



Università degli Studi di Bari

Corso di Laurea in Fisica

Leonardo Angelini

**Appunti sparsi di Meccanica
Quantistica
Parte I**

Versione aggiornata al 4 aprile 2022

Dipartimento Interateneo di Fisica
via Amendola 173, 70126 Bari, Italy
leonardo.angelini@fisica.uniba.it

Indice

Introduzione	iii
1 Equazione di Schrödinger	1
1.1 Sistemi a molti gradi di libertà	1
1.2 Equazione di Schrödinger nella base delle coordinate	2
1.3 Riducibilità a sistemi unidimensionali: i potenziali rettangolari	3
2 Sistemi unidimensionali	5
2.1 Particella libera in $D=1$	5
2.2 Propagatore per una particella libera unidimensionale	6
2.3 Primi esercizi	7
2.4 Equazione di continuità per la probabilità	9
2.5 Potenziali quadrati	10
2.5.1 Gradino di potenziale	11
2.5.2 Particella vincolata su un segmento	14
2.5.3 Buca di potenziale	15
2.5.4 Barriera di potenziale	20
3 Proprietà generali dell'Equazione di Schrödinger in una dimensione	25
3.1 Teorema del Wronskiano	25
3.2 Comportamento asintotico delle soluzioni	27
3.3 Natura dello spettro degli autovalori	28
3.4 Nodi degli stati legati	29
3.5 Parità delle autofunzioni	30
4 Oscillatore armonico	31
4.1 Operatori di creazione e distruzione	31
4.2 Spettro dell'energia	32
4.3 Autofunzioni dell'energia	34
4.4 Stati coerenti	36
5 Potenziali periodici in una dimensione	41
5.1 Autofunzioni e autovalori dell'hamiltoniano: proprietà generali	41
5.1.1 Teorema di Floquet e Teorema di Bloch	41
5.1.2 Spettro dell'hamiltoniano	43
5.2 Il pettine di Dirac	44
5.3 Il modello di Kronig-Penney	46
6 Momento angolare	49
6.1 Il Momento Angolare come generatore delle rotazioni	49
6.2 Autofunzioni comuni ad L^2 ed L_z nella base delle coordinate	52
6.2.1 Proprietà delle Armoniche Sferiche	56
6.2.2 Le prime Armoniche Sferiche	57

6.3	Autovalori del momento angolare nello spazio dei ket di stato	57
6.4	Lo Spin	59
6.5	Elementi di matrice di \vec{J} nella rappresentazione di J^2 e J_z	61

Introduzione

Queste dispense sono relative ad alcune parti del mio corso di Istituzioni di Fisica Teorica I. Essi cercano di costituire una risorsa ufficiale che sostituisca i numerosi appunti redatti da volenterosi che circolano tra gli studenti. Il testo base adottato nel corso è il Nardulli [1]. Tuttavia, poiché nel corso mi sono a volte allontanato da questa trattazione, spesso utilizzando più libri, mi è sembrato utile stendere questi appunti per facilitare agli studenti la preparazione dell'esame. Sottolineo il fatto che essi non contengono trattazioni originali ed indicherò di volta in volta la fonte.

Come dicevo, queste dispense rendono più facile la preparazione dell'esame; raccomando, tuttavia, la consultazione dei testi originali per vari motivi. Citandone solo alcuni, il primo è che un libro di testo è preparato con molta più cura di una dispensa, il secondo è che la capacità di consultazione di più testi è parte insostituibile della formazione universitaria e, infine, che in una trattazione vi possono essere elementi formativi che in un'altra possono essere stati sottovalutati o poco evidenziati.

Non posso credere nemmeno per un attimo che Dio giochi a dadi.
(A. Einstein - comunicazione orale)

Piantala di dire a Dio che cosa fare con i suoi dadi.
(N. Bohr - comunicazione orale)

Non solo Dio gioca a dadi, ma li getta laddove non possiamo vederli.
(S. Hawking - comunicazione orale)

Penso di poter affermare che nessuno capisce la Meccanica Quantistica.
(R.P. Feynman - comunicazione orale)

Capitolo 1

Equazione di Schrödinger

1.1 Sistemi a molti gradi di libertà

Consideriamo un sistema fisico di N particelle, descritto, quindi, da un insieme di $s = 3N$ coordinate cartesiane $q = \{q_1, q_2, \dots, q_s\}$ e un insieme di s impulsi $p = \{p_1, p_2, \dots, p_s\}$.

In Fisica Classica la dinamica di tale sistema è completamente determinata dall'Hamiltoniano $\mathcal{H}(q, p, t)$, che, eventualmente, dipende dal tempo t . In Fisica Quantistica alle osservabili posizione e impulso corrispondono gli operatori hermitiani $Q = \{Q_1, Q_2, \dots, Q_s\}$ e $P = \{P_1, P_2, \dots, P_s\}$ nello spazio di Hilbert del sistema, mentre il tempo è una variabile reale.

I $2s$ operatori soddisfano le regole di commutazione:

$$[Q_j, Q_k] = 0 \quad [P_j, P_k] = 0 \quad [Q_j, P_k] = i\hbar \delta_{j,k}$$

per ogni $j, k = 1, 2, \dots, s$.

Quanto detto deriva direttamente dai postulati fondamentali della Fisica Quantistica. Per introdurre gli operatori relativi alle altre grandezze fisiche è necessario un ulteriore postulato.

Postulato. Ad ogni variabile classica funzione delle coordinate e degli impulsi

$$\Omega(q, p, t)$$

associamo un operatore $\hat{\Omega}$ ottenuto tramite la regola di sostituzione:

$$\hat{\Omega}(Q, P; t) = \Omega(q_1 \rightarrow Q_1, q_2 \rightarrow Q_2, \dots, q_s \rightarrow Q_s; p_1 \rightarrow P_1, p_2 \rightarrow P_2, \dots, p_s \rightarrow P_s; t).$$

Questa regola di sostituzione vale, in particolare per l'Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}(q, p, t) \rightarrow \hat{\mathcal{H}}(Q, P, t).$$

Ricordiamo l'importanza degli stati stazionari, cioè degli autostati dell'Hamiltoniano, al fine di determinare l'evoluzione degli stati. Se al tempo $t = 0$ lo stato del sistema coincide con uno stato stazionario $|\psi_E\rangle$ relativo all'autovalore E , soluzione dell'**equazione di Schrödinger stazionaria**

$$\hat{\mathcal{H}}(Q, P, t)|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle,$$

l'evoluzione temporale di questo stato è data semplicemente da

$$|\psi_E(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}(Q, P, t)t}{\hbar}}|\psi_E\rangle = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}|\psi_E\rangle.$$

Nel caso di un generico stato $|\psi\rangle$ esso può essere sviluppato nella base dell'energia, per cui si può ottenere la sua evoluzione temporale in termini di quella degli stati stazionari:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}(Q, P, t)t}{\hbar}}|\psi\rangle = e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}(Q, P, t)t}{\hbar}} \sum_E c_E |\psi_E\rangle = \sum_E c_E |\psi_E\rangle e^{-i\frac{Et}{\hbar}}. \quad (1.1)$$

Per questo motivo dedicheremo largo spazio alla soluzione dell'equazione di Schrödinger stazionaria per alcuni modelli di sistemi fisici.

Premettiamo due importanti proprietà generali concernenti gli autovalori dell'Hamiltoniano.

Proprietà I: L'operatore Energia cinetica ha sempre autovalori positivi.

Tenendo conto del Postulato appena introdotto, l'operatore energia cinetica del sistema di particelle è data da

$$\mathcal{T} = \sum_{k=1}^N \frac{P_k^2}{2m_k}.$$

Essa si presenta, quindi, come una somma di operatori ciascuno dei quali, essendo il quadrato di un operatore hermitiano, ha sicuramente autovalori positivi. Gli autoket dell'energia cinetica sono autoket comuni a tutti questi operatori, in quanto essi commutano. Pertanto, ciascun autovalore dell'energia cinetica è somma di autovalori tutti positivi dei singoli operatori e, di conseguenza è positivo. In particolare per ogni stato $|\psi\rangle$ risulta

$$\langle\psi|\mathcal{T}|\psi\rangle \geq 0$$

trattandosi della media di quantità positive.

Proprietà II: Gli autovalori dell'Energia potenziale sono sempre maggiori o uguali del suo valore minimo.

Infatti, detto V_{min} il minimo valore dell'energia potenziale, risulta

$$\langle\mathcal{V}\rangle_\psi \equiv \langle\psi|\mathcal{V}|\psi\rangle \geq \langle\psi|V_{min}|\psi\rangle = V_{min}.$$

come è facile comprendere se il calcolo viene effettuato nella rappresentazione della posizione, nella quale \mathcal{V} è diagonale. Quindi il valore di aspettazione del potenziale in qualsiasi stato è maggiore o uguale del suo valore minimo. L'enunciato è dimostrato, se si pensa che questa relazione vale in particolare se $|\psi\rangle$ è un autoket di \mathcal{V} , e quindi il valore di aspettazione coincide con l'autovalore.

Proprietà III: Gli autovalori dell'Hamiltoniano sono sempre maggiori o uguali del minimo valore dell'energia potenziale.

Infatti, detto V_{min} il minimo valore dell'energia potenziale, tenendo conto del fatto che per il valor medio dell'Hamiltoniano in un qualsiasi stato $|\psi\rangle$ del sistema risulta

$$\langle\mathcal{H}\rangle_\psi \equiv \langle\psi|\mathcal{H}|\psi\rangle = \langle\mathcal{T}\rangle_\psi + \langle\mathcal{V}\rangle_\psi \geq \langle\psi|V_{min}|\psi\rangle \geq V_{min}$$

dove si è tenuto conto delle proprietà precedenti. Ponendo $|\psi\rangle$ pari al generico autoket di \mathcal{H} la proprietà risulta dimostrata.

1.2 Equazione di Schrödinger nella base delle coordinate

In generale lo studio dei sistemi fisici si effettua, utilizzando un fissato sistema di riferimento cartesiano, nella rappresentazione della posizione, proiettando, quindi i ket sulla base degli autoket comuni agli operatori relativi alle coordinate cartesiane:

$$\begin{aligned} X_1 |x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N\rangle &= x_1 |x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N\rangle \\ Y_1 |x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N\rangle &= y_1 |x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N\rangle \\ Z_1 |x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N\rangle &= z_1 |x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N\rangle \\ \dots &= \dots \end{aligned}$$

i quali soddisfano le relazioni di ortonormalizzazione

$$\langle x'_1, y'_1, z'_1, x'_2, \dots, z'_N | x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N \rangle = \delta(x'_1 - x_1) \delta(y'_1 - y_1) \delta(z'_1 - z_1) \delta(x'_2 - x_2) \dots \delta(z'_N - z_N).$$

Ai ket $|\psi\rangle$ dello spazio di Hilbert corrispondono le funzioni d'onda:

$$|\psi\rangle \rightarrow \langle x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N | \psi \rangle \equiv \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_N),$$

mentre l'associazione tra variabile fisica ed operatore si ottiene, tenendo conto che, nella rappresentazione delle coordinate, gli operatori posizione agiscono sulle funzioni d'onda moltiplicandole per il rispettivo argomento, tramite le sostituzioni

$$X_j \rightarrow x_j \quad e \quad P_j \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j}.$$

Introducendo, per brevità di notazione, i vettori posizione $\vec{r}_k = (x_k, y_k, z_k)$, lo stato del sistema è rappresentato dalla funzione d'onda

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \equiv |\psi\rangle \rightarrow \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | \psi \rangle.$$

Su queste funzioni d'onda gli operatori corrispondenti al vettore posizione e al vettore impulso della k -sima particella operano nel modo seguente:

$$\begin{aligned} \vec{R}_k \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) &= \vec{r}_k \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \\ \vec{P}_k \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) &= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_k \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N). \end{aligned}$$

Utilizzando la regola di sostituzione e supponendo che esso non dipenda dal tempo, l'operatore Hamiltoniano diventa:

$$\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V} = -\hbar^2 \sum_{k=1}^N \frac{\nabla_k^2}{2m_k} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$$

del quale si ottengono autovalori e autofunzioni risolvendo l'equazione di Schrödinger stazionaria:

$$\left[-\hbar^2 \sum_{k=1}^N \frac{\nabla_k^2}{2m_k} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N).$$

1.3 Riducibilità a sistemi unidimensionali: i potenziali rettangolari

Molti modelli sono riducibili a problemi in una dimensione.

Per semplicità consideriamo il caso di una sola particella in presenza di un'energia potenziale

$$V(\vec{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$$

In questo caso otteniamo la separazione delle variabili ponendo

$$\psi(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z) \tag{1.2}$$

Sostituendo nell'equazione

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2 X(x)Y(y)Z(z)}{dx^2} + \frac{d^2 X(x)Y(y)Z(z)}{dy^2} + \frac{d^2 X(x)Y(y)Z(z)}{dz^2} \right] + \\ [V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)] X(x)Y(y)Z(z) = E X(x)Y(y)Z(z) \end{aligned}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[Y(y)Z(z) \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + X(x)Z(z) \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + X(x)Y(y) \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} \right] + [V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)] X(x)Y(y)Z(z) = E X(x)Y(y)Z(z)$$

e dividendo ambo i membri per il prodotto $X(x)Y(y)Z(z)$, vediamo che il primo membro si presenta come la somma di tre termini, ciascuno dei quali dipende da un'unica variabile e la somma dei quali deve essere pari ad una costante (l'autovalore E):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + V_x(x) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y(y)} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + V_y(y) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Z(z)} \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} + V_z(z) \right] = E.$$

Ciascuno dei tre termini deve essere pari ad una costante

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} X(x) + V_x(x)X(x) = E_x X(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} Y(y) + V_y(y)Y(y) = E_y Y(y) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} Z(z) + V_z(z)Z(z) = E_z Z(z) \end{cases}$$

vincolate dalla condizione

$$E_x + E_y + E_z = E.$$

Questa condizione mostra che, in generale, la degenerazione dell'autovalore E risulta essere molto elevata, dato che lo stesso autovalore E si può ottenere da molte combinazioni diverse di E_x , E_y , E_z . Inoltre si possono avere autofunzioni corrispondenti allo spettro discreto per quanto riguarda una variabile e allo spettro continuo per un'altra.

Alcuni esempi di potenziali a simmetria rettangolare sono:

- particella libera;
- particella in un parallelepipedo;
- particella in un potenziale armonico in tre dimensioni $V(\vec{r}) = \frac{1}{2} k_x x^2 + \frac{1}{2} k_y y^2 + \frac{1}{2} k_z z^2$.

Capitolo 2

Sistemi unidimensionali

Bibliografia: per la parte riguardante i potenziali quadrati il testo di riferimento è il Gasiorowicz [2].

2.1 Particella libera in D=1

Denotata con x l'unica coordinata presente, l'equazione di Schrödinger stazionaria si scrive:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E \psi(x).$$

Invece di scrivere direttamente l'integrale generale, ricordiamo che l'operatore Hamiltoniano $\mathcal{H} = \frac{P^2}{2m}$, essendo funzione dell'operatore impulso, commuta con esso; pertanto Hamiltoniano e impulso hanno un sistema completo di autofunzioni in comune $\{\psi_{E,p}(x)\}$. Verifichiamo, infatti, che se $\psi_{E,p}(x)$ è autofunzione dell'operatore P

$$P\psi_{E,p}(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi_{E,p}(x) = p\psi_{E,p},$$

allora essa è certamente anche autofunzione dell'Hamiltoniano. Infatti,

$$\frac{P^2}{2m} \psi_{E,p}(x) = \frac{1}{2m} P p \psi_{E,p}(x) = \frac{p}{2m} P \psi_{E,p}(x) = \frac{p^2}{2m} \psi_{E,p}(x).$$

Anche l'autofunzione dell'impulso $\{\psi_{E,-p}(x)\}$, corrispondente all'autovalore $-p$, è, ovviamente, autofunzione dell'Hamiltoniano corrispondente allo stesso autovalore E . Ricordiamo che le due autofunzioni dell'impulso relative agli autovalori

$$p = \sqrt{2mE} \quad \text{e} \quad p = -\sqrt{2mE}$$

sono date da

$$\psi_{E,k}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx} \quad \text{e} \quad \psi_{E,-k}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ikx} \quad (2.1)$$

dove k è il numero d'onda

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Queste due autofunzioni costituiscono i due integrali linearmente indipendenti dell'equazione di Schrödinger. Dal punto di vista dell'operatore Hamiltoniano, abbiamo determinato due autofunzioni linearmente indipendenti corrispondenti allo stesso autovalore E , che, pertanto, è doppiamente degenere.

Da un punto di vista più fisico, le due autofunzioni trovate corrispondono ad onde piane che si propagano, rispettivamente, nella direzione positiva e in quella negativa dell'asse x .

L'autovalore E può assumere qualsiasi valore positivo, dato che, come abbiamo già visto, esso deve essere maggiore del minimo del potenziale, che in questo caso è zero. D'altra parte se E fosse negativo, p sarebbe immaginario e gli esponenziali presenti nelle autofunzioni divergerebbero per $|x| \rightarrow \infty$, e non sarebbero funzioni d'onda fisicamente accettabili.

2.2 Propagatore per una particella libera unidimensionale

Ricordiamo che il propagatore, quando l'Hamiltoniano non dipende dal tempo, è dato da

$$U(t, t') = e^{-i \frac{\mathcal{H}(t-t')}{\hbar}}.$$

Calcoliamo la sua espressione nella rappresentazione delle coordinate per una particella libera in una dimensione.

$$U(x, t, x', t') = \langle x | e^{-i \frac{\mathcal{H}(t-t')}{\hbar}} | x' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \langle x | e^{-i \frac{\mathcal{H}(t-t')}{\hbar}} | p \rangle \langle p | x' \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{i \frac{p(x-x')}{\hbar} - i \frac{p^2(t-t')}{2m\hbar}}$$

Ricordando il noto risultato per l'integrale gaussiano

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2 + \beta x} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \quad (2.2)$$

si ottiene facilmente

$$U(x, t, x', t') = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t-t')}} e^{i \frac{m(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}}.$$

Applichiamo questo risultato ad una particella descritta all'istante iniziale $t = 0$ da un pacchetto d'onda gaussiano

$$\psi(x, t' = 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\Delta^2\pi}} e^{i k_0 x - \frac{x^2}{4\Delta^2}} \quad (2.3)$$

corrispondente ad una indeterminazione sulla posizione $\Delta x = \Delta$ e sull'impulso $\Delta p = \frac{\hbar}{2\Delta}$. Al tempo t avremo

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' U(x, t, x', 0) \psi(x', 0) = \\ &= \frac{1}{\sqrt[4]{2\Delta^2\pi}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i t}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{i k_0 x' - \frac{x'^2}{4\Delta^2} + i \frac{m(x-x')^2}{2\hbar t}} \end{aligned}$$

L'integrale può essere calcolato utilizzando ancora la formula (2.2), ponendo

$$\alpha = \frac{1}{4\Delta^2} - \frac{im}{2\hbar t} \quad \text{e} \quad \beta = i \left(k_0 - \frac{mx}{\hbar t} \right)$$

Si ottiene

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt[4]{2\Delta^2\pi}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i t}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{i \frac{mx^2}{2\hbar t}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\Delta^2\pi} \left(1 + i \frac{\hbar t}{2m\Delta^2} \right)}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha} + i \frac{mx^2}{2\hbar t}} \end{aligned}$$

Calcoliamo l'esponente:

$$\begin{aligned}
 \frac{\beta^2}{4\alpha} + \frac{imx^2}{2\hbar t} &= \frac{-\left(\frac{mx}{\hbar t} - k_0\right)^2}{4\Delta^2 \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\Delta^2}\right)} + \frac{imx^2}{2\hbar t} = \\
 &= \frac{-\left(\frac{mx}{\hbar t} - k_0\right)^2 \frac{2i\hbar t\Delta^2}{m} + \frac{imx^2}{2\hbar t} 4\Delta^2 \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\Delta^2}\right)}{4\Delta^2 \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\Delta^2}\right)} = \\
 &= \frac{-x^2 - \frac{2i\hbar t\Delta^2}{m} k_0 \left(k_0 - \frac{2mx}{\hbar t}\right)}{4\Delta^2 \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\Delta^2}\right)} = \\
 &= \frac{-x^2 + \frac{4i\Delta^2}{\hbar} p_0 \left(x - \frac{p_0 t}{2m}\right)}{4\Delta^2 \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\Delta^2}\right)} = \\
 &= \frac{-x^2 + 2\frac{p_0 t}{m} x - \left(\frac{p_0 t}{m}\right)^2}{4\Delta^2 \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\Delta^2}\right)} + \frac{-2\frac{p_0 t}{m} x + \left(\frac{p_0 t}{m}\right)^2 + \frac{4i\Delta^2}{\hbar} p_0 \left(x - \frac{p_0 t}{2m}\right)}{4\Delta^2 \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\Delta^2}\right)} = \\
 &= \frac{(x - p_0 t/m)^2}{4\Delta^2 \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\Delta^2}\right)} + i\frac{p_0}{\hbar} \left(x - \frac{p_0 t}{2m}\right)
 \end{aligned}$$

L'espressione finale per il pacchetto gaussiano al tempo t è

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2}\Delta^2\pi \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\Delta^2}\right)}} e^{-\frac{(x - p_0 t/m)^2}{4\Delta^2 \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\Delta^2}\right)} + i\frac{p_0}{\hbar} \left(x - \frac{p_0 t}{2m}\right)}$$

Questa espressione mostra che il pacchetto d'onda si sposta come un'onda piana di energia $E = p_0^2/2m$, modulata da un pacchetto gaussiano il cui valore di picco si sposta con $x = p_0 t/m$, il valore medio della posizione. Il valore medio dell'impulso rimane $\langle p \rangle = p_0 = \hbar k_0$. Infine, la distribuzione di probabilità per la posizione, che si ricava dal modulo quadro della funzione d'onda, mostra che l'incertezza sulla posizione varia nel tempo con la legge

$$\Delta x(t) = \Delta \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m\Delta^4}}$$

dando luogo al fenomeno conosciuto come *allargamento del pacchetto d'onda*.

