

APPUNTI DI  
**MECCANICA QUANTISTICA**

*dal corso dei Prof. Ettore Vicari e Vincenzo Alba*

ALESSANDRO GORI  
DAVIDE CHIEGO  
MARCO POMPILI  
VALERIO CAPORIONI

Università di Pisa  
a.a. 2022/2023

*versione 1.0*

# PREFAZIONE

Il proposito di redigere questi *Appunti di Meccanica Quantistica* è nato durante la sessione estiva dello scorso anno, sotto le fronde di un albero, dove ci trovavamo per esercitarci in vista dell'esame di Metodi Matematici. Appena iniziato il corso di Meccanica Quantistica, si è manifestata con estrema chiarezza la necessità di avere appunti ordinati e completi, che riunissero il materiale presentato dal Professor Vicari e dal Professor Alba nelle ore di lezione, magari integrandolo con alcuni consigli di approfondimento. Le sezioni riguardanti parti non trattate a lezione sono state contrassegnate, nell'indice, dal simbolo  $\ddagger$ . Queste note si propongono dunque di fornire uno strumento di studio e di ripasso, sperando che possano rivelarsi utili a chi le leggerà così come lo sono state per chi si è occupato della loro stesura. Inoltre, consapevoli della complessità dell'argomento e della limitatezza della nostra esperienza, da un lato ci sentiamo in dovere di premettere che, tra queste pagine, potrebbero essere presenti errori, omissioni e refusi, dall'altro invitiamo, nel caso li trovaste, a segnalarceli, in modo da poter migliorare la qualità di questo lavoro.

Per scaricare la versione più aggiornata di questi appunti o per contattarci, rimandiamo a questo diligente bot Telegram:

<https://web.telegram.org/k/#@AharonovBot>

I riferimenti bibliografici principali del corso sono i libri [1] e [2]. Nello studio abbiamo trovato utile anche consultare i libri [3], [4] e [5].

Ringraziamo nel modo più vivo i colleghi Paul Purpureo, Nunzio Pelato, Roberto Scoperto e Bellero Fonte per il paziente lavoro di revisione e per i preziosi consigli, senza i quali questo testo non avrebbe mai visto la luce. Un ringraziamento sincero va anche al Dott. M. A. Struzzo per il suo aiuto cruciale e, naturalmente, anche alla Sig.ra Gavazza.

# INDICE

## I TEORIA

1	PRIMO IMPATTO CON LA MECCANICA QUANTISTICA	13
1.1	Perché è nata la Meccanica Quantistica?	13
1.2	Stabilità dell'atomo classico	14
1.3	Il minimo matematico per iniziare	18
2	CONCETTI DI BASE DELLA TEORIA ED EVOLUZIONE TEMPORALE	33
2.1	Assiomi della Meccanica Quantistica	33
2.2	Misure "certe" in Meccanica Quantistica	36
2.3	Commutatori ed osservabili compatibili	36
2.4	Sottosistemi non interagenti	37
2.5	Hamiltoniano ed evoluzione temporale	38
2.5.1	L'Equazione di Schrödinger	39
2.5.2	Evoluzione degli stati: la rappresentazione di Schrödinger	40
2.5.3	Evoluzione degli operatori: la rappresentazione di Heisenberg	41
2.5.4	Evoluzione dei proiettori: una rappresentazione intermedia	42
2.5.5	Operatore Derivata	43
2.6	Gli autostati dell'Hamiltoniano	43
2.6.1	Completezza a ogni istante	44
2.6.2	Stazionarietà	46
2.6.3	Spettro continuo e spettro discreto	47
2.6.4	Spettri ed evoluzione temporale delle probabilità	47
3	SIMMETRIE E LEGGI DI CONSERVAZIONE	53
3.1	Trasformazioni, simmetrie e conservazioni	53
3.1.1	Il legame tra simmetrie e conservazioni	55
3.1.2	L'operatore impulso	57
3.2	Il principio di indeterminazione	59
3.2.1	Le relazioni di commutazione canoniche	59
3.2.2	Il principio di indeterminazione di Heisenberg	60
3.3	Il legame tra impulso e posizione	63
3.3.1	Gli autostati dell'operatore Impulso rappresentati in coordinate	63
3.3.2	Operatori posizione e impulso e loro rappresentazioni	67
4	ASPECTI GENERALI DELLA DINAMICA DEGLI STATI E SISTEMI NOTEVOLI	73
4.1	L'operatore Hamiltoniano	73
4.1.1	La particella libera	73
4.1.2	L'operatore Potenziale	74
4.1.3	Equazione agli autovalori dell'hamiltoniano	75
4.2	Flusso di probabilità ed equazione di continuità	76

4.2.1	L'operatore Velocità	77
4.3	Spettro dell'hamiltoniana di una particella libera	78
4.4	Aspetti generali dei potenziali 1D	80
4.4.1	Operatore Parità	82
4.4.2	Esempio: una particella immersa in un potenziale	83
4.4.3	Separazione dell'hamiltoniano: problemi a $n$ corpi	85
4.5	L'oscillatore armonico unidimensionale	86
4.5.1	Autovalori dell'hamiltoniano: soluzione algebrica	87
4.5.2	Autostati dell'hamiltoniano: soluzione analitica	90
4.5.3	Relazione tra posizione e impulso	92
4.5.4	* Parità degli autostati	92
4.5.5	* Quanti di oscillazione	93
5	SISTEMI INTERAGENTI ED ENTANGLEMENT	97
5.1	Sistemi quantistici interagenti	97
5.1.1	Esempio: due sistemi a due livelli	98
5.1.2	Operatori di stato e miscele statistiche	99
5.1.3	La matrice densità	102
5.1.4	* Stati misti e sovrapposizione di stati	103
5.1.5	* Non univocità della scrittura degli stati misti	105
5.2	Matrice densità ridotta per un sottosistema quantistico	106
5.2.1	Proprietà della matrice densità "ridotta"	109
5.2.2	Evoluzione di uno stato misto	112
5.2.3	Esempio: ancora sui sistemi a due livelli	112
5.2.4	* Uno sguardo da vicino alla matrice densità	114
6	SISTEMI TRIDIMENSIONALI	119
6.1	Rotazioni e Momento Angolare	120
6.1.1	Il momento angolare come generatore delle rotazioni	121
6.2	Il momento angolare: spettro ed autostati	126
6.2.1	Autovalori di $J^2$ e $J_z$	127
6.2.2	Autofunzioni: le armoniche sferiche	130
6.2.3	Autofunzioni e parità	134
6.3	Sistemi a potenziale centrale	136
6.3.1	Il problema a due corpi in interazione	136
6.3.2	Una particella in campo centrale	138
6.3.3	Andamento della funzione d'onda nell'origine	140
6.3.4	Ancora sulla particella libera	141
7	L'ATOMO DI IDROGENO E L'OSCILLATORE ARMONICO 3D	147
7.1	L'atomo di idrogeno	147
7.1.1	Le autofunzioni del sistema	148
7.1.2	Considerazioni sui risultati e analisi	152
7.1.3	Coerenza col Principio di indeterminazione	158
7.2	L'oscillatore armonico tridimensionale	160
7.2.1	Spettro dell'hamiltoniano e principio di indeterminazione	161
7.2.2	* Autostati e parità	162
7.2.3	Degenerazione dei livelli energetici	163
8	LO SPIN	169

8.1	Introduzione al concetto di spin	169
8.1.1	※ Spinori e gradi di libertà aggiuntivi	169
8.1.2	Lo Spin e il Momento Angolare totale	173
8.1.3	Spin $1/2$	176
8.1.4	Le matrici di Pauli	177
8.1.5	Spin 1	178
8.2	Forma matriciale delle rotazioni tridimensionali	178
8.2.1	Angoli di Eulero e Matrici di Wigner	178
8.2.2	※ Rappresentazioni irriducibili del gruppo delle rotazioni	180
8.2.3	La rotazione degli spinori	182
8.2.4	※ L'equivalenza topologica locale tra $\text{SO}(3)$ e $\text{SU}(2)$	184
8.3	Rotazioni di angolo $2\pi$ : fermioni e bosoni	189
8.3.1	Una condizione sulle osservabili	190
8.3.2	※ Regole di superselezione	192
9	LA COMPOSIZIONE DEI MOMENTI ANGOLARI	201
9.1	La base del momento angolare totale	201
9.2	I coefficienti di Clebsch-Gordan	205
9.2.1	Un esempio: composizione di due spin $1/2$	207
9.2.2	※ Un modo per calcolare le matrici di Wigner	210
9.2.3	※ Simmetria per scambio dei coefficienti di CG	212
10	OPERATORI TENSORIALI E ROTAZIONI	217
10.1	Operatori tensoriali e rotazioni	217
10.1.1	Tensori irriducibili	218
10.1.2	Teorema di Wigner-Eckart	220
10.1.3	※ Tensori sferici vettoriali su stati invarianti per rotazione	221
10.1.4	※ Generalizzazione: applicazione di tensori sferici	221
10.1.5	※ Regole di selezione: come usare il Teorema di Wigner-Eckart	223
10.2	※ Oscillatore armonico 3D e momento angolare	224
10.2.1	※ Prima formulazione euristica	225
10.2.2	※ Una risposta algebrica: la composizione “tensoriale”	228
10.2.3	※ Il gruppo di simmetria $U(N)$ dell'oscillatore	232
10.2.4	※ Il significato degli operatori di salita e di discesa	234
11	TEORIA DELLE PERTURBAZIONI	239
11.1	Perturbazioni indipendenti dal tempo	239
11.1.1	Esempio: Sistema a due livelli	243
11.1.2	Esempio: Oscillatore armonico unidimensionale	244
11.2	Degenerazione nel caso <i>time-independent</i>	246
11.2.1	Un esercizio esemplificativo	248
11.3	Prima correzione relativistica per l'atomo di idrogeno	250
11.4	Perturbazioni dipendenti dal tempo	257
11.4.1	Evoluzione di uno stato eccitato per un tempo finito	259
11.4.2	Perturbazione elettromagnetica	260
11.4.3	La Regola d'oro di Fermi	262
11.5	La rappresentazione dell'interazione	264

11.6	Dinamiche adiabatiche	267
12	INTERAZIONI ELETTRONICHE	275
12.1	Particella in campo elettromagnetico	275
12.1.1	Invarianza di gauge	278
12.1.2	Conservazione della probabilità	279
12.2	Moto in campo magnetico uniforme	280
12.2.1	Le autofunzioni del problema	281
12.2.2	Degenerazione dello spettro: i livelli di Landau	283
12.3	Effetto Zeeman	285
12.4	Atomo di idrogeno in campo EM	287
12.5	Effetto Aharonov-Bohm	293
13	SIMMETRIE DISCRETE E PARTICELLE IDENTICHE	301
13.1	Parità	301
13.1.1	Regola di selezione: elementi di matrice fra stati a parità definita	301
13.2	Operatore di inversione temporale	303
13.2.1	Operatore di inversione e conservazioni	305
13.2.2	Azione del <i>time-reversal</i> sulle rappresentazioni di impulso e posizione	306
13.2.3	Inversione del moto e Spin	307
13.3	Indistinguibilità quantistica	308
13.3.1	L'operatore di permutazione	310
13.3.2	Definizione operativa di identicità	313
13.3.3	Regola di superselezione: interferenza fra autostati dell'operatore di permutazione	315
13.3.4	Esempio: occupazione dei livelli energetici per due particelle in un potenziale armonico	316
14	INTRODUZIONE ALLO SCATTERING QUANTISTICO	321
14.1	Aampiezza di scattering e comportamento asintotico	321
14.1.1	Onde sferiche e onde piane	324
14.2	La sezione d'urto differenziale	324
14.2.1	Due importanti precisazioni	325
14.3	Approssimazione di Born	326
14.3.1	Regimi di applicabilità	328
14.4	Una prima soluzione approssimata	330
14.4.1	Esempio: potenziale uniforme a raggio d'azione finito	332
14.4.2	Esempio: potenziale di Yukawa	333
14.5	Seconda soluzione: trattazione perturbativa <i>time-dependent</i>	334
14.5.1	La relazione di completezza su stati del continuo	335
14.5.2	Lo spazio delle fasi	337
14.5.3	Il rate di probabilità	337
14.5.4	La regola d'oro: il continuo	339
14.5.5	Verifica della consistenza: confrontiamo i due approcci	340
14.6	Sviluppo in onde parziali	341
14.6.1	Scattering da particelle lente	344

