

NOTE DI MECCANICA QUANTISTICA

MANUEL DEODATO



INDICE

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Struttura matematica della meccanica quantistica | 4 |
| 1.1 | Introduzione | 4 |
| 1.1.1 | Notazione bra-ket | 4 |
| 1.1.2 | Operatori | 5 |
| 1.1.3 | Operatori autoaggiunti | 5 |
| 1.1.4 | Commutatori | 6 |
| 1.2 | Prodotto esterno | 6 |
| 1.2.1 | Proiettori | 6 |
| 1.2.2 | Completezza di una base e valore di aspettazione di un osservabile | 7 |
| 1.2.3 | Cambiamento di base | 7 |
| 1.3 | Applicazioni per la meccanica quantistica | 7 |
| 1.3.1 | Rappresentazione delle coordinate | 7 |
| 1.3.2 | Rappresentazione degli impulsi | 8 |
| 1.3.3 | Misura di un osservabile | 8 |
| 1.3.4 | Principi della meccanica quantistica | 8 |
| 1.3.5 | Spazio di Hilbert proiettivo, sistemi puri e misti | 9 |
| 1.3.6 | Proiettore per sistemi puri | 9 |
| 1.3.7 | Flusso di probabilità ed equazione di continuità | 10 |
| 2 | Introduzione alla meccanica quantistica | 11 |
| 2.1 | Evoluzione temporale | 11 |
| 2.1.1 | Equazione di Shrödinger per gli stati | 11 |
| 2.1.2 | Soluzione dell'equazione | 11 |
| 2.1.3 | Equazione di Shrödinger per la funzione d'onda | 11 |
| 2.1.4 | Equazione di Shrödinger per il proiettore | 12 |
| 2.2 | Evoluzione temporale per gli operatori | 12 |
| 2.2.1 | Il quadro di Shrödinger | 12 |
| 2.2.2 | Il quadro di Heisenberg | 13 |
| 2.2.3 | Evoluzione delle misure | 13 |
| 2.3 | Simmetrie e operatore impulso | 13 |
| 2.3.1 | Traslazioni | 13 |
| 2.3.2 | L'operatore impulso | 14 |
| 2.3.3 | Funzione d'onda degli impulsi | 14 |
| 2.3.4 | Simmetrie per stati che evolvono temporalmente | 15 |
| 2.3.5 | Commutatore di \hat{p} e \hat{X} | 15 |
| 2.4 | Il principio di indeterminazione | 16 |
| 2.4.1 | Introduzione | 16 |
| 2.4.2 | Algebra degli operatori sottratti | 16 |
| 2.4.3 | Il principio di indeterminazione | 17 |
| 2.5 | Alcuni esempi di \hat{H} per sistemi quantistici | 17 |
| 2.5.1 | Sistema di due corpi | 17 |
| 2.5.2 | Particella in campo esterno | 18 |
| 2.6 | L'oscillatore armonico | 18 |
| 2.6.1 | Operatori di creazione e distruzione | 18 |
| 2.6.2 | Funzione d'onda per l'oscillatore armonico | 19 |
| 2.7 | Operatore parità e sistemi unidimensionali | 20 |
| 2.7.1 | Operatore parità | 20 |
| 2.7.2 | Alcuni teoremi per sistemi unidimensionali | 21 |
| 2.7.3 | Moto di una particella sotto potenziale | 21 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.7.4 | Particella contro barriera di potenziale | 23 |
| 2.8 | Meccanica quantistica dei sistemi interagenti | 23 |
| 2.8.1 | Operatori per sistemi non-interagenti | 23 |
| 2.8.2 | La matrice densità | 24 |
| 2.8.3 | Caratterizzazione degli stati misti | 24 |
| 2.8.4 | Valore di aspettazione per miscele statistiche | 24 |
| 2.8.5 | Evoluzione temporale della matrice densità | 25 |
| 2.9 | L'operatore momento angolare | 25 |
| 2.9.1 | Rotazioni in 3D | 25 |
| 2.9.2 | Rotazione su funzione d'onda | 26 |
| 2.9.3 | Momento angolare | 26 |
| 2.9.4 | Momento angolare orbitale | 27 |
| 2.9.5 | Spettro del momento angolare | 27 |
| 2.9.6 | Introduzione allo spin | 28 |
| 2.9.7 | Spettro del momento angolare orbitale | 28 |
| 2.10 | Atomo di idrogeno | 29 |
| 2.10.1 | Particelle in campo centrale | 29 |
| 2.10.2 | Funzione d'onda per l'atomo di idrogeno | 30 |
| 2.10.3 | Lo stato fondamentale, medie e varianze di posizione e momento | 31 |
| 2.10.4 | Principio di indeterminazione | 32 |
| 2.10.5 | Oscillatore armonico 3D | 32 |
| 2.11 | Lo spin | 33 |
| 2.11.1 | Gli angoli di Eulero e le matrici di Wigner | 33 |
| 2.11.2 | Composizione di due sistemi a due livelli | 34 |
| 3 | Esercitazioni | 35 |
| 3.1 | Sistemi a due livelli | 35 |
| 3.1.1 | Descrizione generale | 35 |
| 3.1.2 | Matrici di Pauli | 35 |
| 3.1.3 | Studio di un sistema a due livelli | 35 |
| 3.2 | Sistema composto da due sottosistemi a due livelli | 36 |
| 3.2.1 | Spettro dell'Hamiltoniano | 37 |
| 3.3 | Buche di potenziale | 37 |
| 3.3.1 | Buca di potenziale V_0 | 37 |

1 STRUTTURA MATEMATICA DELLA MECCANICA QUANTISTICA

1.1 Introduzione

DEFINIZIONE 1.1 — PRODOTTO SCALARE.

Per V spazio vettoriale su \mathbb{C} e $\psi, \phi \in V$, si definisce $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ come:

- $\langle \psi, \phi \rangle \in \mathbb{C}$;
- $\langle \psi, \phi \rangle = \langle \phi, \psi \rangle^*$;
- $\langle \psi, c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2 \rangle = c_1 \langle \psi, \phi_1 \rangle + c_2 \langle \psi, \phi_2 \rangle$, con $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$;
- $\langle \phi, \phi \rangle \geq 0$ e $\langle \phi, \phi \rangle = 0 \iff \phi = 0$.

Dato $\phi \in V$, questo induce la **norma**:

$$\|\phi\| \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle \phi, \phi \rangle} \quad (1.1.1)$$

Si ricordano le seguenti disuguaglianze:

$$\begin{aligned} \textbf{Schwarz: } |\langle \phi, \psi \rangle|^2 &\leq \langle \phi, \phi \rangle \langle \psi, \psi \rangle \\ \textbf{Triangolare: } \|\phi + \psi\| &\leq \|\psi\| + \|\phi\| \end{aligned} \quad (1.1.2)$$

TEOREMA 1.1 — TEOREMA DI RIESZ.

Dato T operatore lineare limitato agente su spazio di Hilbert \mathcal{H} , allora $\exists f \in \mathcal{H} : \forall \phi \in \mathcal{H} \Rightarrow T(\phi) \equiv \langle f, \phi \rangle$. Inoltre, $\|T\| = \|f\|$.

OSSERVAZIONE 1.1 — FUNZIONALI E OPERATORI. Un funzionale lineare è un operatore lineare F che agisce su uno spazio vettoriale V su \mathbb{K} e restituisce un valore nel campo; formalmente: $F : V \rightarrow \mathbb{K}$. In generale, gli operatori non restituiscono valori in \mathbb{K} , mentre i funzionali sì.

Gli operatori rappresentano gli osservabili, mentre i funzionali sono usati per calcolare aspettazione e probabilità.

1.1.1 Notazione bra-ket

Sia V uno spazio vettoriale e V' il suo duale; si definiscono:

- per $\phi \in V \longrightarrow |\phi\rangle \in V$;
- per $F \in V' \longrightarrow \langle F| \in V'$.

Per Riesz, per qualche $f \in V$:

$$\langle F|\phi\rangle \stackrel{\text{def}}{=} F(\phi) = \langle f, \phi \rangle \Rightarrow F(\phi) \leftrightarrow \langle f|\phi\rangle \quad (1.1.3)$$

Visto che $\langle \phi|\psi\rangle = \langle \phi, \psi \rangle$, allora:

$$\langle c\phi| = c^* \langle \phi| \longleftrightarrow |c\phi\rangle = c|\phi\rangle \quad (1.1.4)$$

1.1.2 Operatori

Si considerano vettori, o **stati**, in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} . Un operatore che agisce su tale spazio è definito come $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, quindi $\hat{A}|\phi\rangle \in \mathcal{H}$. Gli operatori di interesse saranno **lineari**.

Se \hat{A} è limitato (quindi continuo), dato $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, con $\{\phi_i\}$ base ortonormale:

$$\begin{cases} \hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle = \sum_{i=1}^{+\infty} c_i |\phi_i\rangle \\ \hat{A}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{+\infty} b_i \hat{A}|\phi_i\rangle \end{cases}$$

si nota che

$$\langle \phi_j | \hat{A} \psi \rangle = \langle \phi_j | \left(\sum_{i=1}^{+\infty} b_i \hat{A} |\phi_i\rangle \right) = \sum_{i=1}^{+\infty} b_i \underbrace{\langle \phi_j | \hat{A} |\phi_i\rangle}_{\equiv A_{ji}} \quad (1.1.5)$$

dove A_{ji} è un elemento di matrice; infatti

$$\langle \phi_j | \phi \rangle = \langle \phi_j | \hat{A} \psi \rangle = \sum_{i=1}^{+\infty} c_i \langle \phi_j | \phi_i \rangle = c_j$$

da cui, unendo le uguaglianze:

$$\sum_{i=1}^{+\infty} A_{ji} b_i = c_j$$

Sia \hat{A} lineare; l'aggiunto è \hat{A}^\dagger e tale che $\langle \phi, \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \phi, \psi \rangle$. Allora, in notazione bra-ket:

$$\langle w | = \langle \phi | \hat{A}^\dagger \longleftrightarrow |w\rangle = \hat{A} |\phi\rangle \quad (1.1.6)$$

Inoltre

$$\begin{aligned} \langle \psi, \phi \rangle^* &= \langle \phi, \psi \rangle \implies \langle \psi | \phi \rangle^* = \langle \phi | \psi \rangle \\ \implies \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle^* &= \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (1.1.7)$$

Infine, se $\{\phi_i\}$ base ortonormale:

$$A_{ij}^\dagger = \langle \phi_i | \hat{A}^\dagger | \phi_j \rangle = \langle \phi_j | \hat{A} | \phi_i \rangle^* = A_{ji}^* \Rightarrow A^\dagger = (A^\top)^* \quad (1.1.8)$$

Da questo, segue:

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger; (cA)^\dagger = c^* A^\dagger \quad (1.1.9)$$

1.1.3 Operatori autoaggiunti

DEFINIZIONE 1.2 — OPERATORE AUTOAGGIUNTO.

Sia \mathcal{H} uno spazio di Hilbert complesso e sia A un operatore lineare definito su un dominio $\text{Dom}(A) \subseteq \mathcal{H}$. L'operatore A si dice **autoaggiunto** se soddisfa le seguenti condizioni:

- (1). **Densità del dominio:** il dominio $\text{Dom}(A)$ è denso nello spazio di Hilbert \mathcal{H} , ovvero:

$$\overline{\text{Dom}(A)} = \mathcal{H}.$$

(2). **Simmetria:** per ogni $\psi, \phi \in \text{Dom}(A)$,

$$\langle \psi, A\phi \rangle = \langle A\psi, \phi \rangle.$$

(3). **Uguaglianza con l'aggiunto:** il dominio di A coincide con quello del suo aggiunto A^\dagger , e i due operatori coincidono, ovvero:

$$\text{Dom}(A) = \text{Dom}(A^\dagger) \quad \text{e} \quad A = A^\dagger.$$

Essendo $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, si ha $A_{ij} = (A_{ji}^*)^\top$. Questi sono sempre diagonalizzabili, quindi hanno base ortonormale di autovettori. Visto che $\langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_1 \rangle^*$, allora $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \in \mathbb{R}$ ed è il **valore di aspettazione**.

Sia $|\psi\rangle$ autostato di \hat{A} autoaggiunto; allora $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \Rightarrow \langle \psi | \hat{A} = \langle \psi | a^*$. Si nota, però, che:

$$a \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = a^* \langle \psi | \psi \rangle \iff a = a^* \Rightarrow a \in \mathbb{R} \quad (1.1.10)$$

Siano $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ tali che $\hat{A}|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle$ e $\hat{A}|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle$, con $a_1 \neq a_2$; allora:

$$\begin{aligned} a_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A}^\dagger | \psi_2 \rangle = a_1^* \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = a_1 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \\ \Rightarrow (a_2 - a_1) \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= 0 \iff |\psi_1\rangle \perp |\psi_2\rangle \end{aligned} \quad (1.1.11)$$

1.1.4 Commutatori

DEFINIZIONE 1.3 — COMMUTATORE.

Siano \hat{A}, \hat{B} due operatori; il commutatore è: $[\hat{A}, \hat{B}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Quindi se \hat{A}, \hat{B} commutano, si ha $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

TEOREMA 1.2 — SPETTRO COMUNE.

Se \hat{A}, \hat{B} sono autoaggiunti e commutano, allora condividono una base di autovettori.

1.2 Prodotto esterno

Applicazione $\rho : V \times V \rightarrow \mathcal{O}$, con \mathcal{O} spazio degli operatori lineari. Un esempio di prodotto esterno è l'operatore lineare

$$\hat{O} = |\psi\rangle \langle \phi| : V \rightarrow V \quad (1.2.1)$$

Si nota che:

$$\langle v | \hat{O} w \rangle = \langle v | (|\psi\rangle \langle \phi|) w \rangle = \langle v | \psi \rangle \langle \phi | w \rangle = \langle \hat{O}^\dagger v | w \rangle \iff \hat{O}^\dagger = |\phi\rangle \langle \psi|$$

1.2.1 Proiettori

Operatore \hat{P} tale che $\hat{P}^2 = \hat{P}$. Un esempio è $\hat{P} = |\psi\rangle \langle \psi|$, con $\|\psi\| = 1$ perché:

$$\hat{P}^2 = |\psi\rangle \langle \psi | \psi \rangle \langle \psi| = |\psi\rangle \langle \psi| \equiv \hat{P}$$

1.2.2 Completezza di una base e valore di aspettazione di un osservabile

Un insieme ortonormale $\{|\phi_i\rangle\}$ si dice completo se:

$$\sum_{i=1}^{+\infty} |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \text{Id} \quad (1.2.2)$$

Un insieme ortonormale completo è una base ortonormale di \mathcal{H} , quindi permette di scomporre ogni stato in una combinazione lineare.

