

# FONDAMENTI DELLA TEORIA QUANTISTICA

- Analisi di un esperimento di interferenza con elettroni;
- Fondamenti della teoria quantistica:
  - \* Principio di corrispondenza;
  - \* Ipotesi di De Broglie;
  - \* Funzione d'onda quantistica significato e proprietà.

## Conclusioni fino alla lezione di oggi

- la nuova teoria (che chiameremo fisica quantistica) deve contenere la fisica classica (principio di corrispondenza)
- esiste una costante universale  $\hbar$
- le grandezze fisiche variano nel discreto
- i sistemi fisici sono descritti (nella formulazione di Schrodinger) da una funzione  $\Psi(\mathbf{r},t)$  a valori complessi che per masse puntiformi a  $v \ll c$  e soggette a forze conservative di potenziale  $V$  è soluzione della equazione
$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t) \Psi(\vec{r},t)$$

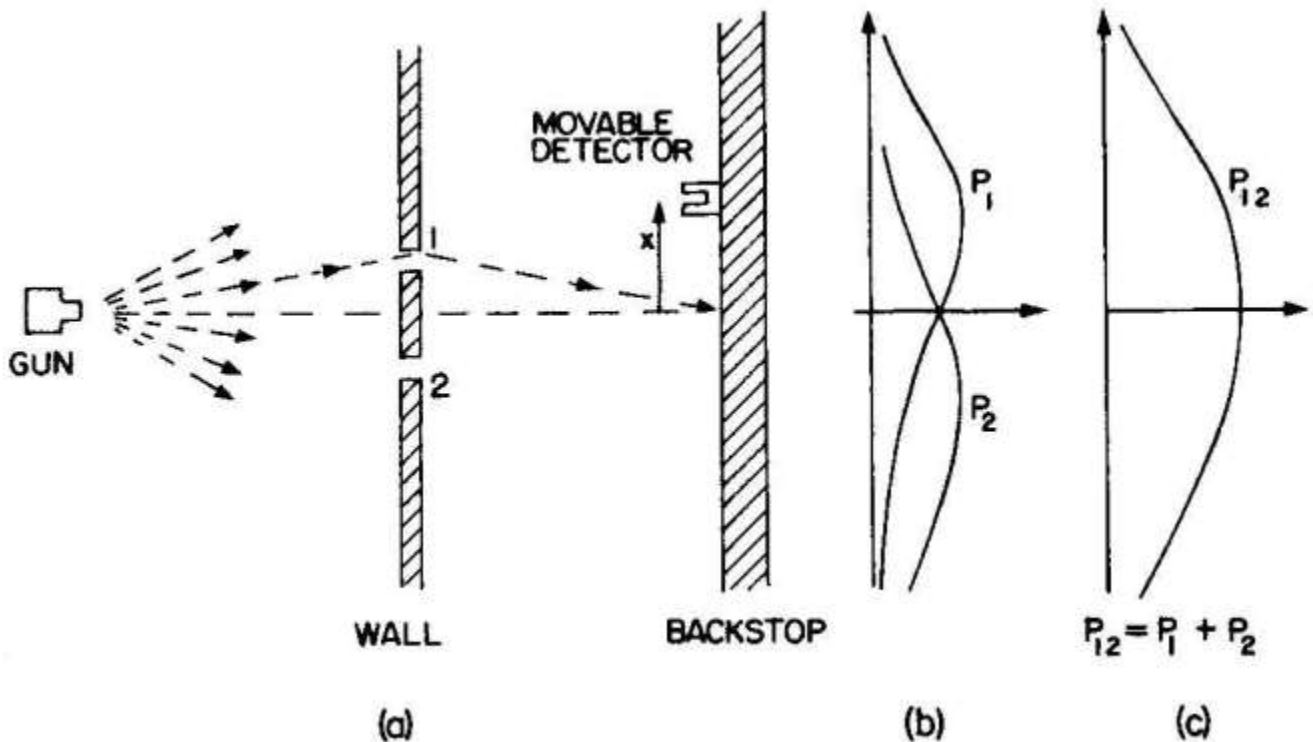
**Dobbiamo adesso:**

1. dedurre il significato della funzione  $\Psi(\vec{r},t)$  (Born, 1927)
2. imparare ad estrarre da  $\Psi(\vec{r},t)$  tutte le informazioni fisiche del sistema (Heisenberg/Dirac 1928-1930)

# ANALISI DI TRE ESPERIMENTI

## (a) Pallottole sparate attraverso due fenditure.

Una pistola spara pallottole con una certa apertura angolare verso due fenditure. Oltre le fenditure si trova uno schermo e un sistema per misurare il numero di pallottole che arriva in ogni punto.