2.3 Primi esercizi

Illustriamo il significato della funzione d'onda con alcuni esempi semplici.

Esercizio 1)

Di una particella che si muove su un asse si sa che

- ha impulso di modulo p ,
- si ha la stessa probabilità di trovarla con impulso diretto nei due versi opposti.

È corretto affermare che la funzione d'onda è data da

$$\psi(x) = N \left[e^{i\frac{px}{\hbar}} + e^{-i\frac{px}{\hbar}} \right],$$

con N costante di normalizzazione?

Soluzione. La risposta è negativa poiché le condizioni date non sono sufficienti a fissare la fase relativa tra le due autofunzioni corrispondenti a p e $-p$.

Esercizio 2)

Si sa che ad un certo istante una particella è descritta dalla funzione d'onda

$$\psi(x) = A \sin kx.$$

Si può concludere che si tratta di una particella libera?

Soluzione. La funzione d'onda è la sovrapposizione di due autofunzioni dell'impulso corrispondenti ad autovalori opposti. Essa potrebbe essere un'autofunzione di un'Hamiltoniano in assenza di potenziale. Ciononostante occorre ricordare che la funzione d'onda specifica lo stato di un sistema, non la dinamica del sistema stesso. Questa è, invece, specificata dall'Hamiltoniano, che, in questo caso, non è noto.

Esercizio 3)

La funzione d'onda di una particella libera di massa m

$$\psi(x) = A \cos kx$$

descrive uno stato di impulso definito?

Soluzione. La risposta è negativa. Infatti

$$\psi(x) = \frac{A}{2} [e^{ikx} + e^{-ikx}]$$

rappresenta la sovrapposizione di due stati con impulso $p = \hbar k$ e $p = -\hbar k$. Poichè essi hanno uguali ampiezze sono equiprobabili. È definita invece l'energia $E = \frac{p^2}{2m}$.

Esercizio 4)

Calcolare il valor medio dell'impulso per lo stato

$$\psi(x) = \phi(x) e^{i \frac{p_0 x}{\hbar}},$$

dove $\phi(x)$ è una funzione reale ed è normalizzata.

Soluzione. Poiché $\phi(x)$, e quindi anche $\psi(x)$, è normalizzata abbiamo che

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi(x) = 0.$$

Quindi:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) = \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi(x) e^{-i \frac{p_0 x}{\hbar}} \left[\frac{d\phi(x)}{dx} e^{i \frac{p_0 x}{\hbar}} + \frac{i}{\hbar} p_0 \phi(x) e^{i \frac{p_0 x}{\hbar}} \right] = \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi(x) \frac{d\phi(x)}{dx} + p_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi^2(x) = \\ &= -\frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{d\phi^2(x)}{dx} + p_0 = \\ &= -\frac{i\hbar}{2} [\phi^2(x)]_{-\infty}^{+\infty} + p_0 = p_0 \end{aligned}$$

2.4 Equazione di continuità per la probabilità

Ricordiamo che il fatto che la carica elettrica sia conservata *localmente* si esprime tramite l'equazione di **continuità** della corrente elettrica:

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) \quad (2.4)$$

dove $\rho(\vec{r}, t)$ e $\vec{j}(\vec{r}, t)$ sono, rispettivamente, la densità di carica e la densità di corrente.

Il suo significato fisico diventa evidente integrando entrambi i membri su un qualsiasi volume V delimitato da una superficie S . Utilizzando il teorema di Gauss si ottiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho(\vec{r}, t) d^3r = - \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) d^3r = - \int_S \vec{j}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{S}$$

Il significato dell'equazione di continuità per i fenomeni elettrici è, dunque, che qualsiasi variazione della quantità di carica presente in un volume V è connesso ad un passaggio di corrente attraverso la sua frontiera. Questa equazione è valida per ogni grandezza per la quale esiste una legge di conservazione.

In Meccanica Quantistica la norma della funzione d'onda

$$P(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

è una densità di probabilità, nel senso che

$P(\vec{r}, t) d^3r$ è la probabilità di trovare la particella, il cui stato è descritto da ψ , nel volume d^3r intorno al punto \vec{r} all'istante t .

La dimensione di P è $(lunghezza)^{-3}$, quindi ψ ha dimensione $(lunghezza)^{-3/2}$. Alla ψ , e, di conseguenza, a P , sono associate tutte le grandezze caratterizzanti la particella, come massa, carica, ...; per questo motivo risulta necessario individuare anche in Meccanica Quantistica una legge di continuità. A differenza dal caso classico, essa sarà collegata all'interpretazione probabilistica tipica dei fenomeni quantistici; parleremo quindi, ad esempio, non di densità di carica, ma di densità di probabilità di carica. Dato che abbiamo già una densità di probabilità, è necessario definire una densità di corrente, o flusso, di probabilità.

Consideriamo l'equazione di Schrödinger e la sua complessa coniugata

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi^*(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Moltiplichiamo la I equazione per ψ^* , la II equazione per ψ e sottraiamo membro a membro:

$$\begin{aligned} i\hbar \left[\psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} + \psi(\vec{r}, t) \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} \right] &= -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi^*(\vec{r}, t) \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, t)] \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)] &= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot [\psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t)] \end{aligned}$$

Abbiamo ottenuto così un'equazione di continuità

$$\frac{\partial P(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) \quad (2.6)$$

dove la densità di corrente di probabilità è definita come

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} [\psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t)] = \frac{\hbar}{m} \Im(\psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t)). \quad (2.7)$$

Alcune considerazioni a proposito di questa espressione:

1. Dalla dimensione di P ricaviamo che \vec{j} ha dimensione $(lunghezza)^{-2} (tempo)^{-1}$; essa rappresenta la quantità di probabilità che passa nell'unità di tempo attraverso l'area unitaria posta perpendicolarmente alla direzione di $\vec{j}(\vec{r}, t)$.
2. Se la funzione d'onda è reale, ad essa non è associata alcuna corrente.
3. Fenomeni anelastici, nei quali vi è un assorbimento di materia o carica, possono essere simulati mediante potenziali complessi. Nell'equazione (2.5) al posto di V ci sarà il suo complesso coniugato e, di conseguenza, l'equazione (2.6) risulta violata.
4. $j(\vec{r}, t)$ è una quantità fisica e, di conseguenza, deve essere non singolare. Requisito, dunque, per la funzione d'onda $\psi(\vec{r}, t)$ è che essa sia continua con la sua derivata prima o, equivalentemente, con la sua derivata logaritmica.

Consideriamo il caso di una particella libera descritta da un'autofunzione dell'impulso corrispondente all'autovalore \vec{p} . Generalizzando quanto abbiamo visto nel caso unidimensionale, essa è anche autofunzione dell'energia (cinetica) corrispondente all'autovalore $E = p^2/2m$. Pertanto la sua espressione in funzione del tempo è data, lasciando indeterminata la costante di normalizzazione, da

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = C e^{i(\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}-Et}{\hbar})}$$

Il termine dipendente dal tempo non dà contributo e la densità di probabilità è una costante pari a $|C|^2$, mentre la densità di corrente è

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left[C^* e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} C \frac{i\vec{p}}{\hbar} e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} + C e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} C^* \frac{i\vec{p}}{\hbar} e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} \right] = \frac{\vec{p}}{m} |C|^2 = \vec{v}|C|^2 \quad (2.8)$$

Otteniamo così

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = P(\vec{r}, t) \vec{v},$$

cioè la stessa relazione valida per le cariche elettriche. Notiamo che, dato che P e \vec{j} sono costanti, in questo caso l'equazione di continuità è trivialmente verificata. Come già sappiamo le autofunzioni dell'impulso sono non normalizzabili, per cui il significato probabilistico a rigore perde di significato. Tuttavia possiamo ancora utilizzarlo se ricorriamo alla probabilità relativa definendo

$$\frac{\int_D |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r}{\int_{D'} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r}$$

come probabilità di trovare la particella nel dominio D rispetto a quella di trovarla in D' .

2.5 Potenziali quadrati

La soluzione dell'equazione di Schrödinger presenta difficoltà anche nel caso di energia potenziale modellata da funzioni elementari. Il comportamento delle soluzioni può essere, tuttavia, intuito a partire da una classe di potenziali semplici, i potenziali quadrati. Essi sono costituiti da funzioni costanti ovunque esclusi alcuni punti di discontinuità.

Come abbiamo visto studiando la corrente di probabilità, la funzione d'onda deve essere continua con la sua derivata prima. Possiamo quindi risolvere l'equazione in ciascuna delle regioni nelle quali il potenziale è costante e, successivamente, imporre, in ciascun punto di discontinuità del potenziale, che limite destro e limite sinistro della funzione d'onda e della sua derivata prima assumano lo stesso valore. Nelle regioni di potenziale costante la soluzione è la stessa del caso libero, come è evidente, dato che l'energia è definita a meno di una costante arbitraria.

2.5.1 Gradino di potenziale

Il più semplice potenziale quadrato è il gradino, definito da

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{per } x < 0; \\ V_0, & \text{per } x > 0. \end{cases}$$

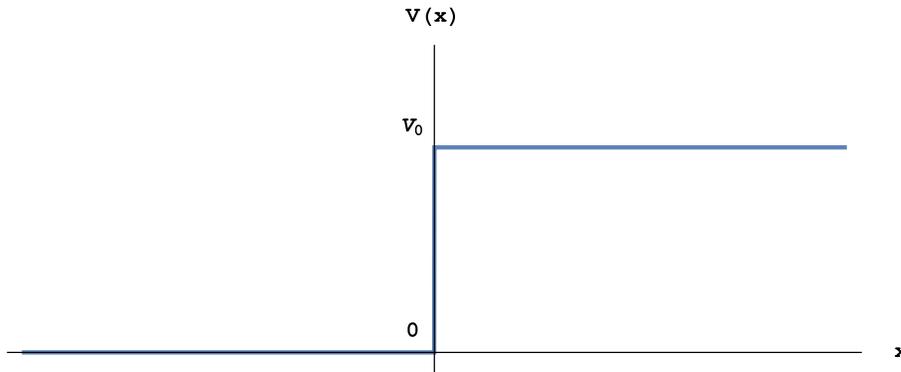


Figura 2.1: Il potenziale a gradino.

In Meccanica Classica una particella di energia fissata E incidente sul gradino ha un comportamento molto semplice. Se, ad esempio, viene inviata nel verso dell'asse x , essa si sposta con velocità costante v pari a $\sqrt{\frac{2E}{m}}$ finché la coordinata x è negativa, poi la sua velocità varia bruscamente assumendo il valore $v' = \sqrt{\frac{2(E-V_0)}{m}}$. Questo accade se $E > V_0$. In caso contrario non esiste possibilità di moto nella regione degli x positivi, dato che la velocità v' sarebbe immaginaria, e la particella rimbalza all'indietro. Nel caso di particelle provenienti dal verso opposto all'asse x , la loro energia deve essere maggiore di V_0 ed esse, una volta giunte nella posizione dell'origine aumentano in modulo la loro velocità, che passa da $-v'$ a $-v$. Vediamo ora il comportamento quantistico degli stati di energia fissata E . Notiamo prima di tutto che l'autovalore E deve essere positivo, dato che, come sappiamo, esso deve essere maggiore del minimo del potenziale. Si evidenziano, inoltre, due regioni nelle quali il potenziale è costante. Diciamo regione I quella del semiasse negativo e regione II quella del semiasse positivo.

Regione I

In questa regione l'equazione di Schrödinger si scrive:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x),$$

cioè

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x),$$

dove

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0.$$

La soluzione generale è data da una combinazione lineare dei due integrali linearmente indipendenti della particella libera (2.1):

$$\psi(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx} \quad (2.9)$$

dove abbiamo posto uguale a 1 il coefficiente dell'onda piana che si propaga verso destra. Il primo termine viene detto onda (piana) *incidente* e il secondo onda (piana) *riflessa*. Per comprendere il significato fisico di questa soluzione calcoliamo la corrispondente corrente di probabilità usando la (2.7), tenendo conto del fatto che in questo caso non vi è dipendenza dal tempo e siamo in presenza di una sola dimensione.

$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{\hbar}{m} \Im(\psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x)) = \frac{\hbar}{m} \Im[(e^{-ikx} + R^* e^{ikx})(ike^{ikx} - ikRe^{-ikx})] \\ &= \frac{\hbar k}{m} \Re[(e^{-ikx} + R^* e^{ikx})(e^{ikx} - Re^{-ikx})] = \frac{\hbar k}{m} \Re(1 - |R|^2 + R^* e^{2ikx} - Re^{-2ikx}) \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) = v \cdot 1 - v \cdot |R|^2 \end{aligned}$$

La densità di corrente di probabilità è composta, pertanto, di due termini costanti: il primo rappresenta una densità di corrente di probabilità che si propaga con velocità v da sinistra verso destra e il secondo una densità di corrente che si propaga con velocità opposta. Ricordando quanto abbiamo detto sul significato di \vec{j} e rapportandolo al fatto che ora siamo in una dimensione (la funzione d'onda ora ha dimensione $(lunghezza)^{-1/2}$), si tratta rispettivamente di una densità di corrente di 1 particella e di $|R|^2$ particelle al secondo che attraversano ciascun punto.

Regione II

In questa regione l'equazione di Schrödinger si scrive:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V_0 \psi(x) = E \psi(x),$$

cioè

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k'^2 \psi(x) = 0,$$

dove

$$k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} = \frac{p'}{\hbar} = \frac{mv'}{\hbar}.$$

Abbiamo ora due possibilità a seconda se E sia maggiore o minore di V_0 .

Caso $E > V_0$

In questo caso k' è reale. Ancora una volta la soluzione generale è del tipo

$$\psi(x) = Te^{ik'x} + Se^{-ik'x} \quad (2.10)$$

con T e S costanti. Se vogliamo che la soluzione descriva una situazione fisicamente riproducibile poniamo $S = 0$. Non calcoleremo, quindi l'integrale generale dell'equazione, ma una soluzione particolare corrispondente a particelle che sono inviate da sinistra verso destra da $x = -\infty$. Consideriamo, pertanto,

$$\psi(x) = Te^{ik'x}. \quad (2.11)$$

che corrisponde ad una densità di corrente di $v' \cdot |T|^2$ particelle che passano per ciascun punto della regione II al secondo. Per determinare i coefficienti R e T ricordiamo che la funzione d'onda e la sua derivata prima devono essere continue ovunque, in particolare nel punto $x = 0$ di frontiera tra le due regioni I e II. Otteniamo così il sistema lineare di due equazioni

$$\begin{cases} 1 + R = T \\ ik(1 - R) = ik'T \end{cases}$$

che ha soluzione

$$\begin{aligned} R &= \frac{k - k'}{k + k'} \\ T &= \frac{2k}{k + k'} \end{aligned}$$

Dai valori di R e T otteniamo le correnti

$$\begin{aligned} v|R|^2 &= v \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \\ v'|T|^2 &= v' \frac{4k^2}{(k + k')^2}. \end{aligned}$$

È facile verificare che, dato che:

$$v(1 - |R|^2) = v'|T|^2,$$

la corrente è la stessa nelle due regioni.

Terminiamo lo studio di questo caso con le seguenti considerazioni:

- nel limite $E \gg 0$, cioè per $k \rightarrow k'$, $|R|^2 \rightarrow 0$ e $|T|^2 \rightarrow 1$, confermando l'intuizione che a grande energia la presenza del gradino può essere trascurata rispetto alla situazione della particella libera.
- in generale, invece, emerge una importante novità rispetto al comportamento classico delle particelle: la presenza di una perturbazione nel potenziale genera una probabilità finita di riflessione all'indietro della particella. Il comportamento è analogo a quello che avviene in ottica, dove un cambiamento dell'indice di rifrazione genera un'onda riflessa. Di fatto, per onde monocromatiche, una volta eliminata la dipendenza dal tempo, è la stessa equazione che governa i due fenomeni con il termine $2m(V - E)/\hbar^2$ che prende il posto del termine k^2/c^2 , dove c è la velocità di propagazione delle onde elettromagnetiche, funzione dell'indice di rifrazione.

Caso $E < V_0$ Notiamo che, essendo $E - V_0 < 0$, risulta

$$k'^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} = (i\chi)^2 \quad \text{dove} \quad \chi = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad \text{è reale e positivo}$$

Possiamo riscrivere l'equazione di Schrödinger nella forma:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \chi^2 \psi(x) = 0, \quad (2.12)$$

il cui integrale generale è ancora del tipo (2.10), ma con esponenti reali:

$$\psi(x) = Te^{-\chi x} + Se^{\chi x}. \quad (2.13)$$

Notiamo ora che, dato che la regione II si estende verso $x = +\infty$, il secondo termine non è accettabile perché diverge in questo limite. Avremo, pertanto,

$$\psi(x) = Te^{-\chi x}. \quad (2.14)$$

Risolvendo ora il nuovo sistema che si ottiene imponendo le condizioni di continuità o, più semplicemente, con la sostituzione $ik' \rightarrow -\chi$, otteniamo i due coefficienti R e T :

$$\begin{aligned} R &= \frac{k - i\chi}{k + i\chi} \\ T &= \frac{2k}{k + i\chi}. \end{aligned}$$

In questo caso possiamo notare che:

- R ha modulo 1, mentre, poiché nella regione II la funzione d'onda è reale, la corrente è nulla; per questo la corrente riflessa è uguale a quella incidente e tutte le particelle, come accade in meccanica classica, tornano indietro.

- Contrariamente, invece, a quanto accade in meccanica classica per la quale non vi sono particelle nella regione II in quanto l'energia cinetica diventerebbe negativa, abbiamo una probabilità non nulla di trovare particelle nella regione $x > 0$.

In entrambi i casi $E > V_0$ e $E < V_0$ l'energia può assumere qualsiasi valore positivo, quindi lo spettro dell'energia per questo potenziale è positivo. Tuttavia nei due casi la degenerazione degli autovalori è differente.

$E > V_0$. In questo caso lo spettro è doppiamente degenero. Infatti, anche se abbiamo trovato una sola soluzione del problema, ciò è la conseguenza del fatto di aver posto il coefficiente $S = 0$, in modo da riprodurre una situazione fisicamente riproducibile. Esiste, tuttavia, una soluzione linearmente indipendente da questa, corrispondente all'invio di particelle in direzione opposta all'asse x .

$E < V_0$. In questo caso, invece, abbiamo dovuto porre $S = 0$ perché altrimenti avremmo avuto una soluzione divergente all'infinito. Uno dei due integrali linearmente indipendenti dell'equazione agli autovalori non fa parte dello spazio delle funzioni d'onda accettabili fisicamente e, di conseguenza, gli autovalori compresi tra 0 e V_0 sono non degeneri.

2.5.2 Particella vincolata su un segmento

Come in Meccanica classica, una particella che vincolata a muoversi su un segmento può essere descritta tramite il potenziale:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{per } 0 < x < L; \\ +\infty, & \text{altrove.} \end{cases}$$

Facciamo vedere che, effettivamente, la funzione d'onda della regione è diversa da zero solo per $0 < x < L$. Consideriamo ad esempio, la regione $x > L$. Dato che qui il potenziale è infinito, esso è superiore a qualsiasi autovalore E dell'energia noi possiamo fissare. Per questo potremo risolvere l'equazione di Schrödinger supponendo che in questa regione il potenziale abbia un valore costante $V_0 > E$ e poi prendere il limite della soluzione per $V_0 \rightarrow \infty$. Siamo nella



Figura 2.2: La particella vincolata su un segmento equivale ad un pozzo infinito di potenziale.

stessa situazione del problema precedente quando si considera il caso $E < V_0$ per la regione II. Abbiamo quindi un'unica soluzione

$$\psi(x) = T e^{-\chi x}.$$

Se adesso consideriamo il limite $V_0 \rightarrow \infty$, abbiamo

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty} \chi = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = +\infty \quad \implies \quad \lim_{V_0 \rightarrow \infty} \psi(x) = 0$$

Quindi per $x > L$ la funzione d'onda si annulla e analogo ragionamento può essere ripetuto nella regione $x < 0$.

Non ci resta che risolvere l'equazione di Schrödinger nella regione $0 < x < L$ e poi imporre che la funzione d'onda si annulli agli estremi del segmento. In questa regione la particella è libera e potremmo considerare come soluzioni linearmente indipendenti le due onde piane dirette in verso opposto. Per comodità di calcolo, consideriamo invece, come integrale generale, la soluzione

$$\psi(x) = A \sin(kx + \delta) \quad \text{dove} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

La condizione di annullamento in $x = 0$ comporta

$$\delta = 0,$$

mentre, applicando la stessa condizione in $x = L$, abbiamo

$$kL = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = n\pi \quad \text{dove} \quad n = 1, 2, \dots$$

Da questa relazione si ricava che gli autovalori dell'energia sono dati da:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad \text{dove} \quad n = 1, 2, \dots$$

Quando, come in questo caso, gli autovalori dell'energia sono discreti, essi sono anche denominati livelli di energia.

Infine determiniamo A normalizzando le autofunzioni:

$$1 = \int_0^L dx |A|^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} = \frac{|A|^2}{2} \int_0^L dx \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{L}\right) = \frac{|A|^2 L}{2} \quad \implies \quad A = \sqrt{\frac{2}{L}},$$

a meno del fattore di fase arbitrario. Pertanto le autofunzioni normalizzate sono date da

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad \text{con} \quad n = 1, 2, \dots$$

nella regione $x \in [0, L]$ e nulle altrove.

In conclusione lo spettro dell'energia è discreto e gli autovalori sono tutti non degeneri.

2.5.3 Buca di potenziale

Consideriamo, ora, una buca di potenziale le cui pareti sono finite:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{per } |x| > a; \\ -V_0, & \text{per } |x| < a. \end{cases}$$

In Meccanica Classica distinguiamo due intervalli dell'energia nei quali il moto ha diverse caratteristiche. Se $-V_0 < E < 0$ la particella si muove a velocità costante in modulo $v' = \sqrt{\frac{2(E+V_0)}{m}}$ avanti e indietro tra le pareti della buca. Se, invece, $E > 0$ la particella viaggia in uno dei due versi assumendo velocità di modulo pari a $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ all'esterno della buca e $v' = \sqrt{\frac{2(E+V_0)}{m}} > v$ all'interno.