1.2.3 Cambiamento di base

Siano $\{|\phi_i\rangle\}_i, \{|\psi_i\rangle\}_i$ basi ortonormali. Si esprime una in funzione dell'altra:

$$|\psi_i\rangle = \left(\sum_{j=1}^{+\infty} |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \right) |\psi_i\rangle = \sum_{j=1}^{+\infty} \langle \phi_j | \psi_i \rangle |\phi_j\rangle \equiv \sum_{j=1}^{+\infty} S_{ij}^* |\phi_j\rangle \quad (1.2.3)$$

Per φ generico stato: $|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{+\infty} a_i |\phi_i\rangle = \sum_{i=1}^{+\infty} b_i |\psi_i\rangle$; allora:

$$\begin{cases} b_i = \langle \psi_i | \varphi \rangle = \sum_{j=1}^{+\infty} a_j \langle \psi_i | \phi_j \rangle \equiv \sum_{j=1}^{+\infty} S_{ij} a_j \\ a_i = \langle \phi_i | \varphi \rangle = \sum_{j=1}^{+\infty} b_j \langle \phi_i | \psi_j \rangle \equiv \sum_{j=1}^{+\infty} S_{ji}^* b_j \end{cases} \quad (1.2.4)$$

Ora, essendo le due basi ortonormali:

$$\delta_{ij} = \left\langle \phi_i \left| \left(\sum_{k=1}^{+\infty} |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \right) \phi_j \right\rangle = \sum_{k=1}^{+\infty} \langle \phi_i | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \phi_j \rangle = \sum_{k=1}^{+\infty} S_{ki}^* S_{kj} \quad (1.2.5)$$

da cui $S^\dagger S = \text{Id}$.

1.3 Applicazioni per la meccanica quantistica

1.3.1 Rappresentazione delle coordinate

Uno stato si decompone in maniera diversa a seconda della base; ogni decomposizione è una sua diversa **rappresentazione**.

Sia $\hat{Q} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ operatore autoaggiunto **posizione**¹, con $\hat{Q} |x\rangle = x |x\rangle$ ². Il suo spettro è continuo, quindi la decomposizione spettrale avviene tramite integrale: dato uno stato $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | \psi \rangle |x\rangle dx \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) |x\rangle dx \quad (1.3.1)$$

con $\psi(x)$ **funzione d'onda** dello stato $|\psi\rangle$ e ne indica i coefficienti nella rappresentazione delle coordinate.

¹Indicato anche con \hat{X} .

²Gli autostati sono le x , mentre $|x\rangle$ rappresenta gli autovettori.

1.3.2 Rappresentazione degli impulsi

Sia $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ operatore impulso (autoaggiunto); per $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp c(p) |p\rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\psi}(p) |p\rangle \quad (1.3.2)$$

dove $\tilde{\psi}(p)$ è la funzione d'onda nel dominio degli impulsi e si ottiene trasformando con Fourier $\psi(x)$.

1.3.3 Misura di un osservabile

Sia \hat{A} operatore lineare autoaggiunto¹ con autovalori a_i e autovettori $|\lambda_i\rangle$. Assumendo che $\langle\lambda_i|\lambda_j\rangle = \delta_{ij}$ formino una base ortonormale² e dato un generico $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{+\infty} b_i |\lambda_i\rangle$, si nota che :

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \left[\sum_{i=1}^{+\infty} b_i^* \langle\lambda_i| \right] \left[\sum_{j=1}^{+\infty} b_j \hat{A} |\lambda_j\rangle \right] = \sum_{i=1}^{+\infty} |b_i|^2 a_i \quad (1.3.3)$$

dove si può vedere $|b_i|^2$ come probabilità di ottenere misura a_i da osservabile \hat{A} . In questo senso, deve valere:

$$\sum_{i=1}^{+\infty} |b_i|^2 \stackrel{!}{=} 1$$

Questa condizione è verificata dalla normalizzazione di ciascuno stato:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \left[\sum_{i=1}^{+\infty} b_i^* \langle\lambda_i| \right] \left[\sum_{j=1}^{+\infty} b_j |\lambda_j\rangle \right] = \sum_{i,j=1}^{+\infty} b_i^* b_j \langle\lambda_i|\lambda_j\rangle = \sum_{i=1}^{+\infty} |b_i|^2 \stackrel{!}{=} 1 \quad (1.3.4)$$

Per un operatore a spettro continuo \hat{F} , con autovettori $|z\rangle$ relativi ad autovalori z e $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) |z\rangle dz$, $f(z) = \langle z|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(y) \langle y| dy \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) \hat{F} |z\rangle dz \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dy dz f^*(y) f(z) z \langle y|z\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} z |f(z)|^2 dz \quad (1.3.5) \\ \langle\psi|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} |f(z)|^2 dz \stackrel{!}{=} 1 \text{ (normalizzazione)} \end{aligned}$$

1.3.4 Principi della meccanica quantistica

- (a). Uno stato fisico $|\psi\rangle$ è un vettore in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , ℓ^2 o L^2 . Lo stesso stato può essere equivalentemente moltiplicato per una fase: $e^{i\alpha} |\psi\rangle$.
- (b). Per ogni sistema, ogni stato deve essere tale che $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.
- (c). Gli osservabili sono operatori lineari autoaggiunti che agiscono su \mathcal{H} .

¹In generale, ogni operatore in meccanica quantistica, almeno quelli associati ad osservabili, sono operatori lineari autoaggiunti.

²Possono essere sempre costruiti in modo che siano ortonormali.

- (d). Il valore di aspettazione di un osservabile \hat{A} relativo ad uno stato $|\psi\rangle$ è $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$. Se a_i sono autovalori, con $|a_i\rangle$ relativi autovettori, di \hat{A} , la probabilità di ottenere la misura a_i (data dal fatto che il sistema è nello stato $|a_i\rangle$) è $|a_i|^2$.

Nel caso di operatori con spettri continui, si costruisce la densità di probabilità $P(x)dx = |\psi(x)|^2 dx$ (come esempio per operatore posizione \hat{Q}) ed è probabilità di trovare la particella nell'intervallo spaziale dx .

1.3.5 Spazio di Hilbert proiettivo, sistemi puri e misti

Ogni stato $|\psi\rangle$ è definito a meno di una fase; per eliminare fase globale, si usa lo spazio proiettivo $\mathcal{P}(\mathcal{H}) = \mathcal{H}/\sim$, con $|\psi\rangle \sim e^{i\alpha} |\psi\rangle$.

Con gli elementi di $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ si può introdurre un **isomorfismo naturale**¹ con lo spazio generato dagli operatori $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, nel caso di sistemi **puri**.

Un sistema quantistico puro, è univocamente descritto da un singolo stato $|\psi\rangle$ (quello in cui si trova in un certo istante temporale), quindi il proiettore $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ contiene tutte le informazioni necessarie per una sua descrizione. Un sistema **misto**, invece, non può essere descritto tramite un singolo stato perché appartiene a più stati puri contemporaneamente in una certa proporzione; in questo caso, il proiettore diventa una **matrice di densità** con

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (1.3.6)$$

1.3.6 Proiettore per sistemi puri

La condizione di normalizzazione è:

$$\text{Tr } \rho = 1 \quad (1.3.7)$$

Dimostrazione. Se $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n |\phi_n\rangle$:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \rho &\stackrel{\text{def}}{=} \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} \langle\phi_m|\rho|\phi_n\rangle \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{+\infty} \langle\phi_n|\rho|\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} \langle\phi_n|\psi\rangle \langle\psi|\phi_n\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{+\infty} |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.3.8)$$

dove l'ultima uguaglianza deriva dalla completezza di $\{|\phi_n\rangle\}_n$. ■

Un generico elemento di matrice di $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ è $\rho_{ij} = c_i c_j^*$, dove $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle$.

Dimostrazione. Per conto diretto:

$$\begin{aligned} \rho_{ij} &= \langle\phi_i|\rho|\phi_j\rangle = \langle\phi_i|\psi\rangle \langle\psi|\phi_j\rangle = \sum_{m=1}^{+\infty} c_m \langle\phi_i|\phi_m\rangle \sum_{n=1}^{+\infty} c_n^* \langle\phi_n|\phi_j\rangle \\ &= \sum_{m,n=1}^{+\infty} c_m c_n^* \delta_{im} \delta_{jn} = c_i c_j^* \end{aligned} \quad (1.3.9)$$

■

¹Isomorfismo che non dipende dalla scelta del rappresentante della classe di equivalenza.

Dato \hat{A} osservabile con base di autostati $\{|a_i\rangle\}_i$:

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \text{Tr } \rho\hat{A} \quad (1.3.10)$$

Dimostrazione. Si prende $\psi = \sum_i c_i |a_i\rangle$ e $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$; allora:

$$\text{Tr}(\rho\hat{A}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i \langle a_i | \rho \hat{A} | a_i \rangle = \sum_i a_i \langle a_i | \rho | a_i \rangle = \sum_i |c_i|^2 a_i \equiv \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \quad (1.3.11)$$

■

1.3.7 Flusso di probabilità ed equazione di continuità

Sistema composto da particella in 3D sotto potenziale $V(x)$. Sia $\psi(\mathbf{x}, t)$ funzione d'onda per stato $|\psi(t)\rangle$. La probabilità di trovare particella in una regione Γ dello spazio è¹:

$$P_\Gamma(t) \equiv \int_\Gamma d^3x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (1.3.12)$$

Per quanto detto in §2.5.2: $i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}, t)$; evoluzione temporale di $P_\Gamma(t)$ è:

$$\begin{aligned} \partial_t P_\Gamma(t) &= \partial_t \int_\Gamma d^3x \psi(\mathbf{x}, t) \psi^*(\mathbf{x}, t) = \int_\Gamma [\psi^*(\mathbf{x}, t) \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) + \psi(\mathbf{x}, t) \partial_t \psi^*(\mathbf{x}, t)] d^3x \\ &= \int_\Gamma \left[\psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi^*(\mathbf{x}, t) \right] d^3x \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_\Gamma [\psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) - \psi(\mathbf{x}, t) \nabla^2 \psi^*(\mathbf{x}, t)] d^3x = \frac{i\hbar}{2m} \int_\Gamma \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) d^3x \end{aligned}$$

Definendo **flusso di probabilità**:

$$\mathbf{J} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (1.3.13)$$

si ha:

$$\partial_t P_\Gamma(t) = - \int_\Gamma \nabla \cdot \mathbf{J} d^3x \quad (1.3.14)$$

da cui si ottiene equazione di continuità:

$$\partial_t |\psi|^2 + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (1.3.15)$$

¹I termini con il potenziale si cancellano perché simmetrici, mentre quelli con ∇^2 no perché in uno sarà derivato ψ , nell'altro ψ^* .

2 INTRODUZIONE ALLA MECCANICA QUANTISTICA

2.1 Evoluzione temporale

2.1.1 Equazione di Shrödinger per gli stati

Variazione temporale dello stato di un sistema: $|\psi(t)\rangle$ o $|\psi, t\rangle$. Per la funzione d'onda: $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$. Per trovare evoluzione temporale di uno stato, si richiede che:

- (a). l'evoluzione sia univocamente determinata da uno stato iniziale \Rightarrow si richiede che nell'equazione compaia al massimo il primo ordine di derivazione $\partial_t |\psi(t)\rangle$;
- (b). sperimentalmente, si verifica il principio di sovrapposizione, quindi l'equazione differenziale deve essere lineare.

L'equazione risultante è:

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (2.1.1)$$

\hat{H} è un generico operatore che definisce l'evoluzione temporale del sistema. Deve risultare autoaggiunto.

Dimostrazione. Da $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle \stackrel{!}{=} 1, \forall t$:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \partial_t \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = (\partial_t \langle \psi(t) |) |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | (\partial_t |\psi(t)\rangle) \\ &\Rightarrow \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H}^\dagger | \psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle \Rightarrow \hat{H}^\dagger = \hat{H} \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

■

Questo candida \hat{H} come osservabile

2.1.2 Soluzione dell'equazione

La soluzione è:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle \quad (2.1.3)$$

dove

$$e^{\hat{A}} \stackrel{\text{def}}{=} 1 + \hat{A} + \frac{1}{2} \hat{A}^2 + \dots$$

Visto che \hat{H} è autoaggiunto, l'esponenziale è unitario:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} = \text{Id} \quad (2.1.4)$$

Definendo l'**evolutore** come l'operatore $\hat{U}(t, t_0)$ tale che $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$, risulta $\hat{U}(t, t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) = \text{Id}$. Se \hat{H} **indipendente dal tempo**, allora $\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$.

2.1.3 Equazione di Shrödinger per la funzione d'onda

Per $\{|x\rangle\}$ base ortonormale $\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle \psi(t) | x \rangle \langle x | \psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x, t)|^2 \stackrel{!}{=} 1$ per normalizzazione. Nell'eq. di Shrödinger:

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \Rightarrow i\hbar \partial_t \langle x | \psi(t) \rangle = \langle x | \hat{H} | \psi(t) \rangle \Rightarrow i\hbar \partial_t \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \quad (2.1.5)$$

Il passaggio $\langle x|\hat{H}|\psi(t)\rangle \stackrel{*}{=} \hat{H}\psi(x, t)$ è giustificato con l'accorgimento che gli \hat{H} non sono gli stessi: uno agisce su ket, l'altro su scalare; la definizione di \hat{H} agente su $\psi(x, t)$ è:

$$\langle x|\hat{H}|\psi(t)\rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dy \langle x|\hat{H}|y\rangle \langle y|\psi(t)\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{H}\psi(x, t)$$

con $\langle x|\hat{H}|y\rangle$ è l'elemento di matrice dell'Hamiltoniano originale nella rappresentazione delle coordinate.

Per la soluzione dell'equazione:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \Rightarrow \langle x|\psi(t)\rangle = \psi(x, t) = \langle x|\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ \Rightarrow \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \langle x|\hat{U}(t, t_0)|y\rangle \langle y|\psi(t_0)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \hat{U}(x, y, t, t_0) \psi(y, t_0) \\ \Rightarrow \psi(x, t) &= \hat{U}(t, t_0) \psi(x, t_0) \end{aligned}$$

dove, come prima, i due \hat{U} non sono gli stessi.

2.1.4 Equazione di Shrödinger per il proiettore

Partendo da $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, si trova:

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}(t) &= [\partial_t |\psi(t)\rangle] \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle [\partial_t \langle \psi(t)|] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + \frac{i}{\hbar} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \hat{H}^\dagger = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{\rho}(t) + \frac{i}{\hbar} \hat{\rho}(t) \hat{H} \\ &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

2.2 Evoluzione temporale per gli operatori

Ci sono tre quadri per vedere il problema:

- (a). **quadro di Shrödinger:** solo gli stati dipendono dal tempo, mentre gli operatori no;
- (b). **quadro di Heisenberg:** solo gli operatori dipendono dal tempo;
- (c). **quadro misto (o di interazione):** l'Hamiltoniano si divide in $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I$, dove il primo evolve gli operatori e il secondo evolve gli stati.

2.2.1 Il quadro di Shrödinger

Evoluzione temporale di \hat{O} , con $\partial_t \hat{O} = 0$, è:

$$\begin{aligned} \partial_t \langle \psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t)|\hat{H}\hat{O}|\psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t)|\hat{O}\hat{H}|\psi(t)\rangle \\ &= \left\langle \psi(t) \left| \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}] \right| \psi(t) \right\rangle \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

Operatore **velocità** definito come $\hat{v} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}]$.

2.2.2 Il quadro di Heisenberg

Gli stati evolvono tramite operatore, quindi si definisce $\hat{O}_H(t)$ come:

$$\left\langle \psi(t_0) \left| e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \right| \psi(t_0) \right\rangle \equiv \langle \psi(t_0) | \hat{O}_H(t) | \psi(t_0) \rangle \quad (2.2.2)$$

dove si nota che ancora \hat{O} non dipende dal tempo.

