quantità  $\hbar k$  non è il vero impulso dell'elettrone, ad essa si dà il nome di *momento di cristallo* o *momento cristallino*, traslitterando dall'inglese *crystal momentum*, in cui in realtà il termine *momentum* significa impulso.

Per poter procedere, occorre determinare la legge di dispersione, cioè il legame fra  $\omega$  e  $k$ , ovvero fra l'energia ( $\hbar\omega$ ) e  $k$ . Ora, mentre il legame fra  $\alpha$  ed  $E$  è semplicemente quadratico, come sappiamo dalla (111), quello fra  $k$  ed  $E$  è più complicato. Per stabilirlo, riprendiamo in esame la (128) e scriviamo il secondo membro in funzione di  $E$  sfruttando la (111)

$$\cos(kP) = \cos\left(P\sqrt{2mE}/\hbar\right) + G\frac{\sin(P\sqrt{2mE}/\hbar)}{P\sqrt{2mE}/\hbar}. \quad (138)$$

Dalla (138), tramite l'arcocoseno possiamo ricavare  $kP$

$$kP = \arccos\left[\cos\left(P\sqrt{2mE}/\hbar\right) + G\frac{\sin(P\sqrt{2mE}/\hbar)}{P\sqrt{2mE}/\hbar}\right]. \quad (139)$$

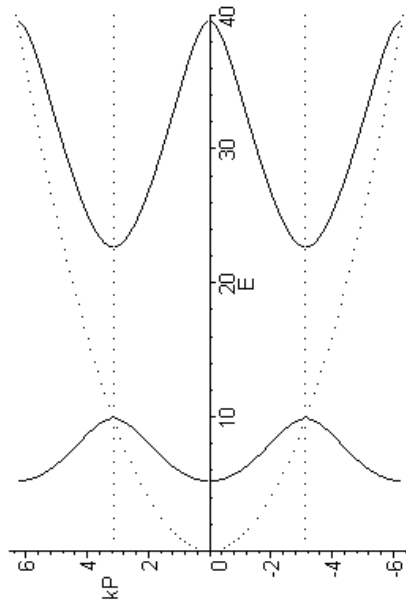
Naturalmente la precedente equazione ha soluzioni (reali) solo se  $E$  è contenuta in una delle bande consentite, come abbiamo detto discutendo la (128). Possiamo fare un

grafico di  $kP$  in funzione di  $E$ , tenendo conto che il coseno è funzione pari e periodica con periodo  $2\pi$ . Ruotando la figura di 90 gradi otteniamo delle curve del tipo riportato nella figura che segue, in cui si è preso  $G = 5$  (vedi eq. (129)). Esse rappresentano la legge di dispersione. Si noterà l'analogia con le curve di dispersione per le onde elastiche nella catena biatomica. Ciò indica che l'origine delle bande è da ricondurre alla struttura periodica del sistema. Si noti però che nella figura sono indicate solo le prime due bande d'energia e che altre sono presenti per energie superiori (nella (139) la variabile  $E$  può essere scelta arbitrariamente grande). Le due rette verticali punteggiate indicano i limiti della prima zona di Brillouin, mentre la parabola punteggiata rappresenta la legge di dispersione che si avrebbe per un vero elettrone libero.

Una volta risolta la (128) si possono individuare, a meno di una costante moltiplicativa, le autofunzioni dell'energia, che, secondo le (112) e (117), sono date da

$$u(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}, \quad (0 < x < P), \quad (140)$$

$$u(x) = Ae^{i(\alpha-k)P}e^{i\alpha x} + Be^{-i(\alpha+k)P}e^{-i\alpha x}, \quad (-P < x < 0). \quad (141)$$



Per specificare le autofunzioni (a meno di una costante moltiplicativa) basta trovare il rapporto  $B/A$ . Ricordando la (119)

$$A + B = Ae^{i(\alpha-k)P} + Be^{-i(\alpha+k)P}, \quad (142)$$

ricaviamo

$$\frac{B}{A} = \frac{e^{i(\alpha-k)P} - 1}{1 - e^{-i(\alpha+k)P}}, \quad (143)$$

e questa, per ogni coppia  $k, \alpha$  che sia soluzione della (128), dà il rapporto fra l'ampiezza dell'onda retrograda e di quella progressiva. Ci limitiamo a vedere ciò che accade ai bordi della prima zona di Brillouin. In tali punti è  $kP = \pm\pi$ , per cui la (143) fornisce

$$\frac{B}{A} = -\frac{e^{i\alpha P} + 1}{1 + e^{-i\alpha P}} = -e^{-i\alpha P}. \quad (144)$$

Ne segue che  $|B/A| = 1$ . Perciò  $u(x)$  assume la forma di un'onda stazionaria. Ciò è dovuto ad un fenomeno di riflessione alla Bragg.