**II ESERCITAZIONI**

<b>1 SISTEMA A DUE LIVELLI</b>	<b>351</b>
1.0.1 Due sottosistemi a due livelli	354
1.1 Campo magnetico statico	356
1.2 Campo magnetico variabile nel tempo	360
<b>2 PROBLEMI UNIDIMENSIONALI</b>	<b>365</b>
2.1 Buca di potenziale quadrata	365
2.1.1 Buca di potenziale infinita	371
2.1.2 Buca di potenziale a delta di Dirac	374
2.2 Scattering da potenziale	376
<b>3 PROBLEMI TRIDIMENSIONALI</b>	<b>381</b>
3.1 Spin dell'elettrone nell'atomo di idrogeno	381
<b>4 PROBLEMI DI TEORIA PERTURBATIVA</b>	<b>387</b>
4.1 Perturbazione all'oscillatore armonico bidimensionale	387
4.2 Effetto Stark per l'atomo di idrogeno	392
4.3 Risonanza di spin - trattazione perturbativa	401
4.4 Perturbazione Spin-Posizione	406
4.5 Transizioni adiabatiche e ionizzazione	412
4.6 Due fermioni in un potenziale armonico	419
4.7 Due spin 1 in potenziale armonico isotropo	425
4.8 Oscillatore con perturbazione esponenziale	429
4.9 Elettrone contro atomo di idrogeno	431
4.9.1 Soluzione approssimata in due regimi estremali per $q$	434
4.9.2 Soluzione esatta	436
<b>5 PROBLEMI DI ESAME</b>	<b>437</b>
5.1 Positronio	437
5.2 Oscillatore armonico tridimensionale	447
5.3 Potenziale armonico bidimensionale	461
5.4 Buca infinita	474

**III APPENDICI**

<b>A CLEBSCH-GORDAN</b>	<b>483</b>
<b>B ALCUNE FUNZIONI NOTEVOLI</b>	<b>484</b>



Parte I  
TEORIA



# 1

## PRIMO IMPATTO CON LA MECCANICA QUANTISTICA

*In questo capitolo iniziale sono raccolte le motivazioni che hanno portato allo sviluppo della Meccanica Quantistica, in particolare le incongruenze interne delle teorie classiche. Inoltre sono raccolte, senza dimostrazioni e facendo riferimento ad altri testi e corsi per dettagli più approfonditi, le nozioni matematiche imprescindibili per costruire la teoria. La Meccanica Quantistica è una teoria essenzialmente lineare: le nozioni riportate fanno riferimento ai corsi di Geometria e Algebra Lineare e Metodi Matematici per la Fisica.*

### 1.1 PERCHÉ È NATA LA MECCANICA QUANTISTICA?

La Meccanica Quantistica è una teoria fisica sviluppata nel XX secolo. Su di essa si basa gran parte della nostra comprensione del mondo microscopico. Seguiremo un approccio diverso da quello storico, partendo da un certo numero di assiomi e deducendo in modo costruttivo i principi generali della teoria.

Esiste un certo numero di fenomeni, studiati a partire dalla fine del XIX secolo, che le teorie classiche (in particolare la Meccanica Newtoniana e l'Elettrodinamica Classica) non riuscivano a spiegare in modo soddisfacente. Nella Sez. 1.2 discuteremo sinteticamente uno dei più evidenti: la struttura atomica. La trattazione quantistica dell'atomo di idrogeno sarà effettuata nel Cap. 7 e raffinata nei capitoli successivi.

La Meccanica Quantistica predice molti fenomeni controintuitivi e di difficile comprensione: alcuni di essi presentano delle caratteristiche comuni, spesso senza una immediata controparte classica, che elenchiamo senza pretesa di completezza.

**DISCRETIZZAZIONE** Il nome della teoria è dovuto all'evidenza sperimentale di come alcune grandezze fisiche, misurate in vari esperimenti dall'inizio dello scorso secolo, appaiano discrete.

Un celebre esempio è l'esperimento di Franck-Hertz (1914). Esso consiste di due piastre metalliche alle quali è applicata una differenza di potenziale, e tra le quali è inserito un gas (per esempio mercurio gassoso). La d.d.p. accelera degli elettroni emessi al catodo, i quali incontrando gli atomi di gas possono dare luogo ad un urto elastico oppure anelastico. In questo secondo caso, l'elettrone può cedere una certa quantità di energia all'atomo, che in un mondo classico può assumere un valore in principio arbitrario. Sperimentalmente, al contrario, appariva come se gli scambi di energia fossero discreti, e si osservavano dei picchi di corrente (come funzione della d.d.p.  $\Delta V$ ) equi-

spaziati; nel caso del mercurio, in corrispondenza di multipli di 4.9 V (4.9 eV è l'energia necessaria ad far passare l'Hg al primo stato eccitato).

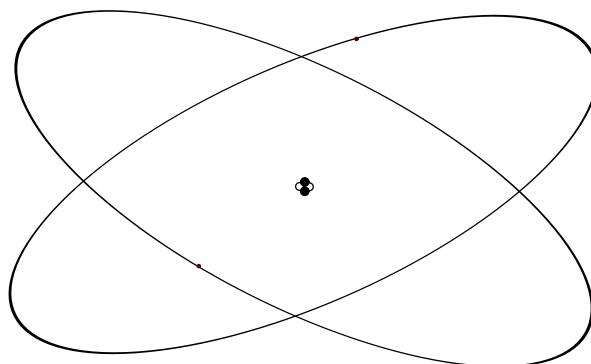
**DIFFRAZIONE** Il fenomeno della diffrazione era noto per i fenomeni ondulatori. In termini classici, per onde e.m. è una conseguenza della linearità delle equazioni di Maxwell. Davisson e Germer nel 1927 mostrarono che anche gli elettroni subiscono diffrazione.

Possiamo immaginare un esperimento concettuale di interferenza da doppia fenditura per illustrare questa evidenza. Chiamiamo  $A$  e  $B$  le due fenditure. Se si raccolgono gli elettroni in un punto  $C$  si osserva dunque che il comportamento dell'elettrone non è quello di una particella classica. In tal caso, note le probabilità  $P_{AC}$  e  $P_{BC}$  che un elettrone passato attraverso  $A$  o  $B$  raggiunga  $C$  si potrebbe associare una probabilità  $P_C = P_{AC} + P_{BC}$  che un elettrone, dopo essere partito da una sorgente posta prima delle fenditure, intercetti con la propria traiettoria il punto  $C$ . La comparsa dell'interferenza suggerisce che l'elettrone sia in realtà un altro tipo di particella, per cui non sia definita una traiettoria ma tale che il passaggio "sorgente  $\rightarrow C$ " sia descritto da una funzione  $A$ , detta *ampiezza di probabilità*, per cui si scriva  $P_C = |A_{AC} + A_{BC}|^2$ . Il fenomeno si verifica anche prolungando l'esperimento e inviando "un elettrone alla volta". Compito della teoria sarà precisare la natura bizzarra di questa particella.

**COERENZA** Quello di coerenza è un concetto introdotto dapprima nella meccanica ondulatoria classica, con riferimento alla condizione di sfasamento costante tra sorgenti che permette la comparsa dell'interferenza.

Nella nuova teoria il concetto di coerenza assume un significato diverso e più profondo, sempre legato a relazioni di fase che intercorrono tra componenti di un sistema.

## 1.2 STABILITÀ DELL'ATOMO CLASSICO



**Figura 1.1:** L'atomo costituisce un perfetto esempio di sistema la cui trattazione non è possibile con i soli mezzi della Fisica Classica. Anche se spesso lo immaginiamo pressappoco in questo modo, vedremo che tale rappresentazione contiene varie imprecisioni, determinate dalla nostra innegabile fatica ad immaginare il mondo in termini quantomeccanici.

Un importante fenomeno che le teorie classiche non riuscivano a descrivere è la stabilità della materia. Un esperimento condotto intorno al 1911, l'**esperimento di Rutherford**, aveva mostrato come la carica positiva del nucleo atomico dovesse occupare una regione (il nucleo) di dimensioni dell'ordine di  $r_n \sim 10^{-15} \text{ m} = 1 \text{ fm}$ . Si ipotizzò così che essa fosse al centro dell'atomo, e che attorno ad esso l'elettrone orbitasse ad una distanza tipica  $d \sim 10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ Å}$ .

Tuttavia, secondo la teoria classica dell'elettromagnetismo, una carica che accelera irraggia, perdendo energia. Per questa ragione, persino l'atomo più semplice, quello di idrogeno, non potrebbe esistere in forma stabile.

Immaginiamo infatti di descrivere il fenomeno, nel caso semplice di un elettrone in orbita circolare. Se lo descriviamo come una particella puntiforme di massa  $m$  e carica  $-e$ , e supponiamo che il protone sia approssimativamente fermo (poiché  $m_p \simeq 2000m$ ), allora l'elettrone è soggetto ad una interazione Coulombiana e ad ogni istante possiede l'energia

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - k_0 \frac{e^2}{r}$$

con  $v = |\mathbf{v}|$  e  $r = |\mathbf{r}|$  e dove  $k_0$  vale 1 in cgs,  $1/(4\pi\epsilon_0)$  in MKS; e usando il nucleo come origine del sistema di assi. Usiamo il secondo principio della dinamica per il moto circolare uniforme

$$m \frac{v^2}{r} = k_0 \frac{e^2}{r^2}$$

che sostituito nell'energia cinetica dà

$$E = \frac{1}{2}k_0 \frac{e^2}{r} - k_0 \frac{e^2}{r} = -k_0 \frac{e^2}{2r}$$

Secondo le Equazioni di Maxwell l'elettrone irraggia, perdendo energia e spiraleggiando verso il nucleo di conseguenza. Il contributo dominante all'irraggiamento è quello di dipolo elettrico, per cui la potenza irraggiata si scrive

$$P = \frac{2k_0}{3c^3} |\ddot{\mathbf{d}}|^2$$

con  $\mathbf{d} = -er$  dipolo elettrico dell'elettrone.

Supponiamo che valga l'approssimazione adiabatica, ossia che, se  $T$  è il periodo orbitale,

$$\frac{E(t+T) - E(t)}{E(t)} = \frac{\Delta E}{E} \ll 1$$

ossia che l'elettrone perda poca energia ad ogni periodo, in modo che il raggio orbitale  $r(t)$  sia sempre ben definito (traiettoria quasi-circolare).

Poiché  $\ddot{\mathbf{d}} = -e\mathbf{a}$ , si può utilizzare l'equazione del moto  $\mathbf{a} = \mathbf{F}/m$  e l'espressione della forza di Coulomb per riscrivere la potenza irraggiata come

$$P = \frac{2k_0}{3c^3} e^2 \left( \frac{k_0 e^2}{mr^2} \right)^2$$

da cui richiedendo che

$$P = -\frac{dE}{dt} \implies \frac{2k_0}{3c^3} e^2 \left( \frac{k_0 e^2}{mr^2} \right)^2 = -\frac{d}{dt} \left( -k_0 \frac{e^2}{2r} \right) = -k_0 \frac{e^2}{2} \frac{\dot{r}}{r^2}$$

si trova l'equazione differenziale a variabili separabili

$$\dot{r} = -\frac{4}{3c^3} \frac{(k_0 e^2)^2}{m^2 r^2}$$

che integrando tra l'istante 0 e  $T$ , quando l'elettrone raggiunge il nucleo ( $r(T) \simeq 0$ ) dà

$$T = \frac{mc^3 r_0^3}{4(k_0 e^2)^2} \sim 10^{-10} \text{ s}$$

per cui l'elettrone dovrebbe collassare sul nucleo in un tempo del tutto irragionevole.

### Stabilizzazione quantistica

La Fisica Classica non è in grado di giustificare la stabilità dell'atomo, il che è un evidente indizio dell'insufficienza di tale teoria a descrivere il mondo microscopico. In questa sezione, stabilizzeremo euristicamente l'atomo classico aggiungendo (in maniera abbastanza brutale) il *principio di indeterminazione* (che sarà descritto in dettaglio nella Sez. 3.2) alla trattazione precedente.

Dato un sistema fisico con un'estensione spaziale  $\Delta x$  e ampiezza spettrale nella distribuzione del momento<sup>1</sup>  $\Delta p$ , supponiamo che valga

$$\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar$$

Qual è la conseguenza diretta? Se riduciamo le dimensioni del sistema, inevitabilmente allarghiamo lo spettro dei momenti, rendendo accessibili velocità anche molto elevate; se vogliamo "rallentare" il sistema, dobbiamo per forza aumentarne le dimensioni.

Vista la grande differenza tra le masse di protone ed elettrone, come nella sezione precedente possiamo assumere il protone come fermo e attribuire il momento unicamente all'elettrone<sup>2</sup>, ossia

$$\Delta p \approx p$$

D'altronde,  $\Delta x$  è proprio la dimensione che ci interessa, e possiamo porlo uguale a  $r$  – in quanto è la distanza tra nucleo ed elettrone a misurare la dimensione dell'atomo. Possiamo quindi ricavare la relazione (molto *naïf*):

$$p \approx \frac{\hbar}{r}$$

Quello che abbiamo fatto è un passo notevolmente grande: legando  $p$  e  $r$ , abbiamo ridotto di 1 la dimensione del problema. L'Hamiltoniana del sistema, ora nella forma

$$E(r) = \frac{p^2}{2m} - k_0 \frac{e^2}{r} \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2} - k_0 \frac{e^2}{r}$$

adesso dipende unicamente da  $r$ , e ciò rende dipendenti due variabili la cui indipendenza *a priori* era fondamentale in Meccanica Classica. Un'energia di questo tipo ha un minimo:

$$\frac{dE}{dr} \Big|_{r=r_B} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + k_0 \frac{e^2}{r^2} \Big|_{r=r_B} = 0$$

$$r_B = \frac{\hbar^2}{mk_0e^2} = \frac{\hbar}{m\alpha c} \approx 0.5\text{Å}$$

dove abbiamo sostituito i valori noti e introdotto la **costante di struttura fine**<sup>3</sup>

$$\alpha \equiv \frac{k_0e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

Notiamo come l'aver "semplicemente" introdotto il principio di indeterminazione renda *a priori* un valore del tutto ragionevole che *a posteriori* sappiamo essere accurato.