2.2.3 Evoluzione delle misure

Modello della mq prevede che operatore \hat{O} autoaggiunto applicato ad uno stato $|\psi\rangle$ restituisca valore rappresentato da \hat{O} in tale stato. In questo senso, potendo espandere $|\psi\rangle$ in autostati di \hat{O} , le misure sono gli autovalori dell'operatore e, a seconda del tipo di spettro, sono continui, discreti o entrambi.

Per l'energia (quindi se $\hat{O} \equiv \hat{H}$), se $|\psi_n\rangle$ autovettore dell'autostato E_n : $\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$, dove E_n è energia dello stato $|\psi_n\rangle$.

Sia $|\phi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)\right) |\phi(t_0)\rangle$ un generico stato, con $|\phi(t_0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n(t_0)\rangle$. Allora:

$$|\phi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |\psi_n(t_0)\rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} |\psi_n(t_0)\rangle \quad (2.2.3)$$

L'esponenziale è una fase, quindi $|\phi(t)\rangle$ è **stazionario**. Per questo, se \hat{O} operatore: $\langle \psi_n(t) | \hat{O} | \psi_n(t) \rangle = \langle \psi_n(t_0) | \hat{O} | \psi_n(t_0) \rangle$, da cui $E_n(t) = E_n(0)$ per $\hat{O} \equiv \hat{H}$.

2.3 Simmetrie e operatore impulso

2.3.1 Traslazioni

Sia trasla $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle$, $\hat{A} \rightarrow \hat{A}'$, e, assumendo simmetria per traslazioni spaziali, si richiede che per $\hat{A} |\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle \rightarrow \hat{A}' |\phi_n\rangle = a'_n |\phi'_n\rangle$ si abbia $a'_n = a_n$. Se $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$ e $|\psi'\rangle = \sum_n c'_n |\phi'_n\rangle$, deve valere $|c_n|^2 = |c'_n|^2$ perché sono le probabilità di ottenere una certa misura. L'invarianza per traslazione è assicurata quando:

$$\begin{cases} a'_n = a_n \\ |c'_n|^2 = |c_n|^2 \end{cases} \quad (2.3.1)$$

Si cerca \hat{U} operatore delle traslazioni. Si assume che questo soddisfi:

$$\begin{cases} |\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle, \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \\ \langle \phi' | \psi' \rangle = \langle \phi | \psi \rangle, \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \end{cases} \quad (2.3.2)$$

Unendo le due, si trova \hat{U} unitario:

$$\langle \phi' | \psi' \rangle = \langle \phi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi \rangle \Rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{U} = \text{Id} \quad (2.3.3)$$

Su generico operatore \hat{A} come sopra:

$$\begin{aligned} \hat{A}' \hat{U} |\phi_n\rangle &= a_n \hat{U} |\phi_n\rangle = \hat{U} a_n |\phi_n\rangle = \hat{U} \hat{A} |\phi_n\rangle \Rightarrow \hat{A}' \hat{U} |\phi_n\rangle = \hat{U} \hat{A} |\phi_n\rangle \\ &\Rightarrow \hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Si definisce azione di \hat{U} su una funzione d'onda:

$$\psi'(x) = \langle x|\psi' \rangle = \langle x|\hat{U}|\psi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \hat{U}\psi(x) \Rightarrow \psi'(x) = \hat{U}\psi(x) \quad (2.3.5)$$

2.3.2 L'operatore impulso

Visto \hat{U} unitario, si prende $\hat{U}(s) = e^{is\hat{K}}$ per parametrizzare la traslazione con parametro continuo s . Si mostra che \hat{K} è autoaggiunto¹. Sviluppando attorno a $s = 0$:

$$\hat{U}(s) \simeq \hat{U}(0) + s \frac{d}{ds} \hat{U}(s) \Big|_{s=0} + O(s^2) = \text{Id} + is\hat{K} + O(s^2) \quad (2.3.6)$$

Dovendo essere $\hat{U}(s)\hat{U}^\dagger(s) = \text{Id}$, trascurando $O(s^2)$:

$$\left(\text{Id} + s \frac{d}{ds} \hat{U}^\dagger(s) \right) \left(\text{Id} + s \frac{d}{ds} \hat{U}(s) \right) = \left(\text{Id} - is\hat{K}^\dagger \right) \left(\text{Id} + is\hat{K} \right) \simeq \text{Id} + is(\hat{K} - \hat{K}^\dagger) \quad (2.3.7)$$

da cui $\hat{K} = \hat{K}^\dagger$.

Si introduce operatore **impulso**² come $\hat{K} = -\frac{1}{\hbar}\hat{p}$, da cui $\hat{U}(s) = \exp(-\frac{i}{\hbar}s\hat{p})$. Si ricava la sua rappresentazione nello spazio delle posizioni. Sviluppando³:

$$\begin{aligned} \hat{U}\psi(x) &\simeq \left(1 - \frac{i}{\hbar}s\hat{p} \right) \psi(x) \\ \psi'(x) &\equiv \psi(x-s) \simeq \psi(x) + s \frac{d}{ds} \psi(x-s) \Big|_{s=0} = \psi(x) - s\partial_x \psi(x) \\ &\Rightarrow \left(1 - \frac{i}{\hbar}s\hat{p} \right) \psi(x) = \psi(x) - s\partial_x \psi(x) \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

Da cui $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$.

2.3.3 Funzione d'onda degli impulsi

Visto che $\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar\partial_x|\psi\rangle$, vale $\langle x|\hat{p}|p\rangle = \hat{p}\langle x|p\rangle \equiv \hat{p}\psi_p(x) \Rightarrow -i\hbar\partial_x\psi_p(x) = p\psi_p(x)$, quindi $\psi_p(x) = \langle x|p\rangle = C \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)$. Per C , si usa normalizzazione:

$$\delta(p'-p) = \langle p'|p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle p'|x\rangle \langle x|p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |C|^2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar}x(p'-p)\right) = 2\pi |C|^2 \hbar \delta(p-p')$$

quindi $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ e

$$\psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right) \quad (2.3.9)$$

Dato generico $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ rappresentato dalle posizioni, usando $\langle p|x\rangle^* = \psi_p(x)$:

$$\tilde{\psi}(p) \equiv \langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) \psi(x) dx \quad (2.3.10)$$

¹Quindi sarà un possibile osservabile.

²Questa introduzione è giustificata dal fatto che, per il teorema di Nöther, l'impulso è il generatore delle traslazioni spaziali.

³Si ottiene l'espressione di \hat{p} nella rappresentazione delle coordinate sotto l'assunzione che una traslazione abbia il seguente effetto su una funzione d'onda: $\psi'(x) \equiv \hat{U}\psi(x) = \psi(x-s)$.

Quindi spazi di posizioni e momenti sono legati da una trasformata di Fourier¹:

$$\begin{cases} \psi(x) \equiv \langle x|\psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p) e^{ipx/\hbar} dp \\ \tilde{\psi}(p) \equiv \langle p|\psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \end{cases} \quad (2.3.11)$$

L'azione di \hat{X} su $\tilde{\psi}(p)$ è:

$$\hat{X}\tilde{\psi}(p) = i\hbar\partial_p\tilde{\psi}(p) \quad (2.3.12)$$

cioè la rappresentazione di \hat{X} nello spazio dei momenti è $\hat{X} = i\hbar\partial_p$. Infatti:

$$\begin{aligned} \langle p|\hat{X}|\psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle p|\hat{X}|x \rangle \langle x|\psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{x}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx = \left(-\frac{\hbar}{i}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \partial_p e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx \\ &= (i\hbar\partial_p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx = i\hbar\partial_p \tilde{\psi}(p) \end{aligned}$$

2.3.4 Simmetrie per stati che evolvono temporalmente

$\hat{O}(t, t_0)$ operatore di evoluzione temporale: $|\psi'(t)\rangle = \hat{O}(t, t_0) |\psi'(t_0)\rangle$ e $|\psi(t)\rangle = \hat{O}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$. Simmetria per traslazioni temporali implica: $|\psi'(t)\rangle = \hat{U}(s) |\psi(t)\rangle$, $\forall t$. Unendo le due:

$$\begin{aligned} |\psi'(t)\rangle &= \hat{U}(s) \hat{O}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(s) \hat{O}(t, t_0) \hat{U}^{-1}(s) \hat{U}(s) |\psi(t_0)\rangle \\ &= \hat{U}(s) \hat{O}(t, t_0) \hat{U}^{-1}(s) |\psi'(t_0)\rangle \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

Dall'imposizione dell'invarianza per traslazioni, risulta $\hat{U}(s) \hat{O}(t, t_0) \hat{U}^{-1}(s) = \hat{O}(t, t_0)$. Vista la struttura dell'operatore di evoluzione temporale², si ricava $[\hat{H}, \hat{U}(s)] = 0$.

Per s piccoli, $\hat{U}(s)$ è rappresentato da \hat{p} , quindi vale $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$.

2.3.5 Commutatore di \hat{p} e \hat{X}

Sia $\hat{T}(s)$ operatore di traslazione spaziale; se $|x'\rangle = \hat{T}(s) |x\rangle \equiv |x+s\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}s\hat{p}\right) |x\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{X} |x'\rangle &= x' |x'\rangle = (x+s) |x+s\rangle \\ \hat{X}' |x'\rangle &= \hat{T}(s) \hat{X} \hat{T}^\dagger(s) |x'\rangle = x |x+s\rangle \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

con \hat{X}' operatore traslato. Per s piccoli:

$$\hat{X}' = e^{-\frac{i}{\hbar}s\hat{p}} \hat{X} e^{\frac{i}{\hbar}s\hat{p}} \simeq \hat{X} + \frac{i}{\hbar}s[\hat{X}, \hat{p}]$$

¹Essendo $\lambda = h/p$ e $k = 2\pi/\lambda = 2\pi p/h = p/\hbar$.

²Nel caso in questione, si può scrivere come esponenziale dell'operatore \hat{H} , che, sviluppato in serie, permette di ricavare l'espressione del commutatore.

Visto che $(\hat{X} - s \text{Id}) |x + s\rangle = x |x + s\rangle$, da cui $\hat{X}' = \hat{X} - s \text{Id}$:

$$\hat{X}' = \begin{cases} \hat{X} + \frac{i}{\hbar} s [\hat{X}, \hat{p}] \\ \hat{X} - s \text{Id} \end{cases} \Rightarrow [\hat{X}, \hat{p}] = i\hbar \text{Id} \quad (2.3.15)$$

Alternativamente, si sarebbe potuto notare che

$$\begin{cases} \hat{X}\psi(x) = x\psi(x) \\ \hat{p}\psi(x) = -i\hbar\partial_x\psi(x) \end{cases}$$

implica:

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{p}]\psi(x) &= x(-i\hbar\partial_x)\psi(x) - (-i\hbar\partial_x)x\psi(x) \\ &= -x(i\hbar\partial_x\psi(x)) + x(i\hbar\partial_x\psi(x)) + \psi(x)(i\hbar\partial_x x) = i\hbar\psi(x), \quad \forall \psi(x) \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

2.4 Il principio di indeterminazione

2.4.1 Introduzione

Si usa funzione d'onda¹ tridimensionale² $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$, dove $|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}(x_1, x_2, x_3)\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes |x_3\rangle$. Questa definizione è necessaria per far sì che l'azione di un operatore posizione legato alla singola coordinata restituisca $\hat{X}_1 |\mathbf{r}\rangle = x_1 |\mathbf{r}\rangle$ per esempio³. Allora $|\psi(\mathbf{r})|^2 = |\langle \mathbf{r} | \psi \rangle|^2$ è densità di probabilità di trovare la particella in un certo intervallo $d\mathbf{r}$. Il valore di aspettazione si esprime come:

$$\mathbf{E}[\mathbf{r}] = \langle \psi | \hat{\mathbf{R}} | \psi \rangle \equiv \bar{\mathbf{R}} = \iiint dxdydz \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 = \begin{pmatrix} \bar{R}_{x_1} \\ \bar{R}_{x_2} \\ \bar{R}_{x_3} \end{pmatrix} \quad (2.4.1)$$

La varianza è data da $\mathbf{E}[(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{R}})^2] = \iiint dxdydz (\mathbf{r} - \bar{\mathbf{R}})^2 |\psi(\mathbf{r})|^2$, quindi si definisce:

$$\Delta_r^2 \stackrel{\text{def}}{=} \langle \psi | \hat{\mathbf{R}}_S^2 | \psi \rangle = \iiint dxdydz (\mathbf{r} - \bar{\mathbf{R}})^2 |\psi(\mathbf{r})|^2 \equiv \mathbf{E}[(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{R}})^2] \quad (2.4.2)$$

con $\hat{\mathbf{R}}_S = \hat{\mathbf{R}} - \bar{\mathbf{R}}$ è l'operatore posizione **sottratto** e $\bar{\mathbf{R}} = \bar{R} \text{Id}$. Analogamente:

$$\begin{aligned} \bar{p} &= \langle \psi | \hat{\mathbf{P}} | \psi \rangle \\ \Delta_p^2 &= \langle \psi | \hat{\mathbf{P}}_S^2 | \psi \rangle \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

2.4.2 Algebra degli operatori sottratti

Siano \hat{A}, \hat{B} autoaggiunti tali che $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, con \hat{C} autoaggiunto⁴; se \hat{A}_s, \hat{B}_s sono i sottratti, allora è ancora $[\hat{A}_s, \hat{B}_s] = i\hat{C}$:

$$\begin{aligned} [\hat{A}_s, \hat{B}_s] &= (\hat{A} - \bar{\hat{A}})(\hat{B} - \bar{\hat{B}}) - (\hat{B} - \bar{\hat{B}})(\hat{A} - \bar{\hat{A}}) = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) - \cancel{\bar{\hat{A}}\hat{B}} + \cancel{\bar{\hat{B}}\hat{A}} - \cancel{\hat{A}\bar{\hat{B}}} + \hat{B}\bar{\hat{A}} - \hat{A}\bar{\hat{B}} \\ &= [\hat{A}, \hat{B}] \end{aligned}$$

¹Con il pedice 0, indica che è relativa allo stato fondamentale ψ_0 .

²Essa è definita, sotto l'assunzione di poter separare le variabili nell'integrale, come $\psi(\mathbf{r}) = \psi(x_1)\psi(x_2)\psi(x_3)$. Essendo che $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$ e che ogni bra agisce sul ket del suo spazio di Hilbert, si ottiene $\psi(\mathbf{r}) = \langle x_1 \otimes x_2 \otimes x_3 | \psi_{x_1} \otimes \psi_{x_2} \otimes \psi_{x_3} \rangle = \langle x_1 | \psi_{x_1} \rangle \langle x_2 | \psi_{x_2} \rangle \langle x_3 | \psi_{x_3} \rangle$.

³In questo caso $|\mathbf{r}\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$, dove gli operatori $\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3$ agiscono rispettivamente su $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_3$.

⁴La i fuori serve per assicurare che \hat{C} sia autoaggiunto.

dove si è usato che l'identità commuta con ogni operatore. Sia $\hat{T} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}_S + i\omega\hat{B}_S$ non autoaggiunto: $\hat{T}^\dagger = \hat{A}_S - i\omega\hat{B}_S$. Si nota che $\hat{T}^\dagger\hat{T}$ è autoaggiunto: $(\hat{T}^\dagger\hat{T})^\dagger = \hat{T}^\dagger\hat{T}$.