Facciamo l'esperimento

**una prima volta**

tenendo aperta la fenditura (1) e chiusa la (2),

**una seconda volta**

tenendo aperta la fenditura (2) e chiusa la (1).

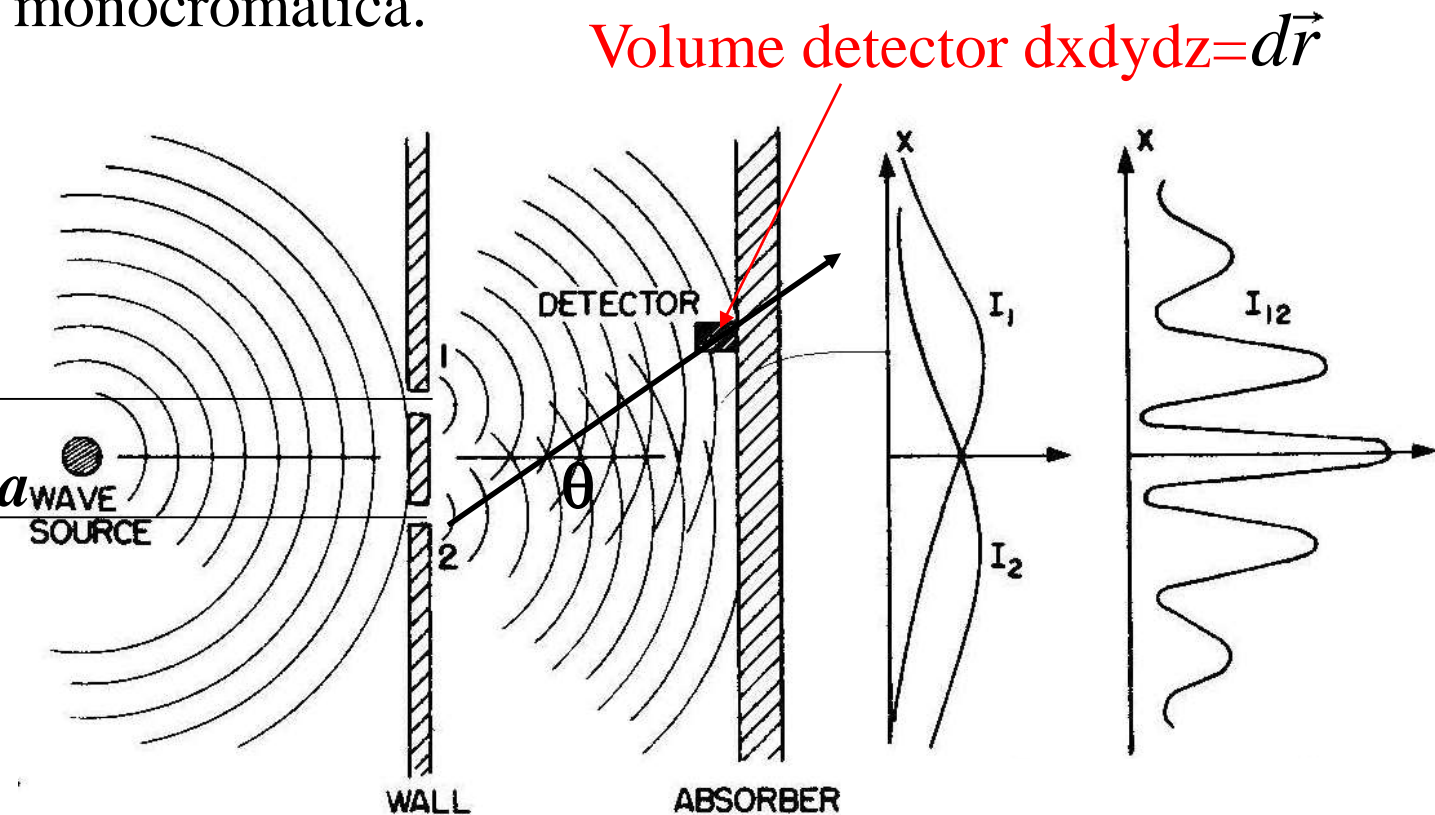
La pistola spara sempre con le stesse caratteristiche. Misuriamo le pallottole che arrivano nei vari punti dello schermo (variabile di posizione  $x$ ) nei due casi e chiamiamo  $P_1(x)$  e  $P_2(x)$  il rapporto tra il numero di pallottole arrivate e quelle sparate;  $P_1(x)$  e  $P_2(x)$  può essere anche letto come la probabilità che una pallottola sparata arrivi sullo schermo nel punto  $x$ .