Anche in Meccanica Quantistica occorre distinguere i due casi. Consideriamo prima il

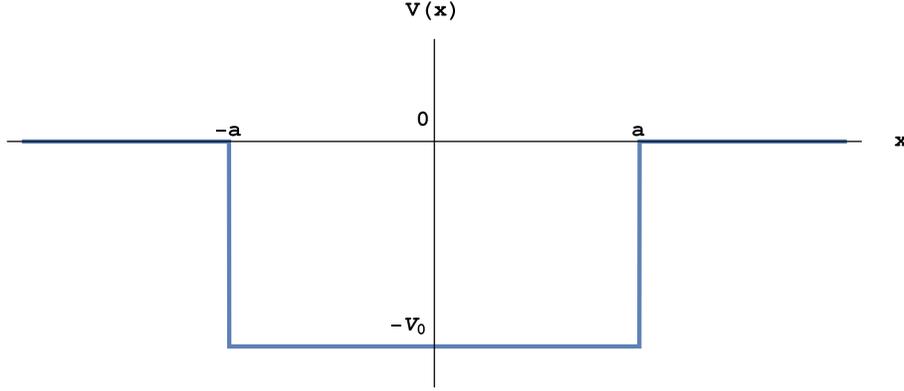


Figura 2.3: Buca di potenziale.

Caso $E > 0$

Introduciamo i numeri d'onda k e k' relativi alle regioni nelle quali il potenziale è costante.

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}}.$$

Procedendo come nel caso del gradino, possiamo scrivere le soluzioni nelle 3 regioni a potenziale costante nella forma

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & \text{per } x < -a; \\ Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x}, & \text{per } |x| < a; \\ Te^{ikx}, & \text{per } x > a. \end{cases} \quad (2.15)$$

Ancora una volta non abbiamo considerato l'integrale generale, ma abbiamo imposto la condizione a contorno che la soluzione rappresenti il moto di una particella proveniente da sinistra che, interagendo con la buca, possa essere riflessa o trasmessa. La corrente di probabilità nelle 3 regioni è pari a

$$j(x) = \begin{cases} \frac{\hbar k}{m} - \frac{\hbar k}{m} |R|^2, & \text{per } x < -a; \\ \frac{\hbar k'}{m} |A|^2 - \frac{\hbar k'}{m} |B|^2, & \text{per } |x| < a; \\ \frac{\hbar k}{m} |T|^2, & \text{per } x > a. \end{cases}$$

I coefficienti R , A , B e T , possono essere ricavati imponendo le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata nei punti di confine tra le regioni di potenziale costante, a e $-a$. Si hanno le seguenti equazioni:

$$\begin{aligned} e^{-ika} + Re^{ika} &= Ae^{-ik'a} + Be^{ik'a} \\ ik(e^{-ika} - Re^{ika}) &= ik'(Ae^{-ik'a} - Be^{ik'a}) \\ Ae^{ik'a} + Be^{-ik'a} &= Te^{ika} \\ ik'(Ae^{ik'a} - Be^{-ik'a}) &= ikTe^{ika} \end{aligned}$$

Risolto il sistema, troviamo per R e T le seguenti espressioni

$$R = e^{-2ika} \frac{i(k'^2 - k^2) \sin 2k'a}{2kk' \cos 2k'a - i(k'^2 + k^2) \sin 2k'a} \quad (2.16)$$

$$T = e^{-2ika} \frac{2kk'}{2kk' \cos 2k'a - i(k'^2 + k^2) \sin 2k'a} \quad (2.17)$$

Queste relazioni consentono di verificare che la corrente di probabilità è la stessa in ogni regione. Possiamo concludere lo studio di questo caso con le seguenti considerazioni:

- Notiamo che

$$|T|^2 \propto (kk')^2 = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) E(E + V_0) \quad \text{mentre} \quad |R|^2 \propto (k'^2 - k^2)^2 = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2.$$

Pertanto, nel limite di alte energie, $E \gg V_0$, abbiamo

$$kk' \sim \frac{2mE}{\hbar^2} \gg \frac{2mV_0}{\hbar^2} \implies |T|^2 \gg |R|^2$$

e quindi la riflessione è trascurabile.

- Nel limite di basse energie, invece, $T \rightarrow 0$ ed è la trasmissione ad essere trascurabile.
- R è anche proporzionale a $\sin 2k'a$, pertanto la riflessione si annulla ogni volta che

$$k' = \frac{n\pi}{2a} \implies k'^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{4a^2}$$

cioè per valori dell'energia

$$E_n = -V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}.$$

Si tratta di un fenomeno detto *Risonanza di Trasmissione*, osservata per la prima volta da Ramsauer e Towsend nell'urto tra elettroni di bassissima energia ($\sim 0.1 \text{ eV}$) su gas nobili. Un effetto simile è noto in ottica (lamine sottili) e viene utilizzato per migliorare la trasmissione della luce attraverso le lenti. Nel linguaggio ondulatorio possiamo dire di essere in presenza di un'interferenza distruttiva delle onde riflesse dai bordi della buca, che diventa massima quando la lunghezza d'onda $\lambda = 2\pi/k$ assume dei particolari valori correlati alle caratteristiche della buca.

Da quanto visto possiamo concludere che per $E > 0$ lo spettro dell'energia è continuo e doppiamente degenere.

Consideriamo ora il caso in cui l'energia è negativa.

Caso $0 > E > -V_0$

Nelle due regioni $|x| > a$, a destra e a sinistra della buca, siamo in presenza, come nel caso $E < V_0$ per il gradino, di un'equazione del tipo (2.12) che ha come integrale generale

$$\psi(x) = c_1 e^{\chi x} + c_2 e^{-\chi x}, \quad \text{dove} \quad \chi^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

Per evitare divergenze della funzione d'onda, nella regione di sinistra dovremo considerare solo il primo dei due termini e nella regione di destra solo il secondo. La funzione d'onda si presenta, nelle varie regioni, nella forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} c_1 e^{\chi x}, & \text{per } x < -a; \\ A \cos k'x + B \sin k'x, & \text{per } |x| < a; \\ c_2 e^{-\chi x}, & \text{per } x > a, \end{cases}$$

dove, nella regione centrale, ho scelto come integrale generale una combinazione di funzioni reali (seni e coseni), invece degli esponenziali complessi.

Imponendo le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata, si ottiene il sistema di equazioni

$$\begin{aligned} c_1 e^{-\chi a} &= A \cos k'a - B \sin k'a \\ c_1 \chi e^{-\chi a} &= Ak' \sin k'a + Bk' \cos k'a \\ c_2 e^{-\chi a} &= A \cos k'a + B \sin k'a \\ -c_2 \chi e^{-\chi a} &= -Ak' \sin k'a + Bk' \cos k'a \end{aligned}$$

Ricaviamo c_1 e c_2 dalla prima e dalla terza equazione e sostituiamo i loro valori nella seconda e quarta, si ottengono le due equazioni che devono consentire di calcolare A e B :

$$\chi = k' \frac{A \sin k'a - B \cos k'a}{A \cos k'a + B \sin k'a} \quad (2.18)$$

$$\chi = k' \frac{A \sin k'a + B \cos k'a}{A \cos k'a - B \sin k'a} \quad (2.19)$$

Notiamo che, se uguagliamo i secondi membri, troviamo che, perché le due equazioni siano compatibili, deve verificarsi

$$AB = 0.$$

Possiamo distinguere, quindi, due tipi di soluzioni

- **Caso B=0.** Dal sistema vediamo che $c_1 = c_2$ e la soluzione nella regione centrale è $\psi(x) = A \cos k'x$. Complessivamente la soluzione è una funzione **pari** di x .
- **Caso A=0.** Dal sistema vediamo che $c_1 = -c_2$ e la soluzione nella regione centrale è $\psi(x) = B \sin k'x$. Complessivamente la soluzione è una funzione **dispari** di x .

Autofunzioni pari. Se poniamo $B = 0$ nelle equazioni (2.18) otteniamo

$$\chi = k' \tan k'a$$

che, tenendo conto della relazione che lega χ e k'

$$\chi^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - k'^2, \quad (2.20)$$

può essere riscritta nella forma

$$\frac{\sqrt{\lambda^2 - z^2}}{z} = \tan z$$

dove

$$\lambda^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \quad \text{e} \quad z = k'a$$

sono entrambe quantità positive. L'energia E , in termini della nuova variabile z , è data da

$$E = \frac{\hbar^2 z^2}{2ma^2} - V_0. \quad (2.21)$$

Trattandosi di un'equazione trascendente possiamo studiarla qualitativamente utilizzando un grafico nel quale riportiamo le due funzioni a primo e secondo membro in funzione della variabile z . I valori di z dei punti di intersezione tra le due curve consentono di determinare gli autovalori dell'energia dato che, dalla relazione (2.20), Nella figura 2.4 mostriamo nel I quadrante (l'unico ad essere coinvolto) gli archi relativi alla tangente e le curve di $\frac{\sqrt{\lambda^2 - z^2}}{z}$ al variare del parametro

λ . Queste ultime intersecano l'asse z nel punto $z_{max} = \lambda = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}}$. Notiamo che

- al crescere di λ il numero di intersezioni fra le due curve, e quindi di autovalori dell'energia, aumenta, ma, per quanto λ sia piccolo, ve ne è sempre almeno uno;
- nel limite $\lambda \rightarrow \infty$, cioè $V_0 \rightarrow \infty$ le intersezioni si spostano verso

$$z_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi = (2n + 1)\frac{\pi}{2} \quad \text{con} \quad n = 0, 1, \dots$$

riportandoci ai risultati per il pozzo di potenziale infinito per n dispari (tener conto della sostituzione $2a \rightarrow L$).

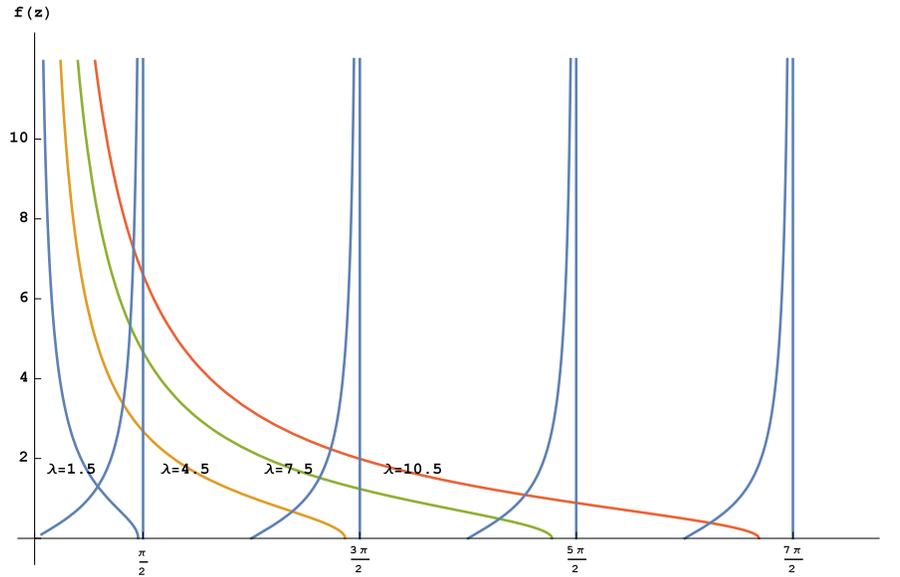


Figura 2.4: Ricerca grafica dei livelli di energia per le autofunzioni pari.

Autofunzioni dispari. Ponendo, invece, $A = 0$ nelle equazioni (2.18) otteniamo l'equazione

$$\chi = -k' \cot k'a = k' \tan(k'a + \frac{\pi}{2}),$$

la quale, usando le variabili già definite, diventa

$$\frac{\sqrt{\lambda^2 - z^2}}{z} = \tan(z + \frac{\pi}{2})$$

Le soluzioni possono essere trovate, anche in questo caso, graficamente, come possiamo vedere nella figura 2.4. Notiamo che

- per $\lambda < \pi/2$ non si hanno soluzioni per questo tipo di autofunzioni;
- al crescere di λ il numero di intersezioni, e quindi di autovalori dell'energia, aumenta;
- nel limite $\lambda \rightarrow \infty$, cioè $V_0 \rightarrow \infty$ le intersezioni si spostano verso

$$z_n = n\pi = 2n \frac{\pi}{2} \quad \text{con} \quad n = 1, 2, \dots$$

e coincidono con i risultati per il pozzo di potenziale infinito per n pari (tener conto della sostituzione $2a \rightarrow L$).

- essendo dispari queste soluzioni si azzerano nell'origine, cosa che si avrebbe se il potenziale fosse dato da:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{per } x < 0; \\ -V_0, & \text{per } 0 < x < a. \end{cases} ;$$

quindi questo potenziale ha autofunzioni dell'energia coincidenti con quelle dispari della buca.

Tenendo presente entrambe le figure, possiamo notare che al crescere di λ , che è proporzionale al prodotto $V_0 a^2$, si ottiene un primo autovalore dell'energia corrispondente a un'autofunzione pari, poi emerge anche un secondo autovalore corrispondente a un'autofunzione dispari e così

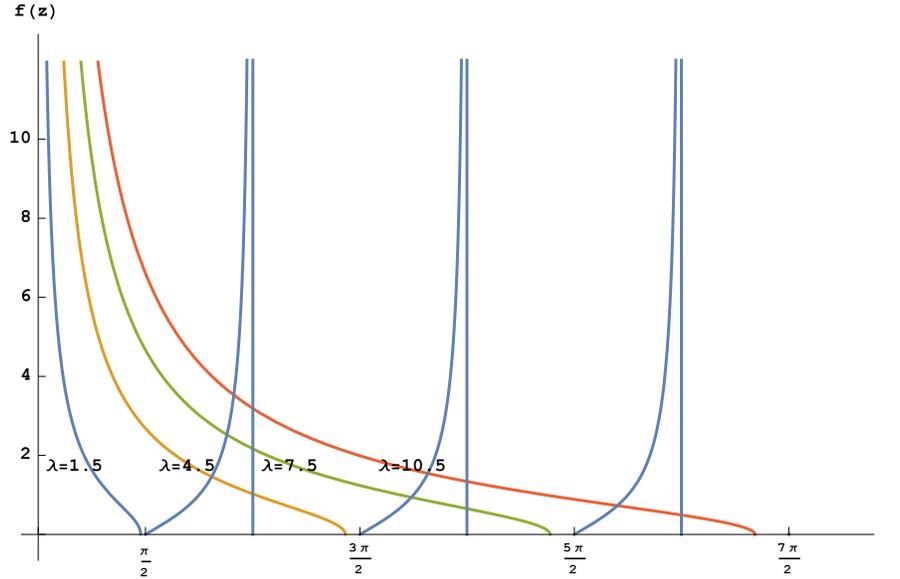


Figura 2.5: Ricerca grafica dei livelli di energia per le autofunzioni dispari.

via, alternando soluzioni pari e soluzioni dispari. Vedremo che questo è un comportamento generale legato alla simmetria del potenziale. Nel nostro caso, se

$$\lambda \in \left[(n-1)\frac{\pi}{2}, n\frac{\pi}{2} \right],$$

si hanno n livelli di energia e l'autofunzione corrispondente all'autovalore n -simo ha parità $(-1)^{(n+1)}$.

Notiamo anche che, in ciascuno dei due casi ($B = 0$ e $A = 0$) i coefficienti c_1 e c_2 risultano determinati a meno dell'altro coefficiente (A o B rispettivamente). Questo coefficiente residuo può essere fissato, a meno di una fase, tramite la normalizzazione. Per quanto riguarda lo spettro possiamo dire che in questo intervallo di energie esso è discreto, mentre le autofunzioni si annullano esponenzialmente all'infinito e rappresentano il corrispondente quantistico delle orbite classiche limitate ad una regione dello spazio. Questi stati, che abbiamo già incontrato nel pozzo di potenziale, sono detti *stati legati*.

Come si è detto, vi è sempre uno stato legato corrispondente ad un'autofunzione pari. Questo comporta che esiste almeno uno stato legato per qualsiasi buca di potenziale $\bar{V}(x)$ di forma arbitraria. Infatti è sempre possibile maggiorare $\bar{V}(x)$ con un potenziale $V(x)$ rettangolare; detta $\psi_0(x)$ l'autofunzione dell'energia dello stato fondamentale di $V(x)$, risulta

$$\left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2M} + \bar{V}(x) \right| \psi_0 \right\rangle < \left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2m} + V(x) \right| \psi_0 \right\rangle < 0, \quad (2.22)$$

e, perché un operatore abbia un valore di attesa negativo, deve esserci almeno un autovalore negativo, cioè uno stato legato.

2.5.4 Barriera di potenziale

Consideriamo il potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{per } |x| > a; \\ V_0, & \text{per } |x| < a. \end{cases}$$

e supponiamo che, come nei casi precedenti, su di esso incidano delle particelle di fissata energia provenienti da $x = -\infty$.

In meccanica classica distinguiamo due casi: le particelle con energia $E < V_0$ giunte nella posizione $x = -a$ invertono il moto, mentre quelle con energia $E > V_0$ rallentano nel tratto compreso tra $-a$ e a , assumendo poi di nuovo la velocità iniziale.

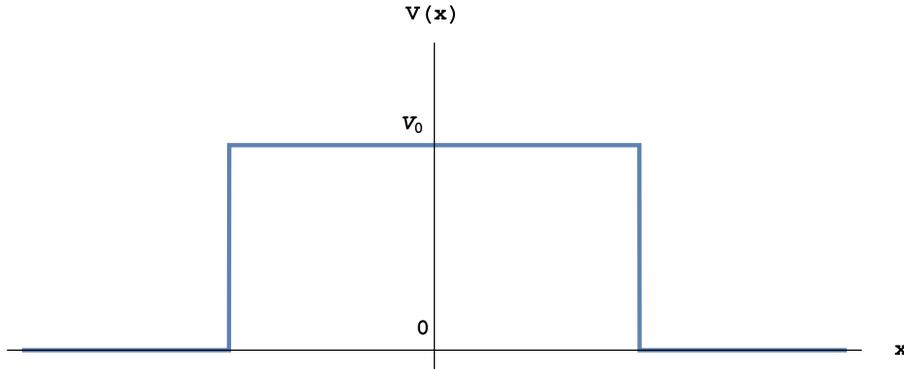


Figura 2.6: Barriera di potenziale.

Anche in meccanica quantistica dobbiamo distinguere gli stessi casi (dato che l'equazione di Schrödinger ha differenti soluzioni), ma troveremo comportamenti completamente diversi.

Caso $E > V_0$

Osserviamo che, dato che nelle tre regioni dell'asse x l'energia è maggiore del potenziale, possiamo utilizzare i risultati già visti per la buca di potenziale nella situazione analoga, cioè per $E > 0$. È sufficiente, a tal fine, effettuare la sostituzione $V_0 \rightarrow -V_0$, cioè $k' = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \rightarrow k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$. Con questa sostituzione abbiamo immediatamente i coefficienti R e T relativi alle correnti di riflessione e trasmissione. Sostanzialmente non abbiamo risultati nuovi e lo spettro dell'energia si presenta continuo e doppiamente degenere.

Caso $0 < E < V_0$

Questo caso è più interessante, perché introduce un fenomeno nuovo rispetto alla Meccanica Classica. Consideriamo, infatti, la soluzione dell'equazione di Schrödinger corrispondente ad una particella proveniente da sinistra

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & \text{per } x < -a; \\ Ae^{\chi x} + Be^{-\chi x}, & \text{per } |x| < a; \\ Te^{ikx}, & \text{per } x > a. \end{cases}$$

Questa soluzione è la stessa trovata per la buca (2.15), salvo le sostituzioni $V_0 \rightarrow -V_0$ e $ik' \rightarrow \chi$ (con $\chi = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ reale e positivo). Quest'ultima sostituzione è necessaria dato che nella regione $|x| < a$ l'equazione ha soluzioni con esponenti reali. Possiamo, quindi, effettuare le suddette sostituzioni direttamente sui risultati. In particolare il coefficiente di trasmissione T è dato da

$$T = e^{-2ika} \frac{2k(-i\chi)}{2k(-i\chi) \cos 2(-i\chi)a - i((-i\chi)^2 + k^2) \sin 2(-i\chi)a}$$

e, tenendo conto delle relazioni

$$\cos ix = \cosh x \quad \text{e} \quad \sin ix = i \sinh x,$$

otteniamo

$$T = e^{-2ika} \frac{2k\chi}{2k\chi \cosh 2\chi a - i(k^2 - \chi^2) \sinh 2\chi a}.$$

La densità di corrente di probabilità al di là della barriera è data dal prodotto di $\frac{\hbar k}{m}$ per il modulo quadro di T , che è pari a

$$\begin{aligned} |T|^2 &= \frac{(2k\chi)^2}{4k^2\chi^2 \cosh^2 2\chi a + (k^2 - \chi^2)^2 \sinh^2 2\chi a} \\ &= \frac{(2k\chi)^2}{4k^2\chi^2(1 + \sinh^2 2\chi a) + (k^2 - \chi^2)^2 \sinh^2 2\chi a} \\ &= \frac{(2k\chi)^2}{(k^2 + \chi^2)^2 \sinh^2 2\chi a + (2k\chi)^2} \end{aligned}$$

Questa espressione, che rappresenta anche il rapporto tra la densità di corrente trasmessa e quella incidente sulla barriera (che è pari a $\frac{\hbar k}{m}$), è sicuramente positiva e ci dice che in meccanica quantistica, contrariamente alla soluzione classica, si presenta sempre una probabilità di attraversamento di una barriera di potenziale. Questo fenomeno viene detto effetto **Tunnel** ed è all'origine di importanti applicazioni.