A questo punto, si apre una questione di rilievo: abbiamo trattato il problema in maniera **non relativistica**, ma è necessario controllare la coerenza della derivazione. Possiamo dunque calcolare la velocità dell'elettrone

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad v \approx \frac{\hbar}{mr_B} = \alpha c$$

In effetti si trova una velocità abbastanza piccola da trascurare gli effetti relativistici, ma comunque incredibilmente grande: stiamo parlando di circa un centesimo della velocità della luce! Se avessimo trovato velocità comparabili con  $c$ , le conseguenze sarebbero state molto diverse: le allora necessarie correzioni relativistiche al potenziale avrebbero richiesto tecniche proprie della Teoria Quantistica dei Campi, che esulano dai contenuti di questo corso. D'ora in poi deriveremo una Meccanica Quantistica ancora non relativistica.

Alcuni importanti commenti su quanto detto finora:

**CHE COS'È LA VELOCITÀ?** Ancora non è possibile dare una risposta esatta a questa domanda, in quanto mancano le nozioni fondamentali per farlo; tuttavia è fondamentale notare che la velocità che abbiamo calcolato **non è una velocità intesa in senso classico**, dal momento che non abbiamo nessuna traiettoria descritta da una legge oraria che possiamo derivare vettorialmente. L'elettrone non sta vorticosalemente girando intorno al nucleo seguendo un percorso definito dalle condizioni iniziali, piuttosto è *distribuito* in posizione e momento secondo una statistica coerente con la fisica del sistema. In particolare, la velocità  $v = \alpha c$  che abbiamo trovato non è una velocità univocamente definita, quanto piuttosto una **scala di velocità**: infatti quello che conta (e a cui possiamo accedere) è l'ordine di grandezza delle velocità coinvolte relativamente a quella della luce.

**L'ESISTENZA DI UN MINIMO ENERGETICO** Mischiando un po' incoerentemente meccanica classica e quantistica, abbiamo che l'esistenza stessa del principio di indeterminazione vincola il momento dell'elettrone a crescere drammaticamente quando la dimensione dell'atomo diminuisce. Siccome  $p \propto r^{-1}$ , l'irraggiamento - che è il responsabile della diminuzione dell'energia nella trattazione classica, e di conseguenza della diminuzione del raggio - è causa dell'aumento dell'energia cinetica. Di fatto, quello che succede è che i due effetti fisici si trovano a lottare fino a bilanciarsi perfettamente nel minimo energetico, per cui l'energia che si perde irraggiando la si riaquista sotto forma di energia cinetica.

Abbiamo un atomo ibrido tra Fisica Classica e Quantistica. Il modello è un certo po' rozzo, ma se non altro abbiamo un atomo stabile – che è più di quanto si potesse sperare nell'Elettromagnetismo Classico.

### 1.3 IL MINIMO MATEMATICO PER INIZIARE

In questa sezione sono riepilogati i concetti e le nozioni matematiche necessarie per lo sviluppo della teoria. Si tratta di matematica lineare, proprio perché la Meccanica Quantistica è una teoria essenzialmente lineare, che fa uso pesante di concetti quali spazi vettoriali, funzionali lineari e prodotti scalari.

#### Spazi vettoriali

Si dice **spazio vettoriale**  $V$  su campo  $\mathbb{C}$  uno spazio tale che

$$\forall \phi, \psi \in V : \phi + \psi \in V \quad \forall a \in \mathbb{C} : a\phi \in V$$

In  $V$ , i vettori  $\{\phi_i\}_{i=1,\dots}$  si dicono **linearmente indipendenti** se vale

$$\sum_n a_n \phi_n = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \forall n : a_n = 0$$

Se almeno uno dei coefficienti complessi è non nullo, i vettori saranno non indipendenti. Una **base** è un set minimale di generatori di  $V$  e massimale di vettori linearmente indipendenti, ossia è composta da un numero di vettori indipendenti  $\{\phi_i\}_{i=1,\dots} \subset V$  tale che:

$$\forall \psi \in V : \exists \{a_i\}_{i=1,\dots} \subset \mathbb{C} \quad \text{tali che} \quad \psi = \sum_n a_n \phi_n$$

cioé ci sono abbastanza vettori da generare tutto lo spazio, e

$$\forall \zeta \in V \setminus \{\phi_i\}_{i=1,\dots} : \{\phi_i\}_{i=1,\dots} \cup \{\zeta\}$$

non è un set di vettori indipendenti. Il numero di vettori che compongono la base è la **dimensione** dello spazio.

#### Prodotto scalare

Un **prodotto scalare** è un'applicazione (a due input)  $V \times V \rightarrow \mathbb{C}$  tra uno spazio e un campo

$$\phi, \psi \in V : (\phi, \psi) = a \in \mathbb{C}$$

tale che:

- si ha coniugazione per scambio delle componenti:

$$(\phi, \psi) = (\psi, \phi)^*$$

- vale la linearità nella seconda componente:

$$(\phi, c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\phi, \psi_1) + c_2(\phi, \psi_2)$$

da cui segue, applicando il primo punto:

$$(c_1\phi_1 + c_2\phi_2, \psi) = c_1^*(\phi_1, \psi) + c_2^*(\phi_2, \psi)$$

- è definito positivo:<sup>4</sup>

$$\forall \phi \in V, \phi \neq 0 : (\phi, \phi) > 0$$

Un buon prodotto scalare è dato da

$$\phi = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad \psi = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (\phi, \psi) \equiv \sum_i a_i^* b_i$$

Chiaramente possiamo definire prodotti scalari anche dentro spazi funzionali: se  $\phi(x)$  e  $\psi(x)$  sono due funzioni, si può dimostrare che è un buon prodotto scalare

$$(\phi, \psi) \equiv \int dx \phi^*(x)\psi(x)w(x)$$

dove  $w$  è un peso che si può eventualmente introdurre senza modificare le proprietà fondamentali del prodotto scalare.

### Norma

Tramite un prodotto scalare è possibile definire una **norma**:

$$\|\phi\| \equiv \sqrt{(\phi, \phi)}$$

Per essa valgono le disuguaglianze:

- di Schwarz:

$$|(\phi, \psi)|^2 \leq \|\phi\| \|\psi\|$$

- Triangolare:

$$\|\phi + \psi\| \leq \|\phi\| + \|\psi\|$$

La diseguaglianza di Schwarz è saturata per  $\phi = c\psi$ , con  $c \in \mathbb{C}$ ; lo stesso vale per quella triangolare, a patto però che  $c$  sia reale.

### Base ortonormale

Una base  $B = \{\phi_i\}_{i=1,\dots}$  si dice **ortonormale** se

$$\forall n, m : (\phi_n, \phi_m) = \delta_{nm}$$

Segue che

$$\forall \psi \in V : \psi = \sum c_n \phi_n$$

dove  $c_n = (\phi_n, \psi)$ .

### Spazio duale e funzionali lineari

Un **funzionale lineare** è un'applicazione lineare da uno spazio a un campo

$$F : V \rightarrow \mathbb{C} \quad F(a\phi + b\psi) = aF(\phi) + bF(\psi)$$

con ovvio significato dei simboli. Lo spazio dei funzionali lineari  $V'$  prende il nome di **spazio duale** ed è uno spazio vettoriale:

$$a_1F_1 + a_2F_2 \in V'$$

Vale inoltre il seguente lemma:

**Lemma** (Riesz). *Per ogni funzionale lineare  $F \in V'$  esiste una sola  $\psi \in V$  tale che:*

$$\forall \phi \in V : F(\phi) = (\psi, \phi)$$

*Dimostrazione.* Sia  $B = \{\phi_i\}_{i=1,\dots}$  una base ortonormale. Ogni elemento di  $V$  può essere decomposto secondo  $B$ :

$$\phi = \sum c_n \phi_n \quad \Rightarrow \quad F(\phi) = \sum c_n F(\phi_n)$$

dove abbiamo banalmente applicato la linearità di  $F$ . Sia ora

$$\psi \equiv \sum F(\phi_n)^* \phi_n$$

Operando semplicemente per sostituzione:

$$(\psi, \phi) = \left( \sum F(\phi_n)^* \phi_n, \phi \right) = \sum F(\phi_n) (\phi_n, \phi) = \sum c_n F(\phi_n)$$

il che dimostra che  $F(\phi) = (\psi, \phi)$ . □

### Bra-ket (notazione di Dirac)

Introduciamo ora una notazione inventata da Paul Dirac. Sia  $\phi$  un elemento di uno spazio vettoriale  $V$ . Lo indicheremo con

$$|\phi\rangle \sim \phi \in V \quad \text{"ket"}$$

Se invece  $F$  è un funzionale lineare:

$$\langle F | \sim F \in V' \quad \text{"bra"}$$

In questo modo, quando vogliamo indicare l'applicazione del funzionale  $F$  all'elemento  $\phi$ , scriveremo

$$\langle F | \phi \rangle \sim F(\phi) \quad \text{"braket"}$$

Come dimostrato nel lemma alla sezione precedente, questa scrittura è di fatto equivalente a eseguire un prodotto scalare:

$$\langle F | \phi \rangle \sim (\psi, \phi)$$

e per tutta la trattazione non faremo distinzione tra applicazione di un funzionale e esecuzione di un prodotto scalare. Comunque è formalmente corretto sottolineare che tra le due operazioni c'è una differenza, che diventa

rilevante in settori della Fisica più avanzati.

In conclusione, possiamo associare sia ai *ket* che ai *bra* un vettore di  $V$ : questo è ovvio per i primi, che già dalla definizione rappresentano dei vettori, mentre per quanto riguarda i secondi, che sono funzionali lineari appartenenti a  $V'$ , bisogna ricordare il *Lemma di Riesz* sopra mostrato, per cui lo spazio  $V$  ed il suo duale sono posti in corrispondenza biunivoca, una volta fissata una base ortonormale. Da questo lemma discende che tale isomorfismo è anti-lineare: se vale

$$\langle \phi | \quad \longleftrightarrow \quad |\phi \rangle$$

allora

$$c_1 \langle \phi_1 | + c_2 \langle \phi_2 | \quad \longleftrightarrow \quad c_1^* |\phi_1\rangle + c_2^* |\phi_2\rangle$$

### Operatori lineari

Un **operatore lineare** è un'applicazione lineare che mappa uno spazio nello spazio stesso

$$A : V \rightarrow V \quad A(a\phi + b\psi) = aA(\phi) + bA(\psi)$$

In dimensione finita, dalla proprietà di linearità segue che è sufficiente conoscere il modo in cui un operatore agisce sui vettori di base per sapere come trasforma l'intero spazio vettoriale. Se  $|\psi\rangle = \sum c_n |\phi_n\rangle$ , con  $B = \{|\phi_n\rangle\}$  base ortonormale dello spazio vettoriale degli stati, allora

$$A|\psi\rangle = \sum c_n A|\phi_n\rangle$$

La somma di operatori lineari è anch'essa un operatore lineare:

$$(A + B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle$$

È inoltre definita la moltiplicazione (composizione) di operatori

$$AB|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle) \neq B(A|\psi\rangle) = BA|\psi\rangle$$

di cui è necessario ricordare la non commutatività.

Supponiamo che  $\dim V = N < \infty$ , e di avere

$$|\psi\rangle = \sum c_n |\phi_n\rangle$$

combinazione lineare degli elementi di una fissata base ortonormale di  $V$ . Se  $\hat{M} : V \rightarrow V$  è un operatore lineare (il cappuccio è spesso usato per distinguere gli operatori dalle relative matrici), sicuramente  $\hat{M}|\psi\rangle \in V$ , pertanto possiamo scrivere

$$\hat{M}|\psi\rangle = \sum a_n |\phi_n\rangle$$

Da qui discende una caratterizzazione dell'operatore  $\hat{M}$ : infatti

$$\langle \phi_i | \hat{M} | \psi \rangle = \sum a_n \langle \phi_i | \phi_n \rangle = \sum a_n \delta_{in} = a_i$$

ma è pur vero che

$$\langle \phi_i | \hat{M} | \psi \rangle = \sum c_n \langle \phi_i | \hat{M} | \phi_n \rangle \equiv \sum M_{in} c_n$$

dove è stata sfruttata la corrispondenza tra l'operatore  $\hat{M}$  e la matrice quadrata  $M_{hk} \in \mathbb{C}_{N \times N}$ . Dall'unione dei risultati segue che

$$a_i = \sum M_{in} c_n$$

Ciò equivale ad affermare che, determinata una base, il vettore dei coefficienti di  $\hat{M}|\psi\rangle$  corrisponde al risultato della moltiplicazione matrice-vettore tra la matrice  $M$  (corrispondente biunivocamente a  $\hat{M}$ ) e il vettore dei coefficienti di  $|\psi\rangle$ :

$$\mathbf{a} = M\mathbf{c}$$

Tale formalismo, qui presentato come relativo al caso  $\dim V < \infty$ , può essere in massima parte esteso agli **spazi di Hilbert**, ovvero a spazi vettoriali infinito-dimensionalili che godono della proprietà di **completezza** rispetto alla norma<sup>5</sup> indotta da un prodotto scalare scelto.