Se adesso ripetiamo l'esperimento con tutte e due le fenditure aperte e chiamiamo  $P_{12}(x)$  la frazione di pallottola sparate che arriva in  $x$  (leggibile anche come la probabilità che una pallottola sparata arrivi in  $x$ ) sullo schermo dopo essere passata da una qualsiasi delle due fenditure, otteniamo:

$$P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$$

**(b) Onde generate da un sorgente puntiforme fatte passare attraverso due fenditure (esp di Young).**

Ripetiamo lo stesso esperimento di prima ma invece di pallottole mandiamo sulle fenditure onde di lunghezza d'onda  $\lambda$  generate da una sorgente puntiforme monocromatica.



(a)

Se  $E_1 = E_0 e^{i(kx_1 - \omega t)}$ ;  $E_2 = E_0 e^{i(kx_2 - \omega t)}$

sono le due onde coerenti uscenti dalle fenditure.

Quando entrambe le fenditure sono aperte, il campo elettrico sul detector vale :

$$E_R = E_1 + E_2 = E_0 e^{i(kx_1 - \omega t)} + E_0 e^{i(kx_2 - \omega t)}$$

$$E_R = E_1 + E_2 = 2E_0 \cos \left[ \frac{\phi}{2} \right] e^{i(\frac{\phi}{2} - \omega t)}$$

$$E_R = 2E_0 \cos \left[ \frac{\pi}{\lambda} (x_2 - x_1) \right] e^{i(\frac{\phi}{2} - \omega t)}$$

La densità di energia e.m. media in corrispondenza del detector vale

$$I_{12}(Det) \propto \left( 2E_0 \cos \frac{\pi a \sin \theta}{\lambda} \right)^2 = |E_R|^2$$

$$\text{Cioè} \quad I_{12} \propto |E_R|^2 = |E_1 + E_2|^2$$

Se calcoliamo l'energia sul detector (*en.Det*) di volume  $dx dy dz$

$$en.Det = I_{12}(Det) d\vec{r} \propto |E_R|^2 d\vec{r} = |E_1 + E_2|^2 d\vec{r}$$

Rapportiamo adesso l'energia che arriva sul detector (*en.Det*) con quella che viene emessa dalla sorgente (*en.Sorg*)

$$\frac{en.Det}{en.Sorg} = \frac{I_{12}(Det) d\vec{r}}{N_0 h\nu} = \frac{n_f(Det) h\nu}{N_0 h\nu} = \frac{n_f(Det)}{N_0}$$

$$\frac{n_f(Det)}{N_0} \propto |E_R|^2 d\vec{r} = |E_1 + E_2|^2 d\vec{r}$$

$$\frac{n_f(Det)}{N_0} = \begin{array}{l} \text{frazione di fotoni che arriva al detector} \\ \text{rispetto a tutti i fotoni emessi} \end{array}$$

Possiamo anche leggere il rapporto come probabilità che un fotone emesso dalla sorgente arrivi al detector