Interessiamoci ora alle caratteristiche della forma delle curve di dispersione, riferendoci alla banda di minima energia. Come si vede, l'andamento di  $E$  in funzione di  $kP$  è approssimativamente parabolico nella prima parte (piccoli  $k$ ). Quando però ci si avvicina al bordo della banda, il grafico cambia curvatura. La concavità, che era verso l'alto per piccoli  $k$ , si rivolge verso il basso nella zona vicina al bordo della banda. In particolare, in corrispondenza al bordo banda la tangente alla curva diventa orizzontale, cosicché, in un intorno di tale punto, il grafico è approssimabile con una parabola ad asse verticale con la concavità verso il basso.

Vogliamo studiare, per un elettrone che si trovi in uno stato caratterizzato da un certo momento cristallino  $\hbar k$ , l'effetto di una forza costante, per es. prodotta da un campo elettrico applicato dall'esterno del cristallo. Quando abbiamo trattato il caso di una particella assoggettata ad una forza costante, abbiamo visto che, quale che sia la funzione d'onda iniziale, il valore atteso dell'impulso della particella cresce linearmente nel tempo, in accordo con la previsione classica. Questo ci autorizza a fare un ragionamento semiclassico del seguente tipo. Calcoliamo l'espressione dell'accelerazione della particella facendo la derivata temporale della velocità di gruppo. Ciò fornisce:

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{d\omega}{dk} \right) = \frac{d}{dk} \left( \frac{d\omega}{dk} \right) \frac{dk}{dt} = \left( \frac{d^2\omega}{dk^2} \right) \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2E}{dk^2} \right) \frac{d(\hbar k)}{dt}. \quad (145)$$

Ora, se pensiamo l'elettrone come libero, la quantità  $\hbar k$  rappresenta il suo impulso. Perciò, se confrontiamo la precedente equazione con il secondo principio della dinamica per una particella di massa  $m$

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{dp/dt}{m}, \quad (146)$$

vediamo che le due equazioni sono compatibili a patto di introdurre per l'elettrone una grandezza  $m_e$ , che chiamiamo massa efficace, data da

$$m_e = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2}. \quad (147)$$

E' qui che interviene il ruolo essenziale della legge di dispersione. Osserviamo preventivamente che, se si avesse una vera particella libera di massa  $m$ , la legge di dispersione sarebbe la parabola (indicata nella figura precedente)  $E = (\hbar k)^2/(2m)$ . In questo caso

la (147) darebbe proprio  $m_e = m$ . Tuttavia, la legge di dispersione cui dobbiamo fare riferimento è la (139). Le curve che descrivono tale legge sono approssimabili a delle parabole nell'intorno di quasi tutti i punti (fanno eccezione i punti in cui la concavità cambia verso). Si tratterà però di parabole con un parametro di proporzionalità fra  $E$  e  $(\hbar k)^2$  diverso da  $1/(2m)$ . Perciò, anche in una regione come la parte più bassa della prima banda, dove l'andamento parabolico è evidente, la massa efficace sarà diversa dalla vera massa  $m$  dell'elettrone. Quel che è ancora più sorprendente è che se si fa un'approssimazione parabolica in prossimità del bordo di una banda, si trova, come si è già detto, una parabola con la concavità verso il basso. Perciò in tali regioni la massa efficace diventa negativa. E' come dire che, applicando un campo elettrico al cristallo, l'elettrone si muove in verso opposto alla forza agente. Siccome lo stesso effetto sarebbe prodotto se la massa fosse positiva e si cambiasse segno alla carica, si può pensare che in corrispondenza al bordo superiore della banda l'elettrone nel cristallo si comporti come una carica positiva (con massa positiva). A questa si dà il nome di lacuna o buca. Vale la pena di aggiungere che, in corrispondenza alle regioni dove la curvatura cambia, la massa efficace diverge (perché la derivata seconda di  $E$  rispetto a  $k$  va a zero).

Senza pretendere di entrare in una descrizione dei processi di conduzione, ci limitiamo a dire che, a seconda del tipo di conduttore, si trova che, nella maggior parte dei casi d'interesse, gli elettroni effettivamente coinvolti nel processo di conduzione stanno in livelli energetici posti o nella parte più bassa o in quella più alta di una banda. Nel primo caso essi si comportano come particelle con massa positiva (anche se diversa da quella intrinseca), mentre nel secondo si comportano come particelle con massa efficace negativa, o equivalentemente, come cariche positive (con massa positiva).