Al fine di determinare un'espressione nel caso di potenziali più realistici (non risolvibili esattamente), notiamo che quando il termine χa è grande, possiamo approssimare l'espressione precedente con

$$|T|^2 \simeq \frac{(4k\chi)^2}{(k^2 + \chi^2)^2} e^{-4\chi a}. \quad (2.23)$$

Prendendo il logaritmo naturale abbiamo

$$\ln |T|^2 \simeq -4\chi a + 2 \ln \frac{(4k\chi)}{(k^2 + \chi^2)} \simeq -4\chi a,$$

supponendo di essere in una situazione in cui il termine logaritmico possa essere trascurato. Possiamo approssimare una barriera di potenziale continua con una sequenza di barriere qua-

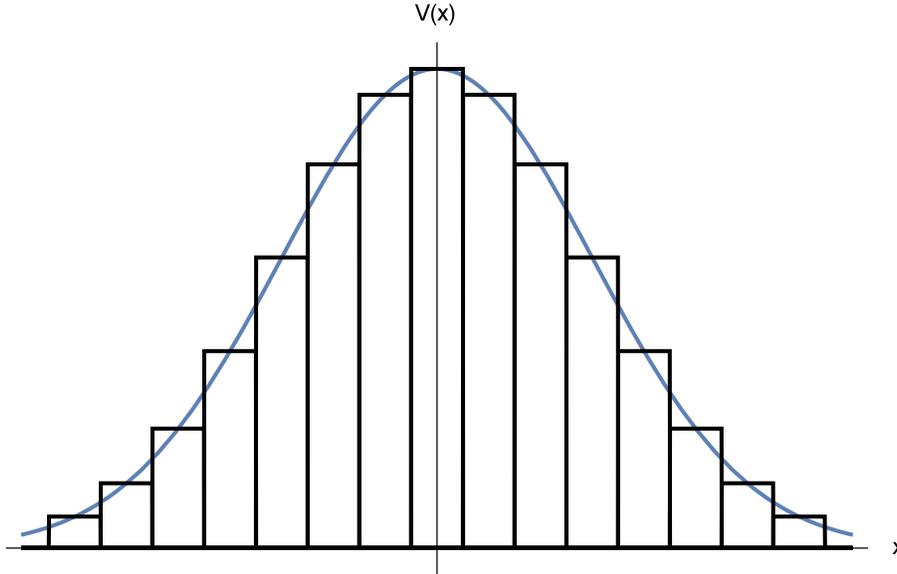


Figura 2.7: Discretizzazione di una barriera di potenziale.

drate. Ad ogni i -sima barriera la densità di corrente trasmessa viene smorzata di un fattore $|T_i|^2$ per cui

$$|T|^2 \simeq |T_1|^2 \cdot |T_2|^2 \cdot |T_3|^2 \cdot \dots \simeq \prod_i |T_i|^2$$

Per il logaritmo si ha

$$\ln |T|^2 \simeq \sum_i \ln |T_i|^2 = \sum_i \ln e^{-2\chi \cdot 2a} = \sum_i (-2\chi \cdot \Delta x_i)$$

dove Δx_i è la larghezza della i -sima barriera. Nel limite $\Delta x_i \rightarrow 0$:

$$\ln |T|^2 \simeq -2 \int dx \chi = -2 \int dx \sqrt{\frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2}}$$

dove l'integrale è esteso alla regione in cui $V(x) > E$ e la radice nell'integrando è reale. Alcune approssimazioni fatte non sono completamente giustificate: ad esempio la (2.23), ottenuta per χ grande, non è valida nella regione di inversione del moto classico dove $\chi = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$ va a 0. Inoltre $V(x)$ deve essere lentamente variabile, altrimenti l'approssimazione della somma con un integrale è valida solo per $\Delta x = 2a$ tanto piccoli da pregiudicare ancora una volta l'approssimazione (2.23). Tuttavia, questa stessa espressione può essere trovata con il metodo WKB, che sarà studiato in seguito, e che consente un maggiore controllo delle approssimazioni di calcolo.

Capitolo 3

Proprietà generali dell'Equazione di Schrödinger in una dimensione

In questo capitolo forniremo gli strumenti matematici che consentono di individuare, a partire dalle proprietà del potenziale, il comportamento generale delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger. Risulterà evidente che larga parte di tale comportamento è prevedibile in base allo studio dei potenziali quadrati.

Bibliografia: il testo di riferimento per questa parte è il cap. III, parte II, par. 8-14 del Messiah vol. I [3].

3.1 Teorema del Wronskiano

Alla base di molte delle proprietà che discuteremo vi è il teorema del Wronskiano insieme ad alcuni suoi corollari. Per semplificare la notazione, consideriamo l'equazione

$$y''(x) + [\epsilon - U(x)]y(x) = 0 \quad (3.1)$$

che si ottiene dall'equazione di Schrödinger ponendo

$$\epsilon = k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{e} \quad U(x) = \frac{2mV(x)}{\hbar^2}. \quad (3.2)$$

Supporremo che $U(x)$ sia limitato inferiormente e che abbia al più discontinuità di I specie.

Il Wronskiano di due funzioni $y_1(x)$ e $y_2(x)$ è definito come

$$W(y_1, y_2) = y_1 y_2' - y_1' y_2 = y_1 y_2 \left(\frac{y_2'}{y_2} - \frac{y_1'}{y_1} \right) = y_1 y_2 \frac{d}{dx} \ln \left(\frac{y_2}{y_1} \right) \quad (3.3)$$

Il Wronskiano è una funzione di x e dalla (3.3) si ricava che

- se $W(\bar{x}) = 0$, y_1 e y_2 hanno la stessa derivata logaritmica in \bar{x} ;
- se $W(x) = 0 \forall x$, y_1 e y_2 sono multiple una dell'altra.

Teorema del Wronskiano

Siano z_1 e z_2 due soluzioni delle equazioni

$$z_1'' + F_1(x) z_1 = 0 \quad (3.4)$$

$$z_2'' + F_2(x) z_2 = 0 \quad (3.5)$$

Dato un intervallo (a, b) in cui $F_1(x)$ e $F_2(x)$ sono continue o hanno al più discontinuità di I specie, la variazione del Wronskiano nell'intervallo (a, b) è data da

$$W(z_1, z_2) \Big|_a^b = \int_a^b dx [F_1(x) - F_2(x)] z_1(x) z_2(x) \quad (3.6)$$

Dimostrazione

Moltiplicando la 3.4 per z_2 , la 3.5 per z_1 e sottraendo membro a membro otteniamo

$$(z_2 z_1'' - z_1 z_2'') + (F_1(x) - F_2(x))z_1 z_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad -\frac{dW}{dx} + (F_1(x) - F_2(x))z_1 z_2 = 0$$

e integrando sull'intervallo (a, b) si ottiene il risultato cercato.

C.V.D

Da questo teorema derivano alcuni corollari. I primi due sono di dimostrazione immediata.

Corollario I

Dette y_1 e y_2 due soluzioni dell'equazione (3.1) corrispondenti agli autovalori ϵ_1 e ϵ_2 , si ha, per ogni intervallo (a, b) compreso nel dominio di definizione delle soluzioni:

$$W(y_1, y_2)|_a^b = (\epsilon_1 - \epsilon_2) \int_a^b dx y_1(x) y_2(x) \quad (3.7)$$

Corollario II

Dette y e z due soluzioni dell'equazione (3.1) corrispondenti allo stesso autovalore ϵ , il Wronskiano è costante:

$$W(y, z) = \text{costante} \quad (3.8)$$

Corollario III

Detta $y(x; \epsilon)$ la soluzione dell'equazione (3.1) la cui derivata logaritmica $f(x; \epsilon)$ ha un valore fissato f_a in $x = a$. Considerata come funzione di ϵ , $f(x; \epsilon)$ è una funzione monotona, crescente se $x < a$ e decrescente se $x > a$ e la sua derivata vale

$$\frac{\partial f(x; \epsilon)}{\partial \epsilon} = -\frac{1}{y^2(x; \epsilon)} \int_a^x dt y^2(t; \epsilon) \quad (3.9)$$

Dimostrazione

Notiamo che, per ogni ϵ fissato, la soluzione dell'equazione (3.1) è completamente determinata se si conoscono i valori della funzione e della sua derivata prima in un punto $x = a$. Sia $y(x; \epsilon)$ questa funzione:

$$y(a; \epsilon) = y_a \quad y'(a; \epsilon) = y'_a$$

Facciamo ora *variare ϵ mantenendo invariate queste condizioni*. A una variazione $\delta\epsilon$ di ϵ corrisponderà una variazione δy di y . Per il corollario I, trascurando infinitesimi superiori al primo:

$$W(y, y + \delta y)|_a^x = -\delta\epsilon \int_a^x dt y^2(t). \quad (3.10)$$

Notiamo ora che, per l'ipotesi fatta sulle soluzioni:

$$W(y, y + \delta y)|_a = 0$$

mentre per ogni altro valore di x :

$$W(y, y + \delta y)|_x = y(y + \delta y)' - y'(y + \delta y) = y\delta y' - y'\delta y = y^2 \delta\left(\frac{y'}{y}\right) = y^2 \delta f.$$

Della (3.10) si ottiene

$$y^2 \delta f = -\delta\epsilon \int_a^x dt y^2(t)$$

e quindi la tesi (3.9), assieme alle conseguenti proprietà di monotonia in ϵ della f .

C.V.D

Possiamo notare che dalla (3.9) deriva che f , come funzione di ϵ , ha un comportamento simile alla tangente o alla cotangente, con un asintoto verticale, in ogni punto in cui la y si annulla (vedi figura 3.1). Notiamo, infine, che il corollario III si può applicare anche per $a = -\infty$ (in questo caso ogni punto al finito $x > a = -\infty$ e, pertanto, $f(x; \epsilon)$ è funzione decrescente di ϵ e per $a = +\infty$ (in questo caso ogni punto al finito $x < a = +\infty$ e, pertanto, $f(x; \epsilon)$ è funzione crescente di ϵ).

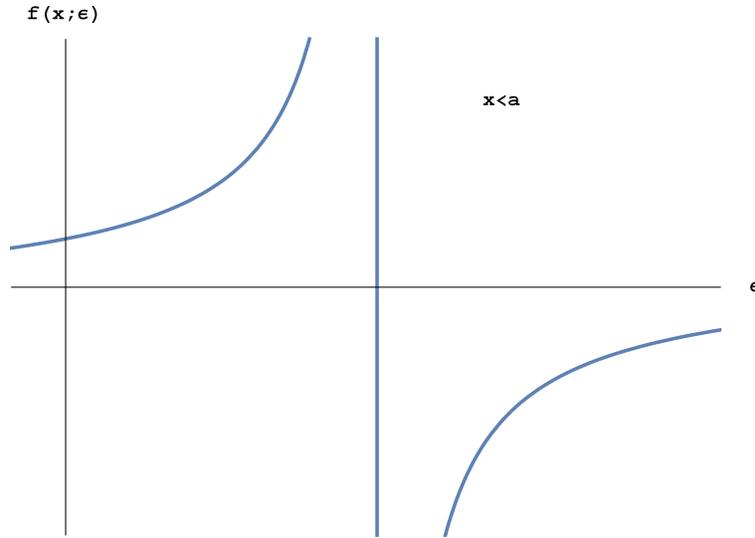


Figura 3.1: Comportamento della derivata logaritmica negli zeri della funzione.

3.2 Comportamento asintotico delle soluzioni

Per i potenziali quadrati, il comportamento delle soluzioni dell'equazione (3.1) è molto diverso a seconda del segno di $E - V$, cioè di $\epsilon - U$: se esso è positivo le soluzioni reali sono funzioni oscillanti, combinazioni di onde piane, altrimenti abbiamo combinazioni di esponenziali con esponenti reali. In quest'ultimo caso, se la regione di appartenenza delle soluzioni si estende all'infinito, dobbiamo eliminare una delle soluzioni perchè non accettabile fisicamente.

Una situazione analoga si presenta anche nel caso di potenziali che sono funzioni continue di x , quando si studia l'andamento asintotico delle soluzioni.

Consideriamo solo il limite $x \rightarrow +\infty$, dato che nel limite opposto si ritrova un analogo comportamento. Facciamo l'ipotesi che, in questo limite, $\epsilon - U$ mantenga un segno costante a partire da un certo punto x_0 . Si distinguono due casi a seconda del segno.

Caso I: $\exists x_0$ tale che $\forall x > x_0 : \epsilon > U(x)$.

Nell'ipotesi che

$$U_+ = \lim_{x \rightarrow +\infty} U(x) \quad \text{sia finito,}$$

detto $k = \sqrt{\epsilon - U_+}$, reale per ipotesi, si dimostra che

1. le soluzioni reali dell'equazione (3.1) restano limitate e oscillanti tra due valori opposti;
2. se $U(x)$ tende U_+ più rapidamente di $\frac{1}{x}$, si verifica il seguente comportamento asintotico:

$$y(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} A_+ \sin(kx + \phi_+) \tag{3.11}$$

dove A_+ e ϕ_+ sono due costanti.

Caso II: $\exists x_0$ tale che $\forall x > x_0 : \epsilon < U(x)$.

Definiamo sempre

$$U_+ = \lim_{x \rightarrow +\infty} U(x),$$

ma questa volta non ha importanza che U_+ sia finito; supponiamo semplicemente che

$$U(x) - \epsilon \geq M^2 > 0 \quad \forall x > x_0.$$

Si dimostra che, nel limite $x \rightarrow \infty$,

1. esiste una sola soluzione particolare dell'equazione (3.1) che tende a 0 almeno come e^{-Mx} ;
2. tutte le altre soluzioni divergono almeno come e^{Mx} .

Le dimostrazioni riguardanti queste proprietà sono riportate nel par. 9 del cap. III, Messiah vol. I [3].

3.3 Natura dello spettro degli autovalori

Definiamo

$$U_+ = \lim_{x \rightarrow +\infty} U(x) \quad \text{e} \quad U_- = \lim_{x \rightarrow -\infty} U(x)$$

che possono essere finiti o $+\infty$.

U_+ e U_- dividono il dominio di ϵ in tre regioni nelle quali lo spettro ha proprietà differenti. Supponiamo ad esempio che sia $U_+ < U_-$, in modo che le tre regioni si presentano come in figura 3.2.

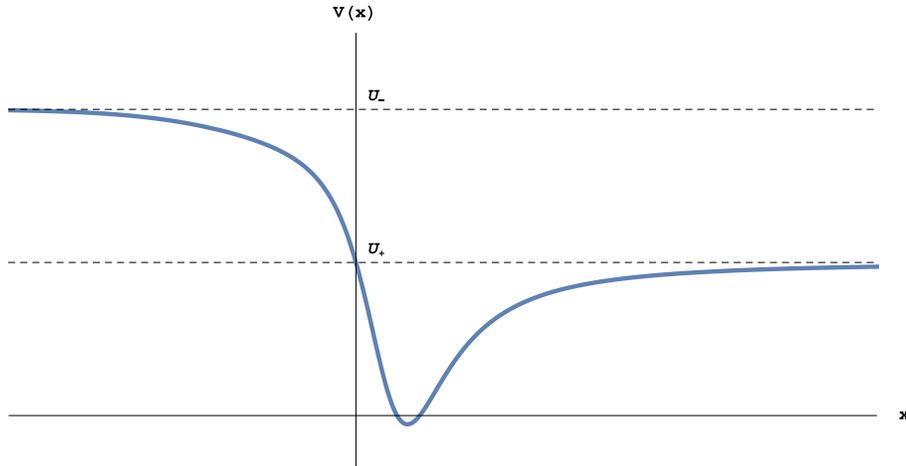


Figura 3.2: Le tre regioni dello spettro di ϵ

Regione I: $U_+ < U_- < \epsilon$. Sicuramente in entrambi i limiti $x \rightarrow \pm\infty : \epsilon > U(x)$. Tutte le soluzioni restano limitate e oscillanti in entrambi i limiti, quindi sono accettabili come soluzioni fisiche. Pertanto ϵ è autovalore 2 volte degenere. Oltre ad essere degenere lo spettro è anche continuo. Gli stati sono non legati, dato che nelle regioni asintotiche le funzioni d'onda non si annullano.

Regione II: $U_+ < \epsilon < U_-$. Nel limite $x \rightarrow -\infty$ risulta $\epsilon - U(x) < 0$, quindi esiste una sola soluzione (esponenzialmente decrescente) in questo limite. Nel limite $x \rightarrow +\infty$ questa soluzione resta limitata e oscillante come tutte le soluzioni, dato che in questo limite risulta $\epsilon > U(x)$. Pertanto lo spettro è continuo e non degenere. Gli stati sono non legati.

Regione III: $\epsilon < U_+ < U_-$. Sia per $x \rightarrow -\infty$ che per $x \rightarrow +\infty$ risulta $\epsilon - U(x) < 0$. In entrambi i limiti esiste una sola soluzione limitata ed accettabile fisicamente. Denotiamo con y_- la soluzione che si annulla per $x \rightarrow -\infty$ e con y_+ la soluzione che si annulla per $x \rightarrow +\infty$ e con f_- e f_+ le loro derivate logaritmiche in un punto x generico. Ovviamente, ϵ sarà autovalore se e soltanto se $y_- = y_+$ e $f_- = f_+$. Applicando il corollario III del teorema del Wronskiano considerando per a i punti all'infinito, nei quali le due soluzioni si annullano, f_- è funzione decrescente di ϵ , mentre f_+ è funzione crescente di ϵ . Pertanto esse possono coincidere solo per valori discreti di ϵ .

Siamo giunti alla conclusione che lo spettro degli autovalori è discreto e non degenera. Il numero degli stati legati può andare da 0 a $+\infty$. Ad esempio, non ci sono autovalori dello spettro discreto se $U(x) > U_+$ per ogni x . Si può vedere che esso è dell'ordine di grandezza di

$$\frac{1}{\pi} \int dx \sqrt{U_+ - U(x)} = \frac{1}{\pi} \int dx \sqrt{\frac{2m(V_+ - V(x))}{\hbar^2}},$$

dove l'integrale è esteso alla regione di realtà della radice quadrata.

3.4 Nodi degli stati legati

Continuiamo a considerare gli stati legati. Una questione meritevole di attenzione è il numero di nodi, cioè gli zeri, delle autofunzioni. Questa quantità rappresenta anche il numero di zeri della distribuzione di probabilità associata e si comprende che, nel caso di molti zeri, tale distribuzione sarà molto meno piccata rispetto ad una distribuzione con pochi zeri. Questo fatto può avere conseguenze fisiche importanti.

Notiamo, prima di tutto, che, essendo l'equazione di Schrödinger stazionaria una equazione differenziale lineare a coefficienti reali, se una certa funzione ne è soluzione, lo devono essere anche la sua parte reale e la sua parte immaginaria. Queste non possono essere linearmente indipendenti nel caso degli autovalori discreti, dato che essi non sono degeneri. Per questo motivo le autofunzioni degli stati legati, con opportuna scelta della fase della costante di normalizzazione, sono reali.

Dimostriamo ora un ulteriore corollario del Teorema del Wronskiano.

Corollario IV

Dette y_1 e y_2 due soluzioni dell'equazione (3.1) corrispondenti agli autovalori ϵ_1 e ϵ_2 , con $\epsilon_1 < \epsilon_2$, y_2 ha almeno uno zero tra due zeri di y_1 .

Dimostrazione

Per y_1 e y_2 vale il corollario I, per cui, per ogni intervallo (a, b) , risulta (3.7):

$$W(y_1, y_2) \Big|_a^b = (\epsilon_1 - \epsilon_2) \int_a^b dx y_1(x) y_2(x) \tag{3.12}$$

Siano a e b due zeri consecutivi di y_1 . Si ottiene:

$$y_1' y_2 \Big|_a^b = (\epsilon_2 - \epsilon_1) \int_a^b dx y_1(x) y_2(x) \tag{3.13}$$

Nell'intervallo $]a, b[$, y_1 ha segno costante, supponiamo sia $y_1 > 0$: questo implica che

$$y_1'(a) > 0 \quad \text{e} \quad y_1'(b) < 0.$$

Ne deriviamo che y_2 deve necessariamente cambiare di segno nell'intervallo $]a, b[$, altrimenti il primo membro della (3.13) avrebbe segno opposto rispetto a y_2 e il secondo membro lo stesso segno. Dimostrazione analoga può essere ripetuta nell'ipotesi $y_1 < 0$.

Come abbiamo visto le autofunzioni degli stati legati si azzerano a $\pm\infty$. Sappiamo, vedi (2.22), che un potenziale unidimensionale, per il quale esiste una regione di energia del tipo che abbiamo chiamato III nel paragrafo precedente, ha almeno uno stato legato. L'autofunzione dello stato fondamentale, cioè dello stato di più bassa energia, non avrà, dunque, zeri al finito, perchè altrimenti ci sarebbe uno stato di energia più bassa, con un nodo in meno. L'autofunzione del primo stato eccitato avrà uno zero al finito, e così via crescendo. Questo risultato è noto come **Teorema di oscillazione** il cui enunciato è il seguente

L'autofunzione corrispondente all'autovalore n-simo ha $n-1$ nodi al finito

dove gli autovalori sono stati numerati in ordine di energia crescente.

3.5 Parità delle autofunzioni

Anticipiamo ora alcune considerazioni sulla *Parità*, argomento sarà sviluppato in seguito, perchè consentono di vedere come le proprietà di invarianza di un sistema fisico (rappresentato dal suo Hamiltoniano) si riflettono sulle proprietà dei suoi stati (rappresentati dalle autofunzioni).

Consideriamo un potenziale funzione pari di x :

$$U(x) = U(-x). \quad (3.14)$$

L'Hamiltoniano \mathcal{H} è invariante per la trasformazione di parità $x \rightarrow -x$, dato che lo è anche l'operatore energia cinetica. Ne consegue che, se $\psi(x)$ è autofunzione di \mathcal{H} corrispondente all'autovalore E ,

$$\mathcal{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (3.15)$$

lo è anche $\psi(-x)$

$$\mathcal{H}\psi(-x) = E\psi(-x). \quad (3.16)$$

Sono anche autofunzioni corrispondenti all'autovalore E le combinazioni

$$\psi_+(x) = \psi(x) + \psi(-x) \quad \text{e} \quad \psi_-(x) = \psi(x) - \psi(-x). \quad (3.17)$$

Notiamo che di queste quattro autofunzioni, $\psi_+(x)$ e $\psi_-(x)$ hanno parità definita e, sicuramente, almeno una di esse non è nulla identicamente. Distinguiamo due casi

E autovalore non degenere Esiste una sola autofunzione linearmente indipendente, quindi le quattro autofunzioni possono essere o una multipla delle altre o identicamente nulle. $\psi_+(x)$ e $\psi_-(x)$ non possono essere multiple una dell'altra, quindi una delle due è identicamente nulla. $\psi(x)$ è multipla della funzione di parità fissata che non è identicamente nulla. Concludiamo che le autofunzioni hanno parità determinata. Inoltre data la simmetria del potenziale i valori asintotici U_- e U_+ coincidono, per cui non esiste Regione II. Pertanto siamo per forza nella Regione III; cioè gli autovalori non degeneri appartengono allo spettro discreto. Ricordando quanto abbiamo detto sui nodi, deve accadere che le autofunzioni pari e dispari hanno, rispettivamente un numero pari e dispari di nodi. Si alternano, pertanto, autofunzioni pari e dispari e l'autofunzione dello stato fondamentale è pari.