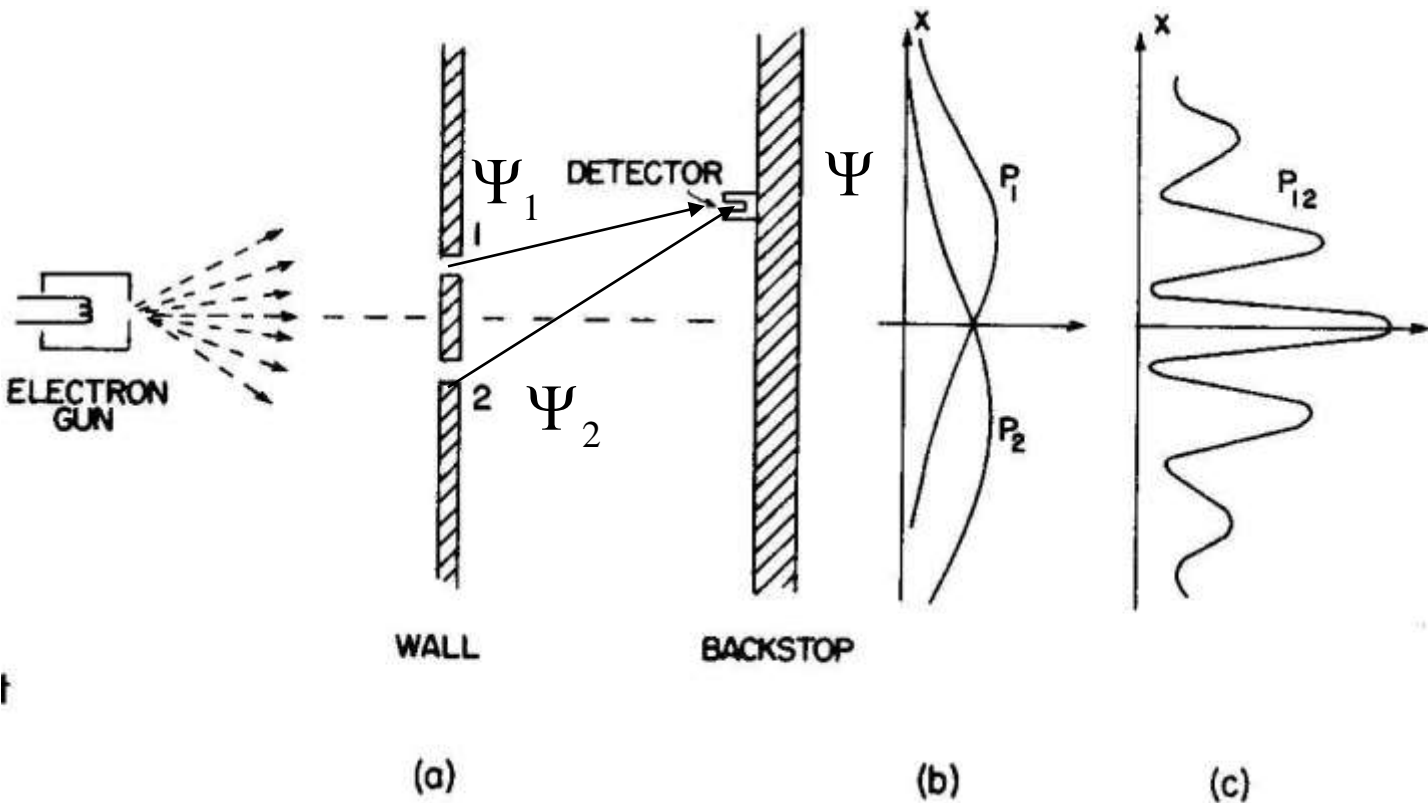
$$\frac{n_f(Det)}{N_0} = \begin{array}{l} \text{frazione di fotoni} \\ \text{che arriva al} \\ \text{detector rispetto} \\ \text{a tutti i fotoni} \\ \text{emessi} \end{array} = \begin{array}{l} \text{leggibile come} \\ \text{probabilità di} \\ \text{arrivo di un} \\ \text{fotone sul} \\ \text{detector} \end{array}$$

Il ragionamento può essere esteso a qualunque punto P dello spazio in cui arrivano le due onde coerenti

$$\frac{n_f(P)}{N_0} \propto |E_R|^2 d\vec{r} = |E_1 + E_2|^2 d\vec{r}$$

(c) Se ripetiamo lo stesso esperimento con elettroni sparati attraverso due fenditure.

Ci aspettiamo di ottenere un risultato analogo al caso delle onde (come con la diffrazione da cristallo)!





Rifacendo lo stesso esperimento fatto con le onde e.m./fotoni con gli elettroni con entrambe le fenditure aperte otteniamo gli stessi risultati sperimentali in termini di elettroni che incidono sul detector e quindi interpretiamo teoricamente l'esperimento con la stessa algebra e con gli stessi significati

$$\frac{n_e(Det)}{N_{0,e}} \propto |\Psi(Det)|^2 d\vec{r} = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 d\vec{r}$$

$|\Psi(Det)|^2 d\vec{r}$  = frazione di eln leggibile come  
 che arriva la = probabilità di  
 detector rispetto arrivo di un eln  
 tutti gli eln sul detector  
 emessi

Il ragionamento può essere esteso a qualunque punto P dello spazio in cui arrivano le due onde coerenti

probabilità di  
 arrivo di un eln =  $|\Psi_R|^2 d\vec{r}$   
 in P

# Fondamenti della meccanica quantistica

## •Principio di corrispondenza

Come vedremo in seguito, talvolta le predizioni della meccanica quantistica, pur adeguate alla descrizione della realtà osservata, risultano essere distanti dal “senso comune”, cioè da quella fenomenologia cui siamo abituati.