Si ha qui la possibilità di spiegare una gran serie di fenomeni elettrici. Limitandoci a quanto visto finora, consideriamo l'effetto Hall nei metalli. Possiamo dire che nei casi in cui la costante di Hall è negativa, evidentemente gli elettroni implicati nella conduzione hanno massa efficace positiva e si presentano come effettive cariche negative. Si usa dire che il metallo conduce per elettroni. Al contrario, nei casi di costante positiva, gli elettroni sono dotati di massa efficace negativa e equivalgono a cariche positive. Si dice allora che il metallo conduce per lacune.

Vale la pena di aggiungere un commento. Per quanto i concetti di massa efficace e di lacuna siano utilissimi e usati in continuazione, in particolare nello studio delle proprietà elettriche dei semiconduttori, va tenuto presente che essi derivano dalla pretesa di descrivere come libera una particella (l'elettrone) che in realtà è immersa nel potenziale periodico del cristallo. Per ricordare ciò, questi enti fittizi che abbiamo introdotto (elettroni con massa diversa da quella intrinseca, lacune), sono spesso detti quasi-particelle. Essi infatti, pur presentandosi con caratteristiche corpuscolari, esistono solo entro il cristallo.

## 4 Stati entangled

E' noto fin dagli anni trenta che è esistono stati di due particelle (o di due fotoni), detti entangled (intrecciati) in cui, a seguito di un'interazione nel passato, le funzioni d'onda delle due particelle rimangono, per così dire, agganciate. Per spiegare di cosa si tratti ci riferiremo ai fotoni. E' possibile creare coppie di fotoni entangled in cui i due fotoni hanno stati di polarizzazione lineare ortogonali. La direzione di polarizzazione peraltro non è definita. Supponiamo ora che uno dei due fotoni incida su un polarizzatore lineare, diretto, ad es. lungo  $x$ . Il fotone può superare il polarizzatore o restare assorbito. In entrambi i casi, all'atto dell'interazione col polarizzatore, il fotone si porta in una direzione di polarizzazione ben definita. O si porta su  $x$  e supera il polarizzatore, o si porta su  $y$  e resta assorbito. L'*entanglement* consiste nel fatto che il processo di riduzione della funzione d'onda riguarda entrambi i fotoni. Ciò significa che se un fotone va su  $x$ , certamente l'altro va su  $y$  (si ricordi che gli stati di polarizzazione dei due fotoni sono ortogonali) e viceversa.

L'esperienza conferma quest'analisi. In certi cristalli non lineari è possibile che un fotone in ingresso venga trasformato in una coppia di fotoni a frequenza metà di quella del fotone incidente. Questo processo, noto come conversione parametrica verso il basso, produce coppie di fotoni entangled aventi direzioni di propagazione diverse e polarizzazioni ortogonali. Se si mandano i due fotoni su due diversi polarizzatori lineari disposti con gli assi di trasmissione ortogonali si trova proprio che o entrambi i fotoni sono trasmessi oppure entrambi sono assorbiti.

### 4.1 Il paradosso EPR

Nel 1935 Einstein, Podolski e Rosen pubblicarono un lavoro che intendeva dimostrare l'incompletezza della meccanica quantistica. Essi considerarono uno stato entangled di due particelle e si riferirono alle grandezze posizione e impulso. L'argomentazione di Einstein, Podolski e Rosen (EPR) fu presentata in termini alternativi da Bohm nel 1953 e può essere formulata con riferimento agli stati entangled di fotoni descritti nel paragrafo precedente.

Supponiamo che i polarizzatori lineari su cui si mandano i fotoni siano a distanze diverse dal punto di generazione della coppia, in modo tale che i fotoni arrivino sui polarizzatori a tempi diversi. Indichiamo i due fotoni con  $A$  e  $B$  e supponiamo che  $A$  sia quello che giunge per primo sul polarizzatore. Nel momento in cui  $A$  incontra il suo polarizzatore ha luogo il collasso della funzione d'onda e noi sappiamo esattamente quale direzione di polarizzazione assume il fotone  $B$ . Quindi, ancor prima di fare la misura, cioè ancor prima di mandare  $B$  sul suo polarizzatore, sappiamo se  $B$  sarà trasmesso o assorbito. Ora, noi possiamo fare l'esperimento in modo tale che quando i due fotoni incontrano i polarizzatori si trovino molto lontani l'uno dall'altro e, facendo percorrere ai due fotoni cammini quasi uguali, possiamo scegliere gli istanti di misura così vicini che

nessun segnale (che al massimo può muoversi a velocità  $c$ ) faccia in tempo a propagarsi da un rivelatore all'altro.