E autovalore degenere (doppiamente) Siamo nel caso dello spettro continuo. Supponiamo di partire da una $\psi(x)$ di parità non determinata. Nè $\psi_+(x)$ nè $\psi_-(x)$ sono identicamente nulle e, essendo di parità opposta, sono anche linearmente indipendenti. In questo caso, quindi, è possibile la scelta di due autofunzioni linearmente indipendenti di parità opposta.

Capitolo 4

Oscillatore armonico

Scriviamo il potenziale di un oscillatore armonico unidimensionale nella forma

$$V(q) = \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \quad (4.1)$$

dove q è la coordinata di posizione e ω la pulsazione del moto classico.

Ricordiamo che l'importanza di questo modello deriva dal fatto che esso consente di approssimare un qualsiasi potenziale nell'intorno di una sua posizione q_0 di minimo (punto di equilibrio stabile), cioè tale che $V'(q_0) = 0$ e $V''(q_0) > 0$. Infatti sviluppando in serie in un intorno di q_0 , si ha, trascurando gli ordini superiori al secondo in $q - q_0$,

$$V(q) \simeq V(q_0) + \frac{1}{2} V''(q_0) (q - q_0)^2 \quad (4.2)$$

che coincide con il potenziale armonico previa sottrazione di $V(q_0)$ e introduzione di $\omega = \sqrt{\frac{V''(q_0)}{m}}$.

In meccanica quantistica tutte le proprietà dello spettro dell'Hamiltoniano e delle sue autofunzioni si possono ricavare a partire dal commutatore tra posizione e impulso:

$$[q, p] = i\hbar. \quad (4.3)$$

4.1 Operatori di creazione e distruzione

Introduciamo l'operatore a

$$a = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} [m\omega q + ip] \quad (4.4)$$

e il suo aggiunto a^\dagger

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} [m\omega q - ip] \quad (4.5)$$

Da queste definizioni si ricava

$$a^\dagger a = \frac{1}{2m\hbar\omega} (m^2\omega^2 q^2 + p^2 + im\omega[q, p]) = \frac{1}{\hbar\omega} \left[\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} - \frac{\hbar\omega}{2} \right] = \frac{1}{\hbar\omega} \left[\mathcal{H} - \frac{\hbar\omega}{2} \right] = \widehat{\mathcal{H}} - \frac{1}{2}, \quad (4.6)$$

dove abbiamo introdotto l'operatore

$$\widehat{\mathcal{H}} = \frac{\mathcal{H}}{\hbar\omega}. \quad (4.7)$$

In maniera analoga si dimostra

$$aa^\dagger = \frac{1}{\hbar\omega} \left[\mathcal{H} + \frac{\hbar\omega}{2} \right] = \widehat{\mathcal{H}} + \frac{1}{2}. \quad (4.8)$$

Da queste relazioni otteniamo

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (4.9)$$

Moltiplicando per a , la (4.6) a sinistra e la (4.8) a destra, e sottraendo membro a membro si ottiene

$$[a, \mathcal{H}] = \hbar\omega a \quad \text{o, equivalentemente,} \quad [a, \widehat{\mathcal{H}}] = a. \quad (4.10)$$

In maniera analoga, moltiplicando per a^\dagger , la (4.6) a destra e la (4.8) a sinistra, e sottraendo si ottiene

$$[a^\dagger, \mathcal{H}] = -\hbar\omega a^\dagger \quad \text{o, equivalentemente,} \quad [a^\dagger, \widehat{\mathcal{H}}] = -a^\dagger. \quad (4.11)$$

Sia $|\epsilon\rangle$ autoket di $\widehat{\mathcal{H}}$ relativo all'autovalore ϵ

$$\widehat{\mathcal{H}}|\epsilon\rangle = \epsilon|\epsilon\rangle$$

mostriamo che $a|\epsilon\rangle$ è ancora autoket di $\widehat{\mathcal{H}}$, ma relativo all'autovalore $\epsilon - 1$. Infatti

$$\widehat{\mathcal{H}}a|\epsilon\rangle = (a\widehat{\mathcal{H}} - [a, \widehat{\mathcal{H}}])|\epsilon\rangle = (a\widehat{\mathcal{H}} - a)|\epsilon\rangle = (\epsilon - 1)a|\epsilon\rangle$$

In maniera analoga mostriamo che $a^\dagger|\epsilon\rangle$ è ancora autoket di $\widehat{\mathcal{H}}$, ma relativo all'autovalore $\epsilon + 1$. Infatti

$$\widehat{\mathcal{H}}a^\dagger|\epsilon\rangle = (a^\dagger\widehat{\mathcal{H}} - [a^\dagger, \widehat{\mathcal{H}}])|\epsilon\rangle = (a^\dagger\widehat{\mathcal{H}} + a^\dagger)|\epsilon\rangle = (\epsilon + 1)a^\dagger|\epsilon\rangle.$$

Per questo motivo gli operatori a e a^\dagger , sono detti operatori di abbassamento e di innalzamento, o, anche di distruzione e di creazione.

4.2 Spettro dell'energia

Gli operatori di creazione e distruzione, a partire da un qualsiasi autoket $|\epsilon\rangle$ consentono di costruire una sequenza di autoket di $\widehat{\mathcal{H}}$:

$$\cdots \quad a^2|\epsilon\rangle \quad a|\epsilon\rangle \quad |\epsilon\rangle \quad a^\dagger|\epsilon\rangle \quad (a^\dagger)^2|\epsilon\rangle \quad \cdots \quad (4.12)$$

corrispondenti, rispettivamente, agli autovalori

$$\cdots \quad (\epsilon - 2) \quad (\epsilon - 1) \quad \epsilon \quad (\epsilon + 1) \quad (\epsilon + 2) \quad \cdots \quad (4.13)$$

Proprietà: La sequenza degli autovalori è limitata inferiormente da un autovalore non nullo.

Questo risultato è stato già acquisito parzialmente, dato che abbiamo visto che gli autovalori dell'energia sono non inferiori al minimo del potenziale, che in questo caso è pari a zero. Nel caso dell'oscillatore armonico dimostriamo che l'autovalore dello stato fondamentale di \mathcal{H} , e quindi di $\widehat{\mathcal{H}}$, non può essere nullo. Calcoliamo, a tal fine, il valore di aspettazione dell'Hamiltoniano in un generico stato $|\psi\rangle$:

$$\langle \mathcal{H} \rangle_\psi = \frac{1}{2m} [\langle \psi | p^2 | \psi \rangle + m^2 \omega^2 \langle \psi | q^2 | \psi \rangle] = \frac{1}{2m} [\langle \psi' | \psi' \rangle + m^2 \omega^2 \langle \psi'' | \psi'' \rangle] > 0 \quad (4.14)$$

Questo risulta deriva dal fatto che, definiti $|\psi'\rangle = p|\psi\rangle$ e $|\psi''\rangle = q|\psi\rangle$, la loro norma è sicuramente maggiore o uguale a zero. Tuttavia vale la maggiorazione stretta in quanto altrimenti dovrebbe accadere che

$$|\psi'\rangle = p|\psi\rangle = 0 = |\psi''\rangle = q|\psi\rangle$$

cosa impossibile, poiché in tal caso $|\psi\rangle$ dovrebbe essere autoket comune a p e q .

Ne segue che deve esistere un autoket $|\epsilon_0\rangle$ tale che un'ulteriore applicazione dell'operatore di distruzione genera un ket nullo

$$a|\epsilon_0\rangle = 0 \quad (4.15)$$

Se operiamo su entrambi i membri con l'operatore di creazione, otteniamo

$$a^\dagger a|\epsilon_0\rangle = 0 \quad \longleftrightarrow \quad \left(\widehat{\mathcal{H}} - \frac{1}{2}\right)|\epsilon_0\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \widehat{\mathcal{H}}|\epsilon_0\rangle = \frac{1}{2}|\epsilon_0\rangle, \quad (4.16)$$

cioè l'autovalore più basso di $\widehat{\mathcal{H}}$ è $\epsilon_0 = \frac{1}{2}$.

Ricostruendo a partire da $|\epsilon_0\rangle$ la sequenza degli autoket e degli autovalori mediante applicazione di a^\dagger concludiamo che lo spettro di $\widehat{\mathcal{H}}$ è dato da

$$\epsilon_n = n + \frac{1}{2} \quad \text{con} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.17)$$

e quello di \mathcal{H} da

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (4.18)$$

Proprietà: non esistono altri autovalori di \mathcal{H} oltre a quelli dati dalla (4.18).

Se esistessero altri autovalori e/o autoket, potremmo costruire una nuova sequenza come la (4.12) e, ripetendo il ragionamento già fatto, giungeremmo alla conclusione che deve esistere un altro ket $|\epsilon'_0\rangle$ tale che

$$a|\epsilon'_0\rangle = 0 \quad (4.19)$$

Ripetendo sempre il ragionamento precedente, troveremmo che esso corrisponde all'autovalore $\frac{1}{2}$. Dato, però, che abbiamo dimostrato che lo spettro discreto di un potenziale unidimensionale è non degenere, i due autoket $|\epsilon_0\rangle$ e $|\epsilon'_0\rangle$, e, di conseguenza, le sequenze da esse generate, devono coincidere.

C.V.D

Proprietà: non esiste un limite superiore alla sequenza di autovalori dati dalla (4.18).

Infatti, se ci fosse tale limite, dovrebbe esistere un autoket $|\bar{\epsilon}\rangle$ tale

$$a^\dagger|\bar{\epsilon}\rangle = 0.$$

Applicando a ad ambo i membri, si otterrebbe, utilizzando la (4.8):

$$aa^\dagger|\bar{\epsilon}\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left(\widehat{\mathcal{H}} + \frac{1}{2}\right)|\bar{\epsilon}\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \widehat{\mathcal{H}}|\bar{\epsilon}\rangle = -\frac{1}{2}|\bar{\epsilon}\rangle,$$

cioè a $|\bar{\epsilon}\rangle$ corrisponderebbe un autovalore negativo, cosa non possibile.

C.V.D

Denotiamo con $|n\rangle$ gli autoket normalizzati:

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \quad (4.20)$$

Non possiamo assumere che gli autoket risultanti dall'applicazione degli operatori a e a^\dagger siano anche essi normalizzati. Scriveremo, quindi:

$$a|n\rangle = c_n|n-1\rangle \quad \text{equivalente, nello spazio duale, a} \quad \langle n|a^\dagger = \langle n-1|c_n^*$$

e, moltiplicando scalarmente,

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = |c_n|^2 \langle n-1|n-1\rangle = |c_n|^2$$

Ma, utilizzando la (4.6),

$$|c_n|^2 = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n|\left(\widehat{\mathcal{H}} - \frac{1}{2}\right)|n\rangle = \langle n|\left(n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)|n\rangle = n.$$

Perciò, a meno della solita fase arbitraria, $c_n = \sqrt{n}$ e possiamo riscrivere

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (4.21)$$

In maniera analoga si dimostra

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (4.22)$$

L'operatore $a^\dagger a$ viene anche detto operatore *Numero*:

$$N = a^\dagger a, \quad (4.23)$$

a causa del fatto che

$$N|n\rangle = \left(\widehat{\mathcal{H}} - \frac{1}{2}\right)|n\rangle = n|n\rangle$$

Pertanto l'Hamiltoniano si può anche riscrivere nella forma

$$\mathcal{H} = \widehat{\mathcal{H}} \cdot \hbar\omega = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2}\right)$$

Ovviamente \mathcal{H} e N sono grandezze compatibili

$$[\mathcal{H}, N] = 0 \quad (4.24)$$

Notiamo che, applicando ripetutamente la (4.22), si ottiene:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} (a^\dagger)^2 |n-2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \quad (4.25)$$

che consente di generare un qualsiasi autoket a partire da quello dello stato fondamentale.

4.3 Autofunzioni dell'energia

L'espressione (4.25) per la generazione degli autoket può essere trasferita nella rappresentazione della posizione consentendo così di generare le autofunzioni n -sime a partire da quella dello stato fondamentale:

$$\begin{aligned} \psi_n(q) &= \langle q|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle q|(a^\dagger)^n|0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\right)^n \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle q|(m\omega q - ip)^n|0\rangle \\ \psi_n(q) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\right)^n \left(m\omega q - \hbar \frac{d}{dq}\right)^n \psi_0(q). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Per calcolare le autofunzioni è necessario, quindi, conoscere l'autofunzione dello stato fondamentale. A tal fine, consideriamo l'equazione (4.15) nella rappresentazione delle coordinate:

$$\begin{aligned} a|0\rangle = 0 &\implies \langle q|\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}[m\omega q + ip]|0\rangle = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dq} \right] \psi_0(q) &= 0 \end{aligned} \quad (4.27)$$

Introducendo la variabile

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \quad (4.28)$$

la formula generatrice (4.26) diventa

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \psi_0(\xi), \quad (4.29)$$

mentre l'equazione (4.27) si semplifica in

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_0(\xi) = 0 \quad (4.30)$$

la cui soluzione regolare all'infinito è

$$\psi_0(\xi) = A_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (4.31)$$

che, riportata in termini della variabile q e normalizzata, dà

$$\psi_0(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2} \quad (4.32)$$

Come si è detto dalla autofunzione dello stato fondamentale possiamo ricavare, tramite la formula generatrice (4.26), tutte le altre autofunzioni:

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar n! 2^{2n}} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dq} \right]^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2} \quad (4.33)$$

o, anche, in termini della variabile ξ ,

$$\psi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar n! 2^{2n}} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (4.34)$$

Nelle espressioni (4.33) e (4.34) vediamo che, a parte il fattore, è presente un operatore che agisce ripetutamente su una funzione gaussiana. L'effetto di questo operatore è di restituire ancora la gaussiana moltiplicata per un polinomio di grado n . Questi polinomi sono detti *polinomi di Hermite* e possono essere generati anche tramite la formula:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \quad (4.35)$$

Riportiamo qui i primi polinomi di Hermite

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1; & H_1(\xi) &= 2\xi; & H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2; & H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12; & H_5(\xi) &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \end{aligned}$$

Notiamo che essi hanno parità $(-1)^n$ e che è verificata la seguente relazione di ortogonalità

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n,m} \quad (4.36)$$

Riportiamo, infine, l'espressione dell'autofunzione n -sima dell'oscillatore armonico in termini dei polinomi di Hermite:

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar n! 2^{2n}} \right)^{\frac{1}{4}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2} \quad (4.37)$$

La parità delle autofunzioni è la stessa del polinomio di Hermite che ne fa parte. Coerentemente con quanto abbiamo visto nello studio dei potenziali pari, vediamo che lo spettro (discreto) è non degenere, lo stato fondamentale ha un'autofunzione pari priva di nodi al finito, mentre per gli stati eccitati si alternano autofunzioni dispari e pari, con numero di nodi crescente con n .

4.4 Stati coerenti

In assenza di potenziale, il pacchetto d'onda gaussiano rappresenta lo stato di una particella nel quale il principio di Heisenberg è soddisfatto al minimo. Anche nel caso di potenziale armonico esistono stati nei quali si realizza la stessa situazione. Questi stati sono gli stati coerenti e sono l'oggetto di questo paragrafo, nel quale saranno dimostrate alcune loro interessanti proprietà. Ad esempio, nella rappresentazione delle coordinate, anche le funzioni d'onda corrispondenti a questi stati sono i pacchetti d'onda gaussiani. La ricerca di stati con la medesima proprietà nel caso di altri sistemi non ha dato risultati. Anche Schrödinger si pose il medesimo obiettivo per l'atomo d'idrogeno, senza conseguirlo.

Dato $z \in \mathcal{C}$, definiamo **stato coerente** lo stato

$$|z\rangle = e^{za^\dagger} |0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n (a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle, \quad (4.38)$$

dove $|0\rangle$ è lo stato fondamentale dell'oscillatore armonico, il quale è esso stesso uno stato coerente per $z = 0$.

Ricordando che $|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$, possiamo riscrivere la precedente definizione nella forma

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (4.39)$$

Dimostriamo ora la seguente

Proprietà: Gli stati coerenti sono autostati dell'operatore a .

Dimostrazione Infatti

$$a|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} a|n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n} |n-1\rangle = z|z\rangle, \quad (4.40)$$

dalla quale si deduce anche che z è l'autovalore corrispondente.

C.V.D

Da questa proprietà consegue che, poiché, comunque si fissi $z \in \mathcal{C}$, si ottiene un autostato di a , l'insieme degli stati coerenti $|z\rangle$ è sicuramente più vasto dell'insieme degli $|n\rangle$, il quale è un insieme numerabile. Pertanto l'insieme $|z\rangle$, i cui elementi sono, tra l'altro, autoket di un operatore non hermitiano, non sono una base dello spazio di Hilbert dell'oscillatore armonico.¹ Da quanto visto non stupisce che valga anche l'altra

Proprietà: Stati coerenti corrispondenti a diversi z non sono ortogonali.

Dimostrazione

Notiamo che il bra corrispondente a $|z\rangle$ è

$$\langle z| = \langle 0|e^{z^*a},$$

soluzione dell'equazione agli autovalori nello spazio duale

$$\langle z|a^\dagger = \langle z|z^*.$$

Consideriamo due stati coerenti $|z_1\rangle$ e $|z_2\rangle$. Il loro prodotto scalare è dato da

$$\langle z_2|z_1\rangle = \langle 0|e^{z_2^*a}e^{z_1a^\dagger}|0\rangle.$$

¹Si può dimostrare che gli $|z\rangle$ costituiscono una base *sovracompleta*, cioè, benché essi non siano linearmente indipendenti, vale la risoluzione dell'identità

$$\mathbb{I} = \int \frac{dx dy}{\pi} |z\rangle\langle z| \text{ con } z = x + iy \text{ e } x, y \in \mathcal{R}.$$

In questo caso possiamo applicare la formula di Baker-Hausdorff

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]},$$

valida in quanto

$$[A, B] = z_2^* [a, a^\dagger] z_1 = z_2^* z_1 \in \mathcal{C},$$

ottenendo un risultato non nullo

$$\langle z_2 | z_1 \rangle = e^{z_2^* z_1} \langle 0 | e^{z_1 a^\dagger} e^{z_2^* a} | 0 \rangle = e^{z_2^* z_1},$$

dato che, evidentemente,

$$e^{z_2^* a^\dagger} | 0 \rangle = | 0 \rangle \text{ e } \langle 0 | e^{z_1 a} = \langle 0 |.$$

C.V.D

Notiamo che, se $z_2 = z_1 = z$, si ottiene

$$\langle z | z \rangle = e^{|z|^2},$$

cioè gli stati coerenti, così come definiti dalla (4.38), non sono normalizzati. Per assicurare la normalizzazione occorre la sostituzione

$$|z\rangle \longrightarrow e^{-\frac{|z|^2}{2}} |z\rangle.$$

Studiamo ora l'evoluzione temporale di uno stato coerente. A tale proposito dimostriamo la seguente

Proprietà: Un oscillatore armonico, il quale nell'istante $t = 0$ è in uno stato coerente, permane in uno stato coerente (non identico) negli istanti successivi.

Dimostrazione

Sia $|z_0\rangle$ lo stato coerente nell'istante iniziale $t = 0$ di un oscillatore armonico di pulsazione ω

$$|\psi(0)\rangle = |z_0\rangle.$$

All'istante successivo t avremo

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} |z_0\rangle = e^{-i\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_0^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\frac{\hbar\omega(n+1/2)t}{\hbar}} |n\rangle = \\ &= e^{-i\frac{\omega t}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z_0 e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} |z_t\rangle, \end{aligned} \quad (4.41)$$

avendo definito $z_t = z_0 e^{-i\omega t}$.

C.V.D

Veniamo ora a quanto è stato preannunciato riguardo al Principio di Indeterminazione.

Proprietà: Lo stato coerente di un oscillatore armonico realizza al minimo il Principio di Heisenberg.

Dimostrazione

Calcoliamo i valori di attesa di posizione e impulso

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_t &= \langle z_t | X | z_t \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \langle z_t | a + a^\dagger | z_t \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} (z_t \langle z_t | z_t \rangle + z_t^* \langle z_t | z_t \rangle) = \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \Re(z_t), \end{aligned} \quad (4.42)$$

$$\langle p \rangle_t = \langle z_t | P | z_t \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{2m\hbar\omega} \langle z_t | a - a^\dagger | z_t \rangle = \sqrt{2m\hbar\omega} \Im(z_t), \quad (4.43)$$

e i valori d'attesa per i loro quadrati

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle_t &= \frac{1}{4} \frac{2\hbar}{m\omega} \langle z_t | a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2 | z_t \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (z_t \langle z_t | a^2 + 1 + 2a^\dagger a + (a^\dagger)^2 | z_t \rangle) = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (z_t^2 + 2z_t z_t^* + (z_t^*)^2 + 1) = \frac{\hbar}{2m\omega} [(z_t + z_t^*)^2 + 1] = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} [2(\Re(z_t))^2 + 1],\end{aligned}\tag{4.44}$$

$$\langle p^2 \rangle_t = \frac{m\hbar\omega}{2} [2(\Im(z_t))^2 + 1].\tag{4.45}$$

Le indeterminazioni di posizione e impulso sono date da

$$(\Delta x)_t^2 = \langle x^2 \rangle_t - \langle x \rangle_t^2 = \frac{\hbar}{2m\omega},\tag{4.46}$$

$$(\Delta p)_t^2 = \langle p^2 \rangle_t - \langle p \rangle_t^2 = \frac{m\hbar\omega}{2},\tag{4.47}$$

dal prodotto delle quali si ottiene il risultato cercato

$$\Delta x_t \Delta p_t = \frac{\hbar}{2}.\tag{4.48}$$

C.V.D

Nel corso della sua evoluzione temporale uno stato coerente soddisfa il teorema di Ehrenfest. Infatti risulta valida la

Proprietà: L'evoluzione dei valori di attesa $\langle x \rangle_t$ e $\langle p \rangle_t$ è quella predetta dalla Meccanica Classica.