### Operatore aggiunto

Sia  $A$  un operatore lineare; si definisce il suo **aggiunto**  $A^\dagger$  come l'operatore lineare tale che

$$(\phi, A\psi) = (A^\dagger\phi, \psi)$$

Supponiamo che

$$\langle w | = \langle \phi | A^\dagger$$

Utilizzando la corrispondenza biunivoca  $V' \longleftrightarrow V$ , se vale

$$\langle \phi | \longleftrightarrow |\phi \rangle$$

allora si ha che

$$\langle w | = \langle \phi | A^\dagger \longleftrightarrow A |\phi \rangle = |w \rangle$$

inoltre vale l'equazione

$$\langle w | \psi \rangle^* = \langle \psi | w \rangle$$

da cui per sostituzione

$$\langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | A | \phi \rangle$$

Ricordiamo la relazione che, a base  $\{\phi_n\}$  fissata, lega un operatore alla relativa matrice:

$$A_{ij} = \langle \phi_i | A | \phi_j \rangle \equiv \langle \phi_i | A \phi_j \rangle$$

Pertanto la matrice di  $A^\dagger$  è

$$A_{ij}^\dagger = \langle \phi_i | A^\dagger | \phi_j \rangle = \langle \phi_j | A | \phi_i \rangle^* = A_{ji}^*$$

cioè la matrice trasposta coniugata (o, in sintesi, aggiunta) della matrice relativa ad  $A$ . Si ricorda infine che

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

Si definisce **autoaggiunto** o **hermitiano**<sup>6</sup> un operatore tale che  $A^\dagger = A$ , e la matrice di un tale operatore, anch'essa chiamata hermitiana o autoaggiunta, rispetta l'equazione

$$A_{ij} = A_{ji}^*$$

Si può dimostrare che è sempre diagonalizzabile, ha tutti autovalori reali e possiede una base ortonormale di autovettori<sup>7</sup>.

Dalla proprietà

$$\langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | A^\dagger | \phi_1 \rangle^*$$

deriva in modo immediato che

$$\langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^* \quad \text{per } A \text{ autoaggiunto}$$

e che

$$\langle \psi | A | \psi \rangle \in \mathbb{R} \quad \forall | \psi \rangle \in V \quad \Rightarrow \quad A = A^\dagger$$

dove l'oggetto  $\langle \psi | A | \psi \rangle$  è detto **elemento diagonale di matrice** sullo stato  $|\psi\rangle$  o **valore di aspettazione dell'operatore  $A$  sullo stato  $|\psi\rangle$** .

Definito un operatore  $A$ , i suoi **autovalori** sono gli  $a \in \mathbb{C}$  tali che

$$A |\psi\rangle = a |\psi\rangle$$

ove  $|\psi\rangle$  è detto **autovettore** (o **autostato**) relativo all'autovalore  $a$ . Per l'operatore  $A^\dagger$  vale dunque

$$\langle \psi | A^\dagger = a^* \langle \psi |$$

in virtù dell'anti-linearità.

**Lemma.** *Gli operatori autoaggiunti hanno autovalori reali.*

*Dimostrazione.* Sia  $|\psi\rangle$  un autovettore relativo ad  $A$ . Dall'ipotesi segue che  $A = A^\dagger$ , allora

$$a \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A^\dagger | \psi \rangle^* = a^* \langle \psi | \psi \rangle$$

cioè  $a = a^*$ , essendo  $\langle \psi | \psi \rangle \in \mathbb{R}$ . □

**Lemma.** *Autovettori di operatori autoaggiunti relativi ad autovalori diversi sono ortogonali tra loro.*

*Dimostrazione.* Sia, dalla tesi,  $A$  tale che  $A = A^\dagger$ , mentre

$$A |\phi_1\rangle = a_1 |\phi_1\rangle \quad A |\phi_2\rangle = a_2 |\phi_2\rangle \quad a_1 \neq a_2$$

Abbiamo già visto che, per operatori autoaggiunti,

$$\langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^*$$

Sostituendo da sopra, e usando che gli autovalori di operatori autoaggiunti sono reali, si ottiene

$$a_2 \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = a_1 \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle$$

$$(a_1 - a_2) \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0$$

ma vale anche  $a_1 \neq a_2$ , allora

$$\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0$$

□

### Prodotto esterno

Un **prodotto esterno** è un'applicazione  $V \times V \rightarrow O$ , dove con  $O$  rappresentiamo lo spazio degli operatori lineari. Un esempio di operatore scritto come risultato di un prodotto esterno è

$$|\psi\rangle\langle\phi|$$

Per caratterizzare questo operatore, lo si applica a uno stato di  $V$ :

$$(|\psi\rangle\langle\phi|)|\lambda\rangle = |\psi\rangle\langle\phi|\lambda\rangle = \alpha|\psi\rangle \in V \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

È facile vedere che

$$(|\psi\rangle\langle\phi|)^\dagger = |\phi\rangle\langle\psi|$$

infatti, se  $A = |\psi\rangle\langle\phi|$

$$\langle a|Ab\rangle = \langle a|(|\psi\rangle\langle\phi|)b\rangle = \langle a|\psi\rangle\langle\phi|b\rangle = \langle aA^\dagger|b\rangle$$

Allora

$$\langle b|A^\dagger a\rangle = \langle b|\phi\rangle\langle\psi|a\rangle = \langle b|(|\phi\rangle\langle\psi|)a\rangle$$

dove si è banalmente invertito l'ordine delle operazioni ambo i lati, pertanto  $A^\dagger = |\phi\rangle\langle\psi|$ .

### Proiettore

Si definisce **proiettore** un operatore  $P$  per cui vale

$$P^2 = P$$

cioè tale che applicarlo due (o più) volte sia identico ad applicarlo una soltanto. Ad esempio,  $|\psi\rangle\langle\psi|$ , con  $\|\psi\| = 1$ , è un proiettore:

$$|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi|$$

ed è evidentemente autoaggiunto.

### Relazione di completezza

Sia  $\{|\phi_i\rangle\}_i$  una base ortonormale completa di uno spazio vettoriale  $V$ , e sia  $|\psi\rangle = \sum c_i |\phi_i\rangle$  con  $c_i \in \mathbb{C}$  un vettore di  $V$ . Abbiamo visto che in tal caso

$$c_i = \langle\phi_i|\psi\rangle$$

Sostituendo nell'espressione per  $|\psi\rangle$  si ottiene

$$|\psi\rangle = \sum |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle = (\sum |\phi_i\rangle\langle\phi_i|) |\psi\rangle$$

da cui

$$\sum |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \mathbb{1}$$

è l'operatore identità. Questa relazione deve essere valida per ogni base ortonormale completa.

## Rappresentazione delle coordinate e funzioni d'onda

Di un medesimo vettore  $|\psi\rangle$  di  $V$  è possibile dare, in generale, varie **rappresentazioni**: ciò significa che è possibile esprimerlo in termini di varie basi dello spazio  $V$ , una differente dell'altra. Quando si espande un vettore in termini della base degli autovettori di uno specifico operatore hermitiano  $\hat{Q}$ , detto **operatore posizione**, se ne dà la **rappresentazione delle coordinate**.

Come dimostreremo più avanti, l'operatore posizione è hermitiano. In spazi a dimensione finita questo implicherebbe la decomponibilità dell'intero spazio in una somma diretta di autospazi ortogonali; siccome noi stiamo lavorando con dimensioni infinite, questo non è più garantito. Possiamo tuttavia supporre l'esistenza di autostati. Lo spettro di  $\hat{Q}$  è continuo, cioè i suoi autostati

$$\hat{Q} |x\rangle = x |x\rangle$$

non sono discreti, bensì continui. Evidentemente non è possibile espandere il vettore  $|\psi\rangle$  come una combinazione lineare discreta degli autostati: il passaggio al continuo ci costringe a usare l'integrale

$$|\psi\rangle = \int \psi(x) |x\rangle dx$$

in cui

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$$

corrisponde ad uno spettro continuo – non più una serie di coefficienti discreti – ed è definita **funzione d'onda** relativa allo stato  $|\psi\rangle$ . In altri termini

$$\psi(x_0) = \psi_{x_0}$$

svolge il ruolo di “coefficiente” associato all'autostato  $|x_0\rangle$ ; tuttavia, siccome siamo passati al continuo,  $\psi(x)$  rappresenta più propriamente una **densità di coefficienti**. Se consideriamo tutti gli autostati associati ai valori tra  $x - dx$  e  $x + dx$ ,  $\psi(x)$  “misura” in tale intorno il contributo locale all'integrale che definisce lo stato  $|\psi\rangle$ , ossia il limite al continuo della combinazione lineare degli autostati di base.

Siamo ora interessati a studiare gli autostati dell'operatore. Potremmo chiederci quale sia la funzione d'onda  $v(x)$  relativa a un generico autostato  $|y\rangle$  di  $\hat{Q}$ , tale che

$$\hat{Q} |y\rangle = y |y\rangle$$

Moltiplicando per  $\langle x|$  otteniamo

$$\langle x | y \rangle = v(x) = \langle x | \int v(s) |s\rangle ds = \int v(s) \langle x | s \rangle ds$$

in cui  $s$  è la variabile muta di integrazione. Da qui possiamo dedurre che

$$\langle x | s \rangle = \delta(x - s)$$

Si indica come  $\delta(x)$  la **delta di Dirac**, una distribuzione estremamente localizzata, tanto da essere non nulla solo in un punto del suo dominio e da non costituire una funzione. Possiamo quindi concludere che la “funzione”

d'onda  $v(x)$  non è, in realtà, neppure una vera funzione. Di sopra segue (cambiando semplicemente nome alla  $s$ ):

$$\langle x|y \rangle = v(x) = \delta(x - y)$$

Questa relazione tra gli autostati può essere considerata come un'estensione al continuo della *Delta di Kronecker*, che definisce la relazione tra due vettori di una base ortonormale discreta:

$$(v_i, v_j) = \delta_{ij}$$

A posteriori, questa relazione tra autostati è interpretabile in uno schema abbastanza “naturale”. Vogliamo una “funzione” che, associata a ogni possibile valore della variabile, ne descriva in termini “funzionali” la posizione; necessitiamo quindi di qualcosa che sia univocamente localizzato sulla posizione dell'autostato. Conseguentemente, quando otteniamo

$$\langle y|x \rangle = \delta(y - x)$$

se stavolta leggiamo  $x$  come variabile reale stiamo trovando una funzione generalizzata che rispetta proprio le richieste che abbiamo imposto. D'altronde, nessun'altra funzione generalizzata è possibile oltre alla *Delta di Dirac*: essa è per definizione univocamente localizzata sull'autovalore-posizione e normalizzata.

È degno di nota il fatto che la base degli autostati  $|x\rangle$  non ha una normalizzazione banale, infatti

$$\langle x|x \rangle = \delta(x - x) = \delta(0) = \infty$$

Tale base è quindi normalizzata *a meno di una*  $\delta$ .

Potrà rivelarsi utile l'introduzione di una notazione alternativa a quella di Dirac, usata e.g. da Lev Landau:

$$\hat{O}\psi(x) = \langle x|\hat{O}|\psi\rangle \quad (1.1)$$

Dunque usando tale notazione con  $\hat{Q}$  si ha

$$\hat{Q}\psi(x) = \langle x|\hat{Q}|\psi\rangle = \langle x|\int \psi(s)\hat{Q}|s\rangle ds = \int s\psi(s)\langle x|s\rangle ds = x\psi(x)$$

dove, in sequenza, si è scritto  $|\psi\rangle$  come espansione integrale sugli autostati, si è sfruttata la relazione  $\hat{Q}|x\rangle = x|x\rangle$  per ciascuno di essi e si è usato che  $\langle x|s\rangle = \delta(x - s)$ . Qui è necessario prestare attenzione: adesso  $x$  è un argomento, una variabile, quindi se vale  $\hat{Q}\psi(x) = x\psi(x)$ ,  $\psi(x)$  non necessariamente costituisce un'autofunzione per  $\hat{Q}$ , in quanto  $x$  non è qui inteso come una costante. Al contrario, un autovalore è necessariamente una costante, cioè non è ammissibile che la funzione sia riscalata di  $x_1$  in  $x_1$  e di  $x_2$  in  $x_2$ . Di conseguenza vediamo anche a posteriori come sia inevitabile che gli autostati siano delle *Delta*: si tratta dell'unica distribuzione che resta proporzionale a se stessa quando riscalata e che rispetta il vincolo appena esposto, in quanto – dal momento che è nulla ovunque tranne sul suo centro  $x_0$  – una rimoltiplicazione per  $x$  equivale *di fatto* a una rimoltiplicazione per  $x_0$ , ossia una costante e dunque un autovalore sensato.