L'argomentazione di EPR è ora la seguente. La misura fatta sul fotone  $A$  non può perturbare in alcun modo lo stato del fotone  $B$ . Ma allora lo stato del fotone  $B$  è determinato già prima della misura su  $A$ . Esso costituisce un *elemento di realtà fisica*. E siccome la meccanica quantistica non rende conto di tale elemento, essa è incompleta.

L'argomentazione EPR fu confutata da Bohr che, sempre nel 1935, pubblicò un lavoro in cui veniva rigettata come illecita la conclusione EPR circa l'incompletezza della meccanica quantistica. Il lavoro di Bohr, peraltro di non semplice lettura, venne accettato come conclusivo dalla maggioranza dei fisici. Tuttavia sopravvissero alcune scuole di pensiero secondo le quali si sarebbe dovuta cercare una teoria che inglobasse la meccanica quantistica (visti i suoi indubbi successi), ma permettesse di eliminare l'ipotesi che l'indeterminazione cui possono essere soggette le grandezze fisiche fosse un carattere intrinseco della natura. Una delle linee su cui si lavorò maggiormente era la seguente.

Nell'interpretazione canonica della meccanica quantistica esistono stati in cui una certa grandezza fisica è ben definita e un'altra no. Per tornare all'esempio più familiare, una particella può trovarsi in un autostato dell'impulso, ma in questo caso è completamente indeterminata la posizione, o viceversa, trovarsi in un autostato della posizione e avere impulso completamente indeterminato. In casi di questo tipo una delle due grandezze è (secondo l'interpretazione canonica) *intrinsecamente* indeterminata. Non si tratta cioè di una nostra ignoranza. Se la particella ha posizione determinata non possiede nessun preciso impulso e, al tempo stesso, ne possiede potenzialmente infiniti (tutti quelli che entrano nella rappresentazione alla Fourier di una delta nella posizione). Questa è l'interpretazione canonica. I critici di questa interpretazione si chiedevano: perché non pensare che l'indeterminazione sia dovuta solo alla nostra ignoranza? Non potrebbe essere che la grandezza che ci appare indeterminata sia, in realtà perfettamente definita da un gruppo di parametri cui non riusciamo ad accedere? Questo vorrebbe dire che, quando ci riferiamo ad una particella in un autostato dell'impulso, la particella ha, istante per istante, una precisa posizione; solo che per trovarla dovremmo conoscere certi parametri che sfuggono alla nostra capacità di misura.

Teorie di questo genere furono effettivamente costruite a vanno sotto il nome di teorie a variabili nascoste. Per parecchio tempo sembrò che esse permettessero di fare le stesse previsioni della meccanica quantistica senza rinunciare a certe idee, come l'esistenza simultanea di valori ben determinati per posizione e impulso. Diversi scienziati cominciarono a pensare che queste teorie fossero da preferire alla meccanica quantistica nella sua formulazione ortodossa. Le cose cambiarono quando fu stabilito un risultato fondamentale, noto come *disuguaglianza di Bell*.



## 4.2 La disuguaglianza di Bell

Partiamo dall'ovvia osservazione che in fisica sono i risultati degli esperimenti che possono rafforzare una teoria a scapito di un'altra. Perciò se una teoria alternativa alla meccanica quantistica ordinaria fa sempre le stesse previsioni di quest'ultima, non ci saranno dati sperimentali che possano privilegiare l'una rispetto all'altra. La scelta fra le due diventerebbe un fatto soggettivo, basato su presupposti di carattere ideologico.

Negli anni sessanta, il fisico britannico Bell riuscì a dimostrare che, se si assume come schema base l'interpretazione alla EPR, si arriva, per certi esperimenti, a previsioni diverse da quelle della meccanica quantistica. In questo modo, l'andamento sperimentale dei fenomeni in questione avrebbe potuto dare un sostegno decisivo ad uno dei due approcci.

Deriveremo ora la disuguaglianza di Bell. Riferiamoci all'esperimento di generazione di coppie di fotoni in stati entangled. Supponiamo che i polarizzatori incontrati dai due fotoni possano essere orientati, a scelta, lungo tre direzioni diverse che indicheremo con  $a$ ,  $b$  e  $c$ . Per brevità diremo il polarizzatore  $a$  (o  $b$ , o  $c$ ) per indicare il polarizzatore orientato lungo la direzione  $a$  (o  $b$ , o  $c$ ). Secondo l'interpretazione EPR, anche se noi non sappiamo che cosa succederà al fotone, per es.  $A$ , quando incontrerà il polarizzatore orientato lungo una delle tre direzioni dette, il destino di  $A$  è predeterminato. Prendiamo un gran numero di coppie entangled, per un totale, diciamo, di  $N_t$  coppie. Di queste, ce ne saranno, diciamo  $N_1$ , in cui il fotone  $A$  supererebbe il polarizzatore  $a$ , e anche il  $b$  e il  $c$ . Indicheremo queste coppie col simbolo  $(a, b, c)$ . Poi ci saranno, diciamo  $N_2$  coppie, che indicheremo con  $(a, b, \bar{c})$  in cui  $A$  supererebbe  $a$  e  $b$ , ma non  $c$ . Procedendo così troveremo 8 classi possibili, indicate schematicamente nella tabella che segue