Possiamo in qualche misura attribuire tale “discrepanza” al fatto che i nostri sensi operano su scala macroscopica, mentre le peculiarità della meccanica quantistica si estrinsecano principalmente su scala microscopica.

Peraltro, a meno che non si voglia ammettere la possibilità di leggi fisiche completamente diverse a seconda delle dimensioni del sistema coinvolto, ciò porta alla necessità di enunciare il seguente

**principio di corrispondenza:**

*passando dalla scala microscopica a quella macroscopica (il cosiddetto “limite classico”), si devono ritrovare i risultati che si ottengono applicando la meccanica newtoniana.*

Il concetto, di “limite classico” deve essere valutato con attenzione caso per caso. Tale principio può essere utile non solo come controllo dei risultati, suggerendo di valutare la correttezza di una previsione quantistica anche tramite il suo soddisfacimento del principio testé citato, ma anche come strumento di previsione.

•**Esistono quantità fisiche che possono assumere valori discreti.**

•**Le onde e.m. sono quantizzate,**

cioè l'energia che trasportano, sotto forma di quanti (i fotoni) di massa nulla, vale

$$E = \hbar \omega = \hbar 2\pi \nu$$

e l'impulso vale

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad \text{con} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\text{da cui} \quad E = pc \quad \Rightarrow \quad c = \frac{\omega}{k} = \lambda \nu$$

• Accettiamo di estendere questo discorso  
(**ipotesi di De Broglie**) cioè:

- 1) a qualsiasi particella materiale corrisponde un campo di onde di lunghezza d'onda  $\lambda$ ;
- 2) a qualsiasi campo ondulatorio corrisponde una particella quantica (quanto).

Le relazioni che legano energia ed impulso del quanto alle caratteristiche delle onde sono:

$$E = \hbar \omega \qquad \omega = 2\pi \nu$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Nel caso di particelle materiali di massa  $m$  non nulla in presenza di forze conservative l'energia del quanto è data dalla relazione classica:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

- Quindi, tutte le particelle quantistiche possono essere descritte da un campo d'onda.

Questa è l'idea che è alla base della formulazione di Schrodinger della MECCANICA QUANTISTICA.

L'ampiezza di questo campo d'onda deve essere una funzione del posto  $\vec{r}$  e del tempo  $t$ .

Tale ampiezza è detta FUNZIONE D'ONDA  $\Psi(\vec{r}, t)$

Nella funzione  $\Psi$  devono essere nascoste tutte le informazioni fisiche del sistema quantistico in esame.

## Significato della funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r},t)$

La funzione d'onda  $\Psi(\mathbf{r},t)$  di un sistema quantistico è tale per cui

$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}$  = frazione di volte in cui  
sperimentalmente trovo la particella nel  
volume  $d\vec{r}$  intorno a  $\vec{r}$  = probabilità di trovare il  
sistema nel volume  $d\vec{r}$  intorno a  $\vec{r}$

**Cioè nel volume dove si trova il sistema:**

$$\int_{vol} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1$$

**deve essere normalizzata alla unità**

## Proprietà della funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r},t)$

- La funzione  $\Psi(\mathbf{r},t)$  potrà essere in generale una funzione a valori complessi.
- Se il sistema quantistico è contenuto nel volume  $\Omega$

$$\Psi(\vec{r}, t) = 0 \quad \vec{r} \notin \Omega$$

$$\Psi(\vec{r}, t) \text{ continua e finita se } \vec{r} \in \Omega$$

$\Psi(\vec{r}, t)$  deve essere una funzione a quadrato sommabile nel suo dominio  $\Omega \subset R^3$

$$\Psi(\vec{r}, t) \in L^2(\Omega)$$

$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = C$$

- Deve valere il principio di sovrapposizione:  
se  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$  sono due funzioni che descrivono un sistema quantistico, il sistema è anche descritto da una qualsiasi combinazione lineare

$$\Psi = a\Psi_1 + b\Psi_2$$
$$a, b \in \mathbb{C}$$

In conclusione le funzioni  $\Psi$ ,  
che descrivono un sistema quantistico,  
costituiscono uno **spazio vettoriale lineare**

somma

$$\Psi_1, \Psi_2 \in L^2(\Omega), \quad a, b \in \mathbb{C}$$
$$\Psi = (a\Psi_1 + b\Psi_2) \in L^2(\Omega)$$

prodotto scalare

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_{\Omega} \Psi_1^* \Psi_2 d\vec{r} \in \mathbb{C}$$