Conviene sottolineare ancora che le “autofunzioni” trovate **non sono funzioni**, cioè vivono al di fuori dello spazio funzionale che studiamo; si può dimostrare, tuttavia, che rimanendo dentro lo spazio funzionale è possibile trovare delle successioni di funzioni che vi tendono<sup>8</sup>. Queste “autofunzioni” determinano effettivamente la struttura dello spazio, poiché sono un set di generatori, eppure non fanno parte dello spazio che generano. Questa è una conseguenza del passaggio dal finito all’infinito.

Dimostriamo infine che  $\hat{Q}$  è autoaggiunto: siano  $|\phi_1\rangle$  e  $|\phi_2\rangle$  due stati di  $V$  con relative funzioni d’onda  $\phi_1(x)$  e  $\phi_2(x)$ .

$$\langle \phi_1 | \hat{Q} | \phi_2 \rangle = (\phi_1, \hat{Q}\phi_2) = \int \phi_1^*(x) x \phi_2(x) dx$$

ma  $x \in \mathbb{R}$ , essendo una coordinata, perciò

$$\langle \phi_1 | \hat{Q} | \phi_2 \rangle = \int (x \phi_1(x))^* \phi_2(x) dx = (\phi_2, \hat{Q}\phi_1)^* = \langle \phi_2 | \hat{Q} | \phi_1 \rangle^*$$

da cui segue  $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$ . Questa proprietà è quella che, come abbiamo sottolineato prima, ha permesso di studiare l’operatore supponendone l’esistenza di autostati.

### Proprietà della Delta di Dirac

Per definizione,  $\delta$  è la distribuzione tale che, per ogni funzione  $f$  continua in un intorno del punto  $y$ ,

$$\int_D dx f(x) \delta(x - y) = f(y)$$

se  $y \in D$ . Segue subito il fatto che sia normalizzata ad 1

$$\int dx \delta(x - y) = 1 \quad \forall y \in \mathbb{R}$$

Essendo localizzata in un punto della retta reale, deve valere

$$\delta(x - y) = \begin{cases} 0 & x \neq y \\ \infty & x = y \end{cases}$$

Vale inoltre:

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x)$$

Infatti:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(\alpha x) \phi(x) &= \frac{1}{|\alpha|} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \delta(s) \phi\left(\frac{s}{\alpha}\right) \\ &= \frac{1}{|\alpha|} \phi(0) \\ &= \frac{1}{|\alpha|} \int_{-\infty}^{+\infty} ds \delta(s) \phi(s) \end{aligned}$$

dove si è sottinteso che si sono considerati i due casi  $\alpha > 0$  e  $\alpha < 0$ , che portavano allo stesso risultato a meno di un segno irrilevante.

### Cambiamento di base

Consideriamo due basi complete e ortonormali generiche  $\{|\phi_i\rangle\}_i$  e  $\{|\psi_i\rangle\}_i$ , nello spazio degli stati. Proviamo a scrivere una delle due in funzione dell'altra, elemento per elemento:

$$|\psi_i\rangle = \left( \sum_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \right) |\psi_i\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \psi_i \rangle$$

dove nel primo passaggio si è utilizzata la relazione di completezza valida dall'ipotesi sulla base  $\{|\phi_i\rangle\}_i$  e nel secondo il fatto che gli operatori di proiezione indicizzati da  $i$  sono di fatto delle matrici, che possono quindi distribuirsi sul vettore su cui operano (le matrici sono associate ad operatori lineari, che formano uno spazio vettoriale). A questo punto si può definire:

$$\langle \psi_i | \phi_j \rangle = S_{ij}$$

da cui

$$|\psi_i\rangle = \sum_j S_{ij}^* |\phi_j\rangle$$

Se ora consideriamo un generico stato  $|\phi\rangle$  dello spazio, questo potrà essere scritto sia come combinazione lineare degli elementi della base  $\{|\phi_i\rangle\}_i$ , sia di quelli della base  $\{|\psi_i\rangle\}_i$ , come segue:

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_j c_j |\phi_j\rangle \\ |\phi\rangle &= \sum_i b_i |\psi_i\rangle \end{aligned}$$

Operando a sinistra della prima espressione con  $\langle \psi_i |$  si ottiene:

$$\langle \psi_i | \phi \rangle = \sum_j c_j S_{ij}$$

dalla definizione di sopra. Ma il primo termine di questa equazione è proprio la componente  $b_i$  di  $|\phi\rangle$ , nella base (ortonormale)  $\{|\psi_i\rangle\}_i$ . Quindi si ha che  $S$  rappresenta proprio la matrice di cambio base:

$$b_i = \sum_j S_{ij} c_j$$

Ci chiediamo ora di quali proprietà goda questa matrice. Dato che:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

allora, inserendo un'identità tra i due stati si ha, per la relazione di completezza:

$$\delta_{ij} = \langle \phi_i | \left( \sum_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \right) |\phi_j\rangle = \sum_k \langle \phi_i | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \phi_j \rangle$$

da cui

$$\sum_k S_{ki}^* S_{kj} = \delta_{ij}$$

che in forma matriciale diventa

$$S^\dagger S = \mathbb{1}$$

Questa proprietà, in dimensione finita, caratterizza le matrici unitarie.<sup>9</sup> Quindi di questo genere di matrici, garantisce un buon cambiamento di base tra basi ortonormali.

### Commutatività tra operatori

Dati due operatori  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  di uno spazio vettoriale, si definisce **commutatore** di  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  l'operatore

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Se  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , i due operatori  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  commutano (nel prossimo capitolo diremo che le relative osservabili sono compatibili).

Il risultato seguente fa da fondamento matematico ad alcuni concetti centrali della Meccanica Quantistica.

**Teorema.** *Se  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  sono due operatori autoaggiunti e  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , cioè i due operatori commutano, allora condividono una base comune di autovettori.*

*Dimostrazione.* Dimostriamo il teorema nel caso in cui  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  abbiano spettri non degeneri, cioè con autospazi 1-dimensional (gli autovettori relativi ad uno specifico autovalore sono tutti multipli tra loro).

Poiché gli operatori sono autoaggiunti, esistono due basi  $\{|a_n\rangle\}$  e  $\{|b_n\rangle\}$  di autovettori per  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  rispettivamente, in modo che

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle \quad \text{e} \quad \hat{B}|b_n\rangle = b_n|b_n\rangle$$

Questo garantisce che si possano sempre trovare almeno una base per  $\hat{A}$  e una per  $\hat{B}$ . Considerando l'azione di  $\hat{A}$  sul ket  $\hat{B}|a_n\rangle$ ,

$$\hat{A}\hat{B}|a_n\rangle = \hat{B}\hat{A}|a_n\rangle = a_n\hat{B}|a_n\rangle$$

dove si è usato  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$  e il fatto che  $|a_n\rangle$  è un autovettore per  $\hat{A}$ . Si deduce dunque che  $\hat{B}|a_n\rangle$  è autovettore per  $\hat{A}$ , relativo allo stesso autovalore  $a_n$ . Ma allora  $\hat{B}|a_n\rangle$  è nello stesso autospazio di  $|a_n\rangle$ , per cui dovrà valere per un certo  $\mu_n \in \mathbb{C}$

$$\hat{B}|a_n\rangle = \mu_n|a_n\rangle$$

In altri termini la base  $\{|a_n\rangle\}$  è di autovettori anche per  $\hat{B}$ . □

Dunque, quando due operatori con autospazi non degeneri commutano, condividono tutte le basi di autovettori. Questo significa che, se si trovano gli autovettori di  $A$  e si scopre che questo commuta con  $B$ , se entrambi sono autoaggiunti abbiamo gratuitamente una base di autostati per  $B$ .

Il risultato vale anche in generale, se gli operatori hanno autovalori con molteplicità maggiore di 1: in quel caso non è detto che ogni base di autovettori per l'uno lo sia sempre anche per l'altro, ma sicuramente esiste almeno una base spettrale ortonormale comune ai due operatori.

**PROPRIETÀ DEI COMMUTATORI** Siano  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$  operatori  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ . Valgono per i commutatori le seguenti proprietà, di cui faremo uso estensivo e frequente:

- la *nihilpotenza*

$$[\hat{a}, \hat{a}] = 0$$

- la *bilinearità*

$$[\hat{a}, \hat{b} + \hat{c}] = [\hat{a}, \hat{b}] + [\hat{a}, \hat{c}]$$

$$[\hat{a} + \hat{b}, \hat{c}] = [\hat{a}, \hat{c}] + [\hat{b}, \hat{c}]$$

- l'anticommutatività

$$[\hat{a}, \hat{b}] = -[\hat{b}, \hat{a}]$$

- una versione della regola di Leibniz

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{b}\hat{c}] &= [\hat{a}, \hat{b}]\hat{c} + \hat{b}[\hat{a}, \hat{c}] \\ [\hat{a}\hat{b}, \hat{c}] &= \hat{a}[\hat{b}, \hat{c}] + [\hat{a}, \hat{c}]\hat{b} \end{aligned}$$

- l'identità di Jacobi

$$[\hat{a}, [\hat{b}, \hat{c}]] + [\hat{b}, [\hat{c}, \hat{a}]] + [\hat{c}, [\hat{a}, \hat{b}]] = 0$$

### Spazi di Hilbert

Per spazi vettoriali a dimensione infinita non valgono tutte le stesse semplici proprietà valide in dimensione finita. Per uno spazio a dimensione infinita con base ortonormale  $\{|\phi_n\rangle\}$  è non banale persino definire il prodotto scalare canonico, cioè il più “naturale”, perché per due vettori

$$|\psi_1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n |\phi_n\rangle, \quad |\psi_2\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} b_n |\phi_n\rangle$$

la serie associata al prodotto scalare potrebbe divergere

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^* b_n = \infty$$

per cui è necessario dare delle condizioni sugli spazi che utilizziamo per costruire la Meccanica Quantistica.

Una richiesta sufficiente a rendere il prodotto scalare canonico un buon prodotto scalare, è richiedere che per ogni vettore  $|\psi\rangle = \sum c_n |\phi_n\rangle$  valga

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 < \infty$$

Questa condizione definisce uno **spazio di Hilbert**, sottoinsieme dello spazio delle successioni, il cosiddetto spazio  $l^2$ , o delle successioni quadrato-sommabili:<sup>10</sup>

$$l^2 = \left\{ \{c_n\}_{n=0}^{\infty} : \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \right\}$$

I vettori che consideriamo allora sono quelli con norma quadra finita,  $\langle\psi|\psi\rangle < \infty$ , cioè quelli le cui coordinate sono successioni quadrato-sommabili. Per la diseguaglianza di Schwarz, se entrambi i vettori  $|\psi\rangle$ ,  $|\phi\rangle$  godono di tale proprietà, vale anche  $\langle\psi|\phi\rangle < \infty$ .

Per uno spazio vettoriale a dimensione infinita, dotato di una base completa continua  $\{|x\rangle\}$ , la richiesta è simile. Consideriamo infatti il prodotto scalare  $\langle\psi|\phi\rangle$  ed inseriamo l'operatore identità al centro<sup>11</sup>

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi| \left( \int dx |x\rangle\langle x| \right) |\phi\rangle = \int dx \langle\psi|x\rangle \langle x|\phi\rangle = \int dx \psi^*(x)\phi(x)$$

dove abbiamo usato la linearità e l'identificazione  $\langle x|\psi \rangle = \psi(x)$ , citata nella sezione sull'operatore posizione.