$$\begin{aligned}
 N_1 &: (a, b, c), \\
 N_2 &: (a, b, \bar{c}), \\
 N_3 &: (a, \bar{b}, c), \\
 N_4 &: (a, \bar{b}, \bar{c}), \\
 N_5 &: (\bar{a}, b, c), \\
 N_6 &: (\bar{a}, b, \bar{c}), \\
 N_7 &: (\bar{a}, \bar{b}, c), \\
 N_8 &: (\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}).
 \end{aligned} \tag{148}$$

5 Per quanto riguarda il fotone  $B$ , che è polarizzato ortogonalmente ad  $A$ , le etichette sarebbero complementari, nel senso che, ad es., nelle  $N_5$  coppie contrassegnate con  $(\bar{a}, b, c)$  nella tabella precedente,  $B$  supererebbe  $a$ , mentre sarebbe assorbito sia da  $b$  che da  $c$ .

Supponiamo ora di orientare il polarizzatore su cui incide  $A$  lungo la direzione  $a$  e quello su cui incide  $B$  lungo  $b$ . Le coppie per le quali entrambi i fotoni emergono dai polarizzatori sono quelle in cui compare  $a$  (fotone  $A$  che passa per  $a$ ) e  $\bar{b}$  (fotone  $B$  che passa per  $b$ ). Come si vede dalla tabella, esse sono in tutto  $N_3 + N_4$ . Per la legge dei grandi numeri, la probabilità che  $A$  superi  $a$ , ma non  $b$  (nel qual caso  $B$  lo supera), che

indicheremo con  $P(a, \bar{b})$  vale

$$P(a, \bar{b}) = \frac{N_3 + N_4}{N_t}. \quad (149)$$

Con simboli analoghi avremo

$$P(b, \bar{c}) = \frac{N_2 + N_6}{N_t}; \quad P(a, \bar{c}) = \frac{N_2 + N_4}{N_t}. \quad (150)$$

Dal confronto fra la (149) e la (150) segue la disuguaglianza di Bell

$$P(a, \bar{c}) \leq P(a, \bar{b}) + P(b, \bar{c}) \quad (151)$$

Passiamo ora a valutare le probabilità che compaiono nelle (149) e (150) secondo la meccanica quantistica. La probabilità che  $A$  superi il polarizzatore  $a$  è semplicemente  $1/2$  (perché per  $A$  tutte le direzioni di polarizzazione sono equiprobabili). Resta da valutare la probabilità che  $B$  superi  $b$  sapendo che  $A$  ha superato  $a$ . Il fotone  $A$  si è portato in una polarizzazione parallela ad  $a$  e quindi, per la riduzione della funzione d'onda dello stato entangled,  $B$  si deve essere portato su una polarizzazione ortogonale ad  $a$ . Se  $\vartheta_{ab}$  è l'angolo fra  $a$  e  $b$ , l'angolo fra la direzione di polarizzazione di  $B$  e  $b$  sarà  $\pi/2 - \vartheta_{ab}$ . Perciò la probabilità di attraversamento per  $B$  sarà  $\cos(\pi/2 - \vartheta_{ab})$ . Complessivamente la probabilità  $P(a, \bar{b})$  è

$$P(a, \bar{b}) = \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta_{ab}. \quad (152)$$

Analogamente avremo

$$P(a, \bar{c}) = \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta_{ac}; \quad P(b, \bar{c}) = \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta_{bc}. \quad (153)$$

Si tratta di vedere se le probabilità valutate quantisticamente rispettano la disuguaglianza di Bell. E' facile rendersi conto che questo non sempre succede. Ad es., se  $b$  è la bisettrice fra  $a$  e  $c$  e se chiamiamo  $\vartheta$  l'angolo fra  $a$  e  $b$  (e fra  $b$  e  $c$ ) la disuguaglianza di Bell richiede

$$\frac{1}{2} \sin^2 2\vartheta \leq \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta + \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta, \quad (154)$$

ovvero

$$\cos^2 \vartheta \leq \frac{1}{2}, \quad (155)$$

disuguaglianza che, ovviamente, non è sempre verificata.