Per generico $|\psi\rangle$ vale $\langle\psi|\hat{T}^\dagger\hat{T}|\psi\rangle \geq 0$:

$$|w\rangle = \hat{T}|\psi\rangle, \quad \langle w| = \langle\psi|\hat{T}^\dagger \Rightarrow \langle w|w\rangle = \langle\psi|\hat{T}^\dagger\hat{T}|\psi\rangle \geq 0$$

quindi:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle\psi|\hat{T}^\dagger\hat{T}|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{A}_S - i\omega\hat{B}_S)(\hat{A}_S + i\omega\hat{B}_S)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}_S^2|\psi\rangle + \omega^2 \langle\psi|\hat{B}_S^2|\psi\rangle + i\omega \langle\psi|[\hat{A}_S, \hat{B}_S]|\psi\rangle \\ &\Rightarrow \langle\psi|\hat{A}_S^2|\psi\rangle + \omega^2 \langle\psi|\hat{B}_S^2|\psi\rangle + i\omega \langle\psi|i\hat{C}|\psi\rangle \geq 0, \quad \forall\omega \end{aligned}$$

Vale $\forall\omega \Rightarrow$ si cerca ω_0 che la rende più piccola possibile¹; si ottiene, per $\omega = \omega_0$:

$$\Delta_A^2 \Delta_B^2 \geq \frac{\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle^2}{4} \Rightarrow \Delta_A \Delta_B \geq \frac{|\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle|}{2} \quad (2.4.4)$$

2.4.3 Il principio di indeterminazione

Usando \hat{A}, \hat{B} come \hat{X}_i, \hat{p}_i ; visto che $[\hat{R}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$, allora:

$$\Delta_{x_i} \Delta_{p_i} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.4.5)$$

2.5 Alcuni esempi di \hat{H} per sistemi quantistici

2.5.1 Sistema di due corpi

Il sistema è rappresentato dallo spazio di Hilbert totale dato da $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ delle singole particelle in 3D. Per due corpi 1, 2 in 3D, si ha un Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + U(|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|) \quad (2.5.1)$$

con² $[\hat{r}_{ij}, \hat{p}_{kl}] = i\hbar\delta_{ik}\delta_{jl}$. Si definiscono:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{X}} &= \frac{m_1\hat{\mathbf{r}}_1 + m_2\hat{\mathbf{r}}_2}{m_1 + m_2}; \quad \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{r}}_2 - \hat{\mathbf{r}}_1 \\ \hat{\mathbf{P}} &= \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2; \quad \hat{\mathbf{p}} = \frac{m_1\hat{\mathbf{p}}_2 - m_2\hat{\mathbf{p}}_1}{m_1 + m_2} \end{aligned} \quad (2.5.2)$$

con $[\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ e $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$. In questo modo³:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(|\hat{\mathbf{x}}|), \quad M = m_1 + m_2 \quad \text{e} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2.5.3)$$

che agisce su una nuova separazione dello spazio di Hilbert in termini di \mathbf{X} (coordinata del centro di massa) e \mathbf{x} (coordinata relativa): $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{CM}} \otimes \mathcal{H}_{\text{rel}}$.

¹La procedura si basa sul derivare rispetto a ω e imporre derivata a 0.

²Il primo indice rappresenta a quale delle due particelle fa riferimento la grandezza, mentre il secondo indice indica la componente del vettore.

³Si sostituisce $\hat{\mathbf{p}}_1 = -\hat{\mathbf{p}} + m_1\hat{\mathbf{P}}/(m_1 + m_2)$ e $\hat{\mathbf{p}}_2 = \hat{\mathbf{p}} + m_2\hat{\mathbf{P}}/(m_1 + m_2)$.

Da eq. 2.5.1, passando in rappresentazione delle coordinate:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_1}\vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\vec{\nabla}_2^2 + U(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}_X^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}_x^2 + U(|\mathbf{x}|)\end{aligned}\quad (2.5.4)$$

Si è separato \hat{H} in parte dipendente da $\hat{\mathbf{X}}$ e parte dipendente solo da $\hat{\mathbf{x}}$. Per risolvere l'equazione di Shrödinger¹ si usa la separazione delle variabili: $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{X}) = A(\mathbf{X})B(\mathbf{x})$:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}_X^2 A(\mathbf{X}) = EA(\mathbf{X}) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}_x^2 + U(|\mathbf{x}|)\right) B(\mathbf{x}) = E'B(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (2.5.5)$$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}_X^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}_x^2 + U(|\mathbf{x}|)\right) \psi(\mathbf{x}, \mathbf{X}) = (E + E')\psi(\mathbf{x}, \mathbf{X})$$

2.5.2 Particella in campo esterno

In 1D, particella soggetta a $F = -\partial_x V(x)$ con $V(x)$ potenziale. In questo caso, varrà:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (2.5.6)$$

L'equazione di Shrödinger è:

$$i\hbar\partial_t |\psi(x, t)\rangle = \hat{H} |\psi(x, t)\rangle \quad (2.5.7)$$

In rappresentazione delle coordinate, visto che \hat{H} si rappresenta come $-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)$:

$$i\hbar\partial_t \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right) \psi(x, t) \quad (2.5.8)$$

In rappresentazione degli impulsi, invece:

$$i\hbar\partial_t \tilde{\psi}(p, t) = \left(\frac{p^2}{2m} + V(i\hbar\partial_p)\right) \tilde{\psi}(p, t) \quad (2.5.9)$$

2.6 L'oscillatore armonico

2.6.1 Operatori di creazione e distruzione

Si prende un Hamiltoniano analogo al caso classico:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (2.6.1)$$

Tramite costanti del sistema come m, ω, \hbar , si costruiscono altre costanti caratteristiche del sistema in questione: $\ell_\omega = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ lunghezza caratteristica e $p_\omega = m\omega\ell_\omega$ impulso caratteristico. Da queste, si definiscono gli operatori:

$$\begin{cases} \hat{p} = \hat{P}/p_\omega \\ \hat{q} = \hat{x}/\ell_\omega \end{cases} \Rightarrow \hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} [\hat{p}^2 + \hat{q}^2] \quad (2.6.2)$$

¹Data da $\hat{H}\psi = E\psi$, con E energia dello stato.

Si definisce anche $\hat{a} = (\hat{q} + i\hat{p})/\sqrt{2}$, che soddisfa $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ e $\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})$. Per $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a} \Rightarrow \hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2)$ ¹; inoltre:

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{a}] &= [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a} \\ [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] &= \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \end{aligned}$$

Prendendo base di autostati di \hat{N} tali che $\hat{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$ e definendo $\hat{a}|\nu\rangle = |w\rangle$, si ha²:

$$\hat{N}|w\rangle = \hat{N}\hat{a}|\nu\rangle = (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|\nu\rangle = \hat{a}(\nu - 1)|\nu\rangle = (\nu - 1)\hat{a}|\nu\rangle = (\nu - 1)|w\rangle \quad (2.6.3)$$

Questo significa che $|w\rangle$ è autostato con autovalore diminuito di 1 rispetto a quello di partenza, che si traduce nel fatto che \hat{a} mappa gli autostati di \hat{N} in autostati con autovalore diminuito di 1.

Si osserva, poi, che gli autovalori di \hat{N} non sono mai negativi:

$$0 \leq \langle w|w\rangle = \langle \nu|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\nu\rangle = \langle \nu|\hat{N}|\nu\rangle = \nu \langle \nu|\nu\rangle = \nu$$

che assicura che $\hat{a}|0\rangle = |0\rangle$. In maniera del tutto analoga si vede che $\hat{N}\hat{a}^\dagger|\nu\rangle = (\nu + 1)\hat{a}^\dagger|\nu\rangle$, quindi \hat{a}^\dagger aumenta autovalore. Si nota che **non vi è limite superiore** agli autovalori, mentre limite inferiore è dato da $\langle \nu|\nu\rangle \geq 0$. Ciò significa che autovalori di \hat{N} vanno da 0 a $+\infty$.

Si nota, infine, che, vale $\hat{a}^\dagger|n\rangle = c_n|n+1\rangle$ ³; per trovare c_n , facendo uso della relazione di commutazione $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{N} + 1$:

$$\begin{cases} \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|(\hat{N} + 1)|n\rangle = (n + 1)\langle n|n\rangle = n + 1 \\ \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = |c_n|^2 \langle n + 1|n + 1\rangle = |c_n|^2 \end{cases} \Rightarrow |c_n|^2 = n + 1$$

Dovendo avere autostati normalizzati:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad (2.6.4)$$

Dagli autovalori di \hat{N} , si ricavano quelli dell'energia $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2) \Rightarrow E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

2.6.2 Funzione d'onda per l'oscillatore armonico

In rappresentazione delle coordinate, l'equazione di Shrödinger è $\hat{H}\psi(x, t) = i\hbar\partial_t\psi(x, t)$, cioè:

$$\left[-\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi(x, t) = i\hbar\partial_t\psi(x, t) \quad (2.6.5)$$

Per gli autovalori, invece si ha $\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x)$ ⁴:

$$\left[-\frac{\hbar^2\partial_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad (2.6.6)$$

Si definisce $\lambda = E/E_\omega$, dove si è preso $E_\omega = \hbar\omega/2$. In rappresentazione delle coordinate, $q = x/\ell_\omega$, quindi $\psi(x) = \psi(\ell_\omega q) \equiv u(q)$. Quindi:

$$\frac{d^2u}{dq^2} + (\lambda - q^2)u = 0 \quad (2.6.7)$$

¹Questo si ottiene aggiungendo e sottraendo $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ all'interno della parentesi in \hat{H} .

²La seconda uguaglianza è assicurata dal commutatore $[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}$.

³Visto che \hat{a}^\dagger deve mappare autostato di \hat{N} in quello che ha autovalore aumentato di 1, allora $\hat{a}^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle$ con costante di proporzionalità c_n . Lo stesso vale per \hat{a} .

⁴Visto che l'evoluzione temporale degli autostati dell'Hamiltoniano è banale, cioè consiste nel prodotto per una fase, si trascura evoluzione temporale nell'equazione agli autovalori.

Dimostrazione. Essendo $q = x/\ell_\omega \Rightarrow \frac{d}{dx} = \frac{dq}{dx} \frac{d}{dq} = \frac{1}{\ell_\omega} \frac{d}{dq}$. Sostituendo nell'equazione agli autovalori:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\ell_\omega^2} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2} m \omega \ell_\omega^2 q^2 \right] \psi_E(x) = \left[-\frac{\hbar\omega}{2} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{\hbar\omega}{2} q^2 \right] \psi_E(x) = E \psi_E(x)$$

Usando $E = \lambda E_\omega = \lambda \frac{\hbar\omega}{2}$ e dividendo tutto per $\frac{\hbar\omega}{2}$, si ottiene il risultato cercato dopo aver sostituito $u(q) = \psi(\ell_\omega q)$. ■

Questo si dice *risrittura in unità naturali*, cioè si è espresso tutto tramite valori adimensionali.

Si impone condizione di moto limitato, quindi $\lim_{q \rightarrow \pm\infty} u(q) = 0$; sotto questo limite, l'equazione diventa

$$\frac{d^2 u}{dq^2} + q^2 u = 0 \Rightarrow u(q) \propto e^{q^2/2}, e^{-q^2/2}$$

da cui chiaramente si deve scartare $e^{q^2/2}$ perché non rispetta il limite. Si assume soluzione generale della forma:

$$u(q) = \mathcal{H}(q) e^{-q^2/2} \quad (2.6.8)$$

Per trovare $\mathcal{H}(q)$ si sostituisce in equazione originale $\Rightarrow \mathcal{H}'' - 2q\mathcal{H}' + (\lambda - 1)\mathcal{H} = 0$; matematicamente si dimostra che vi è soluzione che non modifica l'andamento di $e^{-q^2/2}$ solo se $(\lambda_n - 1) = 2n$ e questa soluzione sono i **polinomi di Hermite**, della forma

$$\mathcal{H}_n = (-1)^n e^{q^2} \frac{d^n e^{-q^2}}{dq^n} \quad (2.6.9)$$

Allora avere una soluzione fisicamente accettabile, cioè che rispetti $\lim_{q \rightarrow \pm\infty} u(q) = 0$ implica quantizzazione dell'energia perché, dovendo richiedere $\lambda_n = 2n + 1$, si ha $E_n = \lambda_n E_\omega = \hbar\omega(n + 1/2)$.

Ora si torna a $\psi_n(x)$ e si cerca la costante di normalizzazione C_n :

$$\psi_n(x) = C_n \mathcal{H}_n \left(\frac{x}{\ell_\omega} \right) e^{-x^2/(2\ell_\omega^2)} \quad (2.6.10)$$

Per la costante di normalizzazione, si fa uso di $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}_n^2(q) e^{-q^2} dq = 2^n (n!) \sqrt{\pi}$:

$$1 \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = |C_n|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}_n^2 \left(\frac{x}{\ell_\omega} \right) e^{x^2/\ell_\omega^2} dx = |C_n|^2 \ell_\omega \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}_n^2(q) e^{-q^2} dq$$

dove $q = x/\ell_\omega$. Allora si ha $C_n = 1/\sqrt{2^n \ell_\omega \sqrt{\pi} (n!)}$, da cui:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n \ell_\omega \sqrt{\pi} (n!)}} \mathcal{H}_n \left(\frac{x}{\ell_\omega} \right) e^{-x^2/(2\ell_\omega^2)} \quad (2.6.11)$$

2.7 Operatore parità e sistemi unidimensionali

2.7.1 Operatore parità

Operatore \hat{P}_a definito in modo tale da soddisfare

$$\begin{aligned} \hat{P}_a \hat{x} \hat{P}_a^{-1} &= -\hat{x}; \quad \hat{P}_a \hat{p} \hat{P}_a = -\hat{p} \\ \hat{P}_a^2 &= \text{Id} \Rightarrow \hat{P}_a = \hat{P}_a^{-1} \end{aligned} \quad (2.7.1)$$

Da questo deriva che $[\hat{P}_a \hat{x} \hat{P}_a, \hat{P}_a \hat{p} \hat{P}_a] = i\hbar$. Dato un generico stato $|\psi\rangle$, si ha:

$$\hat{P}_a \hat{x} \psi(x) = \hat{P}_a x \psi(x) = x \hat{P}_a \psi(x) \Rightarrow \hat{P}_a \hat{x} \hat{P}_a \psi(x) = -\hat{x} \hat{P}_a \psi(x) = x \hat{P}_a \psi(x)$$

cambiando segno ad entrambi i membri, si vede che $\hat{P}_a \psi(x) = \psi(-x)$. L'operatore parità può commutare con \hat{H} quando questo è, per esempio, quadratico in \hat{x}, \hat{p} , infatti:

$$[\hat{P}_a, \hat{p}^2] = \hat{P}_a \hat{p}^2 - \hat{p} \hat{P}_a = \hat{P}_a \hat{p}^2 + \hat{p} \hat{P}_a \hat{p} = \hat{P}_a \hat{p}^2 - \hat{P}_a \hat{p}^2 = 0$$

dove si è sfruttato solo che $\hat{P}_a \hat{P}_a = \text{Id}$. Quando \hat{P}_a commuta con \hat{H} , oltre a valere invarianza temporale, significa anche che hanno stessi autostati. Visto che $\hat{P}_a^2 = \text{Id}$, i suoi autovalori sono ± 1 , quindi nei casi in cui $[\hat{H}, \hat{P}_a] = 0$, si possono ordinare gli autostati $|n\rangle$ di \hat{H} t.c. $\hat{P}_a |n\rangle = (-1)^n |n\rangle$. Questo implica che:

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{x} | n \rangle &= -\langle n | -\hat{x} | n \rangle = -\langle n | \hat{P}_a \hat{x} \hat{P}_a | n \rangle = -(-1)^n (-1)^n \langle n | \hat{x} | n \rangle = -\langle n | \hat{x} | n \rangle \\ \Rightarrow \langle n | \hat{x} | n \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Analogamente si vede che $\langle n | \hat{p} | n \rangle = 0$.