## Assunti fino alla lezione di oggi

- la nuova teoria deve contenere la fisica classica (principio di corrispondenza)
- esiste una costante universale  $\hbar$
- le grandezze fisiche variano nel discreto
- i sistemi fisici sono descritti (nella formulazione di Schrodinger) da una funzione  $\Psi(\mathbf{r},t)$  a valori complessi che per masse puntiformi a  $v \ll c$  e soggette a forze conservative di potenziale  $V$  è soluzione della equazione

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)$$

- Secondo Born (inter. di Copenaghen o ortodossa)  $\Psi$  :
  - ha un significato **probab.**  $|\Psi(\vec{r},t)|^2 d\vec{r}$
  - soddisfa al principio di sovrapposizione
  - è definibile una operazione  $\int_{\Omega} \Psi_1^* \Psi_2 d\vec{r} \in \mathbb{C}$

frazione di volte  
in cui misuro la  
particella nel  
volume  $d\vec{r}$  intorno  
a  $\vec{r}$

$\Psi(\vec{r},t) \in L^2(\Omega)$  è un elemento di un insieme che soddisfa all'algebra degli spazi vettoriali

da  $\Psi(\vec{r},t)$  si devono poter estrarre tutte le informazioni fisiche

# **EQUAZIONE DI SCHRODINGER DIPENDENTE DAL TEMPO E OPERATORI QUANTISTICI**

- Equazione di Schrodinger: informazioni fisiche contenute nella funzione d'onda;
  - Valor medio dei vettori posizione e impulso;
  - Valor medio di una grandezza fisica;
  - Operatori quantistici e loro proprietà;
  - Continuità per la probabilità
- 
- L'operatore Hamiltoniano
  - L'equazione di Schrodinger Stazionaria

# Informazioni fisiche contenute nella funzione d'onda

Se  $\Psi(\vec{r}, t)$  descrive un sistema fisico quantistico deve contenere tutte le informazioni di tale sistema.

Abbiamo visto che

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = \left[ \begin{array}{c} \text{frazione di volte in cui} \\ \text{sperimentalmente} \\ \text{trovo il sistema in} \\ \text{\(\vec{r}\) all'istante } t \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{probabilità di} \\ \text{trovare il sistema} \\ \text{in } d\vec{r} \text{ all'istante } t \end{array} \right]$$

## La posizione media in cui trovo il sistema massa puntiforme (VALOR MEDIO DEL VETTORE POSIZIONE)

All'istante  $t$  la posizione media della particella quantistica è definita come media aritmetica delle  $N_0$  misure fatte per determinare la posizione

$$\langle \vec{r} \rangle = \sum_{i=1}^{N_0} \frac{\vec{r}_i}{N_0} = \sum_j \frac{\vec{r}_j N_0 |\Psi(\vec{r}_j)|^2}{N_0}$$

Per  $N_0 \rightarrow$  infinito la sommatoria converge ad un integrale  $\langle \vec{r} \rangle = \int_{\Omega} \vec{r} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}$

$$\langle \vec{r} \rangle = \langle \Psi | \vec{r} | \Psi \rangle = \int_{\Omega} \Psi^*(\vec{r}, t) [\vec{r} \Psi(\vec{r}, t)] d\vec{r}$$

## VALOR MEDIO DEL VETTORE IMPULSO

Si può dimostrare che il valor medio dell'impulso  $\mathbf{p}$  di una particella quantistica di funzione d'onda  $\Psi$  vale:

$$\langle \vec{p} \rangle = \langle \Psi | \hat{\vec{p}} | \Psi \rangle = \int_{\Omega} \Psi^*(\vec{r}, t) \left[ \hat{\vec{p}} \cdot \Psi(\vec{r}, t) \right] d\vec{r}$$

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{\Omega} \Psi^*(\vec{r}, t) \left[ (-i\hbar \nabla) \cdot \Psi(\vec{r}, t) \right] d\vec{r}$$