Dimostrazione

Ricordiamo che, detto z_0 il numero complesso al quale corrisponde, all'istante $t = 0$, lo stato coerente in esame, al tempo t , (vedi (4.41)) corrisponde al numero complesso

$$z_t = z_0 e^{-i\omega t} = |z_0| e^{i(\lambda - \omega t)},$$

dove abbiamo indicato con λ la fase di z_0 .

Dalle espressioni (4.42) ricaviamo

$$\begin{aligned}\langle x \rangle_t &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \Re(z_t) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |z_0| \cos(\lambda - \omega t), \\ \langle p \rangle_t &= \sqrt{2m\hbar\omega} \Im(z_t) = \sqrt{2m\hbar\omega} |z_0| \sin(\lambda - \omega t),\end{aligned}\tag{4.49}$$

C.V.D

Anche per un potenziale armonico uno stato che soddisfa al minimo la relazione di Heisenberg è un pacchetto d'onda gaussiano:

Proprietà: La funzione d'onda di uno stato coerente è un pacchetto d'onda gaussiano.

Dimostrazione

L'equazione agli autovalori per l'operatore a

$$a|z\rangle = z|z\rangle$$

nella rappresentazione delle coordinate diventa

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right) \psi_z(y) = z \psi_z(y),\tag{4.50}$$

nella quale si è posto

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

L'equazione differenziale (4.50) ha un integrale del tipo

$$\psi(y) = C e^{\alpha y^2 + \beta y},$$

e α e β possono essere determinati sostituendo nell'equazione stessa:

$$\alpha = -\frac{1}{2}, \quad \beta = \sqrt{2} z.$$

Questa soluzione può essere riscritta, separando z nelle sue parti reale e immaginaria e definendo la costante $C' = C e^{\Re(z)^2}$, nella forma

$$\begin{aligned} \psi(y) &= C e^{-\frac{1}{2} y^2 + \sqrt{2} z y} = C' e^{-\frac{1}{2} [y^2 - 2\sqrt{2} \Re(z)y + 2(\Re(z))^2] + i\sqrt{2} \Im(z)y} = \\ &= C' e^{-\frac{1}{2} [y - \sqrt{2} \Re(z)]^2} e^{+i\sqrt{2} \Im(z)y}. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Ripristinando la coordinata x si ottiene:

$$\psi(x) = C' e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} [x - \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \Re(z)]^2} e^{+i\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \Im(z)x}.$$

Ricordando, infine, che

$$\langle x \rangle_0 = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \Re(z) \quad \text{e} \quad \langle p \rangle_0 = \sqrt{2m\hbar\omega} \Im(z),$$

possiamo riscrivere la funzione d'onda dello stato coerente $|z\rangle$ nella forma

$$\psi(x) = C' e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} (x - \langle x \rangle_0)^2} e^{+i \frac{\langle p \rangle_0 x}{\hbar}},$$

che rappresenta un pacchetto d'onda gaussiano centrato in $\langle x \rangle_0$ che si propaga con impulso $\langle p \rangle_0$.

C.V.D

Si può anche vedere che il pacchetto d'onda mantiene la sua forma, mentre $\langle x \rangle_t$ e $\langle p \rangle_t$ seguono il moto classico. Infatti, come si è già visto (4.46), le dispersioni per posizione e impulso, al contrario di quanto avviene nel caso della particella libera, non dipendono dal tempo.

Capitolo 5

Potenziali periodici in una dimensione

Bibliografia: questo capitolo ripercorre essenzialmente la trattazione di Flügge [4].

5.1 Autofunzioni e autovalori dell'hamiltoniano: proprietà generali

Diremo che $V(x)$ è un potenziale periodico di passo a se esso verifica la relazione

$$V(x + na) = V(x) \quad \text{per } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (5.1)$$

In questo caso l'equazione di Schrödinger è invariante per trasformazioni

$$x \rightarrow x + na,$$

per traslazioni, cioè, di multipli interi di a .

Siano $u_1(x)$ e $u_2(x)$ due soluzioni linearmente indipendenti dell'equazione di Schrödinger. Per l'invarianza, anche

$$u_1(x + a) \quad \text{e} \quad u_2(x + a)$$

sono soluzioni. Deve risultare quindi:

$$u_1(x + a) = c_{1,1} u_1(x) + c_{1,2} u_2(x) \quad (5.2)$$

$$u_2(x + a) = c_{2,1} u_1(x) + c_{2,2} u_2(x). \quad (5.3)$$

5.1.1 Teorema di Floquet e Teorema di Bloch

Dimostriamo ora il seguente **Teorema di Floquet**. Esso afferma:

Tra le soluzioni dell'equazione di Schrödinger ne esistono due, ψ_1 e ψ_2 che godono della proprietà

$$\psi(x + a) = \lambda \psi(x) \quad (5.4)$$

dove λ è una costante.

Per tali soluzioni dovrà anche risultare

$$\psi(x + na) = \lambda^n \psi(x) \quad \text{per } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (5.5)$$

Se ψ è soluzione, è possibile scriverla nella forma

$$\psi(x) = A u_1(x) + B u_2(x).$$

Dalla (5.2)

$$\psi(x+a) = A u_1(x+a) + B u_2(x+a) = (A c_{1,1} + B c_{2,1}) u_1(x) + (A c_{1,2} + B c_{2,2}) u_2(x).$$

La ψ verifica la proprietà (5.4) se

$$\begin{aligned} A c_{1,1} + B c_{2,1} &= \lambda A \\ A c_{1,2} + B c_{2,2} &= \lambda B \end{aligned}$$

che costituisce un sistema lineare omogeneo di due equazioni nelle incognite A e B ed ha soluzioni diverse da quella banale se e solo se

$$\begin{vmatrix} c_{1,1} - \lambda & c_{2,1} \\ c_{1,2} & c_{2,2} - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Questa è un'equazione quadratica in λ , le cui soluzioni λ_1 e λ_2 permettono di determinare effettivamente due soluzioni ψ_1 e ψ_2 aventi la proprietà richiesta.

Dimostrato, dunque, il teorema vediamo cosa si può dire su λ_1 e λ_2 . Notiamo, prima di tutto, che il Wronskiano di ψ_1 e ψ_2

$$W(x) = \psi_1 \psi_2' - \psi_1' \psi_2$$

soddisfa la relazione

$$W(x+a) = \lambda_1 \lambda_2 W(x).$$

Ma il Wronskiano di due autofunzioni corrispondenti allo stesso autovalore è costante (par. 3.1), quindi

$$\lambda_1 \lambda_2 = 1.$$

Le funzioni ψ_1 e ψ_2 saranno accettabili se e soltanto se $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$. Infatti se accadesse che $|\lambda_k| > 1$, l'ampiezza della ψ_k crescerebbe oltre ogni limite per $x \rightarrow +\infty$, mentre, se fosse $|\lambda_k| < 1$, la stessa cosa accadrebbe per $x \rightarrow -\infty$. Pertanto possiamo scrivere

$$\lambda_1 = e^{ika} \quad , \quad \lambda_2 = e^{-ika}$$

dove k è un numero reale.¹ Poiché le λ_i sono funzioni periodiche di k possiamo limitarci a considerare i valori di k tali che

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$

sufficienti a determinare tutte le autofunzioni possibili. Per tutte le autofunzioni limitate si avrà quindi (5.5):

$$\psi(x+na) = e^{in ka} \psi(x) \quad \text{per } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Questa espressione mostra che le proprietà di invarianza del potenziale per traslazioni di una lunghezza pari al passo a , si riflettono sulla funzione d'onda in modo tale che, spostandoci di un numero intero di passi, essa è modificata di un semplice fattore di fase. In questo moto le osservabili fisiche non sono influenzate dalla traslazione, cioè la misura di una qualsiasi di esse non consente di dire se ci troviamo in x o in $x+na$.

Se scriviamo la $\psi(x)$ nella forma

$$\psi(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

¹Notiamo che la relazione $\lambda_1 \lambda_2 = 1$ può essere ricavata anche dal fatto che λ_1 e λ_2 hanno modulo 1 e pertanto sono della forma $e^{i\alpha}$, ma, dato che sono soluzioni di un'equazione di II grado se esiste la soluzione $e^{i\alpha}$, vi deve essere anche la soluzione complessa coniugata $e^{-i\alpha}$.

la $u_k(x)$ deve essere una funzione periodica di x con passo a :

$$u_k(x+a) = u_k(x).$$

Questo risultato è noto come **Teorema di Bloch**. Esso mostra la presenza di soluzioni che si presentano come onde piane, le soluzioni per particelle libere, modificate da un'ampiezza che riflette le proprietà di periodicità del potenziale.

Sul piano più formale questi risultati sono le conseguenze del fatto che siamo in presenza di un Hamiltoniano che, a causa della proprietà d'invarianza del potenziale, commuta con l'operatore D_a delle traslazioni di passo a definito da

$$D_a \psi(x) = \psi(x+a).$$

Come sappiamo, il generatore delle traslazioni è l'impulso; per questo $D_a = e^{i\frac{a p}{\hbar}} = e^{i\frac{a}{\hbar} \frac{d}{dx}}$. Le funzioni di Bloch non sono altro che le autofunzioni comuni ad H e D_a corrispondenti rispettivamente agli autovalori E e $e^{ik a}$.

5.1.2 Spettro dell'hamiltoniano

Quanto abbiamo visto consente di costruire una procedura per ottenere le funzioni di Bloch. Fissato un valore dell'energia, si scelgono in maniera qualsiasi due autofunzioni linearmente indipendenti $u_1(x)$ e $u_2(x)$ nell'intervallo $0 \leq x \leq a$ e, successivamente, si cerca una funzione $\psi(x)$ che soddisfi le proprietà derivanti dai teoremi di Floquet e di Bloch

$$\psi(x) = A u_1(x) + B u_2(x).$$

Nell'intervallo $a \leq x \leq 2a$, la $\psi(x)$ sarà data da:

$$\psi(x) = e^{ik a} [A u_1(x-a) + B u_2(x-a)].$$

In $x = a$ le due espressioni per $\psi(x)$ e le loro derivate prime devono coincidere

$$\begin{aligned} A u_1(a) + B u_2(a) &= e^{ik a} A u_1(0) + B u_2(0) \\ A u_1'(a) + B u_2'(a) &= e^{ik a} A u_1'(0) + B u_2'(0). \end{aligned}$$

Abbiamo ottenuto ancora una volta un sistema lineare omogeneo nelle incognite A e B che ha soluzioni diverse da quella banale se e solo se il determinante dei coefficienti si annulla, cioè

$$\begin{vmatrix} u_1(a) - e^{ik a} u_1(0) & u_2(a) - e^{ik a} u_2(0) \\ u_1'(a) - e^{ik a} u_1'(0) & u_2'(a) - e^{ik a} u_2'(0) \end{vmatrix} = 0$$

Tenendo conto della costanza del Wronskiano di $u_1(x)$ e $u_2(x)$, otteniamo la relazione

$$\cos ka = \frac{[u_1(0) u_2'(a) + u_1(a) u_2'(0)] - [u_2(0) u_1'(a) + u_2(a) u_1'(0)]}{2(u_1 u_2' - u_2 u_1')}.$$

Questa relazione consente di determinare i possibili valori di k soltanto se il secondo membro non è maggiore di 1:

$$\left| \frac{[u_1(0) u_2'(a) + u_1(a) u_2'(0)] - [u_2(0) u_1'(a) + u_2(a) u_1'(0)]}{2(u_1 u_2' - u_2 u_1')} \right| \leq 1.$$

Al variare con continuità dell'energia, questa condizione per l'esistenza di autofunzioni limitate può essere verificata in certi intervalli e non verificata in altri. Questo dà origine ad uno **spettro a bande**. I limiti delle bande si ottengono quando $\cos ka = \pm 1$.

Si può verificare facilmente che questo risultato non dipende dalla scelta di $u_1(x)$ e $u_2(x)$. Basta sostituire a $u_1(x)$ e $u_2(x)$

$$u_1(x) = c_{1,1} v_1(x) + c_{1,2} v_2(x) \quad \text{e} \quad u_2(x) = c_{2,1} v_1(x) + c_{2,2} v_2(x)$$

dove $v_1(x)$ e $v_2(x)$ sono altre due soluzioni linearmente indipendenti; si perviene alla stessa relazione per $\cos ka$.

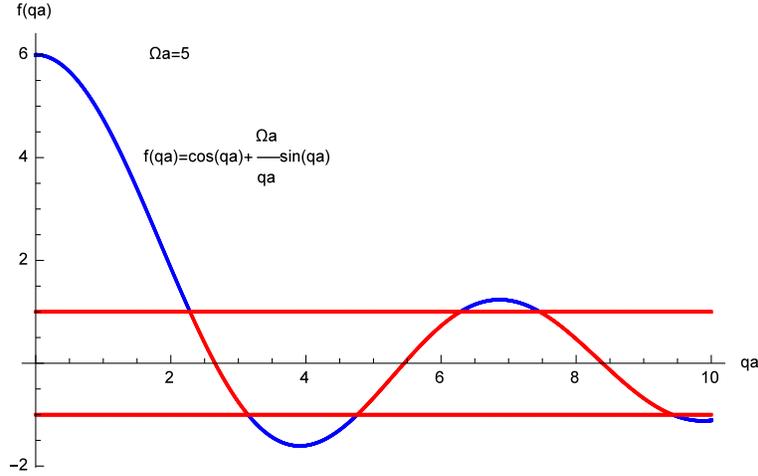


Figura 5.1: Soluzione grafica della disequazione (5.7) per $\Omega a = 5$.

5.2 Il pettine di Dirac

Il più semplice potenziale periodico che si possa considerare è il cosiddetto Pettine di Dirac:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x + na),$$

una sequenza infinita di delta di Dirac posizionate nei punti $x = na$ con n intero relativo o nullo. In ciascuno degli intervalli $]na, (n+1)a[$ la particella è libera, quindi possiamo considerare, fissato l'autovalore E dell'energia, come soluzioni fondamentali le onde piane:

$$u_1(x) = e^{iqx} \quad e \quad u_2(x) = e^{-iqx}, \quad \text{dove} \quad q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Cerchiamo ora le soluzioni limitate di Floquet, cioè tali che, se

$$\psi(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx} \quad \text{nell'intervallo} \quad 0 < x < a,$$

risulti anche

$$\psi(x) = e^{ika} \psi(x - a) = e^{ika} [Ae^{iq(x-a)} + Be^{-iq(x-a)}] \quad \text{nell'intervallo} \quad a < x < 2a.$$

Imponiamo ora la continuità della soluzione e, dato che sulla frontiera è posizionata una δ di Dirac, la discontinuità della sua derivata prima:

$$\begin{aligned} \psi(a^+) &= \psi(a^-) \\ \psi'(a^+) &= \psi'(a^-) + 2\Omega \psi(a). \end{aligned}$$

Sostituendo abbiamo il sistema

$$\begin{aligned} e^{ika}(A + B) &= Ae^{iqa} + Be^{-iqa} \\ iq e^{ika}(A - B) &= iq(Ae^{iqa} - Be^{-iqa}) + 2\Omega(Ae^{iqa} + Be^{-iqa}), \end{aligned}$$

cioè

$$\begin{aligned} (e^{ika} - e^{iqa})A + (e^{ika} - e^{-iqa})B &= 0 \\ \left[e^{ika} - e^{iqa} \left(1 - 2i \frac{\Omega}{q}\right) \right] A - \left[e^{ika} - e^{-iqa} \left(1 + 2i \frac{\Omega}{q}\right) \right] B &= 0. \end{aligned}$$

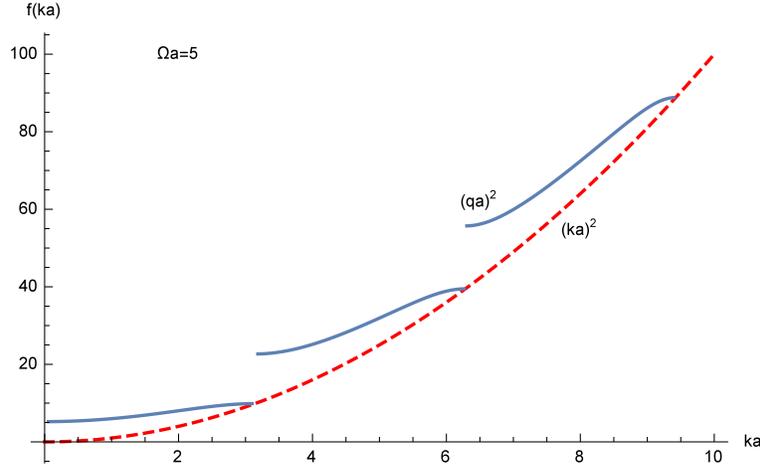


Figura 5.2: L'andamento dell'energia in funzione di qa confrontato con il caso della particella libera ($\Omega a = 5$).

Si tratta di un sistema omogeneo, per cui occorre imporre la condizione

$$\begin{vmatrix} e^{ika} - e^{iqa} & e^{ika} - e^{-iqa} \\ e^{ika} - e^{iqa}(1 - 2i\frac{\Omega}{q}) & e^{ika} - e^{-iqa}(1 + 2i\frac{\Omega}{q}) \end{vmatrix} = 0,$$

dalla quale con brevi passaggi otteniamo

$$\cos ka = \cos qa + \frac{\Omega}{q} \sin qa. \quad (5.6)$$

Le bande degli autovalori dell'energia sono, perciò, definite dalla condizione

$$\left| \cos qa + \frac{\Omega}{q} \sin qa \right| \leq 1 \quad (5.7)$$

Una volta trovati i valori di q che soddisfano la disequazione (5.7), in corrispondenza di ciascuno di essi è possibile determinare dall'equazione (5.6) il valore di k che caratterizza le funzioni di Bloch. L'energia del livello è data da:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} q^2.$$

Dalla figura 5.1 si nota che le bande proibite sono più ampie per piccoli valori di q e tendono ad annullarsi nel limite $q \rightarrow \infty$. Riportiamo in figura 5.2 q^2 , in pratica l'energia, in funzione di k , confrontata con la parabola k^2 , che si avrebbe se le autofunzioni fossero le onde piane, cioè se il moto fosse libero e q coincidesse con k . Le due curve coincidono nei punti $k = \frac{n\pi}{a}$, cioè al limite superiore di ciascuna banda.

Vediamo ora l'influenza del valore del parametro Ω , l'opacità, sullo spettro. Se esso tende a zero, l'equazione (5.6) comporta che $k \rightarrow q$, cioè il reticolo cristallino diventa trasparente, le bande proibite sempre più piccole fino ad annullarsi. Se invece $\Omega \rightarrow \infty$, la funzione a secondo membro della (5.6) assume valori sempre più grandi e soddisfa la condizione (5.7) per intervalli sempre più limitati di q . Le bande permesse degenerano nello spettro discreto che corrisponde alla situazione in cui in ogni segmento di passo a c'è una buca con pareti impenetrabili.

5.3 Il modello di Kronig-Penney

Il modello di Kronig-Penney consiste di una sequenza infinita di barriere rettangolari con altezza del potenziale V_0 , larghezza b e separate da una distanza $a - b$, in modo che a costituisce il passo del reticolo.

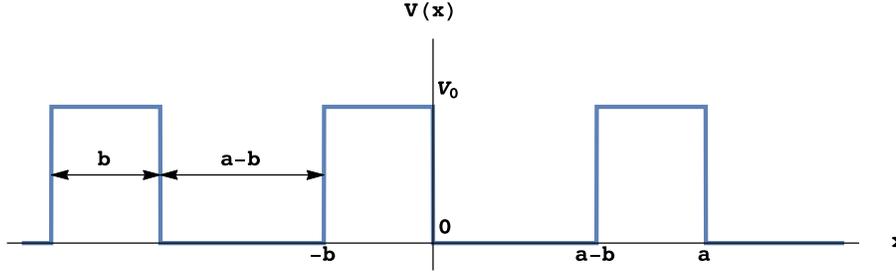


Figura 5.3: Il modello di Kronig e Penney

Per risolvere il modello utilizzeremo un metodo leggermente diverso da quello usato nel caso del Pettine di Dirac.

Nel corso della dimostrazione del Teorema di Floquet abbiamo visto che

$$\lambda_1 = e^{ika} \quad \text{e} \quad \lambda_2 = e^{-ika}$$

sono gli autovalori della matrice

$$\begin{pmatrix} c_{1,1} & c_{2,1} \\ c_{1,2} & c_{2,2} \end{pmatrix}$$

che permette di scrivere le funzioni d'onda cercate in termini di due qualsivoglia soluzioni linearmente indipendenti dell'equazione di Schrödinger. Risolvendo l'equazione agli autovalori troviamo:

$$\lambda_{1,2} = \frac{c_{1,1} + c_{2,2}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{c_{1,1} + c_{2,2}}{2}\right)^2 + c_{1,2}c_{2,1} - c_{1,1}c_{2,2}}.$$

Questo risultato, combinato con l'espressione per λ_1 e λ_2 , comporta

$$c_{1,1} + c_{2,2} = \lambda_1 + \lambda_2 = 2 \cos ka. \quad (5.8)$$

Costruiamo ora due soluzioni linearmente indipendenti $u_1(x)$ e $u_2(x)$ per il potenziale in oggetto, corrispondenti ad autovalori $E < V_0$. Introduciamo le grandezze

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Una soluzione è data da

$$\begin{aligned} u_1(x) &= e^{\alpha x} && \text{per } -b < x < 0 \\ u_1(x) &= \cos \beta x + \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta x && \text{per } 0 < x < a - b, \end{aligned}$$

dove i coefficienti risultano dall'aver posto uguale a 1 quello di u_1 e dall'aver imposto la continuità della funzione e della sua derivata in $x = 0$.