2.7.2 Alcuni teoremi per sistemi unidimensionali

Si considera Hamiltoniano della forma $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$.

TEOREMA 2.1.

In 1D, \hat{H} ha spettro non-degenere.

TEOREMA 2.2.

Gli stati fondamentali dello spettro non hanno zeri.

TEOREMA 2.3.

Gli stati non-fondamentali dello spettro hanno degli zeri e l' n -esimo ne ha n .

TEOREMA 2.4.

Uno spettro discreto di \hat{H} corrisponde ad un moto limitato nello spazio.

2.7.3 Moto di una particella sotto potenziale

Si considera sistema 1D composto da particella soggetta a

$$U(x) = \begin{cases} V_0 & , x > 0 \\ 0 & , x < 0 \end{cases}$$

Conseguentemente, l'Hamiltoniano è $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x})$ e l'equazione agli autovalori è data da $\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x)$.

Quando una particella arriva da $x < 0$ e incontra potenziale V_0 si distinguono i casi in cui $E > V_0$ e $E < V_0$.

L'equazione di Shrödinger è data da:

$$\partial_x^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi = 0$$

- **Caso $E > V_0$.**

Se $x < 0$, si ha $\partial_x^2 \psi + k^2 \psi = 0$ con $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ ¹, quindi:

$$\psi_-(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \quad (2.7.2)$$

Se $x > 0$, invece, si ha, per $q = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$, $\partial_x^2 \psi + q^2 \psi = 0$, da cui:

$$\psi_+(x) = B_1 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx} \quad (2.7.3)$$

Si impone raccordo in $x = 0$ tra le soluzioni:

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = B_1 + B_2 & \text{continuità di } \psi \\ ik(A_1 - A_2) = iq(B_1 - B_2) & \text{continuità di } \psi' \end{cases}$$

Per altre condizioni, si usa flusso di probabilità $J = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \partial_x \psi - \psi \partial_x \psi^*)$; andando a inserire ψ_- nella definizione di J , si ha $J = \frac{\hbar k}{m}(|A_1|^2 - |A_2|^2) \equiv J_{\text{inc}} + J_{\text{rif}}$. Si assume assenza di onda riflessa, per cui $B_2 = 0$ ²; similmente, si prende anche $A_2 = 0$ perché non si è interessati ad un'onda che si propaga via dalla barriera.

Per normalizzazione di ψ_- ³, si prende $|J| = 1$; avendo interpretato $A_1 e^{ikx}$ come onda incidente e $A_2 e^{-ikx}$ come onda riflessa, si deve normalizzare a 1 J_{inc} , quindi $A_1 = 1/\sqrt{\hbar k/m} \equiv 1/\sqrt{v}$ ⁴.

Se $J_{\text{tr}} = \frac{\hbar q}{m}|B_1|^2$ come flusso trasmesso, si possono definire anche

$$T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{J_{\text{tr}}}{J_{\text{inc}}} = \frac{q}{k} \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}; \quad R \stackrel{\text{def}}{=} \frac{J_{\text{rif}}}{J_{\text{inc}}} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} \quad (2.7.4)$$

da cui deve risultare anche $T + R = 1$. Risolvendo le condizioni imposte, si trova:

$$\begin{cases} R = 1 - \frac{4kq}{(k+q)^2} \\ T = \frac{4kq}{(k+q)^2} \end{cases}$$

Per $E/V_0 \rightarrow \infty$, deve risultare $T \rightarrow 1$, quindi $k \sim q$.

- **Caso $E < V_0$.**

In $x < 0$, $\partial_x^2 \psi + k^2 \psi = 0$ con $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ e si ha stessa soluzione di prima. In $x > 0$ vale $\partial_x^2 \psi - \beta^2 \psi = 0$ con $\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$, quindi

$$\psi_+(x) = B_1 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x} \quad (2.7.5)$$

Per il resto, si richiede ancora $B_2 = 0$ e si impongono le stesse condizioni di raccordo.

¹Essendo che in $x < 0$ $U(x) = 0$.

²Si richiede questo perché è il coefficiente dell'onda che da $x > 0$ va verso $x < 0$.

³È comune utilizzare un tipo di normalizzazione alternativa quando si ha a che fare con particelle non confinate in una regione spaziale.

⁴Si identifica $\hbar k/m$ come la velocità di propagazione dell'onda.

2.7.4 Particella contro barriera di potenziale

Si considera $V(x) \neq 0$ per $x \in [0, a]$; si cerca di capire se nel caso di $V_0 > E$, si trova qualcosa per $x > a$.

Se $x < 0$ si ha $\partial_x^2 \psi + k^2 \psi = 0$, $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ e $\psi_- = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$. Per $0 < x < a$, si ha $\psi_a(x) = B_1 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x}$. Se $x > a$, si ha $\psi_+ = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$.

Le condizioni di raccordo sono da scrivere sia in $x = 0$ che in $x = a$; rispettivamente:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\beta & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad x = 0$$

$$\begin{pmatrix} e^{-\beta a} & e^{\beta a} \\ -\beta e^{-\beta a} & \beta e^{\beta a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ik e^{ika} & -ik e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$$

Si richiede $C_2 = 0$ perché si è interessati solo all'effetto tunnel e (forse) si prende $B_2 = 0$ come al solito. Risolvendo il sistema e imponendo $R + T = 1$, si trova

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{V_0 - E}{\hbar^2/(2ma^2)}} \right)} \equiv \frac{|C_1|^2}{|A_1|^2} \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\sqrt{\frac{V_0 - E}{\hbar^2/(2ma^2)}}} \quad (2.7.6)$$

con approssimazione per $V_0 - E \gg \hbar^2/(2ma^2)$.

2.8 Meccanica quantistica dei sistemi interagenti

Si considerano sistemi 1, 2. Se questi non interagiscono $\Rightarrow \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$; se $\{|a_n\rangle\}_n, \{|b_m\rangle\}_m$ basi di $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ rispettivamente, si avrebbe base di \mathcal{H} data da $|a_n, b_m\rangle = |a_n\rangle \otimes |b_m\rangle$, quindi $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ significa che:

$$|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |a_n\rangle \otimes |b_m\rangle \equiv \left[\sum_n c_n |a_n\rangle \right] \otimes \left[\sum_m d_m |b_m\rangle \right]$$

dove $c_{n,m} = c_n b_m$.

2.8.1 Operatori per sistemi non-interagenti

Se \hat{A}, \hat{B} operatori di 1, 2 rispettivamente, allora per $\{|a_n\rangle\}$ base di autostati di \hat{A} e $\{|b_m\rangle\}$ base di autostati di \hat{B} :

$$\begin{aligned} \hat{A} |a_n\rangle \otimes |b_m\rangle &= a_n |a_n\rangle \otimes |b_m\rangle \\ \hat{B} |a_n\rangle \otimes |b_m\rangle &= b_m |a_n\rangle \otimes |b_m\rangle \end{aligned}$$

Da questo, risulta

$$(\hat{A} \otimes \hat{B}) |a_n\rangle \otimes |b_m\rangle = a_n b_m |a_n\rangle \otimes |b_m\rangle$$

Per questa caratterizzazione, deve risultare $[\hat{A}, \hat{B}] = 0^1$. Infine, se $|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |a_n\rangle \otimes |b_m\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{A} |\psi\rangle &= \sum_{n,m} c_{n,m} (\hat{A} |a_n\rangle) \otimes |b_m\rangle = a_n |\psi\rangle \\ (\hat{A} \otimes \hat{B}) |\psi\rangle &= \sum_{n,m} c_{n,m} (\hat{A} |a_n\rangle) \otimes (\hat{B} |b_m\rangle) = a_n b_m |\psi\rangle \end{aligned}$$

¹Questo, in realtà, vale anche quando i sistemi sono interagenti.

2.8.2 La matrice densità

Se \mathcal{H} spazio del sistema complessivo, con base $|a_n b_m\rangle$, e $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, si scrive matrice densità o come $\rho = |\psi\rangle \langle\psi|$, o con elementi di matrice $\langle a_n b_m | \rho | a_j b_k \rangle$ della **matrice densità**.

Se \hat{R} operatore in \mathcal{H} , inserendo base completa tra ρ e \hat{R} :

$$\langle\psi|\hat{R}|\psi\rangle = \text{tr}(\rho\hat{R}) = \sum_{n,m} \langle a_n b_m | \rho \hat{R} | a_n b_m \rangle = \sum_{n,m,j,k} \langle a_n b_m | \rho | a_j b_k \rangle \langle a_j b_k | \hat{R} | a_n b_m \rangle$$

Si considera caso particolare $\hat{R} = \hat{R}^{(1)} \otimes \text{Id}^{(2)}$ (cioè \hat{R} agisce solo su \mathcal{H}_1) e si ha:

$$\begin{aligned} \text{tr}(\rho\hat{R}) &= \sum_{n,m,j,k} \langle a_n b_m | \rho | a_j b_k \rangle \langle a_j b_k | \hat{R} | a_n b_m \rangle = \sum_{n,m,j,k} \langle a_n b_m | \rho | a_j b_k \rangle \langle a_j | \hat{R}^{(1)} | a_n \rangle \overbrace{\langle b_k | \text{Id}^{(2)} | b_m \rangle}^{=\delta mk} \\ &= \sum_{n,m,j} \langle a_n b_m | \rho | a_j b_m \rangle \langle a_j | \hat{R}^{(1)} | a_n \rangle \equiv \text{tr}(\rho^{(1)} \hat{R}^{(1)}) \end{aligned}$$

dove $\rho^{(1)} = \text{tr}^{(2)} \rho \stackrel{\text{def}}{=} \sum_m \langle a_n b_m | \rho | a_j b_m \rangle$. Tutte le proprietà del proiettore valgono anche per $\rho^{(1)}$ ¹, cioè $\text{tr}^{(1)} \rho^{(1)} = 1$, $\rho^{(1)\dagger} = \rho^{(1)}$, ma **non è vero** che $\text{tr}^{(1)} (\rho^{(1)})^2 = 1$. In generale:

$$\text{tr}^{(1)} (\rho^{(1)})^2 \leq 1 \quad (2.8.1)$$

e l'uguaglianza vale quando lo stato che descrive è puro.

2.8.3 Caratterizzazione degli stati misti

Si considerano due sistemi 1, 2 interagenti e si studia il sistema complessivo, rappresentato da $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, con Hamiltoniano $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_I$. L'evoluzione temporale di un $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ è data da:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi(0)\rangle$$

Gli stati che non si possono scrivere come miscela di altri stati sono detti **puri** e si parla di **sovrapposizione coerente**. Un esempio è $|\psi\rangle = (|0\rangle^{(1)} + |1\rangle^{(1)}) \otimes |0\rangle^{(2)}$ che si separa come prodotto tensore di stati del sistema 1 e del 2.

Quando questo non è possibile, si parla di **miscela statistica**, come per lo stato $|\psi\rangle = |0\rangle^{(1)} \otimes |0\rangle^{(2)} + |1\rangle^{(1)} \otimes |1\rangle^{(2)}$.

2.8.4 Valore di aspettazione per miscele statistiche

Per \hat{O} osservabile, valore di aspettazione per stati puri è $\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$. Se $|\phi\rangle$ stato misto, non si calcola allo stesso modo perché il sistema si distribuisce su più stati con una certa probabilità. Si calcola come:

$$\langle\hat{O}\rangle = \sum_n \omega_n \langle\phi_n|\hat{O}|\phi_n\rangle \quad (2.8.2)$$

dove i $|\phi_n\rangle$ sono stati di una base di \mathcal{H} e ω_n è la relativa probabilità, quindi $0 \leq \omega_n \leq 1$ e $\sum_n \omega_n = 1$.

¹Qui si tratterà $\rho^{(1)}$ in particolare, ma il discorso è analogo per gli altri.

Introducendo base ortonormale $\{|i\rangle\}$:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_{n,i,j} \omega_n \langle \phi_n | i \rangle \langle i | \hat{O} | j \rangle \langle j | \phi_n \rangle \equiv \sum_{n,i,j} \omega_n O_{ij} \langle \phi_n | i \rangle \langle j | \phi_n \rangle \equiv \sum_{i,j} \rho_{ji} O_{ij} \equiv \text{tr } \rho \hat{O} \quad (2.8.3)$$

dove si è definita la matrice densità

$$\rho_{ij} = \sum_n \omega_n \langle j | \phi_n \rangle \langle \phi_n | i \rangle \Rightarrow \hat{\rho} = \sum_n \omega_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \quad (2.8.4)$$

Con questa definizione, la **matrice di densità** permette descrizione del sistema. Per questa definizione, continuano a valere $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$ e $\text{tr } \rho = 1$, ma

$$\text{tr } \rho^2 = \sum_n \omega_n^2 \leq \sum_n \omega_n = 1$$

2.8.5 Evoluzione temporale della matrice densità

Per proiettore classico (che si ha per $\omega_n = 1$ per generico n) $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$ l'evoluzione temporale è data da:

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} |\psi(0)\rangle \langle \psi(0)| e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$$

Per stato misto, in generale:

$$\hat{\rho}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \hat{\rho}(0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$$

Per $\{|\phi\rangle_n\}_n$ base:

$$\rho(t) = \sum_n \omega_n e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} |\phi_n(0)\rangle \langle \phi_n(0)| e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \equiv \sum_n \omega_n |\phi_n(t)\rangle \langle \phi_n(t)| \quad (2.8.5)$$

2.9 L'operatore momento angolare

2.9.1 Rotazioni in 3D

Una generica rotazione si scrive come composizione di tre matrici di rotazione

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Per rotazione infinitesima, sviluppando attorno a 0 le matrici sopra, si ottiene la forma generica $R_k(\varepsilon) = \text{Id} - i\varepsilon \Omega_k$, dove k rappresenta l'asse attorno a cui si ruota e:

$$\Omega_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \Omega_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}; \Omega_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Vale $(\Omega_k)_{ij} = -i\varepsilon_{kij}$ e $[\Omega_i, \Omega_j] = i\varepsilon_{ijk}\Omega_k$. Componendo le tre matrici, la rotazione infinitesima più generale, attorno a generico asse \mathbf{n} , è scritta come $R_{\mathbf{n}} = \text{Id} - i\varepsilon_k \Omega_k$ ¹ (eliminando infinitesimi di ordine superiore al primo). Applicandola a vettore \mathbf{x} , si trova $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \delta\theta \mathbf{n} \times \mathbf{x}$, prendendo $\vec{\varepsilon} = \delta\theta \mathbf{n}$.