DIMOSTRAZIONE:

$$\langle \vec{p} \rangle = m \frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = m \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \vec{r} d\vec{r}$$

eseguiamo la dimostrazione per una sola componente del vettore quantità di moto e poi si estenderà

$$\frac{\langle p_x \rangle}{m} = \langle v_v \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \Psi^* \Psi x dx$$

Riprendiamo l'equazione di Schrodinger in una dimensione e moltiplichiamola per  $\Psi^*$

$$\Psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \Psi^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi$$

la sua coniugata è

$$-\Psi i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = \Psi \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi^*$$

Sottraiamo le due equazioni membro a membro

$$\left[ \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi + \Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \right] = \frac{\hbar}{2im} \left[ \Psi \frac{d^2 \Psi^*}{dx^2} - \Psi^* \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \right]$$

e osserviamo che

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \Psi = \frac{\hbar}{2im} \left[ \Psi \frac{d^2 \Psi^*}{dx^2} - \Psi^* \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \right]$$

Per cui

$$\langle v_x \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \Psi^* \Psi x dx = \int_{\Omega} \frac{\partial \Psi^* \Psi}{\partial t} x dx$$

diventa

$$\begin{aligned} \langle v_x \rangle &= \int_{\Omega} \frac{\partial \Psi^* \Psi}{\partial t} x dx = \\ &= \int_{\Omega} \frac{\hbar}{2im} \left[ \Psi \frac{d^2 \Psi^*}{dx^2} - \Psi^* \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \right] x dx \end{aligned}$$

Osservando l'identità

$$\frac{d}{dx} \left[ \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right] = \Psi \frac{d^2 \Psi^*}{dx^2} - \Psi^* \frac{d^2 \Psi}{dx^2}$$

$$\begin{aligned}
 \langle v_x \rangle &= \int_{\Omega} \frac{\partial \Psi^* \Psi}{\partial t} x dx = \\
 &= \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} \frac{d}{dx} \left[ \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right] x dx
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle v_x \rangle &= \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} \frac{d}{dx} \left[ \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right] x dx \\
 &\quad - \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} \frac{d}{dx} \left[ \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right] x dx
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle v \rangle &= \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} x d \left[ \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right] \\
 &\quad - \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} x d \left[ \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right]
 \end{aligned}$$

Ricordando l'integrazione per parti

$$\int_{\Omega} u dv = uv - \int_{\Omega} v du$$

$$\begin{aligned} \langle v_x \rangle = & \cancel{\frac{\hbar}{2im} x \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \Big|_{\Omega}} - \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} \left[ \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right] dx \\ & \cancel{- \frac{\hbar}{2im} x \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \Big|_{\Omega}} + \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} \left[ \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right] dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle v_x \rangle = & - \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} \left[ \Psi \frac{d\Psi^*}{dx} \right] dx \\ & + \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} \left[ \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right] dx \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\langle v_x \rangle &= -\frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} [\Psi d\Psi^*] \\ &\quad + \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} [\Psi^* d\Psi]\end{aligned}$$

Integrando nuovamente per parti

$$\begin{aligned}\langle v_x \rangle &= -\cancel{\frac{\hbar}{2im} \Psi \Psi^* \Big|_{\Omega}} + \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} [\Psi^* d\Psi] \\ &\quad + \frac{\hbar}{2im} \int_{\Omega} [\Psi^* d\Psi]\end{aligned}$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{\Omega} \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} dx$$

quindi

$$\langle p_x \rangle = \int_{\Omega} \Psi^* \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi dx$$

ma

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

è proprio l'operatore quantità di moto componente in direzione asse x.

# VALOR MEDIO DI UNA QUALSIASI GRANDEZZA FISICA

Se  $\Psi(\vec{r}, t)$  è la funzione d'onda di un qualsiasi sistema fisico quantistico,

dopo quanto visto

i) sul significato di  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$   
 ii) sul valor medio del vettore posizione  $\langle \vec{r} \rangle$   
 iii) sul valor medio del vettore impulso  $\langle \vec{p} \rangle$

viene naturale associare

ad ogni grandezza fisica classica	$F$
un operatore quantistico	$\hat{F}$

## La costruzione dell'operatore associato

alla grandezza fisica  $F = F(\vec{r}, \vec{p}, t)$

avviene attraverso la sostituzione nella  $F$  classica  
(funzione della posizione, dell'impulso e del tempo)  
degli operatori    posizione     $\vec{r} \rightarrow \hat{\vec{r}}$ .

e impulso  $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}$ .