In modo del tutto analogo possiamo determinare una soluzione indipendente u_2 data da

$$\begin{aligned} u_2(x) &= e^{-\alpha x} && \text{per } -b < x < 0 \\ u_2(x) &= \cos \beta x - \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta x && \text{per } 0 < x < a - b. \end{aligned}$$

Spostandoci nella regione occupata dalla successiva barriera, tra $a - b$ e a , dobbiamo avere:

$$\begin{aligned} u_1(x) &= c_{1,1}e^{\alpha(x-a)} + c_{1,2}e^{-\alpha(x-a)} && \text{per } a - b < x < a \\ u_2(x) &= c_{2,1}e^{\alpha(x-a)} + c_{2,2}e^{-\alpha(x-a)} && \text{per } a - b < x < a. \end{aligned}$$

Nel punto $x = a - b$ le funzioni e le derivate prime devono coincidere per entrambe le funzioni $u_1(x)$ e $u_2(x)$. Questo porta al sistema:

$$\begin{aligned} \cos \beta(a - b) + \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta(a - b) &= c_{1,1} e^{-\alpha b} + c_{1,2} e^{\alpha b} \\ \cos \beta(a - b) - \frac{\alpha}{\beta} \sin \beta(a - b) &= c_{2,1} e^{-\alpha b} + c_{2,2} e^{\alpha b} \\ -\beta \sin \beta(a - b) + \alpha \cos \beta(a - b) &= \alpha(c_{1,1} e^{-\alpha b} - c_{1,2} e^{\alpha b}) \\ -\beta \sin \beta(a - b) - \alpha \cos \beta(a - b) &= \alpha(c_{2,1} e^{-\alpha b} - c_{2,2} e^{\alpha b}) \end{aligned}$$

dal quale è possibile determinare i coefficienti $c_{i,k}$. Ricaviamo $c_{1,1}$ dalla prima e terza equazione e $c_{2,2}$ dalla seconda e quarta equazione:

$$\begin{aligned} c_{1,1} &= e^{\alpha b} \left[\cos \beta(a - b) + \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sin \beta(a - b) \right] \\ c_{2,2} &= e^{-\alpha b} \left[\cos \beta(a - b) - \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sin \beta(a - b) \right]. \end{aligned}$$

Infine, utilizzando la relazione (5.8) otteniamo:

$$\cos ka = \frac{c_{1,1} + c_{2,2}}{2} = \cosh \alpha b \cos \beta(a - b) + \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sinh \alpha b \sin \beta(a - b). \quad (5.9)$$

Come nel caso del Pettine di Dirac, questa relazione consente di determinare k solo quando il secondo membro è compreso tra -1 e 1 , dando così origine allo spettro a bande.

Capitolo 6

Momento angolare

Bibliografia: Nardulli ([1]), Messiah ([3]), Shankar ([5]).

6.1 Il Momento Angolare come generatore delle rotazioni

Abbiamo visto che l'impulso è il generatore delle traslazioni. Ora vedremo che il momento angolare è il generatore delle rotazioni. Consideriamo un vettore \vec{r} sottoposto ad una rotazione

$$\vec{r} \xrightarrow{R} \vec{r}'$$

Le componenti cartesiane di \vec{r} si trasformano secondo la relazione

$$r'_m = R_{mn} r_n$$

dove abbiamo utilizzato la convenzione di somma sugli indici ripetuti.

R è una matrice di rotazione, che, quindi, lascia invariato il modulo del vettore \vec{r} . Pertanto essa è una matrice ortogonale:

$$R^T R = \mathbb{I} \quad \Rightarrow \quad R_{mn}^T R_{nl} = \delta_{ml}.$$

Supponiamo che la rotazione R sia infinitesima:

$$R = \mathbb{I} + \omega \quad \text{dove } \omega \text{ è una matrice infinitesima.}$$

La condizione di ortogonalità per R diventa

$$\begin{aligned} (\mathbb{I} + \omega)_{nm} (\mathbb{I} + \omega)_{nl} &= \delta_{ml} \\ \delta_{ml} + \omega_{lm} + \omega_{ml} + \omega_{nm}\omega_{nl} &= \delta_{ml} \\ \omega_{ml} &= -\omega_{lm} \end{aligned}$$

dove abbiamo trascurato il termine in ω^2 . La matrice ω è antisimmetrica; deve, pertanto, dipendere da solo tre parametri reali e può essere scritta nella forma

$$\omega_{ml} = \epsilon_{mkl} \delta\phi_k$$

Il vettore \vec{r} è variato di una quantità infinitesima $\delta\vec{r}$:

$$\vec{r}' = \vec{r} + \delta\vec{r}$$

che può essere ricavata da:

$$\begin{aligned} r'_m &= (\mathbb{I} + \omega)_{m\ell} r_\ell = r_m + \omega_{m\ell} r_\ell & \Leftrightarrow & \quad (\delta\vec{r})_m = \omega_{m\ell} r_\ell = \epsilon_{mkl} \delta\phi_k r_\ell = (\delta\vec{\phi} \wedge \vec{r})_m \\ & & \Downarrow & \\ & & \delta\vec{r} &= \delta\vec{\phi} \wedge \vec{r} \end{aligned}$$

Per un sistema di particelle, la rotazione trasforma i ket della base delle coordinate tramite una trasformazione $U(\delta\vec{\phi})$:

$$|\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\rangle \xrightarrow{R} |\vec{r}_1 + \delta\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N + \delta\vec{r}_N\rangle = U(\delta\vec{\phi}) |\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\rangle.$$

Poiché U trasforma ket di base in ket di base, essa è una trasformazione unitaria e soddisfa evidentemente la relazione:

$$U^\dagger(\delta\vec{\phi}) = U^{-1}(\delta\vec{\phi}) = U(-\delta\vec{\phi}).$$

Le funzioni d'onda si trasformano nel modo seguente:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \psi \rangle \xrightarrow{R} \psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N + \delta\vec{r}_N) = \\ &= \langle \vec{r}_1 + \delta\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N + \delta\vec{r}_N | \psi \rangle = \\ &= \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | U^\dagger(\delta\vec{\phi}) | \psi \rangle = \\ &= \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | U(-\delta\vec{\phi}) | \psi \rangle = \\ &= \int d\vec{r}'_1, \dots, d\vec{r}'_N \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | U(-\delta\vec{\phi}) | \vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N \rangle \langle \vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N | \psi \rangle = \\ &= U(-\delta\vec{\phi}) \langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N | \psi \rangle = U(-\delta\vec{\phi}) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \end{aligned}$$

dove si è tenuto conto del fatto che U è diagonale nella rappresentazione delle coordinate (dipendendo solo da esse) e abbiamo indicato con lo stesso simbolo U l'operatore espresso in questa base.

La trasformazione della funzione d'onda può essere ottenuta anche tramite lo sviluppo di Taylor:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &\xrightarrow{R} \psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N + \delta\vec{r}_N) = \\ &= \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) + \sum_{a=1}^N \delta\vec{r}_a \cdot \vec{\nabla}_a \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \\ &= \left(1 + \sum_{a=1}^N \delta\vec{r}_a \cdot \vec{\nabla}_a \right) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \\ &= \left(1 + \sum_{a=1}^N (\delta\vec{\phi} \wedge \vec{r}_a) \cdot \vec{\nabla}_a \right) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N). \end{aligned}$$

Confrontando le due espressioni troviamo:

$$\begin{aligned} U(\delta\vec{\phi}) &= 1 - \sum_{a=1}^N (\delta\vec{\phi} \wedge \vec{r}_a) \cdot \vec{\nabla}_a = 1 - \sum_{a=1}^N (\vec{r}_a \wedge \vec{\nabla}_a) \cdot \delta\vec{\phi} = \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \sum_{a=1}^N (\vec{r}_a \wedge p_a) \cdot \delta\vec{\phi} = 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \delta\vec{\phi} \end{aligned}$$

dove

$$\vec{L} = \sum_{a=1}^N (\vec{r}_a \wedge p_a)$$

è il momento angolare totale del sistema. Analogamente a quanto avviene per l'impulso nel caso delle traslazioni, il momento angolare svolge il ruolo di generatore delle rotazioni infinitesime. Se si considerano rotazioni finite, completando e sommando lo sviluppo di Taylor si ottiene

$$U(\vec{\phi}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{\phi}}.$$

Come sappiamo, in presenza della trasformazione unitaria U , gli operatori si trasformano nel seguente modo:

$$\Omega \xrightarrow{U} \Omega^U = U^\dagger \Omega U = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{\phi}} \Omega e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{\phi}}.$$

Diremo **operatore scalare** un operatore per il quale

$$\Omega^U = \Omega.$$

Devono essere operatori scalari tutti gli operatori corrispondenti a grandezze fisiche scalari. Per essi si ha:

$$[\Omega, U] = 0$$

Nel caso di rotazioni infinitesime deve aversi

$$0 = [\Omega, 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \delta\vec{\phi}] = -\frac{i}{\hbar} [\Omega, \vec{L} \cdot \delta\vec{\phi}]$$

e, per l'arbitrarietà di $\vec{\phi}$,

$$[\Omega, \vec{L}] = 0.$$

Un operatore che corrisponde al modulo di un vettore deve essere anche esso un operatore scalare, ad esempio il modulo quadro del vettore \vec{L} stesso. Avremo quindi

$$[L^2, \vec{L}] = 0.$$

Vediamo, quindi che L^2 commuta con tutte e tre le componenti di \vec{L} , L_x , L_y , L_z . Diremo, invece, **operatore vettoriale** una terna di operatori A_j ($j = 1, 2, 3$) che, sotto rotazioni, si trasformano come le componenti di un vettore

$$A_j \xrightarrow{U} A_j^U = U^\dagger A_j U = R_{j\ell} A_\ell.$$

Un esempio è dato dal vettore posizione \vec{r} di una particella, per il quale avviene

$$r'_j = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \delta\vec{\phi}\right) r_j \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \delta\vec{\phi}\right) = r_j + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot [\vec{L}, r_j],$$

a meno di infinitesimi di ordine superiore a $\delta\vec{\phi}$. Risulta, quindi,

$$\delta r_j = \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot [\vec{L}, r_j].$$

Poiché, però, abbiamo già visto che:

$$\delta r_j = \epsilon_{j k \ell} \delta\phi_k r_\ell,$$

risulta

$$[L_k, r_j] = -i\hbar \epsilon_{j k \ell} r_\ell = i\hbar \epsilon_{k j \ell} r_\ell.$$

La stessa espressione vale per tutti gli operatori vettoriali, quindi anche per \vec{p}

$$[L_k, p_j] = i\hbar \epsilon_{k j \ell} p_\ell$$

e per \vec{L} stesso:

$$[L_k, L_j] = i\hbar \epsilon_{k j \ell} L_\ell, \quad \text{cioè}$$

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y.$$

Consideriamo ora un sistema isolato, o, in generale, un sistema invariante per rotazioni per il quale vale l'isotropia dello spazio. Perchè questo avvenga deve essere invariante per rotazioni la dinamica del sistema stesso, la quale è il risultato dell'hamiltoniano. Ne concludiamo che per questi sistemi \mathcal{H} è un operatore scalare e, quindi,

$$[\mathcal{H}, \vec{L}] = 0.$$

Ricordiamo che un operatore che non dipende dal tempo e commuta con l'hamiltoniano è una grandezza conservata. Abbiamo ottenuto, quindi, la **legge di conservazione del momento angolare**.

6.2 Autofunzioni comuni ad L^2 ed L_z nella base delle coordinate

Come abbiamo appena visto L^2 commuta con le componenti L_x, L_y, L_z , mentre esse non commutano tra di loro e pertanto non sono osservabili compatibili. Possiamo dedurre, quindi, che possiamo determinare un sistema completo di autostati comuni all'operatore L^2 e ad una soltanto delle tre componenti di \vec{L} . Tra le tre componenti scegliamo L_z , sapendo che le proprietà che troveremo non dipenderanno da questa scelta, dato che le direzioni degli assi di un sistema di riferimento sono arbitrarie.

Ora ci porremo nella rappresentazione delle coordinate e cercheremo autovalori e autofunzioni comuni ad L^2 e L_z . Successivamente vedremo che è possibile determinare lo spettro degli autovalori senza adottare una rappresentazione particolare, ma usando metodi operatoriali nello spazio di Hilbert degli stati.

Vedremo che è conveniente utilizzare le coordinate sferiche, in quanto gli operatori L^2 e L_z dipendono soltanto da due di esse.

Il passaggio dalle coordinate cartesiane $\vec{r} \equiv (x, y, z)$ a quelle sferiche $\vec{r} \equiv (r, \theta, \phi)$, è mostrato in figura 6.1. Le coordinate sferiche si ottengono dalle coordinate cartesiane mediante la

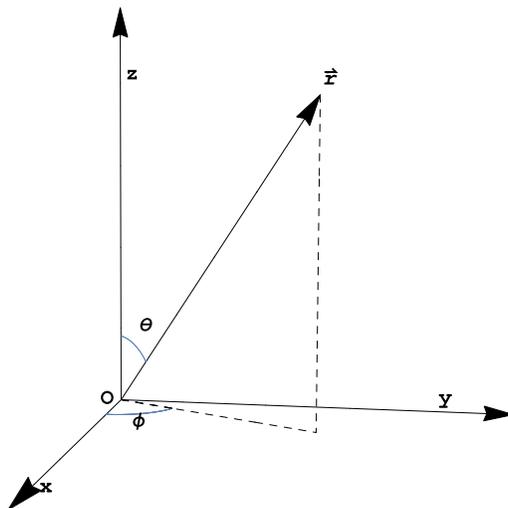


Figura 6.1: Passaggio alle coordinate sferiche.

trasformazione:

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} & r \in [0, +\infty[\\ \phi = \arctan \frac{y}{x} & \phi \in [0, 2\pi] \\ \theta = \arctan \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} & \theta \in [0, \pi] \end{cases} \quad (6.1)$$

mentre la trasformazione inversa è data da

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (6.2)$$

Le componenti di \vec{L} dipendono dalle componenti della posizione e dell'impulso, che in questa base è funzione delle derivate rispetto alle componenti della posizione. Calcoliamo, pertanto, le derivate rispetto alle componenti cartesiane in termini delle coordinate sferiche:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \cos \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \phi \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \sin \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin \phi \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}. \end{cases} \quad (6.3)$$

Le componenti del momento angolare diventano quindi:

$$\begin{cases} L_x = y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\hbar}{i} \left(-\cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ L_y = z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\hbar}{i} \left(-\cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ L_z = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}. \end{cases} \quad (6.4)$$

Quadrando e sommando le relazioni precedenti, troviamo l'espressione per L^2 :

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]. \quad (6.5)$$

Da queste espressioni vediamo che gli operatori L^2 e L_z di momento angolare dipendono soltanto dalle coordinate θ e ϕ . Per questo, dette Y le loro autofunzioni comuni, possiamo scrivere:

$$Y = Y(\theta, \phi).$$

Esse soddisfano le due equazioni agli autovalori

$$\begin{cases} L^2 Y(\theta, \phi) = \hbar^2 \alpha Y(\theta, \phi) \\ L_z Y(\theta, \phi) = \hbar \beta Y(\theta, \phi), \end{cases} \quad (6.6)$$

dove sono state fattorizzate opportune potenze di \hbar , che ha le stesse dimensioni del momento angolare, in modo che i parametri α e β siano adimensionali. Mostriamo ora che l'equazione agli autovalori per L^2 si può risolvere separando le variabili. Poniamo

$$Y(\theta, \phi) = A(\theta) B(\phi). \quad (6.7)$$

L'equazione agli autovalori per L^2

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] A(\theta) B(\phi) = \hbar^2 \alpha A(\theta) B(\phi)$$

diventa

$$\frac{1}{A(\theta)} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial A(\theta)}{\partial \theta} \right) + \alpha \sin^2 \theta + \frac{1}{B(\phi)} \frac{\partial^2 B(\phi)}{\partial \phi^2} = 0.$$

Abbiamo ottenuto due termini che dipendono da variabili diverse e la cui somma deve essere nulla qualsiasi valore tali variabili assumano. Di conseguenza i due termini devono essere uguali a costanti di valore opposto, che indichiamo con λ e $-\lambda$. Otteniamo così le due equazioni

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dA(\theta)}{d\theta} \right) + \left(\alpha - \frac{\lambda}{\sin^2 \theta} \right) A(\theta) = 0 \quad (6.8)$$

$$\frac{d^2 B(\phi)}{d\phi^2} = -\lambda B(\phi) \quad (6.9)$$

Consideriamo prima l'equazione per $B(\phi)$. Essa ammette per integrali funzioni esponenziali:

$$B(\phi) = D e^{\sqrt{-\lambda} \phi}$$

Poichè ϕ è un angolo che varia tra 0 e 2π , $B(\phi)$ deve essere periodica:

$$B(\phi+2\pi) = B(\phi) \quad \Rightarrow \quad e^{\sqrt{-\lambda}(\phi+2\pi)} = e^{\sqrt{-\lambda} \phi} \quad \Rightarrow \quad \sqrt{-\lambda} = i m \quad \text{con } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Risulta, quindi

$$B(\phi) = B_m(\phi) = D e^{i m \phi} \quad \text{con } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Una volta fissata la soluzione per l'equazione (6.9), e, quindi, fissato $\lambda = m^2$, l'equazione (6.8) diventa

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dA_m(\theta)}{d\theta} \right) + \left(\alpha - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) A_m(\theta) = 0. \quad (6.10)$$

Notiamo che, qualsiasi sia $A_m(\theta)$, la funzione $Y_m(\theta, \phi) = A_m(\theta) B_m(\phi)$ è anche autofunzione di L_z . Infatti:

$$L_z Y_m(\theta, \phi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} A_m(\theta) B_m(\phi) = \frac{\hbar}{i} i m A_m(\theta) B_m(\phi) = \hbar m Y_m(\theta, \phi).$$

Abbiamo quindi trovato, con riferimento alle equazioni (6.6), che $Y_m(\theta, \phi)$ è autofunzione comune ad L^2 ed L_z con numero quantico (detto azimutale)

$$\beta = m.$$

Cerchiamo ora la soluzione dell'equazione (6.10) per $A_m(\theta)$ ad m fissato. Effettuando il seguente cambiamento di variabile

$$\cos \theta = x \quad \Rightarrow \quad \sin \theta = \sqrt{1-x^2} \quad \text{e} \quad \frac{d}{d\theta} = -\sin \theta \frac{d}{dx}$$

l'equazione (6.10) diventa:

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dA_m(x)}{dx} \right] + \left(\alpha - \frac{m^2}{1-x^2} \right) A_m(x) = 0.$$

Ponendo $\alpha = \ell(\ell+1)$ e derivando il primo termine si ottiene:

$$(1-x^2) \frac{d^2 A_{\ell m}(x)}{dx^2} - 2x \frac{dA_{\ell m}(x)}{dx} + \left(\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) A_{\ell m}(x) = 0, \quad (6.11)$$

dove abbiamo etichettato la funzione A anche con il numero quantico ℓ relativo all'operatore L^2 .