2.9.2 Rotazione su funzione d'onda

Dovendo rimanere la probabilità invariata sotto rotazione, la funzione d'onda non deve cambiare valore dopo rotazione dello spazio.

Dato operatore $\hat{U}_R : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, con R matrice di rotazione 3D, si richiede che:

$$\psi'(\mathbf{x}) = \hat{U}_R \psi(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x}) \quad (2.9.1)$$

dove $\hat{U}(R)$ in equazione sopra è definito in L^2 .

2.9.3 Momento angolare

Una trasformazione finita da quella infinitesima è data da

$$\hat{U}_R(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}} \quad (2.9.2)$$

con \mathbf{n} asse di rotazione, θ angolo di rotazione e \mathbf{J} vettore **momento angolare** degli operatori Hermitiani dei momenti angolari lungo ciascun asse.

Valgono le relazioni di commutazione e si mostra solo la prima:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_a, \hat{J}_b] &= i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{J}_c \\ [\hat{X}_a, \hat{J}_b] &= i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{X}_c \\ [\hat{p}_a, \hat{J}_b] &= i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{p}_c \end{aligned} \quad (2.9.3)$$

Dimostrazione. Si considerano due rotazioni infinitesime attorno a due assi distinti: $R_1(\varepsilon) = \text{Id} - i\varepsilon \Omega_1$ e $R_2 = \text{Id} - i\varepsilon \Omega_2$. Si approssima al secondo ordine (primo ordine non-banale):

$$R_G = R_2(-\varepsilon)R_1(-\varepsilon)R_2(\varepsilon)R_1(\varepsilon) \simeq (\text{Id} + \varepsilon^2[\Omega_1, \Omega_2]) = (\text{Id} + i\varepsilon^2 \Omega_3) = R_3(-\varepsilon^2)$$

dove si sono usate relazioni di commutazione delle Ω_k . Applicandole a funzione d'onda, si ha contemporaneamente:

$$\begin{cases} \psi'(\mathbf{x}) = \hat{U}_{R_G} \psi(\mathbf{x}) \simeq \left(\text{Id} + \frac{i}{\hbar} \varepsilon^2 \hat{J}_3 \right) \psi(\mathbf{x}) \\ \psi'(\mathbf{x}) \simeq \left(\text{Id} + \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} [\hat{J}_1, \hat{J}_2] \right) \psi(\mathbf{x}) \end{cases}$$

Confrontando le due, si ottiene la tesi generalizzando relazione. (Forse) alternativamente, si sarebbe potuto procedere direttamente da analisi delle relazioni di commutazione delle Ω_k , considerando che $\hat{J}_k = \Omega_k / \hbar$. ■

¹Si sta assumendo somma su k .

2.9.4 Momento angolare orbitale

Si definisce $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{X}} \times \hat{\mathbf{p}}$ parte orbitale di $\hat{\mathbf{J}}$. Si mostra che, in rappresentazione delle coordinate:

$$\hat{\mathbf{L}}\psi(\mathbf{x}) = -i\hbar\mathbf{x} \times \nabla\psi(\mathbf{x}) \quad (2.9.4)$$

Dimostrazione. Per rotazione $\delta\theta$ della funzione d'onda, da $\hat{U}_R\psi(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x})$, si ha:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\delta\theta\hat{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{L}}}\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} - \delta\theta\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x})$$

Sviluppando fino al primo ordine entrambi i membri:

$$\left[\text{Id} - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right] \psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) - \delta\theta(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x})$$

Utilizzando $(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla = \hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{x} \times \nabla)$ e dovendo valere per generica scelta di $\hat{\mathbf{n}}$, si ritrova la tesi. ■

2.9.5 Spettro del momento angolare

\hat{J}_a e \hat{H} non commutano, quindi non hanno base comune. Si definisce $\hat{J}^2 = \sum_a \hat{J}_a^2$ e si può mostrare che $[\hat{J}^2, \hat{J}_a] = 0$. Si cerca base comune a \hat{J}^2 e \hat{J}_z per convenzione; in particolare, si richiede:

$$\hat{J}^2 |\beta m\rangle = \hbar\beta |\beta m\rangle; \quad \hat{J}_z |\beta m\rangle = \hbar m |\beta m\rangle$$

con $|\beta m\rangle$ autostati normalizzabili¹. Si nota che:

- (a). visto che $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$, vale $\beta = \langle \beta m | \hat{J}^2 | \beta m \rangle \geq \langle \beta m | \hat{J}_z^2 | \beta m \rangle = m^2$;
- (b). definendo $\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$, con $[\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{J}_{\pm}$ e $[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar\hat{J}_z$ ², e dovendo valere $\beta \geq m^2 \Rightarrow \exists m_{\max}, m_{\min}$ tali che:

$$\begin{aligned} \hat{J}_z \hat{J}_+ |\beta m\rangle &= (\hat{J}_+ \hat{J}_z + \hbar\hat{J}_+) |\beta m\rangle = \hbar(m+1)\hat{J}_+ |\beta m\rangle \Rightarrow \hat{J}_+ |\beta m_{\max}\rangle = 0 \\ \hat{J}_z \hat{J}_- |\beta m\rangle &= (\hat{J}_- \hat{J}_z - \hbar\hat{J}_-) |\beta m\rangle = \hbar(m-1)\hat{J}_- |\beta m\rangle \Rightarrow \hat{J}_- |\beta m_{\min}\rangle = 0 \end{aligned}$$

- (c). visto che $\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z$, si ha:

$$0 = \hat{J}_- \hat{J}_+ |\beta j\rangle = (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z) |\beta j\rangle \Rightarrow \hbar^2(\beta - j^2 - j) = 0 \Rightarrow \beta = j(j+1)$$

con $j = m_{\max}$. Analogamente $m_{\min} = -j$. Visto che $\beta = j(j+1)$, si usa j al posto di β , per cui vale $-j \leq m \leq j$.

¹ Si usa notazione con due variabili β, m perché corrisponderanno ai due numeri quantici che permettono una più dettagliata descrizione dello stato che rappresentano.

² Si mostrano a partire da $[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{J}_c$.

2.9.6 Introduzione allo spin

Si usa solo parte orbitale $\hat{\mathbf{L}}$ per sistemi la cui descrizione avviene tramite singola funzione d'onda.

Si considera sistema descritto da più funzioni d'onda $\psi_1(\mathbf{x}), \psi_2(\mathbf{x})$; sotto rotazione, il sistema deve mantenere intatte le sue simmetrie e si deve anche considerare lo spin, che è una proprietà intrinseca della particella. Per questo motivo, una generica rotazione è data da:

$$\hat{U}_R \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}} \begin{pmatrix} \psi_1(R^{-1}\mathbf{x}) \\ \psi_2(R^{-1}\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (2.9.5)$$

con $\hat{\mathbf{S}}$ operatore momento angolare di spin. Questo si occupa della rotazione intrinseca della particella per mantenere intatta la simmetria di partenza, mentre $\hat{\mathbf{L}}$ si occupa della rotazione spaziale. Si assume che:

$$[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}] = 0 \quad (2.9.6)$$

e si ha $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$. Inoltre, visto che $[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{J}_c$, deve valere:

$$[\hat{S}_a, \hat{S}_b] = i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{S}_c \quad (2.9.7)$$

2.9.7 Spettro del momento angolare orbitale

Analogamente a quanto fatto per \hat{J} , si usano \hat{L}^2, \hat{L}_z con autostati $|\ell m\rangle$ tali che:

$$\hat{L}^2 |\ell m\rangle = \ell(\ell+1) |\ell m\rangle, \quad \hat{L}_z |\ell m\rangle = m |\ell m\rangle$$

Usando coordinate sferiche, $\hat{\mathbf{L}}$ nello spazio delle coordinate diventa:

$$\hat{\mathbf{L}} = r\hat{r} \times (i\hbar) \left[\hat{r}\partial_r + \frac{1}{r}\hat{\theta}\partial_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\partial_\varphi \right] = -i\hbar \left[\hat{\varphi}\partial_\theta - \frac{1}{\sin\theta}\hat{\theta}\partial_\varphi \right]$$

Si definiscono¹:

$$\begin{aligned} \hat{\ell}^2 &= \hat{L}^2/\hbar = - \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\varphi^2 + \frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta (\sin\theta \partial_\theta) \right] \\ \hat{\ell}_z &= \hat{L}_z/\hbar = -i\partial_\varphi \end{aligned} \quad (2.9.8)$$

Si cerca soluzione con la separazione delle variabili: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$. Inserendola in una delle due, visto che non hanno parte che agisce su $R(r)$, questa si semplifica e riduce il problema al calcolo di $Y(\theta, \varphi)$, quindi a risolvere:

$$\begin{cases} \hat{\ell}^2 Y(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1) Y(\theta, \varphi) \\ \hat{\ell}_z Y(\theta, \varphi) = m Y(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (2.9.9)$$

- **Soluzione della seconda equazione.**

Si risolve

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} [\Theta(\theta)\Phi(\varphi)] = m\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \implies \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = im\Phi(\varphi)$$

¹In $\hat{\ell}_z$ si ha solo componente φ perché è l'unica che contribuisce alla componente z di $\hat{\mathbf{L}}$, infatti $\hat{z} = \hat{r} \cos\theta - \hat{\theta} \sin\theta$.

Questo significa che $\Phi(\varphi) \propto e^{-im\varphi}$ con costante di normalizzazione data da $\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \Phi_{m'}(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}$ dove si è esplicitata dipendenza dal parametro $-\ell < m < \ell$. La soluzione completa è:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (2.9.10)$$

Infine, dovendo risultare $\varphi + 2\pi = \varphi$, si richiede che $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi) \Rightarrow e^{im(2\pi+\varphi)} = e^{im\varphi} \iff e^{i2\pi m} = 1 \iff m \in \mathbb{Z}$. Allora \hat{L}_z può avere solo autovalori del tipo $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \dots$

• **Soluzione della prima equazione.**

Si inserisce $\Phi_m(\varphi)$ e si usa $\partial^2 \Phi_m(\varphi) = -m^2 \Phi_m(\varphi)$, ottenendo:

$$-\left[-\frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \Theta(\theta) = \ell(\ell+1) \Theta(\theta)$$

La soluzione di questa sono i **polinomi di Legendre** $\Theta_{\ell m}(\theta) \propto P_{\ell}^m(\cos \theta)$.

Complessivamente, si ha:

$$Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = C_{\ell m} e^{im\varphi} P_{\ell}^m(\cos \theta), \quad C_{\ell m} = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \quad (2.9.11)$$

In questo modo:

$$\int (Y_{\ell'}^{m'})^* Y_{\ell}^m d\Omega = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

e formano base ortonormale per lo spazio di Hilbert L^2 .

2.10 Atomo di idrogeno

2.10.1 Particelle in campo centrale

Si studia problema generale di particelle in campo centrale $U(|\hat{x}_1 - \hat{x}_2|)$; volendo applicare, poi, il discorso all'atomo di idrogeno, si assume un moto limitato. Si riprende trattazione affrontata in §2.5.1, con $\psi(X, x) = \phi(X) \kappa(x)$ per assunzione, che deve soddisfare:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_X^2 \phi(X) = E_{\text{CM}} \phi(X) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_x^2 + U(x) \right) \kappa(x) = E \kappa(x) \end{cases} \quad (2.10.1)$$

Dalla prima, si trova $\phi(\vec{X}) = C e^{i\vec{k} \cdot \vec{X}}$, essendo $E_{\text{CM}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$. Poi ci si mette nel CM, per cui $E_{\text{CM}} = 0$, e si risolve la seconda usando le coordinate sferiche:

$$\hat{H} \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \Rightarrow \left[\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{1}{r^2} \hat{\ell}^2 \right] \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi = 0 \quad (2.10.2)$$

con $\hat{\ell}^2$ dato da eq. 2.9.8. Allora si assume $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$, per cui:

$$\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) R + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) R = 0$$

Usando $\chi(r) = rR(r)$, tale che $\chi(r) \rightarrow 0$ per $r \rightarrow 0$, e definendo $U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$, si ha:

$$\frac{d^2}{dr^2}\chi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_{\text{eff}}(r))\chi(r) = 0 \quad (2.10.3)$$

Vista l'equazione differenziale, la soluzione dipenderà dai parametri E, ℓ , quindi un autostato si esprime, in generale, come $|E, \ell, m\rangle$ e costituiscono un sistema ortonormale, che è anche non-degenere, conclusione derivante dal fatto che il problema per $R(r)$ è unidimensionale e relativo a moto limitato, quindi la coppia di autovalori E, ℓ , relativi rispettivamente a $\hat{H}, \hat{\ell}^2$, è non-degenere. Visto che le autofunzioni dipendono da m , lo si include per la descrizione degli stati.

Si assume $R(r) \propto r^a$, con a da determinare; per farlo, si sostituisce nell'equazione differenziale e si manda $r \rightarrow 0$, facendo rimanere l'equazione nel limite asintotico di r piccoli:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \ell(\ell+1)R = 0 \Rightarrow a = \ell \quad (2.10.4)$$

quindi $R(r) \propto r^\ell$.

2.10.2 Funzione d'onda per l'atomo di idrogeno

È il caso particolare della trattazione precedente con $U(\hat{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}}$. A partire dalle grandezze $m_e c^2 \simeq 0.5 \text{ MeV}$ e $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ costante di struttura fine, si definisco le grandezze caratteristiche del sistema:

$$\begin{aligned} \ell_B &= \frac{\hbar}{m_e c \alpha} \approx 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m} & (\text{raggio di Bohr}) \\ E_B &= \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 & (\text{costante di Rydberg}) \end{aligned} \quad (2.10.5)$$

Nel caso di atomo di idrogeno, si approssima $\mu \simeq m_e \equiv m$, e l'equazione agli autovalori relativa è:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x}) \quad (2.10.6)$$

Conviene passare in coordinate sferiche e sfruttare invarianza sotto rotazioni, per cui $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] = 0$. Usando separazione delle variabili: $\psi_{E\ell m}(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x} | E\ell m \rangle = R_{E\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$.

Si sostituiscono in eq. differenziale per R le grandezze $\bar{r} = r/\ell_B$ e $\bar{E} = E/E_B$. Per semplicità, si ometteranno le barre, ma si intendono grandezze riscalate. Definendo, inoltre, $n = 1/\sqrt{-2\bar{E}}$ e $\rho = 2r/n$:

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left[\frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad (2.10.7)$$

con $R = R(\rho)$. Si è visto che $R(\rho) \propto \rho^\ell$ per $\rho \rightarrow 0^+$, mentre per $\rho \rightarrow +\infty$ si ha $R'' - \frac{1}{4}R = 0 \Rightarrow R(\rho) \propto e^{\pm\rho/2}$. Volendo descrivere moto limitato, si elimina soluzione con $+$. Complessivamente, si ha:

$$R(\rho) = \rho^\ell e^{-\rho/2} L(\rho) \quad (2.10.8)$$

¹Qui n non è immaginario perché le energie relative al sistema limitato che si sta studiando sono assunte negative.

che, sostituita nell'equazione differenziale, restituisce forma di L , che deve essere una **ipergeometrica confluyente**. Imponendo che queste funzioni rispettino la condizione energetica $n \in \mathbb{N}$ e $n \geq \ell + 1$, le soluzioni sono i **polinomi generalizzati di Laguerre**:

$$L_k^{(s)}(\rho) = \frac{d^s}{d\rho^s} L_k(\rho), \text{ con } L_k(\rho) = e^\rho \frac{d^k}{d\rho^k} (\rho^k e^{-\rho}) \quad (2.10.9)$$

Mettendo tutto insieme e aggiungendo la costante di normalizzazione, si trova:

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{4(n-\ell-1)!}{(\ell_B)^3 n [(n+\ell)!]^3}} \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{n+\ell}^{(2\ell+1)}(\rho) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (2.10.10)$$

dove si è sostituito E con n come pedice in quanto sono in corrispondenza per la relazione $E_n = -\frac{m_e \alpha^2 c^2}{2n^2}$.