Analogamente al caso discreto, usando  $\psi = \phi$  nell'espressione precedente, la richiesta per definire questo prodotto scalare è

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int dx |\psi(x)|^2 < \infty$$

Tale condizione, per la variabile reale  $x \in \mathbb{R}$ , definisce lo spazio di Hilbert  $L^2(-\infty, \infty)$  delle funzioni quadrato-sommabili. Sarà questo il dominio delle funzioni d'onda di cui faremo ampio uso. In particolare, richiederemo che  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  (si veda la Sez. 2.1). Quest'operazione di normalizzazione è sempre possibile per funzioni di  $L^2$ , con l'ovvia sostituzione

$$|\psi\rangle \rightarrow \frac{|\psi\rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^{1/2}}$$

## NOTE

- 1.** Un sistema legato stabile ha momento complessivo nullo, altrimenti sarebbe instabile. L'ampiezza  $\Delta p$  rappresenta, piuttosto, la larghezza della distribuzione dei momenti. Stiamo ragionando in termini puramente probabilistici.
- 2.** Il passaggio è naturale, perché se così non fosse - essendo il sistema composto da due corpi di cui uno circa fermo - la larghezza in momento non sarebbe  $\Delta p$ .
- 3.** Si tratta di una costante comoda in Meccanica Quantistica perché emerge spesso in modo naturale, ma decisamente più fondamentale di una semplice ridefinizione di comodo: si tratta infatti di una misura della forza dell'interazione elettromagnetica, utilizzata soprattutto in Teoria Quantistica dei Campi.
- 4.** In realtà si definisce prodotto scalare anche un prodotto determinato da una matrice ad autovalori negativi o nulli, cioè con segnatura mista; per i nostri scopi, prenderemo in considerazione solo il caso positivo.
- 5.** In particolare, uno spazio normato è detto **completo** quando tutte le sue *successioni di Cauchy* risultano internamente convergenti. In particolare, definita la nozione di distanza a partire da quella di norma associata allo spazio, una *successione di Cauchy* è una successione di punti tale che il limite della distanza di due punti consecutivi è nullo. Gli spazi di Hilbert godono dunque della seguente proprietà: dato un qualsiasi elemento dello spazio, esiste sempre una successione di Cauchy che vi converge - in particolare, stiamo parlando della sua espansione vettoriale in termini della **base completa** dello spazio.
- 6.** A rigore, le due denominazioni non sono davvero equivalenti, tuttavia la differenza tra operatore hermitiano e autoaggiunto non ha rilevanza nel presente corso.
- 7.** I possibili esiti di un procedimento di misura sono gli autovalori di operatori lineari ben definiti. Se si misura un'osservabile fisica, e.g. una coordinata o momento, è lecito richiedere che i possibili valori della misura siano reali. Per questo è molto utile considerare operatori autoaggiunti nell'ambito Meccanica Quantistica.
- 8.** Ad esempio come limite di una *gaussiana* o di una *distribuzione di Cauchy*.
- 9.** In dimensione infinita un operatore  $U$  si dice unitario se, oltre a godere di questa proprietà, è anche suriettivo. Questo garantisce che valga anche  $UU^\dagger = I$  e che quindi  $U^\dagger = U^{-1}$ . Senza questa condizione, l'operatore è soltanto isometrico.
- 10.** Lo spazio  $l^2$  è di particolare importanza, e a volte ci si riferisce ad esso come *lo* spazio di Hilbert, in quanto ogni spazio di Hilbert separabile (cioè "con basi discrete"), fissata una base ortonormale completa, è isomorfo a  $l^2$  mediante la mappa del passaggio in coordinate.

11. Questa operazione, che utilizzeremo frequentemente, equivale a espandere in serie di Fourier astratta, cioè in componenti rispetto alla base ortonormale completa, il vettore immediatamente successivo.

# 2

## CONCETTI DI BASE DELLA TEORIA ED EVOLUZIONE TEMPORALE

In questo capitolo è descritta una possibile scelta di assiomi utilizzabili per la costruzione della Meccanica Quantistica. Sono poi ricavati i primi importanti risultati di dinamica degli stati che da tali postulati possono essere dedotti.

### 2.1 ASSIOMI DELLA MECCANICA QUANTISTICA

Nella Meccanica Newtoniana, un classico problema di moto in campo centrale è lo scattering elastico. Per esempio, in presenza di un campo Coulombiano centrato nell'origine, una particella con energia iniziale  $E(r = \infty) > 0$  vede la sua traiettoria asintoticamente deviata di un angolo di diffusione  $\theta$ , e, fissato il parametro di impatto  $b$ , utilizzando le leggi di conservazione di energia e momento angolare è possibile determinare univocamente il valore di  $\theta$ . Viceversa, una misura sperimentale di  $\theta$  permette di risalire in modo deterministicamente al valore di  $b$ .

In Meccanica Quantistica, in un analogo esperimento concettuale con  $b$  fissato, all'osservazione di un certo angolo di scattering  $\theta$  sarà possibile associare soltanto una certa probabilità, intesa in senso frequentista, immaginando di disporre di un *ensemble* di sistemi preparati in modo identico,<sup>1</sup> e registrando gli esiti di ciascun processo. La frequenza relativa con cui la particella viene diffusa con angolo  $\theta$  si avvicina in principio a questa probabilità nel limite  $N \rightarrow \infty$ .

Precisiamo adesso uno ad uno i postulati alla base della nostra costruzione della teoria.

**ASSIOMA 1** Uno **stato** fisico  $|\psi\rangle$  è un vettore di uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ . Gli stati che consideriamo godono della condizione di normalizzazione

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad (2.1)$$

Più propriamente, gli stati sono *raggi* di modulo 1 dello spazio  $\mathcal{H}$ , in quanto sono definiti a meno di una fase globale:

$$|\psi\rangle \sim e^{i\alpha} |\psi\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

In effetti i due stati appena scritti sono associati allo stesso proiettore, in quanto per linearità

$$(|\psi\rangle e^{-i\alpha})(e^{i\alpha} \langle\psi|) = |\psi\rangle\langle\psi|$$

Far coincidere gli stati che differiscono solo per una fase, ovvero riconoscere i raggi come elementi dello spazio, equivale a lavorare in uno spazio di Hilbert **proiettivo**.

Inoltre, vedremo più avanti (Cap. 5) che quelli appena descritti sono solamente gli **stati puri**. Essi costituiscono in verità una sottoclasse di tutti gli stati definibili in Meccanica Quantistica. Una definizione equivalente (per stati puri) parte proprio dalla matrice densità  $\rho \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$ , che è in corrispondenza biunivoca con gli stati. La normalizzazione si scrive in questo caso

$$\mathrm{Tr} \rho = \mathrm{Tr} |\psi\rangle\langle\psi| = 1$$

*Dimostrazione.* Se scegliamo una base ortonormale completa  $\{|\phi_n\rangle\}$  e un vettore  $|\psi\rangle = \sum c_n |\phi_n\rangle$  allora per definizione di traccia

$$\mathrm{Tr} \rho = \sum_n \langle \phi_n | \rho | \phi_n \rangle = \sum_n \langle \phi_n | \psi \rangle \langle \psi | \phi_n \rangle = \sum_n |\langle \phi_n | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \psi \rangle$$

dove l'ultima uguaglianza è vera per l'identità di Parseval<sup>2</sup>. Dunque si ha la tesi:  $\mathrm{Tr} \rho = \langle \psi | \psi \rangle = 1$ .  $\square$

Uno stato fisico è un oggetto più astratto della sua **rappresentazione**. Se ad esempio scegliamo di rappresentare  $|\psi\rangle$  nella base degli autostati dell'*operatore posizione*  $\hat{Q}$  oppure in quella associata all'*operatore hamiltoniano*  $\hat{H}$ , le due rappresentazioni sono perfettamente equivalenti:

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x) = \sum_n h_n |n\rangle$$

anche se il primo ha spettro continuo e il secondo discreto. *Non varia lo stato ma la sua rappresentazione*, ed è legittimo passare da una rappresentazione all'altra secondo necessità.

**ASSIOMA 2** A ciascuna **osservabile** (o variabile dinamica)  $O$  è associato un operatore lineare  $\hat{O}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  autoaggiunto,  $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$ . I valori ammessi come esito di una misura sono gli autovalori di  $\hat{O}$ .

**ASSIOMA 3** Il valor medio di un'osservabile  $O$  su un ensemble di sistemi preparati identicamente, cioè il **valore atteso**<sup>3</sup> dell'osservabile  $O$  su uno stato  $|\psi\rangle$  è dato dal seguente elemento di matrice

$$\langle O \rangle \equiv \sum_n \lambda_n P_n = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \quad (2.2)$$

dove  $\{\lambda_n\}$  sono gli autovalori (qui assunti discreti) dell'operatore  $\hat{O}$ , mentre  $P_n$  rappresenta la probabilità che l'osservabile  $O$  assuma il valore  $\lambda_n$  quando il sistema è nello stato  $|\psi\rangle$ .

Dall'assioma si ricava il valore di  $P_n$ : se lo stato  $|\psi\rangle$  è espresso come sovrapposizione di una base di autostati  $\{|\phi_n\rangle\}$  di  $\hat{O}$ :

$$|\psi\rangle = \sum c_n |\phi_n\rangle$$

tale probabilità è data da

$$P_n = |c_n|^2 \quad (2.3)$$

Per dimostrarlo è sufficiente espandere l'elemento di matrice in termini degli autostati  $\{|\phi_n\rangle\}$  dell'operatore  $\hat{O}$

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \left( \sum_n c_n^* \langle \phi_n | \right) \hat{O} \left( \sum_m c_m |\phi_m \rangle \right) \\ &= \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle \phi_n | \hat{O} | \phi_m \rangle \\ &= \sum_{n,m} c_n^* c_m \lambda_m \delta_{nm} \\ &= \sum_n \lambda_n |c_n|^2 \end{aligned}$$

da cui è possibile inferire la corrispondenza  $P_n = |c_n|^2$  (*regola di Born*).

In modo analogo, nel caso continuo della rappresentazione delle coordinate, la densità di probabilità in funzione della posizione è

$$p(x) = |\langle x | \psi \rangle|^2 = |\psi(x)|^2$$

La dimostrazione procede in maniera sostanzialmente analoga alla precedente: usando la relazione di completezza della base dell'operatore posizione  $\hat{Q}$ , si trova che

$$\langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle = \int dx x \langle x | \psi \rangle^* \langle \psi | x \rangle = \int dx x |\psi(x)|^2$$

Conviene sottolineare di nuovo come il modulo quadro della funzione d'onda, che è la distribuzione in "componenti" dello stato  $|\psi\rangle$ , rappresenti la **densità di probabilità** di misurare la posizione del sistema in esame in uno specifico punto, e non la probabilità in sé; data la variabilità sul continuo della coordinata, ha senso chiedersi quale sia la probabilità di misurare la posizione in un intervallo  $dx$  vicino a  $x$ :

$$P(x, x+dx) = p(x)dx$$

Vale inoltre:

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \text{Tr}\{\rho \hat{O}\}$$

La dimostrazione è semplice:

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\rho \hat{O}\} &= \text{Tr}\{|\psi\rangle\langle\psi| \hat{O}\} = \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | \hat{O} | n \rangle \\ &= \sum_n c_n \langle \psi | \hat{O} | n \rangle = \langle \psi | \hat{O} \left( \sum_n c_n |n\rangle \right) = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \end{aligned}$$

Da questo terzo assioma appare evidente come la teoria sia inerentemente legata alla statistica. Nel complesso, la Meccanica Quantistica presenta da un lato aspetti chiaramente statistici, come quelli appena mostrati, ma deterministici dall'altro, in quanto sono leggi deterministiche a regolare l'evoluzione delle distribuzioni di probabilità.

## 2.2 MISURE “CERTE” IN MECCANICA QUANTISTICA

Per quanto controidintuitivo rispetto a quanto esposto fino ad adesso, la natura matematica della Meccanica Quantistica ammette che si possa determinare **con certezza** lo stato fisico di un sistema con una sola misura in alcuni casi. Supponiamo infatti di avere un sistema fisico nello stato  $|\psi\rangle$ , e di voler eseguire una misura di un osservabile  $O$ : lo stato avrà una decomposizione

$$|\psi\rangle = \sum_m c_m |\psi_m^O\rangle$$

Sappiamo che  $P_n = |c_n|^2$  è la probabilità, dato il sistema, di misurare il valore  $\lambda_n$ :

$$\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = \sum_n \lambda_n P_n$$

Avere la certezza di misurare  $\lambda_n$  equivale a richiedere che  $P_n = 1$ , e siccome dalla condizione di normalizzazione vale  $\sum |c_n|^2 = 1$ , troviamo che l'unica soluzione è che sia

$$c_n = 1 \quad c_m = 0 \quad \forall m \neq n$$

il che si traduce in

$$|\psi\rangle = |\psi_n^O\rangle$$

ossia: *quando lo stato del sistema fisico è un autostato dell'operatore associato all'osservabile, una singola misura è certa e il suo esito è sempre l'autovalore associato.* Prendiamo, ad esempio, un atomo che sappiamo essere nel suo stato fondamentale, ossia un sistema fisico in un autostato dell'operatore hamiltoniano  $\hat{H}$ . Eseguendo una singola misura su di esso, è possibile ricavare l'energia dell'atomo con certezza e senza che al ripetere della misura (ovviamente nelle stesse condizioni sperimentali) il misurando fluttui<sup>4</sup>.

Al contrario, supponiamo che l'atomo si trovi in una sovrapposizione di autostati; se stavolta eseguiamo la misura, una sola non basterà più per descrivere il sistema fisico, perché la probabilità di trovarlo in uno stato anziché in un altro non è più unitaria e di fatto il risultato della misura varierà al variare del numero di misure. Quando parliamo di misure ripetute non intendiamo temporalmente (misura al tempo  $t_1$ , poi a  $t_2 > t_1$ , poi a  $t_3 > t_2$  e così via) ma eseguite “in parallelo” nelle stesse condizioni sperimentali su un *ensemble* di sistemi preparati identicamente.