Consideriamo ora il caso $m = 0$:

$$(1 - x^2) \frac{d^2 A_{\ell 0}(x)}{dx^2} - 2x \frac{dA_{\ell 0}(x)}{dx} + \ell(\ell + 1)A_{\ell 0}(x) = 0. \quad (6.12)$$

Questa equazione è nota come **equazione di Legendre**. I suoi coefficienti, posto uguale a 1 il coefficiente della derivata di ordine massimo, presentano singolarità nei punti $x = \pm 1$, corrispondenti a $\theta = 0, \pi$, singolarità dovute alla trasformazione, che non è biunivoca, da coordinate cartesiane a coordinate sferiche. Come è noto (Teorema di Fuchs), anche le soluzioni possono presentare gli stessi punti di singolarità dell'equazione e questo accade a meno che non sia ℓ intero non negativo. In questo caso le soluzioni sono i **polinomi di Legendre**, che possono essere generati tramite la formula di Rodriguez

$$P_\ell(x) = (-1)^\ell \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (1 - x^2)^\ell \quad (6.13)$$

e nei quali ℓ rappresenta il grado del polinomio. Quindi per $m = 0$ abbiamo trovato che gli autovalori di L^2 hanno la forma

$$\alpha \hbar^2 = \ell(\ell + 1)\hbar^2 \quad \text{con} \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Vediamo ora cosa succede nei casi $m \neq 0$. Ponendo

$$A_{\ell m}(x) = (1 - x^2)^{\frac{|m|}{2}} F(x)$$

troviamo che la funzione $F(x)$ deve soddisfare l'equazione

$$(1 - x^2) \frac{d^2 F(x)}{dx^2} - 2x(|m| + 1) \frac{dF(x)}{dx} + [\ell(\ell + 1) - |m|(|m| + 1)] F(x) = 0.$$

Deriviamo rispetto a x l'equazione. Otteniamo

$$(1 - x^2) \frac{d^3 F(x)}{dx^3} - 2x(|m| + 2) \frac{d^2 F(x)}{dx^2} + [\ell(\ell + 1) - (|m| + 1)(|m| + 2)] \frac{dF(x)}{dx} = 0.$$

Vediamo che, se $F^{|m|}(x)$ è soluzione relativa al valore $|m|$, allora $\frac{dF(x)}{dx}$ è soluzione relativa al valore $|m| + 1$. Iterando successivamente questa proprietà troviamo, schematicamente:

$$F^{|m|+1}(x) \propto \frac{dF^{|m|}(x)}{dx} \propto \frac{d^{|m|+1} F^0(x)}{dx^{|m|+1}} = \frac{d^{|m|+1} P_\ell(x)}{dx^{|m|+1}}$$

Le soluzioni così costruite a partire dai Polinomi di Legendre ne conservano le proprietà di regolarità nell'intervallo $[-1, +1]$. Le soluzioni per $A_{\ell m}(x)$, tenendo conto della relazione con $F(x)$, sono le funzioni

$$P_{\ell, m}(x) = (-1)^m (1 - x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|} P_\ell(x)}{dx^{|m|}} \quad (6.14)$$

che sono dette **Funzioni associate di Legendre**. Riepilogando e tornando alle variabili θ e ϕ , abbiamo trovato le autofunzioni comuni agli operatori L^2 e L_z corrispondenti agli autovalori $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ e $\hbar m$ rispettivamente.

$$Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(l - m)!}{(l + m)!}} P_{\ell, m}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (6.15)$$

dove

$$P_{\ell, m}(\cos \theta) = (-1)^m (\sin \theta)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{d(\cos \theta)^{|m|}} P_\ell(\cos \theta). \quad (6.16)$$

e i Polinomi di Legendre P_ℓ sono dati da

$$P_\ell(\cos \theta) = (-1)^\ell \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d \cos^\ell \theta} (\sin^2 \theta)^\ell.$$

Queste autofunzioni sono dette Armoniche sferiche e la costante moltiplicativa presente nella (6.15) è una costante di normalizzazione, con una fase convenzionale, ottenuta imponendo

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d \cos \theta |Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2 = 1 \quad (6.17)$$

Notiamo che nelle espressioni precedenti, non abbiamo posto limiti al valore di m per ℓ fissato. È, tuttavia, chiaro essendo le funzioni associate di Legendre il risultato di una derivazione fatta $|m|$ volte sui polinomi di Legendre, non può essere $m > \ell$. Oltre a motivi matematici, vi sono anche motivi fisici per i quali il valore di m deve essere limitato da ℓ . Infatti non è accettabile una situazione in cui L_z possa assumere qualsiasi valore indipendentemente dal valore di L^2 . La stessa condizione classica

$$L^2 \geq L_z^2$$

deve essere verificata anche in Meccanica Quantistica. Se consideriamo, infatti, un sistema che si trova nello stato $|\ell, m\rangle$, autoket comune ad L^2 e L_z , si verifica

$$\langle \ell, m | L^2 - L_z^2 | \ell, m \rangle = \langle \ell, m | L_x^2 + L_y^2 | \ell, m \rangle \geq 0,$$

dato che L_x^2 e L_y^2 sono quadrati di operatori hermitiani e, quindi, definiti positivi. Ne deriva, tenendo conto del fatto che ℓ e m sono interi,

$$\ell(\ell + 1) \geq m^2 \quad \Rightarrow \quad (\ell + 1)^2 > m^2 \quad \Rightarrow \quad \ell + 1 > |m| \quad \Rightarrow \quad \ell \geq |m|$$

In definitiva, ad ℓ fissato, esistono $(2\ell + 1)$ autofunzioni diverse di L_z corrispondenti ai numeri quantici

$$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell$$

Ogni autovalore di L^2 è, dunque, $(2\ell + 1)$ volte degenere e le equazioni agli autovalori per L^2 e L_z possono essere riscritte, in definitiva, nella forma

$$\begin{cases} L^2 Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell,m}(\theta, \phi) & \text{con } \ell = 0, 1, 2, \dots \\ L_z Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{\ell,m}(\theta, \phi) & \text{con } m = 0, \dots, \pm\ell. \end{cases} \quad (6.18)$$

6.2.1 Proprietà delle Armoniche Sferiche

Per le Armoniche sferiche vale la seguente relazione di ortonormalità:

$$\int d\Omega Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell',m'}(\theta, \phi) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d \cos \theta Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell',m'}(\theta, \phi) = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'} \quad (6.19)$$

Altre proprietà importanti sono la **Relazione di Chiusura**:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell,m}(\theta', \phi') = \delta(\Omega - \Omega') = \frac{\delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi')}{\sin \theta} \quad (6.20)$$

e il **Teorema di Addizione**

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell,m}(\theta', \phi') = \frac{2\ell + 1}{4\pi} P_\ell(\cos \alpha) \quad (6.21)$$

dove α è l'angolo tra la direzione (θ, ϕ) e (θ', ϕ') .

Valgono, inoltre, le seguenti **relazioni di Ricorrenza**:

$$\cos \theta Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = a_{\ell,m} Y_{\ell+1,m}(\theta, \phi) + a_{\ell-1,m} Y_{\ell-1,m}(\theta, \phi) \quad (6.22)$$

dove

$$a_{\ell,m} = \sqrt{\frac{(\ell + 1 + m)(\ell + 1 - m)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}} \quad (6.23)$$

6.2.2 Le prime Armoniche Sferiche

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (6.24)$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (6.25)$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi},$$

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \quad (6.26)$$

$$Y_{3,0} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta), \quad Y_{3,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{3,\pm 2} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{2\pm i\phi}, \quad Y_{3,\pm 3} = \mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi} \quad (6.27)$$

6.3 Autovalori del momento angolare nello spazio dei ket di stato

Risolveremo ora le equazioni agli autovalori per gli operatori di momento angolare prescindendo da una specifica rappresentazione. A questo fine, introduciamo un operatore vettoriale $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z)$ il cui modulo quadro è l'operatore $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$. Supporremo, semplicemente, che questi operatori soddisfino le stesse regole di commutazione degli operatori di momento angolare:

$$[J_k, J_j] = i\hbar \epsilon_{kjl} J_l, \quad \text{per } j = 1, 2, 3$$

$$[J^2, J_j] = 0 \quad \text{per } j = 1, 2, 3$$

Il sistema di osservabili compatibili tra questi operatori è composto da J^2 e da una delle componenti, che scegliamo essere J_z . Scriviamo, perciò:

$$J^2 |\alpha, \beta\rangle = \hbar^2 \alpha |\alpha, \beta\rangle$$

$$J_z |\alpha, \beta\rangle = \hbar \beta |\alpha, \beta\rangle.$$

Introduciamo gli operatori di "creazione" e "distruzione"

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$$

Utilizzando le regole di commutazione per le componenti di \vec{J} ricaviamo

$$[J^2, J_{\pm}] = 0 \quad [J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}. \quad (6.28)$$

Mostriamo ora in che senso J_+ è operatore di creazione:

$$J_z(J_+|\alpha, \beta\rangle) = (J_+J_z + \hbar J_+)|\alpha, \beta\rangle = (J_+\hbar\beta + \hbar J_+)|\alpha, \beta\rangle = \hbar(\beta + 1)J_+|\alpha, \beta\rangle$$

$$J^2(J_+|\alpha, \beta\rangle) = J_+J^2|\alpha, \beta\rangle = \hbar^2\alpha J_+|\alpha, \beta\rangle.$$

In effetti, $J_+|\alpha, \beta\rangle$ è ancora autoket di J^2 corrispondente allo stesso valore di α ed è autoket di J_z corrispondente al valore $\beta + 1$. Deve quindi risultare

$$J_+|\alpha, \beta\rangle = c_+|\alpha, \beta + 1\rangle \quad (6.29)$$

e, analogamente,

$$J_-|\alpha, \beta\rangle = c_-|\alpha, \beta - 1\rangle. \quad (6.30)$$

Fissato un generico autoket $|\alpha, \beta\rangle$, possiamo, tramite l'applicazione di J_+ e J_- , costruire una sequenza di autoket

$$\cdots \quad |\alpha, \beta - 2\rangle \quad |\alpha, \beta - 1\rangle \quad |\alpha, \beta\rangle \quad |\alpha, \beta + 1\rangle \quad |\alpha, \beta + 2\rangle \quad \cdots \quad (6.31)$$

Tuttavia, come abbiamo visto nella sezione precedente, questa sequenza è limitata ai ket per i quali

$$\langle\alpha, \beta|J^2 - J_z^2|\alpha, \beta\rangle = \langle\alpha, \beta|J_x^2 + J_y^2|\alpha, \beta\rangle \geq 0,$$

che comporta:

$$\alpha \geq \beta^2.$$

Deve, pertanto, esistere un ket $|\alpha, \beta_{max}\rangle$ tale che

$$J_+|\alpha, \beta_{max}\rangle = 0.$$

Operando con J_- su ambo i membri di questa relazione, otteniamo

$$\begin{aligned} J_-J_+|\alpha, \beta_{max}\rangle &= (J_x^2 + J_y^2 + \imath J_x J_y - \imath J_y J_x)|\alpha, \beta_{max}\rangle = \\ &= (J^2 - J_z^2 + \imath \hbar J_z)|\alpha, \beta_{max}\rangle = (\alpha \hbar^2 - \beta_{max}^2 \hbar^2 - \beta_{max} \hbar^2)|\alpha, \beta_{max}\rangle = 0. \end{aligned}$$

Cioè

$$\alpha = \beta_{max}(\beta_{max} + 1)$$

In modo del tutto analogo si dimostra che, se si applica l'operatore J_+ alla relazione $J_-|\alpha, \beta_{min}\rangle = 0$, si ottiene

$$\alpha = \beta_{min}(\beta_{min} - 1)$$

Uguagliando i due valori di α trovati, abbiamo

$$\beta_{max}(\beta_{max} + 1) = \beta_{min}(\beta_{min} - 1) \quad \Rightarrow \quad \beta_{min} = -\beta_{max},$$

dato che l'altra soluzione, $\beta_{min} = \beta_{max} + 1$, non soddisfa la relazione $\beta_{min} < \beta_{max}$.

Supponiamo ora che, a partire dallo stato $|\alpha, \beta_{min}\rangle$ occorra operare k volte con l'operatore J_+ per ottenere lo stato $|\alpha, \beta_{max}\rangle$. Avremo:

$$\beta_{max} - \beta_{min} = 2\beta_{max} = k \quad \Rightarrow \quad \beta_{max} = \frac{k}{2} \quad \text{con } k = 0, 1, 2, \dots$$

e, quindi,

$$\alpha = \beta_{max}(\beta_{max} + 1) = \frac{k}{2} \left(\frac{k}{2} + 1 \right) \quad \text{e} \quad \beta = -\frac{k}{2}, -\frac{k}{2} + 1, \dots, \frac{k}{2} - 1, \frac{k}{2}$$

Questi risultati possono essere sintetizzati riscrivendo le equazioni agli autovalori nella forma

$$\begin{aligned} J^2|j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle \quad \text{con} \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ J_z|j, m\rangle &= \hbar m|j, m\rangle \quad \text{con} \quad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Per j intero il risultato per lo spettro è lo stesso di quello ottenuto per il momento angolare orbitale nella rappresentazione delle coordinate. Abbiamo, però, trovato che ora j può assumere anche valori seminteri. Questo ci spinge a chiederci se non esistano altre grandezze fisiche alle quali corrispondono in Meccanica Quantistica operatori che hanno le stesse regole di commutazione di quelli del momento angolare orbitale. Ovviamente questo non è necessario; non è necessario, infatti, che qualsiasi risultato matematico abbia una corrispondenza nella natura. Tuttavia questo risultato, assieme ai risultati di alcuni esperimenti fondamentali, come quello di Stern e Gerlach, apre la strada all'introduzione di una nuova grandezza fisica, che sarà oggetto della prossima sezione.

6.4 Lo Spin

Ricordiamo che l'algebra dei commutatori per gli operatori di momento angolare è stata ricavata a partire dalle proprietà di trasformazione degli stati e delle grandezze fisiche per rotazioni. Nel caso di una rotazione di angolo $\vec{\phi}$ la trasformazione unitaria è data da

$$U(\vec{\phi}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{\phi}},$$

che agisce sulla funzione d'onda:

$$\psi(\vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N) = U(-\vec{\phi})\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{\phi}} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

Possiamo pensare che l'esistenza dei numeri quantici seminteri sia legata alla presenza di un'altra forma di momento angolare non dipendente, come quello orbitale, dalle coordinate che individuano la posizione delle particelle nello spazio. Questo tipo di momento angolare è già presente in fisica classica ed è il momento angolare intrinseco o **spin** \vec{S} .

Possiamo quindi sostituire

$$\vec{L} \quad \longrightarrow \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

dove abbiamo indicato con \vec{J} il momento angolare totale, somma del momento angolare orbitale e dello spin. La trasformazione unitaria diventa

$$U(\vec{\phi}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\phi}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{\phi}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{\phi}}.$$

Per una particella in uno stato di momento angolare nullo in presenza di una rotazione agisce solo la parte di Spin della trasformazione:

$$\psi(\vec{r}) \quad \xrightarrow{R} \quad e^{\frac{i}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{\phi}} \psi(\vec{r}).$$

Cerchiamo di capire come cambia la funzione d'onda a seguito di questa trasformazione nel caso di un'unica particella.

L'equazione agli autovalori per lo spin, che è un operatore di momento angolare, ha la forma

$$\begin{aligned} S^2 |s, \sigma\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |s, \sigma\rangle & \text{con} & \quad s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ S_z |s, \sigma\rangle &= \hbar \sigma |s, \sigma\rangle & \text{con} & \quad \sigma = -s, -s+1, \dots, s-1, s. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Nell'ipotesi che lo spin dipenda esclusivamente da gradi di libertà interna l'operatore di spin commuta con l'operatore posizione \vec{R} che attiene alle coordinate di posizione della particella. Quindi S^2, S_z, \vec{R} sono operatori compatibili e possiamo individuare una base comune ad essi nel prodotto tensoriale delle rispettive basi

$$|x, y, z; s, \sigma\rangle = |x, y, z\rangle \otimes |s, \sigma\rangle.$$

Un elemento importante di carattere sperimentale di cui tener conto è che, data una particella, il suo autovalore di $S^2 = s(s+1)$ è fissato ed immutabile. L'unico suo grado di libertà di spin risiede nell'autovalore di S_z , che, fissato s , può assumere $2s+1$ valori distinti. Per questo, quando consideriamo la funzione d'onda che, nella rappresentazione relativa a questa base, corrisponde ad uno stato $|\psi\rangle$ della particella, possiamo pensare ad essa come un oggetto a $2s+1$ componenti:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \langle x, y, z; s, \sigma | \psi \rangle = \psi_\sigma(x, y, z) \quad \text{con} \quad \sigma = -s, -s+1, \dots, s-1, s,$$

dove, nella funzione d'onda, non abbiamo indicato il valore di s , dato che esso, una volta fissata la particella, è fissato. Così, nel caso di una particella di spin $\mathbf{S} = \mathbf{0}$ esiste soltanto la componente $\sigma = \mathbf{0}$ e non si ha nulla di nuovo rispetto alla trattazione in assenza di spin.

Nel caso in cui una particella abbia spin $\mathbf{S} = \frac{1}{2}$ le componenti sono 2, corrispondenti agli stati con $\sigma = \pm\frac{1}{2}$. La funzione d'onda può essere scritta nella forma:

$$\psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} \psi_{+\frac{1}{2}}(x, y, z) \\ \psi_{-\frac{1}{2}}(x, y, z) \end{pmatrix} \quad (6.34)$$

Limitandoci, infine, al caso di spin $\mathbf{S} = 1$ abbiamo 3 componenti che corrispondono agli stati con $\sigma = 0, \pm 1$ e la funzione d'onda ha la forma:

$$\psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} \psi_{+1}(x, y, z) \\ \psi_0(x, y, z) \\ \psi_{-1}(x, y, z) \end{pmatrix} \quad (6.35)$$

Possiamo quindi dire che lo spin è associato alla **struttura** della funzione d'onda ed è chiaro che,

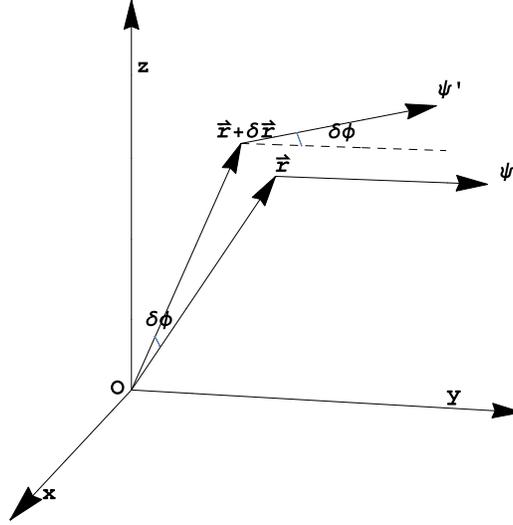


Figura 6.2: Effetto di una rotazione infinitesimale sulla funzione d'onda di una particella vettoriale.

in presenza di rotazioni, mentre la funzione di \vec{L} è di generare una rotazione delle coordinate, lo spin è il generatore delle rotazioni per questa struttura, cioè per i gradi libertà interni. Ad esempio, nel caso di rotazioni infinitesime avremo:

$$\begin{aligned} \psi_\sigma(\vec{r}) \xrightarrow{R} \psi'_\sigma(\vec{r}') &= \langle \vec{r}; \sigma | U(-\delta\vec{\phi}) | \psi \rangle = \int d\vec{r}' \sum_{\sigma'} \langle \vec{r}; \sigma | e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{L} + \vec{S}) \cdot \delta\vec{\phi}} | \vec{r}'; \sigma' \rangle \langle \vec{r}'; \sigma' | \psi \rangle \\ &= \left(e^{\frac{i}{\hbar} \vec{S} \cdot \delta\vec{\phi}} \right)_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}(\vec{r} + \delta\vec{r}). \end{aligned}$$

Nella figura (6.2) mostriamo l'esempio di una rotazione che agisca sulla funzione d'onda di una particella di spin 1, immaginando di aver riportato sugli stessi assi cartesiani sia le componenti della posizione che le componenti della funzione d'onda.

Terminiamo con alcune considerazioni sullo spin.

1. Il fatto che il valore dello spin sia fissato implica anche che, dato un tipo di particella, la struttura della loro funzione d'onda è fissata. Le particelle sono catalogate in base a tale

- struttura: quelle con spin 0 sono dette scalari, quelle con spin $\frac{1}{2}$ spinoriali e quelle con spin 1 vettoriali.
2. È impossibile pensare allo spin come un momento di rotazione intorno ad un asse, come in fisica classica, in quanto le particelle elementari sono prive di estensione spaziale.
 3. Lo spin non ha, in definitiva, una corrispondenza con grandezze della fisica classica. Se intendiamo il limite classico come quello che si ottiene per $\hbar \rightarrow 0$, avviene infatti

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} S^2 = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar^2 s(s+1) = 0.$$

Questo non avviene per il momento angolare orbitale, per il quale possiamo ottenere, in questo limite, qualsiasi valore mandando anche $\ell \rightarrow \infty$.

6.5 Elementi di matrice di \vec{J} nella rappresentazione di J^2 e J_z

Dal calcolo degli elementi di matrice di \vec{J} nella rappresentazione di J^2 e J_z possiamo ricavare dei risultati interessanti. Per effettuare il calcolo occorre preliminarmente calcolare le costanti di normalizzazione c_+ e c_- che compaiono nelle relazioni:

$$J_+|j, m\rangle = c_+|j, m+1\rangle \quad (6.36)$$

$$J_-|j, m\rangle = c_-|j, m-1\rangle. \quad (6.37)$$

Notiamo che la relazione duale della (6.36) si scrive

$$\langle j, m|J_- = c_+^* \langle j, m+1|$$

e, quindi

$$\begin{aligned} \langle j, m|J_-J_+|j, m\rangle &= |c_+|^2 \langle j, m+1|j, m+1\rangle = |c_+|^2 \\ |c_+|^2 &= \langle j, m|J_-J_+|j, m\rangle = \langle j, m|J^2 - J_z^2 - \hbar J_z|j, m\rangle = \\ &= [\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m] \langle j, m|j, m\rangle, \end{aligned}$$

da cui si ricava, se si pone uguale a 0 la fase di c_+ ,

$$c_+ = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \quad (6.38)$$

In modo analogo si ricava:

$$c_- = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)}. \quad (6.39)$$

Le due relazioni (6.36) e (6.37) possono essere, quindi, riscritte nella forma:

$$J_{\pm}|j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle \quad (6.40)$$

Calcoliamo ora gli elementi di matrice delle tre componenti di \vec{J} nella rappresentazione $|j, m\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle j', m'|J_x|j, m\rangle &= \langle j', m'|\frac{J_+ + J_-}{2}|j, m\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'-1} + \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'+1} \right] \end{aligned} \quad (6.41)$$

$$\begin{aligned} \langle j', m'|J_y|j, m\rangle &= \langle j', m'|\frac{J_+ - J_-}{2i}|j, m\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2i} \left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'-1} - \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'+1} \right] \end{aligned} \quad (6.42)$$

$$\langle j', m'|J_z|j, m\rangle = \hbar m \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \quad (6.43)$$

Questi elementi di matrice consentono di ottenere alcuni risultati interessanti relativamente ai valori medi calcolati in un autostato di J^2 e J_z :

1. Il valor medio di J_x e J_y è nullo.
2. È diverso da zero invece il valor medio di J_x^2 e J_y^2 . Infatti:

$$\langle j, m | J_x^2 | j, m \rangle = \sum_{j', m'} \langle j, m | J_x | j', m' \rangle \langle j', m' | J_x | j, m \rangle = \sum_{j', m'} |\langle j', m' | J_x | j, m \rangle|^2 =$$

(tenendo conto del fatto che il termine proporzionale a $\delta_{m, m'-1} \delta_{m, m'+1}$ dà contributo nullo)

$$= \frac{\hbar^2}{4} [(j-m)(j+m+1) + (j+m)(j-m+1)] = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2]$$

Ovviamente calcolando il valor medio di J_y^2 si ottiene lo stesso valore, dato che nel modulo quadro le differenze di segno e la i non contano.

3. Notiamo, infine, che

$$\langle J_x^2 \rangle_{j,m} = \langle J_y^2 \rangle_{j,m} = \frac{1}{2} (\langle J^2 \rangle_{j,m} - \langle J_z^2 \rangle_{j,m});$$

cioè, in media, ciascuna delle componenti x e y acquisisce metà di quanto viene lasciato dalla componente z .

Bibliografia

- [1] G. Nardulli. *Meccanica Quantistica*, volume I e II. Franco Angeli Milano, 2001.
- [2] S. Gasiorowicz. *Quantum Physics*. Wiley New York, 1966.
- [3] A. Messiah. *Mecanique Quantique*, volume I e II. Dunod Paris, 1962.
- [4] S. Flügge. *Practical Quantum Mechanics*, volume I e II. Springer Verlag Berlin, 1971.
- [5] R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press New York, ii edition, 1994.