Quindi per ogni sistema quantistico alla grandezza fisica  $F$ , funzione dei vettori posizione e impulso e del tempo, che lo descrive corrisponde un operatore

$$\hat{F} = \hat{F}(\hat{\vec{r}}, -i\hbar\vec{\nabla}, t)$$

che opera sulle funzioni d'onda del sistema.

Il valor medio della grandezza fisica diventa:

$$\langle F \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \int_{\Omega} \Psi^*(\vec{r}, t) \left[ \hat{F} \cdot \Psi(\vec{r}, t) \right] d\vec{r}$$

# PROPRIETA' DEGLI OPERATORI QUANTISTICI

- Nella meccanica quantistica sono importanti solo gli operatori lineari.

$\hat{F}$  è un operatore lineare che agisce sulle funzioni  $\Psi$  di stato del sistema quantistico.

$\Psi$  sono funzioni a valori complessi e a quadrato sommabile nel loro dominio di definizione  $\Omega \in R^3$

$$\Psi \in L^2(\Omega)$$

cioè

$$\hat{F}(a\Psi_1 + b\Psi_2) = a(\hat{F}\Psi_1) + b(\hat{F}\Psi_2) \in L^2(\Omega)$$

$$\Psi_1, \Psi_2 \in L^2(\Omega)$$

$$a, b \in C$$

•Gli operatori lineari associabili a grandezze fisiche sono **autoaggiunti o hermitiani**.

$\hat{F}$  è autoaggiunto o hermitiano se

$$\int_{\Omega} \Psi^* (\hat{F} \Psi) d\vec{r} = \int_{\Omega} (\hat{F} \Psi)^* \Psi d\vec{r}$$

Se  $\hat{F}$  è autoaggiunto

$$\langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \int_{\Omega} \Psi^* (\hat{F} \Psi) d\vec{r} \in R$$

condizione necessaria visto che  $\langle F \rangle$   
è la media di una grandezza fisica.

## Quindi

- principio di corrispondenza
- esiste una costante universale  $\hbar$
- le grandezze fisiche variano nel discreto
- i sistemi fisici sono descritti (nella formulazione di Schrodinger) da una funzione  $\Psi(\mathbf{r},t)$  a valori complessi che per masse puntiformi a  $v \ll c$  e soggette a forze conservative di potenziale  $V$  è soluzione della equazione

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)$$

- Secondo Born (interpr di Copenaghen o ortodossa):
  - $\Psi$  ha un significato probab.  $|\Psi(\vec{r},t)|^2 d\vec{r}$
  - soddisfa al principio di sovrapposizione
  - è definibile una operazione  $\int_{\Omega} \Psi_1^* \Psi_2 d\vec{r} \in \mathbb{C}$

$\Psi(\vec{r},t) \in L^2(\Omega)$  spazio vettoriali

- Le grandezze fisiche sono operatori costruibili dalla relazione classica attraverso la regola

$$F_{CL} = F(\vec{r}, \vec{p}; t) \qquad \hat{F}_q = \hat{F}(\hat{\vec{r}}, -i\hbar \vec{\nabla}, t)$$

- Le grandezze fisiche relative al sistema si estraggono dalla funzione d'onda attraverso

$$\langle F \rangle = \int \Psi^*(\vec{r},t) [\hat{F} \cdot \Psi(\vec{r},t)] d\vec{r}$$

# CALCOLO dell'OPERATORE ENERGIA (HAMILTONIANA)

Vediamo di applicare la regola che alla grandezza fisica  $F$ , funzione dei vettori posizione e impulso (ed eventualmente del tempo) corrisponde un operatore

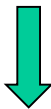
$$F = F(\vec{r}, \vec{p}; t)$$



$$\hat{F} = \hat{F}(\hat{\vec{r}}, -i\hbar\vec{\nabla}, t)$$

per l'energia totale  $H$  di un sistema costituito da una massa puntiforme soggetta a forze conservative di potenziale  $V$

$$H(\vec{r}, \vec{p}; t) = \frac{1}{2}mv^2 + \bar{V}(\vec{r}; t) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}; t)$$



$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}}; t) = \frac{(-i\hbar\vec{\nabla})(-i\hbar\vec{\nabla})}{2m} + V(\hat{\vec{r}}; t)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\hat{\vec{r}}; t)$$



Quindi ricordando l'equazione di Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\vec{r}, t) \Psi \right]$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right] \Psi$$

L'equazione di Schrodinger può essere riscritta:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$