Il risultato di Bell stimolò molti gruppi di ricerca a progettare esperimenti che mostrassero se la disuguaglianza di Bell potesse essere violata, come previsto dalla meccanica quantistica. Gli esperimenti più convincenti furono condotti negli anni ottanta e confermarono in pieno le previsioni quantistiche. Per quanto ciò possa sembrare contrario al senso comune, gli esperimenti danno ragione all'ipotesi che i due fotoni entangled costituiscono un

unico sistema quantistico, non importa quanto lontani l'uno dall'altro essi siano arrivati e che la misura di polarizzazione fatta su uno dei due fotoni produce (istantaneamente) la riduzione della funzione d'onda di tutto il sistema, costringendo anche l'altro fotone ad assumere una polarizzazione ben definita. Una delle conseguenze di ciò è che eventuali teorie a variabili nascoste o comunque teorie che vogliano essere alternative alla meccanica quantistica dovranno rinunciare al requisito della località dei fenomeni fisici (si ricordi che una delle assunzioni chiave del paradosso EPR era che una misura fatta localmente sul fotone  $A$  non poteva influenzare lo stato del fotone  $B$ , se questo era sufficientemente lontano e se la misura condotta su di esso veniva compiuta con un ritardo così piccolo rispetto a quella su  $A$  da non consentire il transito d'informazione da  $A$  a  $B$ ).

Come osservazione finale, aggiungiamo che è possibile dimostrare che il fenomeno (istantaneo) della riduzione della funzione d'onda dei due fotoni non può essere utilizzato per la trasmissione d'informazione e quindi non implica violazioni del principio di relatività (secondo il quale nessun segnale può propagarsi a velocità superiore a  $c$ ).

## 5 Appendice. Cenni sulle armoniche sferiche

Consideriamo una grandezza fisica scalare definita su una superficie sferica. Per es., pensiamo alla temperatura o all'accelerazione di gravità nei vari punti della superficie della terra (assimilata ad una sfera), o alla densità di carica superficiale di un conduttore sferico immerso in un campo elettrico. Usando coordinate sferiche  $\vartheta$  e  $\varphi$ , la grandezza sarà rappresentata da una funzione  $f(\vartheta, \varphi)$ , che, nel caso più generale, possiamo pensare complessa. Ci proponiamo di rappresentare  $f$  mediante opportuni sviluppi in serie sulla sfera. Osservato che  $\vartheta$  varia fra 0 e  $\pi$  e  $\varphi$  fra 0 e  $2\pi$ , possiamo dire che si tratta di sviluppare una funzione il cui dominio è un rettangolo nel piano  $\vartheta, \varphi$ . Ovviamente esistono infiniti modi in cui si può fare tale sviluppo. Per es., pensando di replicare periodicamente il rettangolo detto, si può usare una doppia serie di Fourier. Oppure si può pensare a sviluppi in serie di potenze o a sviluppi in serie di una qualunque famiglia di funzioni ortogonali. In molti casi, la grandezza d'interesse deve soddisfare una certa equazione differenziale (si pensi all'equazione di Laplace, a quella di Helmholtz, ecc). Allora, dell'arbitrarietà di scelta detta prima si può approfittare per imporre la condizione aggiuntiva che ogni funzione che compare nello sviluppo sia, a sua volta, soluzione di tale equazione differenziale. Le cosiddette armoniche sferiche sono una famiglia di funzioni ottenute in base a una condizione del tipo detto. Diamo un cenno sulla loro derivazione. Partiamo dal caso più generale in cui la grandezza di interesse è definita in tutto lo spazio ed è quindi rappresentata da una funzione, diciamo  $F(r, \vartheta, \varphi)$ , di tutte e tre le coordinate polari. Supponiamo inoltre che essa soddisfi ad un'equazione differenziale della forma

$$\nabla^2 F + S(r)F = 0, \tag{156}$$

dove  $S$  è una funzione della sola  $r$ . La struttura (156) include in particolare l'equazione di Laplace (ponendo  $S = 0$ ), quella di Helmholtz (ponendo  $S = k^2$ ) e quella di Schrödinger per gli stati stazionari con potenziale dipendente solo da  $r$  (ponendo, con i soliti simboli,  $S = 2\mu(E - U(r))/\hbar^2$ ). In coordinate polari l'espressione esplicita della (156) è

$$\frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial F}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial F}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} \right] + S(r)F = 0. \quad (157)$$