## 2.3 COMMUTATORI ED OSSERVABILI COMPATIBILI

Abbiamo visto nella sezione precedente che, se un sistema occupa un autostato di un operatore  $\hat{O}$ , associato all'osservabile  $O$ , allora tale sistema ha un valore ben definito di tale osservabile.

A questo punto è lecito chiedersi se esistono sistemi fisici con valori ben definiti di più osservabili. Per esempio, un sistema può avere un'energia ben definita e simultaneamente un impulso ben definito?

La risposta a questa domanda richiede di caratterizzare se e sotto quali ipotesi è possibile trovare **autostati simultanei** di più osservabili fisiche. La risposta non può prescindere dalla definizione di **commutatore** tra due operatori:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Un teorema illustrato nello scorso capitolo afferma che due operatori autoaggiuntivi che commutano, i.e.  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , condividono almeno una base completa di autostati comuni. Le osservabili in questione,  $A$  e  $B$ , si dicono **compatibili**. Viceversa se non commutano non è possibile diagonalizzarli simultaneamente. La non commutatività di alcuni operatori (nel caso più eclatante, di posizione ed impulso) porta a risultati sorprendenti: avremo modo di parlarne in Sez. 3.2.

Un altro concetto collegato è quello di **insieme completo di osservabili compatibili**, che sarà ampiamente, seppur spesso implicitamente, utilizzato più avanti, per esempio nella discussione di problemi tridimensionali. Si tratta di un concetto utile nel caso in cui vogliamo usare una base completa dello spazio di Hilbert ma abbiamo a disposizione operatori autoaggiuntivi (associati ad osservabili) degeneri. Un insieme  $\{\hat{O}_1, \dots, \hat{O}_n\}$  è detto *set completo compatibile* se:

- È un set di operatori compatibili, cioè mutualmente commutanti:

$$[\hat{O}_i, \hat{O}_j] = 0 \quad \forall i, j$$

pertanto esiste una base  $\mathcal{B}$  di autostati simultanei degli  $n$  operatori.

- Ogni stato appartenente alla base  $\mathcal{B}$  è determinato univocamente dalla  $n$ -upla di autovalori  $(\omega_1, \dots, \omega_n)$  (talvolta chiamati *numeri quantici*) di ciascun operatore:

$$\forall i : \hat{O}_i |\omega_1 \dots \omega_n\rangle = \omega_i |\omega_1 \dots \omega_n\rangle$$

in modo tale cioè che la scrittura  $|\omega_1 \dots \omega_n\rangle$  individui **un solo** stato.

Questa definizione permette di “etichettare” ciascuno stato di una base completa (la base  $\mathcal{B}$ ) dello spazio di Hilbert in modo univoco. In questo senso il set è *completo*. Se ad esempio siamo interessati agli autostati dell’energia di un sistema fisico, ma l’operatore associato ad essa è degenere, ci è utile diagonalizzare simultaneamente un certo numero di altre osservabili, per ottenere un *set* completo. Se allora esistono 3 stati indipendenti con la stessa energia, potremo dare un nome diverso a ciascuno dei tre, distinguendoli grazie al fatto che hanno valori di altre osservabili diversi.

## 2.4 SOTTOSISTEMI NON INTERAGENTI

Consideriamo un sistema  $\mathcal{S}$  composto da due sottosistemi  $\mathcal{S}_1$  ed  $\mathcal{S}_2$ , supposti **non interagenti**, cioè **disaccoppiati**; supponiamo poi che a ciascuno di essi siano associati uno spazio di Hilbert e una base:

$$\mathcal{S}_1, \mathcal{H}_1, \{|\psi_i\rangle\} \qquad \mathcal{S}_2, \mathcal{H}_2, \{|\phi_j\rangle\}$$

È possibile dare una descrizione completa di  $\mathcal{S}$  facendo uso della base data dal prodotto tensore delle due basi, ossia<sup>5</sup>

$$|\eta_{mn}\rangle = |\psi_m\rangle |\phi_n\rangle$$

Quello che otteniamo è una matrice  $m \times n$  di vettori di base  $|\eta_{mn}\rangle$  i cui elementi sono **tutte le possibili coppie** degli elementi delle basi di partenza: supponendo che  $\mathcal{S}_1$  e  $\mathcal{S}_2$  siano completamente scorrelati, a ogni possibile stato di uno è possibile associare ogni possibile stato dell'altro senza alcuna correlazione.

$$\begin{aligned} |\eta\rangle &= |\psi\rangle |\phi\rangle = \left( \sum_m a_m |\psi_m\rangle \right) \left( \sum_n b_n |\phi_n\rangle \right) = \\ &= \sum_{n,m} a_m b_n |\psi_m\rangle |\phi_n\rangle = \sum_{n,m} c_{mn} |\eta_{mn}\rangle \end{aligned}$$

Nel misurare in  $\mathcal{S}_1$  l'osservabile  $A_1$ , ci aspettiamo che la misura non sia influenzata da quanto avviene in  $\mathcal{S}_2$ , difatti

$$\langle \eta | \hat{A}_1 | \eta \rangle = \langle \phi | \langle \psi | \hat{A}_1 | \psi \rangle | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{A}_1 | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{A}_1 | \psi \rangle$$

dove è stata usata l'indipendenza tra i due sistemi e la condizione di normalizzazione di ogni stato (si veda il primo assioma). Come ci aspettavamo, misurare l'osservabile nello stato  $\mathcal{S}$  o in  $\mathcal{S}_1$  porta allo stesso risultato *in*  $\mathcal{S}_1$ . È necessario tenere a mente che le due operazioni sono profondamente diverse, nonostante condividano lo stesso risultato:

$$\langle \eta | \hat{A}_1 | \eta \rangle \not\equiv \langle \psi | \hat{A}_1 | \psi \rangle$$

Nel secondo caso stiamo considerando il solo  $\mathcal{S}_1$ , e misurando il valor medio associato all'osservabile  $A_1$ ; nel primo stiamo sempre misurando la stessa osservabile, tenendo però in considerazione  $\mathcal{S}_2$ : il motivo per cui numericamente otteniamo lo stesso valore è che non abbiamo imposto alcuna *condizione* sul secondo sistema; se stessimo eseguendo la misura di  $A_1$  in  $\mathcal{S}_1$  e di  $B_2$  in  $\mathcal{S}_2$ , otterremmo:

$$\langle \eta | \hat{A}_1 \hat{B}_2 | \eta \rangle = \langle \psi | \hat{A}_1 | \psi \rangle \langle \phi | \hat{B}_2 | \phi \rangle$$

che è perfettamente coerente con quanto già è noto in ambito statistico: le densità di probabilità di distribuzioni statisticamente scorrelate si moltiplicano nel calcolo della probabilità complessiva:

$$p(x,y) = p_x(x)p_y(y)$$

Quello che abbiamo derivato qui è un caso semplice, che vale se gli stati sono *fattorizzabili*. Il caso generale è più complesso, e rimandiamo a tal proposito al Cap. 5.

## 2.5 HAMILTONIANO ED EVOLUZIONE TEMPORALE

In questa sezione trattiamo l'evoluzione temporale di un sistema quantistico descritto da un hamiltoniano  $\hat{H}$ , a partire dall'Equazione di Schrödinger.

Tratteremo la differenza tra natura statistica e natura deterministica della teoria, entrambe presenti e perfettamente in accordo, nonostante apparentemente contrastanti, e affronteremo l'evoluzione temporale sia dal punto di vista di evoluzione degli stati (rappresentazione di Schrödinger) che dal punto di vista di evoluzione degli operatori (rappresentazione di Heisenberg).

### 2.5.1 L'Equazione di Schrödinger

Ci accingiamo ora a introdurre una delle equazioni più importanti della quantomeccanica: fino ad ora non abbiamo mai citato il tempo, dunque vogliamo un'equazione che regoli l'evoluzione temporale di un sistema quantistico. Cerchiamo dunque un'equazione differenziale nel tempo che regoli la dinamica del sistema: siccome sperimentalmente osserviamo il fenomeno dell'*interferenza*, tale fenomeno suggerisce l'esistenza di un **principio di sovrapposizione** – cosa peraltro coerente con il formalismo matematico finora introdotto – che vogliamo sempre vero allo scorrere del tempo. Inoltre vogliamo che l'evoluzione della funzione d'onda sia dipendente unicamente dallo stato iniziale e non da altre condizioni.

Un'equazione di questo tipo deve essere lineare al primo ordine nel tempo, in quanto solo a tale ordine una sola condizione iniziale è sufficiente per *determinare* (si noti il verbo) lo stato di evoluzione della funzione d'onda.

$$|\psi, t\rangle \implies |\psi, t + dt\rangle$$

Useremo inizialmente la notazione  $|\psi, t\rangle$  per fissare i concetti e indicare lo stato  $\psi$  al tempo  $t$ ; più avanti cambieremo notazione, e useremo equivalentemente  $|\psi, t\rangle \leftrightarrow |\psi(t)\rangle$  dando per scontato che l'argomento della  $\psi$  nel *ket* è da intendersi come “dipendenza temporale dello stato” e non necessariamente argomento della funzione d'onda.

L'equazione di evoluzione deve preservare in ogni tempo la normalizzazione degli stati quantistici, altrimenti basterebbe l'evoluzione temporale per rompere la struttura matematica:

$$\langle\psi, t|\psi, t\rangle = 1 \quad \forall t$$

Vogliamo poi che compaia un operatore strettamente associato all'evoluzione temporale: ispirandoci alla Meccanica Analitica possiamo supporre che tale operatore sia l'*hamiltoniana*, che in ambito quantistico prende il nome di *operatore hamiltoniano*  $\hat{H}$ . Mettendo insieme tutte queste richieste, a meno di costanti moltiplicative otteniamo l'**Equazione di Schrödinger**

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi, t\rangle = \hat{H} |\psi, t\rangle \tag{2.4}$$

Una condizione fondamentale è la normalizzazione degli stati quantistici. Mostriamo che imponendo questa condizione sull'equazione (2.4) si ricava che l'operatore hamiltoniano deve essere autoaggiunto:

$$\langle\psi, t|\psi, t\rangle = 1 \quad \forall t \implies \hat{H} = \hat{H}^\dagger$$

*Dimostrazione.* Scrivendo l'equazione di Schrödinger per i *bra*, vale

$$-i\hbar \partial_t \langle \psi, t | = \langle \psi, t | \hat{H}^\dagger$$

Dunque possiamo sia usare la condizione di normalizzazione, assiomatica

$$\partial_t \langle \psi, t | \psi, t \rangle = \partial_t (1) = 0$$

che l'equazione (2.4)

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

dove con  $\stackrel{!}{=}$  indichiamo che stiamo *imponendo* la condizione che segue. Siccome questa equazione deve valere su ogni stato e a ogni tempo, segue che l'operatore  $\hat{H}^\dagger - \hat{H}$  è l'operatore nullo, i.e.

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$$

□

### 2.5.2 Evoluzione degli stati: la rappresentazione di Schrödinger

Vogliamo risolvere l'Equazione di Schrödinger (2.4) nel caso in cui  $\hat{H}$  sia **indipendente dal tempo**. La soluzione formale è data da:

$$|\psi, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |\psi, t_0\rangle \quad (2.5)$$

è soluzione dell'equazione (2.4), dove  $|\psi, t_0\rangle = |\psi_0\rangle$  è la necessaria condizione iniziale. Per verificarlo è sufficiente sostituire questo risultato nell'equazione, in modo da ottenere un'identità.

L'operatore

$$f(\hat{H}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \equiv \hat{U}(t, t_0)$$

è detto **evolutore**, ed è unitario:

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$$

come si verifica semplicemente ricordando che  $\hat{H}$  è hermitiano. Per questo motivo alla dinamica che segue dall'equazione di Schrödinger è talvolta attribuito l'aggettivo *unitaria*.

Poco sopra abbiamo scritto l'Equazione di Schrödinger in notazione di Dirac, tuttavia possiamo esprimere la funzione d'onda semplicemente moltiplicando per  $\langle x |$  a sinistra ambo i lati:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t) \quad (2.6)$$

In questo caso, come condizione iniziale si trova la funzione

$$\langle x | \psi, t_0 \rangle = \psi(x, t_0) = \psi_0(x)$$

Per quanto riguarda la soluzione, se prima avevamo (2.5), moltiplicando sempre per  $\langle x|$  a sinistra troviamo

$$\begin{aligned}\langle x|\psi, t\rangle &= \psi(x, t) \\ &= \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|\psi, t_0\rangle \\ &= \int \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|y\rangle \langle y|\psi, t_0\rangle dy \\ &= \int U(x, t; y, t_0) \psi(y, t_0) dy\end{aligned}$$

ove ci siamo avvalsi della relazione di completezza nella rappresentazione delle coordinate.  $U(x, t; y, t_0)$  è la **funzione di Green** caratteristica del problema, chiamata anche **propagatore**. Conoscerlo significa saper ricostruire, mediante la formula appena scritta, l'evoluzione di uno stato quantistico qualsiasi a partire da una condizione iniziale. Un modo per calcolare il propagatore alternativo al formalismo che stiamo costruendo sarà descritto nel capitolo ??.