2.10.3 Lo stato fondamentale, medie e varianze di posizione e momento

L'energia minima del sistema è $E_1 = -m_e \alpha^2 c^2 / 2$ e, visto che si deve rispettare $n \geq \ell + 1$ e $|m| \leq \ell$, associata a:

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi \ell_B^3}} e^{-r/\ell_B} \quad (2.10.11)$$

Essendo il sistema nello stato fondamentale invariante per rotazioni, deve anche valere $\langle 0 | \hat{\mathbf{X}} | 0 \rangle = 0$; questo perché se esistesse grandezza vettoriale, sistema non più invariante per rotazioni \Rightarrow si distingue direzione e verso del vettore. Per lo stesso motivo: $\langle 0 | \hat{\mathbf{p}} | 0 \rangle = 0^1$.

Si può riscrivere ψ_{100} in termini di $\bar{r} = r/\ell_B$, con normalizzazione $(\sqrt{\pi})^{-1} \Rightarrow \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\bar{r}}$.

Si cerca probabilità di ottenere un certo impulso \mathbf{p} (relativo allo stato fondamentale): $\mathcal{P}(p) = |\tilde{\psi}_{100}(p)|^2$. Si ottiene trasformando con Fourier ψ_{100} :

$$\tilde{\psi}_{100} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \frac{1}{(1+p^2)^2}$$

OSSERVAZIONE 2.1. Sistema invariante per rotazione $\Rightarrow \tilde{\psi}(p)$ dipende solo da $|\mathbf{p}|$.

Si calcola varianza della posizione²:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\mathbf{X}}^2 | 0 \rangle &= \int d^3x \langle 0 | x \rangle \langle x | \hat{\mathbf{X}}^2 | 0 \rangle = \int d^3x \psi_{100}^*(x) \hat{\mathbf{X}}^2 \psi_{100}(x) \\ &= \int r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi |\mathbf{x}|^2 |\psi_{100}(x)|^2 \\ &= \frac{1}{\pi \ell_B^3} \int_0^{+\infty} dr r^4 e^{-2r/\ell_B} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= \frac{4}{\ell_B^3} \int_0^{+\infty} dr r^4 e^{-2r/\ell_B} = \frac{4}{\ell_B^3} \cdot \frac{3\ell_B^5}{4} = 3\ell_B^2 \end{aligned} \quad (2.10.12)$$

¹È ragionevole che sia 0 perché lo stato è legato, nel senso che l'elettrone è vincolato a un moto limitato ad una certa regione dello spazio. Se non fosse nullo, il sistema andrebbe all'infinito lungo quella particolare direzione.

²Invarianza per rotazioni $\Rightarrow \psi(\mathbf{x}) \equiv \psi(x)$, inoltre $|\mathbf{x}| \equiv x \equiv r$.

dove si è usato $\int_0^{+\infty} r^n e^{-\alpha r} dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$. Ora si fa il calcolo per $\langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle$. Si ha $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ nelle coordinate, quindi:

$$\langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{100}^*(\mathbf{x}) \nabla^2 \psi_{100}(\mathbf{x}) d^3x = -\hbar^2 \cdot 4\pi \int_0^\infty \psi_{100}(r) \nabla^2 \psi_{100}(r) r^2 dr$$

Per una funzione radiale $\nabla^2 \psi(r) = \psi''(r) + \frac{2}{r} \psi'(r)$, dove $\psi'(r) = -\frac{1}{l_B} \psi_{100}(r)$ e $\psi''(r) = \frac{1}{l_B^2} \psi_{100}(r)$, perciò $\nabla^2 \psi_{100}(r) = \frac{1}{l_B^2} \psi_{100}(r) - \frac{2}{l_B r} \psi_{100}(r)$. Allora:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle &= -\hbar^2 \cdot 4\pi \int_0^\infty \frac{1}{\pi l_B^3} e^{-2r/l_B} \left(\frac{1}{l_B^2} - \frac{2}{l_B r} \right) r^2 dr \\ &= -\frac{4\hbar^2}{l_B^3} \left[\frac{1}{l_B^2} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/l_B} dr - \frac{2}{l_B} \int_0^\infty r e^{-2r/l_B} dr \right] \\ &= -\frac{4\hbar^2}{l_B^3} \left[\frac{1}{l_B^2} \cdot \frac{l_B^3}{4} - \frac{2}{l_B} \cdot \frac{l_B^2}{4} \right] = \frac{\hbar^2}{l_B^2} \end{aligned} \quad (2.10.13)$$

Riassumendo:

$$\langle 0 | \hat{\mathbf{X}} | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{\mathbf{p}} | 0 \rangle = 0 ; \quad \langle 0 | \hat{\mathbf{X}}^2 | 0 \rangle = 3\ell_B^2 ; \quad \langle 0 | \hat{\mathbf{p}}^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{\ell_B^2} \quad (2.10.14)$$

2.10.4 Principio di indeterminazione

Si è visto che, essendo $[\hat{X}_a, \hat{p}_b] = i\hbar \delta_{ab}$, si ricava:

$$\left\langle (\hat{X}_a - \langle \hat{X}_a \rangle)^2 \right\rangle \left\langle (\hat{p}_b - \langle \hat{p}_b \rangle)^2 \right\rangle \geq \delta_{ab} \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.10.15)$$

Applicandolo allo stato fondamentale, per quanto detto sopra, $\langle \hat{X}_a \rangle = \langle \hat{p}_b \rangle = 0, \forall a, b$; inoltre, valendo invarianza per rotazioni, sommando su a, b , si ha:

$$\langle \hat{\mathbf{X}}^2 \rangle \langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle \geq \frac{3\hbar^2}{4} \quad (2.10.16)$$

D'altra parte $\langle 0 | \hat{X}_a^2 | 0 \rangle = \frac{1}{3} \langle 0 | \hat{\mathbf{X}}^2 | 0 \rangle$ e $\langle 0 | \hat{p}_a^2 | 0 \rangle = \frac{1}{3} \langle 0 | \hat{\mathbf{p}}^2 | 0 \rangle$ vista l'invarianza per rotazioni, quindi:

$$\frac{\hbar^2}{4} \leq \langle 0 | \hat{X}_a^2 | 0 \rangle \langle 0 | \hat{p}_a^2 | 0 \rangle = \frac{1}{9} \langle 0 | \hat{\mathbf{X}}^2 | 0 \rangle \langle 0 | \hat{\mathbf{p}}^2 | 0 \rangle \Rightarrow \langle \hat{\mathbf{X}}^2 \rangle \langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle \geq \frac{9}{4} \hbar^2 \quad (2.10.17)$$

per cui si ottiene un limite inferiore più preciso. Tuttavia si possono usare i risultati in eq. 2.10.14, per concludere che $\langle \hat{\mathbf{X}}^2 \rangle \langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle = 3\hbar^2$, conforme con le stime di sopra.

2.10.5 Oscillatore armonico 3D

Si studia sistema con Hamiltoniano $\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}_i^2$. Questo si può scomporre come $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3$, ciascuno relativo a una coordinata spaziale.

Gli Hamiltoniani si diagonalizzano separatamente, con $\hat{H}_1 |n_1\rangle = E_{n_1} |n_1\rangle$, con $E_{n_1} = \hbar \omega (n_1 + 1/2)$. Per operatore di creazione: $|n_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} |0\rangle$, con $|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} \ell_\omega^{1/2}} e^{-x^2/(2\ell_\omega^2)}$.

Chiaramente $[\hat{H}_i, \hat{H}_j] = 0$, quindi uno stato di \hat{H} , individuabile tramite $|n_1 n_2 n_3\rangle$, si può rappresentare con $|n_1\rangle |n_2\rangle |n_3\rangle$; ne segue che $E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3 + 3/2) \equiv \hbar\omega(n + 3/2)$, visto che $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3$.

Potendo scomporre $|n_1 n_2 n_3\rangle$, questo si scrive come:

$$|n_1 n_2 n_3\rangle = C(\hat{a}_1^+)^n (\hat{a}_2^+)^n (\hat{a}_3^+)^n |000\rangle$$

dove C è un fattore di normalizzazione e gli \hat{a}_i^+ sono operatori di creazione relativi alla variabile i -esima.

In 3D, la funzione d'onda è:

$$\varphi_0 = \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \ell_\omega^{1/2}} \right)^3 e^{-r^2/(2\ell_\omega^2)} \quad (2.10.18)$$

Il valore medio della distanza è dato, usando $\hat{r}^2 = \hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2 + \hat{x}_3^2$, da:

$$\langle 0|^{(1)} \langle 0|^{(2)} \langle 0|^{(3)} (\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2 + \hat{x}_3^2) |0\rangle^{(1)} |0\rangle^{(2)} |0\rangle^{(3)} = \langle 0|\hat{x}_1^2|0\rangle \langle 0|\hat{x}_2^2|0\rangle \langle 0|\hat{x}_3^2|0\rangle = \frac{3}{2}\ell_\omega^2$$

2.11 Lo spin

Si ricorda che per sistemi descritti da più funzioni d'onda, una rotazione \hat{R} agisce come:

$$\hat{R} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = \hat{M} \begin{pmatrix} \psi_1(R^{-1}\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \psi_n(R^{-1}\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

con $\hat{R}(\hat{n}, \theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}} \hat{M}(\hat{n}, \theta)$, dove \hat{M} agisce sulle componenti (rotazione passiva), mentre l'esponenziale agisce sulle coordinate (rotazione attiva).

Visto che \hat{R} deve essere unitario e che l'esponenziale già lo è, anche \hat{M} deve esserlo; allora $\hat{M}(\hat{n}, \theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\hat{\mathbf{S}}}$, con $\hat{\mathbf{S}}$ Hermitiano.

$[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}] = 0$ visto che agiscono indipendentemente, quindi $\hat{R}(\hat{n}, \theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot(\hat{\mathbf{L}}+\hat{\mathbf{S}})} \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}}$.

Valendo $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k$ e $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$, deve risultare $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$. Si ha anche:

$$\begin{aligned} [\hat{S}^2, \hat{S}_a] &= 0 \\ \begin{cases} \hat{S}^2 |s, s_z\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, s_z\rangle, & s = \frac{n}{2} \text{ e } n = 0, 1, 2, \dots \\ \hat{S}_z |s, s_z\rangle = \hbar s_z |s, s_z\rangle, & -s \leq s_z \leq s \end{cases} \end{aligned} \quad (2.11.1)$$

2.11.1 Gli angoli di Eulero e le matrici di Wigner

Permettono di esprimere la rotazione più generica. Si indicherà rotazione con $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$. Usando base completa $|jm\rangle$, si verifica che $\langle j'm'|\hat{R}|jm\rangle \equiv \langle \hat{R} \rangle = M\delta_{j'j}$, con M matrice generica; per farlo, si usa $[\hat{J}^2, \hat{R}] = 0$:

$$\begin{cases} \langle j'm'|\hat{J}^2\hat{R}|jm\rangle = j'(j'+1)\langle \hat{R} \rangle \\ \langle j'm'|\hat{J}^2\hat{R}|jm\rangle = j(j+1)\langle \hat{R} \rangle \end{cases} \iff j = j'$$

Si indica $\langle \hat{R} \rangle \equiv D_{m,m'}^j(\alpha, \beta, \gamma)$, con α, β, γ una delle possibili parametrizzazioni. Usando base $|jm\rangle$:

$$\hat{R}|jm\rangle = \sum_{j'm'} |j'm'\rangle \langle j'm'|\hat{R}|jm\rangle = \sum_{m'} |jm'\rangle D_{m,m'}^j(\alpha, \beta, \gamma)$$

Significa che per ogni rotazione, j è fissato. Si calcolano elementi di $D_{m,m'}^j$; si può dimostrare che¹:

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{z}\cdot\mathbf{J}} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{y}\cdot\mathbf{J}} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{z}\cdot\mathbf{J}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z}$$

Ne segue che:

$$\begin{aligned} D_{m,m'}^j(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle jm'|e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z}|jm\rangle = e^{i(\alpha m' - \gamma m)} \langle jm'|e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y}|jm\rangle \\ &\equiv e^{i(\alpha m' - \gamma m)} d_{m,m'}^j(\beta) \end{aligned}$$

Le matrici D, d sono note come **matrici di Winger**.

2.11.2 Composizione di due sistemi a due livelli

Si considerano due sistemi, 1, 2, a due livelli (quindi entrambi hanno spin $1/2$); in questo caso, ciascun operatore di spin sarà associato ad una matrice di Pauli: $\hat{S}_a = \frac{\hbar}{2}\sigma_a$.

Per i due sistemi, \hat{S}^2 e \hat{S}_z forniscono base completa $|s = 1/2, s_z = \pm 1/2\rangle$. Per descrivere uno stato di un solo sistema, è sufficiente $|s_z\rangle$, infatti si può scegliere $|s_z = -1/2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ e $|s_z = +1/2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Per il sistema composto, la base è data dal prodotto tensore:

$$\begin{aligned} \mathcal{B} = \left\{ |1\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 2 \end{vmatrix}^{(1)} \begin{vmatrix} 1 \\ 2 \end{vmatrix}^{(2)}, |2\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 2 \end{vmatrix}^{(1)} \begin{vmatrix} -1 \\ 2 \end{vmatrix}^{(2)}, |3\rangle = \begin{vmatrix} -1 \\ 2 \end{vmatrix}^{(1)} \begin{vmatrix} 1 \\ 2 \end{vmatrix}^{(2)} \right. \\ \left. , |4\rangle = \begin{vmatrix} -1 \\ 2 \end{vmatrix}^{(1)} \begin{vmatrix} -1 \\ 2 \end{vmatrix}^{(2)} \right\} \end{aligned} \quad (2.11.2)$$

Ora si assume che i due sistemi interagiscono con $\hat{H} = \beta \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$; si definisce $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ e soddisfa $[\hat{H}, \hat{\mathbf{S}}] = 0$ perché $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ è uno scalare, quindi invariante sotto rotazioni.

Inoltre, visto che \hat{H} dipende dall'interazione dei due spin: $[\hat{H}, \hat{S}_j] \neq 0$, mentre $[\hat{H}, \hat{P}_j^2] = 0$. Un possibile autostato di \hat{H} potrebbe essere, allora, $|s_1, s_2, s, s_z\rangle^2$ perché $\hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}^2, \hat{S}_z$ commutano con \hat{H} .

Si nota che $\hat{H} = \frac{1}{2}\beta [(S_1 + S_2)^2 - S_1^2 - S_2^2]$, cioè dipende solo da $\hat{S}^2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2$, quindi i possibili autovalori sono $\frac{\hbar^2}{2}\beta [s(s+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)]$.