Applichiamo il procedimento di separazione delle variabili e per prima cosa disaccoppiamo la dipendenza rispetto a  $r$  da quella rispetto a  $\vartheta$  e  $\varphi$ . Ciò si ottiene facendo l'ipotesi che  $F$  sia del tipo

$$F(r, \vartheta, \varphi) = G(r)H(\vartheta, \varphi), \quad (158)$$

cioè che sia il prodotto di una funzione,  $G$ , della sola  $r$  e di una,  $H$ , dipendente da  $\vartheta$  e  $\varphi$ . Inserendo la (158) nella (157) otteniamo

$$\frac{1}{r^2} \left[ H \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial G}{\partial r} \right) + \frac{G}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial H}{\partial \vartheta} \right) + \frac{G}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 H}{\partial \varphi^2} \right] + S(r)GH = 0, \quad (159)$$

e questa, moltiplicata per  $r^2$  e divisa per  $GH$ , fornisce

$$\frac{1}{G} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial G}{\partial r} \right) + \frac{1}{H \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial H}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{H \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 H}{\partial \varphi^2} + r^2 S(r) = 0. \quad (160)$$

Si osservi allora che due termini, il primo e il quarto, dipendono solo da  $r$ , mentre altri due, il secondo e il terzo, dipendono solo da  $\vartheta$  e  $\varphi$ . Ora  $r, \vartheta$  e  $\varphi$  sono variabili indipendenti. Se assegnamo certi valori a  $\vartheta$  e  $\varphi$  e facciamo variare  $r$ , il secondo e il terzo termine rimangono costanti. Ma allora non è possibile che il primo e il quarto cambino perché se così fosse l'equazione non potrebbe essere soddisfatta. In altri termini, la (160) richiede che tanto la somma del primo e quarto termine, quanto quella del secondo e terzo risultino costanti, con valori opposti, al variare, rispettivamente, di  $r$  e di  $\vartheta, \varphi$ . In formule

$$\frac{1}{G} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial G}{\partial r} \right) + r^2 S(r) = K, \quad (161)$$

$$\frac{1}{H \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial H}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{H \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 H}{\partial \varphi^2} = -K, \quad (162)$$

dove  $K$  è una costante. È importante osservare che la (162) non dipende da  $S(r)$ . Perciò per tutte le equazioni prima citate (Laplace, Helmholtz, Schrödinger) la parte angolare deve soddisfare sempre la stessa equazione. È questo che rende le armoniche sferiche così significative.

Vediamo ora come risolvere la (162). Usando ancora il metodo di separazione delle variabili, supponiamo che  $H$  abbia la forma

$$H(\vartheta, \varphi) = f(\vartheta)g(\varphi), \quad (163)$$

cioè che sia il prodotto di una funzione,  $f$ , della sola  $\vartheta$  e di una,  $g$ , della sola  $\varphi$ . Posta nella (162), la (163) fornisce l'equazione

$$\frac{1}{f \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{df}{d\vartheta} \right) + \frac{1}{g \sin^2 \vartheta} \frac{d^2 g}{d\varphi^2} = -K, \quad (164)$$

che, moltiplicata per  $\sin^2 \vartheta$ , dà

$$\frac{\sin \vartheta}{f} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{df}{d\vartheta} \right) + K \sin^2 \vartheta + \frac{1}{g} \frac{d^2 g}{d\varphi^2} = 0. \quad (165)$$

Di nuovo, poiché i primi due termini dipendono solo da  $\vartheta$  e l'ultimo solo da  $\varphi$ , occorre che sia

$$\frac{\sin \vartheta}{f} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{df}{d\vartheta} \right) + K \sin^2 \vartheta = A, \quad (166)$$

$$\frac{1}{g} \frac{d^2 g}{d\varphi^2} = -A, \quad (167)$$

con  $A$  costante. Supposto  $A > 0$  la (167) è l'equazione classica dei moti armonici e ha soluzioni del tipo

$$g(\varphi) = e^{im\varphi}; \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (168)$$

dove la condizione che  $m$  sia un intero deriva da quella che la funzione  $g$  sia a un sol valore e quindi assuma la stessa determinazione in  $\varphi$  e in  $\varphi + 2\pi$ . Evidentemente è allora

$$A = m^2; \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (169)$$

In base a ciò la (166) diventa

$$\sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{df}{d\vartheta} \right) + (K \sin^2 \vartheta - m^2) f = 0. \quad (170)$$

Per ogni fissato valore di  $m$ , la (170) è un'equazione agli autovalori, nel senso che esistono funzioni  $f$  che la soddisfano a patto che  $K$  assuma certi valori particolari (detti autovalori). Riferiamoci dapprima al caso  $m = 0$ , in cui la (170) diventa

$$\sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{df}{d\vartheta} \right) + K f \sin^2 \vartheta = 0. \quad (171)$$