Si cerca un cambio di base da $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ a $|j_1, j_2, J, M\rangle$, con J riferito a $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$ e M a \hat{J}_z , che è utile quando il sistema è invariante per rotazioni.

Si impone $M \stackrel{!}{=} m_1 + m_2$ perché $\hat{J}_z |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = M |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$. Definendo $N(J)$ numero di stati associati a J e $n(M)$ numero di stati associati a M , si ha:

$$n(M) = \sum_{i \geq |M|} N(i) \quad (2.11.3)$$

Per esempio, se $j_1 = j_2 = 1/2$, vale $n(1) = 1, n(0) = 2, n(-1) = 1 \Rightarrow N(1) = 1, N(0) = 1; n(2) = 1, n(1) = 2, n(0) = 3$, quindi $N(2) = 1, N(0) = 1, N(1) = 1$. Vale $N(j) = 1$ se $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$.

¹La seconda disuguaglianza non è dimostrata, è da prendere per buona.

²In questa notazione, s_1, s_2 sono gli autostati di \hat{S}_1^2 e \hat{S}_2^2 rispettivamente.

3 ESERCITAZIONI

3.1 Sistemi a due livelli

3.1.1 Descrizione generale

Sono sistemi i cui stati appartengono ad \mathcal{H} , con $\dim \mathcal{H} = 2$. Possibile base¹ è $\{|0\rangle, |1\rangle\} \equiv \{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$, dove $|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |\downarrow\rangle$ e $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |\uparrow\rangle$.

Dato $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, allora $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ e tali che $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ per normalizzazione $\langle\psi|\psi\rangle \stackrel{!}{=} 1$.

3.1.2 Matrici di Pauli

Dovendo essere autoaggiunto, l'Hamiltoniano per sistemi simili è della forma

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}, \quad a, c \in \mathbb{R}, \quad b \in \mathbb{C} \quad (3.1.1)$$

Una base per i possibili Hamiltoniani è $\mathcal{B} = \{\text{Id}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$, dove σ_i sono **matrici di Pauli**:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.1.2)$$

Autovalori e autovettori di, rispettivamente, $\sigma_z, \sigma_x, \sigma_y$ sono:

- $v_{z,-} \equiv |0\rangle$ relativo a $\lambda = -1$ e $v_{z,+} \equiv |1\rangle$ relativo a $\lambda = 1$;
- $v_{x,-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ relativo a $\lambda = -1$ e $v_{x,+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ relativo a $\lambda = 1$;
- $v_{y,-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}$ relativo a $\lambda = -1$ e $v_{y,+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ relativo a $\lambda = 1$.

Le matrici di Pauli soddisfano le seguenti proprietà:

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha \sigma_\beta &= \delta_{\alpha\beta} + i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma \Rightarrow \begin{cases} [\sigma_\alpha, \sigma_\beta] \stackrel{\text{def}}{=} \sigma_\alpha \sigma_\beta - \sigma_\beta \sigma_\alpha = 2i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma \\ \{\sigma_\alpha, \sigma_\beta\} \stackrel{\text{def}}{=} \sigma_\alpha \sigma_\beta + \sigma_\beta \sigma_\alpha = 2\delta_{\alpha\beta} \text{Id} \end{cases} \\ \text{tr } \sigma_\alpha &= 0 \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

3.1.3 Studio di un sistema a due livelli

Si considera $\hat{H} = a\sigma_z + b\sigma_x$, con $a, b \in \mathbb{R}$. Lo spettro è dato da:

$$0 \stackrel{!}{=} \det(\hat{H} - \lambda \text{Id}) = \begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ b & -a - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - a^2 - b^2$$

¹Qui si sottintende una base sul campo complesso \mathbb{C} .

da cui $\lambda_{\pm} = \pm\sqrt{a^2 + b^2}$. Gli autostati normalizzati sono:

$$|v_{\pm}\rangle = \frac{1}{[2(1 + r^2 \mp r\sqrt{1 + r^2})]^{1/2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -r \pm \sqrt{1 + r^2} \end{pmatrix} \equiv A_{\pm} \begin{pmatrix} 1 \\ R_{\pm} \end{pmatrix}, \quad r = \frac{a}{b}$$

ESERCIZIO 3.1.

Si assume che il sistema si trovi in $|v_+\rangle = A_+ (|\uparrow\rangle + R_+ |\downarrow\rangle)$; calcolare probabilità che stia in $|\uparrow\rangle$.

Svolgimento. La probabilità è data da $|\langle\uparrow|v_+\rangle|^2 = A^2 \equiv P_{\uparrow}$. ♠

ESERCIZIO 3.2.

Il sistema è ancora in $|v_+\rangle$; indicando con $|\rightarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ e $|\leftarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ gli autostati di σ_x , calcolare la probabilità di trovare il sistema in $|\leftarrow\rangle$.

Svolgimento. Si riscrive $|v_+\rangle$ in termini di $|\leftarrow\rangle, |\rightarrow\rangle$:

$$|v_+\rangle = A_+ \left(\frac{1 + R_+}{\sqrt{2}} |\rightarrow\rangle + \frac{1 - R_+}{\sqrt{2}} |\leftarrow\rangle \right)$$

quindi $P_{\leftarrow} = \left(A_+ \frac{1 - R_+}{\sqrt{2}} \right)^2$. ♠

ESERCIZIO 3.3.

Calcolare valore di aspettazione di σ_z in $|v_+\rangle$.

Svolgimento. Essendo $|v_+\rangle = A_+ (|\uparrow\rangle + R_+ |\downarrow\rangle) \Rightarrow \sigma_z |v_+\rangle = A_+ (|\uparrow\rangle - R_+ |\downarrow\rangle)$. Inoltre $\langle v_+ | = A_+^* (\langle\uparrow| + R_+^* \langle\downarrow|) = A (\langle\uparrow| + R_+ \langle\downarrow|)$ visto che $A_+, R_+ \in \mathbb{R}$. Allora:

$$\langle v_+ | \sigma_z | v_+ \rangle = A^2 - A^2 R_+^2 = A^2 (1 - R_+^2)$$

♠

3.2 Sistema composto da due sottosistemi a due livelli

I due sottosistemi si indicano con 1 e 2, quindi $|\psi_1\rangle$ sarà stato del primo e $|\psi_2\rangle$ sarà stato del secondo.

Si considera sistema con Hamiltoniano $\hat{H} = J\sigma_1 \cdot \sigma_2$, con $J \in \mathbb{R}$ e $\sigma_i = (\sigma_{i,x}, \sigma_{i,y}, \sigma_{i,z})$, mentre il prodotto, invece, è definito da:

$$\sigma_1 \cdot \sigma_2 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=\{x,y,z\}} \sigma_{1,i} \otimes \sigma_{2,i} \quad (3.2.1)$$

DEFINIZIONE 3.1 — PRODOTTO TENSORE TRA MATRICI.

Il prodotto tensore tra due matrici, rispettivamente di dimensioni $m \times n$ e $p \times q$, restituisce una matrice di dimensioni $pm \times qn$ definita come:

$$A \otimes B \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix} \quad (3.2.2)$$

dove ogni prodotto $a_{ij}B$ è blocco dato dal prodotto della matrice B per lo scalare a_{ij} .

Si assume che i due sottosistemi non interagiscono fra loro, quindi ogni operatore agisce sul proprio stato e la base di $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ è semplicemente $\mathcal{B} = \mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_2$, ossia:

$$\mathcal{B} = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\} \quad (3.2.3)$$

Si vuole rappresentare \mathcal{H} in forma matriciale. Usando:

$$\begin{aligned} \sigma_x |\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle, \quad \sigma_x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \\ \sigma_y |\uparrow\rangle &= i |\downarrow\rangle, \quad \sigma_y |\downarrow\rangle = -i |\uparrow\rangle \\ \sigma_z |\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \quad \sigma_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle \end{aligned} \implies \begin{aligned} \hat{H} |\uparrow\uparrow\rangle &= J |\uparrow\uparrow\rangle, \quad \hat{H} |\downarrow\downarrow\rangle = J (2 |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ \hat{H} |\uparrow\downarrow\rangle &= J (2 |\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle), \quad \hat{H} |\downarrow\uparrow\rangle = J |\downarrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

si ha:

$$H = J \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.2.4)$$

3.2.1 Spettro dell'Hamiltoniano

Continua nella lezione 3

3.3 Buche di potenziale

3.3.1 Buca di potenziale V_0

Si considera

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , |x| > \frac{a}{2} \\ -V_0 & , |x| \leq \frac{a}{2} \end{cases}, \quad a \in \mathbb{R}^{>0}$$

L'Hamiltoniano è $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x})$ e si risolve $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, ossia

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.3.1)$$

Svolgimento. Si assume $E > 0$. Fuori dalla buca ($|x| > a/2$) vale $V(x) = 0$, quindi:

$$\psi_{\text{out}}(x) = A \exp\left(i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) + B \exp\left(-i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) \quad (3.3.2)$$

Se $|x| = a/2$, invece, si ha:

$$\psi_{\text{bound}}(x) = A' \exp\left(i \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} x\right) + B' \exp\left(-i \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} x\right) \quad (3.3.3)$$

Si rigetta, allora, la possibilità $E > 0$ perché si è interessati al caso di **stati legati**. D'ora in avanti, si considererà $E < 0$. Si nota, inoltre, che $E \geq -V_0$ perché:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{p}^2}{2m} |\psi\rangle + V(\hat{x}) |\psi\rangle &= E |\psi\rangle \implies \left\langle \psi \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| \psi \right\rangle + \langle \psi | V(\hat{x}) | \psi \rangle = E \\ \implies \left\langle \psi \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| \psi \right\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) V(x) \psi(x) &\geq \left\langle \psi \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| \psi \right\rangle + \min_x V(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 \end{aligned}$$

Per condizione di normalizzazione, si trova che:

$$E \geq \left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle + \min_x V(x) \Rightarrow E \geq \min_x V(x) \equiv -V_0 \quad (3.3.4)$$

Si è interessati al caso di una particella all'interno della buca di potenziale, la cui posizione decresce esponenzialmente al di fuori, pertanto il range di interesse è $-V_0 \leq E < 0$.

- Soluzione fuori dalla buca.

Qui $V(x) = 0$, quindi la funzione d'onda è della forma $\psi(x) = Ae^{\lambda x} + Be^{-\lambda x}$, con $\lambda = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(-E)}$ ¹. Si indicherà la soluzione per $|x| < a/2$ con 1 e con 3 quella per $|x| > a/2$.

- Soluzione nella buca.

Qui $V(x) = -V_0$, quindi per $\eta = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$, si ha $\psi(x) = A_2 e^{i\eta x} + B_2 e^{-i\eta x}$. Visto che $E > -V_0 \Rightarrow \eta > 0$.

Si devono raccordare le soluzioni. Intanto si eliminano i termini non fisicamente pertinenti, come $B_1 e^{-\lambda x}$ e $A_3 e^{\lambda x}$ perché fanno divergere le soluzioni. Le condizioni di raccordo sono:

$$\begin{aligned} \psi_1\left(-\frac{a}{2}\right) &= \psi_2\left(-\frac{a}{2}\right) ; \quad \psi_1'\left(-\frac{a}{2}\right) = \psi_2'\left(-\frac{a}{2}\right) \\ \psi_2\left(\frac{a}{2}\right) &= \psi_3\left(\frac{a}{2}\right) ; \quad \psi_2'\left(\frac{a}{2}\right) = \psi_3'\left(\frac{a}{2}\right) \end{aligned}$$

Da quelle nella prima riga, si ha $A_1 e^{-\lambda \frac{a}{2}} = A_2 e^{i\eta \frac{a}{2}} + B_2 e^{-i\eta \frac{a}{2}}$ e $\lambda A_1 e^{\lambda \frac{a}{2}} = i\eta A_2 e^{i\eta} - i\eta B_2 e^{-i\eta \frac{a}{2}}$. Risolvendo per A_2, B_2 :

$$A_2 = \frac{i\eta + \lambda}{2i\eta} A_1 e^{-(\lambda - i\eta) \frac{a}{2}} ; \quad B_2 = \frac{i\eta - \lambda}{2i\eta} A_1 e^{-(\lambda + i\eta) \frac{a}{2}}$$

In modo analogo, dalle altre si ottengono due espressioni per B_3 :

$$B_3 = \begin{cases} \left(e^{i\eta a} \frac{\lambda + i\eta}{2i\eta} - e^{-i\eta a} \frac{\lambda - i\eta}{2i\eta} \right) A_1 \\ \left(-e^{i\eta a} \frac{\lambda + i\eta}{2\lambda} - e^{-i\eta a} \frac{\lambda - i\eta}{2\lambda} \right) A_1 \end{cases} \Rightarrow e^{i\eta a} \frac{\lambda^2 + 2i\lambda\eta - \eta^2}{2i\lambda\eta} = e^{-i\eta a} \frac{\lambda^2 - 2i\lambda\eta - \eta^2}{2i\lambda\eta}$$

da cui

$$e^{2i\eta a} \frac{(\lambda + i\eta)^2}{(\lambda - i\eta)^2} = 1 \Rightarrow \frac{\lambda - i\eta}{\lambda + i\eta} = \pm e^{i\eta a} \quad (3.3.5)$$

Si distinguono i casi negativo (caso a) e positivo (caso b).

- Caso a.

La condizione si riscrive come:

$$\begin{aligned} \frac{\lambda/\eta - i}{\lambda/\eta + i} &= -e^{i\eta a} \Rightarrow \frac{\lambda}{\eta} (1 + e^{i\eta}) = i(1 - e^{i\eta a}) \\ \Rightarrow \frac{\lambda}{\eta} &= \tan\left(\frac{\eta a}{2}\right) \end{aligned}$$

¹Si nota che $-E > 0$, quindi $\lambda \in \mathbb{R}$.

In questo caso, i coefficienti verificano

$$\frac{A_1}{B_3} = -e^{i\eta a} \frac{\lambda + i\eta}{\lambda - i\eta} = 1 ; \quad \frac{A_2}{B_2} = e^{i\eta a} \frac{\lambda + i\eta}{2i\eta} = 1$$

cioè le autofunzioni sono simmetriche rispetto allo zero, quindi sono pari: $\psi_a(x) = \psi_a(-x)$. In definitiva:

$$\psi_a(x) = \begin{cases} A_1 e^{\lambda x} & , x < -a/2 \\ B_2(e^{i\eta x} + e^{-i\eta x}) = 2B_2 \cos(\eta x) & , |x| < a/2 \\ A_1 e^{-\lambda x} & , x > a/2 \end{cases} \quad (3.3.6)$$

- Caso b.

Analogamente, al caso precedente, si ottiene:

$$\frac{\lambda}{\eta} = -\frac{1}{\tan\left(\frac{\eta a}{2}\right)}$$

Questa volta si ha $\frac{A_1}{B_3} = -1$ e $\frac{A_2}{B_2} = -1$, quindi $\psi_b(x) = -\psi_b(-x)$. In definitiva:

$$\psi_b(x) = \begin{cases} A_1 e^{\lambda x} & , x < -a/2 \\ B_2(e^{i\eta x} - e^{-i\eta x}) = 2iB_2 \sin(\eta x) & , |x| < a/2 \\ -A_1 e^{-\lambda x} & , x > a/2 \end{cases} \quad (3.3.7)$$