E' immediato vedere che la (171) è soddisfatta da una  $f$  costante, diciamo 1, e che l'autovalore corrispondente è  $K = 0$ . E' anche facile vedere che è soddisfatta da  $f = \cos \vartheta$  con autovalore  $K = 2$ . Più in generale si trova che la (171) è soddisfatta da un insieme di polinomi nella variabile  $\cos \vartheta$ , i polinomi di Legendre  $P_l(\cos \vartheta)$ , di cui  $f = 1$  e  $f = \cos \vartheta$  rappresentano i primi due, e che al generico polinomio di indice  $l$  corrisponde l'autovalore

$l(l+1)$ . I polinomi di Legendre si possono generare a partire dai primi due mediante la formula di ricorrenza

$$(l+1)P_{l+1}(\eta) = (2l+1)\eta P_l(\eta) - lP_{l-1}(\eta), \quad (172)$$

oppure tramite la formula

$$P_l(\cos \vartheta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d(\cos \vartheta)^l} (\cos^2 \vartheta - 1)^l; \quad (l = 0, 1, 2, \dots). \quad (173)$$

Quando  $m$  è diverso da zero, si trova che gli autovalori sono ancora del tipo  $l(l+1)$ , ma il minimo valore di  $l$  è  $|m|$ . Le autofunzioni sono le cosiddette funzioni associate di Legendre di prima specie, che sono calcolabili con la formula

$$P_l^m(\cos \vartheta) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1 - \cos^2 \vartheta)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{d(\cos \vartheta)^{l+m}} (\cos^2 \vartheta - 1)^l; \quad (l \geq |m|), \quad (174)$$

e che, come si vede, includono i polinomi di Legendre come caso particolare ( $m = 0$ ). Per un generico  $m > 0$  le funzioni  $P_l^m$  e  $P_l^{-m}$  differiscono solo per un fattore di proporzionalità. Si dimostra infatti la relazione

$$P_l^{-m}(\cos \vartheta) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \vartheta). \quad (175)$$

Inoltre, per ogni fissato  $m$ , vale la formula di ricorrenza

$$(l-m+1)P_{l+1}^m(\cos \vartheta) = (2l+1)\cos \vartheta P_l^m(\cos \vartheta) - (l+m)P_{l-1}^m(\cos \vartheta), \quad (176)$$

che include la (172) come caso particolare e che permette di generare tutti i  $P_l^m$  a partire dai primi due. Riportiamo alcune funzioni associate di Legendre nella tabella che segue

$m \setminus l$	0	1	2	3	4	
3	*	*	*	$-15S^3$	$-105S^3C$	
2	*	*	$3S^2$	$15S^2C$	$15S^2(7C^2 - 1)$	
1	*	$-S$	$-3SC$	$3S(1 - 5C^2)/2$	$5SC(3 - 7C^2)/2$	
0	1	$C$	$(3C^2 - 1)/2$	$(5C^3 - 3C)/2$	$(35C^4 - 30C^2 + 3)/8$	(177)
-1	*	$S/2$	$SC/2$	$S(5C^2 - 1)$	$SC(7C^2 - 3)$	
-2	*	*	$S^2/8$	$S^2C/8$	$S^2(7C^2 - 1)/48$	
-3	*	*	*	$S^3/48$	$S^3C/48$	

dove per brevità abbiamo posto  $\cos \vartheta = C$  e  $\sin \vartheta = S$  e dove gli asterischi indicano le coppie  $m, l$  per cui la funzione non è definita. Abbiamo perciò trovato le soluzioni della (162). Le autofunzioni  $H$  (non normalizzate) sono della forma

$$H_{lm}(\vartheta, \varphi) = P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots; l \geq |m|), \quad (178)$$

e gli autovalori  $K$  valgono  $l(l+1)$ . Tali funzioni vengono dette armoniche sferiche e indicate, nella loro forma normalizzata, con  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ . La loro espressione, includendo i fattori di normalizzazione, è

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots; l \geq |m|). \quad (179)$$

Le armoniche sferiche offrono una soluzione al problema posto all'inizio: lo sviluppo di una funzione di  $\vartheta, \varphi$ . Esse infatti costituiscono un sistema ortonormale completo rispetto a tale tipo di funzioni. Valgono le relazioni di ortonormalità

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (180)$$

e qualunque funzione  $g(\vartheta, \varphi)$  può essere sviluppata nella serie

$$g(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (181)$$

dove i coefficienti  $c_{lm}$  si calcolano come segue

$$c_{lm} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) g(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (182)$$