### 2.5.3 Evoluzione degli operatori: la rappresentazione di Heisenberg

Nella **rappresentazione di Schrödinger**, gli operatori non sono sottoposti a un'evoluzione temporale: sono infatti gli stati del sistema a evolvere. Introduciamo adesso la **rappresentazione di Heisenberg**, alternativa ed equivalentemente valida rispetto alla precedente, in cui sono invece gli operatori a evolvere nel tempo, mentre gli stati fisici sono fissi. Poniamo di lavorare con operatori (di Schrödinger) indipendenti dal tempo.

Ricordando la soluzione dell'equazione di Schrödinger scritta nella forma (2.4) e ponendo, senza perdere di generalità,  $t_0 = 0$ , scriviamo:

$$\langle \psi, t | \hat{O} | \psi, t \rangle = \langle \psi_0 | e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | \psi_0 \rangle \equiv \langle \psi_0 | \hat{O}_H(t) | \psi_0 \rangle$$

dove  $\hat{O}_H(t)$  è l'operatore secondo Heisenberg, evidentemente dipendente da  $t$ , con

$$\hat{O} = \hat{O}_H(t_0) = \hat{O}_H(0)$$

Notiamo che il valore di aspettazione di  $\hat{O}$  sullo stato  $|\psi, t\rangle$  corrisponde per definizione al valore di aspettazione di  $\hat{O}_H(t)$  sullo stato iniziale  $|\psi_0\rangle$ .

In tale rappresentazione, l'evoluzione temporale è determinata dall'**Equazione di Heisenberg**:

$$\frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}_H(t)] \quad (2.7)$$

*Dimostrazione.* L'Eq. (2.7) è dimostrata semplicemente per calcolo diretto, ricordando che stiamo lavorando con operatori  $\hat{O}$  indipendenti dal tempo:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) &= \frac{d}{dt} \left( e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \right) \\ &= \left( \frac{i}{\hbar} \hat{H} \right) e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{O} \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ &= \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{O}_H(t) - \frac{i}{\hbar} \hat{O}_H(t) \hat{H} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}_H(t)]\end{aligned}$$

□

Notiamo esplicitamente che, mentre è sempre vero  $[\hat{H}, f(\hat{H})] = 0$  (essendo  $\hat{H}$  hermitiano), non è affatto assicurato che  $\hat{O}$  e  $\hat{H}$  commutino: infatti, tra il secondo e il terzo passaggio si sono commutati gli hamiltoniani coi loro esponenziali.

#### 2.5.4 Evoluzione dei proiettori: una rappresentazione intermedia

Abbiamo già visto che gli stati puri si trovano in corrispondenza biunivoca con i proiettori<sup>6</sup>:

$$\text{stato } |\psi\rangle \quad \longleftrightarrow \quad |\psi\rangle\langle\psi|$$

con

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

Anche in questa rappresentazione deve esistere un'equazione di evoluzione temporale. Ricordando di nuovo la (2.5), si trova

$$|\psi, t\rangle\langle\psi, t| = \rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi_0\rangle\langle\psi_0| e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \rho_0 e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

dunque derivando

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \rho_0 e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} + e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \rho_0 \left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right) e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\rho(t) + \frac{i}{\hbar}\rho(t)\hat{H} \end{aligned}$$

Quindi in conclusione

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \rho(t)] \quad (2.8)$$

Conviene notare una somiglianza interessante. Nel contesto della Meccanica Analitica, dette  $q_i, p_i$  le coordinate hamiltoniane (che regolano l'evoluzione del sistema tramite l'Equazione di Hamilton), è possibile definire nello **Spazio delle Fasi**

$$\rho(q_i, p_i, t) \equiv \text{densità di stati nell'intorno di } (q_i, p_i) \text{ al tempo } t$$

Il Teorema di Liouville afferma che la derivata totale rispetto al tempo di tale densità è nulla:

$$\frac{d}{dt}\rho(q_i, p_i, t) = 0$$

che, nel formalismo delle Parentesi di Poisson, si riscrive equivalentemente come

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, \hat{H}\} = 0$$

che, a meno di costanti, ricorda molto da vicino l'Eq. (2.8). Questo spiega il nome della matrice densità. Eviteremo di stabilire un nesso tra commutatori e Parentesi di Poisson, che in alcuni testi (ad esempio [5]) viene invece postulato direttamente: noi non lo faremo.

### 2.5.5 Operatore Derivata

Sia  $\hat{O}$  un operatore indipendente dal tempo, vogliamo adesso definire un operatore  $\hat{\hat{O}}$ , l'**operatore derivata** di  $\hat{O}$ . Evidentemente,  $\hat{\hat{O}}$  non può coincidere con  $\partial_t \hat{O}$ , che è pari a 0.

Per inquadrare meglio il problema, immaginiamo di voler scrivere l'operatore *velocità*: tale operatore è associato all'osservabile *derivata della posizione*, ma non può certo essere la derivata dell'operatore posizione. Questo è infatti indipendente dal tempo, cioè non varia la sua azione sugli stati allo scorrere del tempo. A variare, piuttosto, sono gli stati stessi nella loro evoluzione temporale. Vogliamo quindi trovare un operatore che tenga conto dell'evoluzione del valore di aspettazione dell'osservabile "primitiva" sugli stati, al netto della loro evoluzione regolata dall'equazione (2.4). Poniamo allora

$$\partial_t \langle \psi, t | \hat{O} | \psi, t \rangle \equiv \langle \psi, t | \hat{\hat{O}} | \psi, t \rangle$$

definendo in questo modo l'operatore  $\hat{\hat{O}}$  per mezzo dei suoi elementi di matrice, che corrispondono alla derivata  $\partial_t$  degli elementi della matrice relativi all'operatore  $\hat{O}$ .

Chiaramente  $\hat{O}$  e  $\hat{\hat{O}}$  non sono indipendenti:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\hat{O}} \rangle &\equiv \partial_t \langle \psi, t | \hat{O} | \psi, t \rangle \\ &= \langle \psi_0 | \frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{O} \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \psi_0 \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi, t | \hat{H} \hat{O} | \psi, t \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi, t | \hat{O} \hat{H} | \psi, t \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{O}] \rangle \end{aligned}$$

Fin qui non abbiamo fatto alcuna assunzione su  $|\psi, t\rangle$ . Si ha quindi che

$$\forall |\psi, t\rangle \quad \left\langle \hat{\hat{O}} - \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}] \right\rangle = 0$$

per cui l'operatore differenza deve essere l'operatore nullo. Segue che possiamo scrivere:

$$\hat{\hat{O}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}] \tag{2.9}$$

Evidenziamo un fatto che sarà ripreso nella Sez. 3.1.1, Parte I: se l'operatore commuta con l'Hamiltoniano, il suo valore atteso su qualsiasi stato è indipendente dal tempo. Questo è evidente da quanto abbiamo appena derivato: l'operatore *derivata di O*, il cui valore di aspettazione è la derivata di  $\langle \psi | O | \psi \rangle$ , è identicamente nullo. Questo risultato richiama evidentemente quanto già noto classicamente, inserendolo in un contesto quantistico.

## 2.6 GLI AUTOSTATI DELL'HAMILTONIANO

*It is important to realize that in physics today, we have no knowledge what energy is. We do not have a picture that energy comes in little blobs of a definite amount.*

Richard Feynman

Qualunque cosa sia, l'energia si presenta sia in forma continua (e.g. per una particella libera in un moto non limitato nello spazio) sia discreta (come nei livelli energetici dell'atomo). Quindi ci aspettiamo – per le assunzioni e le deduzioni fatte finora – che gli autovalori associati all'operatore hamiltoniano debbano in generale appartenere a uno spettro continuo e/o discreto, a seconda del contesto fisico in esame.

In questa sezione saranno ricavati i risultati assumendo che l'operatore  $\hat{H}$  abbia autovalori discreti. Tuttavia l'estensione al continuo non dovrebbe richiedere sforzi eccessivi.

Consideriamo quindi un operatore hamiltoniano  $\hat{H}$  e i suoi autostati. Questi esistono sempre (abbiamo mostrato che  $\hat{H}$  è hermitiano) e costituiscono una base completa per lo spazio degli stati. La definizione di autostato sarà la seguente:

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

dove  $E_n$  rappresenta l'autovalore corrispondente rispettivamente a ciascun autostato  $n$ -esimo. D'altronde l'Equazione di Schrödinger:

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

vale per tutti gli stati dello spazio, quindi anche per gli autostati dell'energia che stiamo considerando. Dalla definizione di autostato segue quindi che:

$$i\hbar \partial_t |\psi_n\rangle = \hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

Risolvendo l'equazione differenziale, assumendo indipendenti dal tempo l'operatore  $\hat{H}$  o comunque gli autovalori  $E_n$ <sup>7</sup>, si ottiene, prendendo come istante iniziale  $t_0 = 0$ :

$$|\psi_n, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_n, 0\rangle \quad (2.10)$$

che per ogni  $n$  regola l'evoluzione temporale di ogni autostato dell'energia, a partire dall'autostato stesso al tempo iniziale. Ricordando che gli stati sono definiti a meno di una fase globale, è lecito concludere che gli stati relativi agli  $|\psi_n, 0\rangle$  sono mappati in loro stessi dall'evoluzione temporale.<sup>8</sup> Questo non vale per il generico stato  $|\psi, 0\rangle$ , in quanto gli sfasamenti sui singoli autostati  $|\psi_n, 0\rangle$  non costituiranno in generale una fase globale.

### 2.6.1 Completezza a ogni istante

Vogliamo ora apprezzare gli effetti di quanto derivato su un stato generico dello spazio, che ricordiamo essere scrivibile come combinazione lineare degli autostati associati all'operatore con cui vogliamo rappresentarlo. Consideriamo un stato generico  $|\psi_0\rangle$  allo stesso tempo  $t = 0$  scelto sopra: è ragionevole aspettarsi che questo possa essere coerentemente espresso in termini degli autostati dell'energia valutati **a quello stesso istante di tempo**. Vale in generale:

$$|\psi_0\rangle = \sum_n c_n |\psi_n, 0\rangle$$

dove quindi  $c_n$  sono le componenti dello stato nella rappresentazione dell'energia, all'istante iniziale. Chiaramente questa quantità non può dipendere dal tempo.

Ci spostiamo ora a un generico istante  $t$  successivo. Qui varrà la soluzione dell'equazione di Schrödinger per l'autostato  $|\psi\rangle$ , ormai evoluto:

$$|\psi, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} |\psi_0\rangle$$

da cui, inserendo la relazione di completezza per la base all'istante iniziale (chiaramente, la relazione deve valere ad ogni istante)

$$|\psi, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \left( \sum_n |\psi_n, 0\rangle \langle \psi_n, 0| \right) |\psi_0\rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} |\psi_n, 0\rangle \langle \psi_n, 0| \psi_0\rangle$$

ma  $\langle \psi_n, 0 | \psi_0 \rangle$  è proprio  $c_n$ , mentre l'operatore esponenziale applicato a  $|\psi_n, 0\rangle$  è (si veda lo sviluppo in serie di Taylor di quell'operatore):

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} |\psi_n, 0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_n, 0\rangle$$

dalla definizione di autostato. Infatti, con un piccolo abuso di notazione, per un operatore hermitiano  $\hat{A}$  tale che  $\hat{A} |\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle$ , vale  $f(\hat{A}) |\phi_n\rangle = f(a_n) |\phi_n\rangle$ , ossia la forma funzionale che agisce sull'operatore in sé può essere applicata agli autostati, dove tale forma funzionale deve essere esprimibile in serie di potenze. Segue la forma per lo stato  $|\psi\rangle$  al tempo  $t$ :

$$|\psi, t\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_n, 0\rangle \tag{2.11}$$

Confrontiamo dunque questa ultima equazione con

$$|\psi_0\rangle = \sum_n c_n |\psi_n, 0\rangle$$

e soffermiamoci su come sia possibile apprezzare l'evoluzione dello stato  $|\psi, 0\rangle$  verso  $|\psi, t\rangle$  in modo duplice. Possiamo infatti immaginare di tenere fissi gli autostati iniziali  $|\psi_n, 0\rangle$  e far evolvere nel tempo i coefficienti dello stato  $|\psi\rangle$  scritti rispetto a questi. I coefficienti  $c_n$  evolveranno tramite la moltiplicazione per la fase locale  $e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$ . Tali coefficienti sono relativi alle proiezioni dello stato sui vari autostati dell'energia, e la moltiplicazione per questa fase è una rotazione con frequenza  $E_n$  nel piano complesso. Ciò significa che l'evoluzione temporale può essere letta come la sovrapposizione degli sfasamenti dei vari coefficienti.

In un secondo scenario, possiamo invece assumere che siano – come di fatto costruito – gli autostati ad evolvere, lasciando costanti nel tempo i coefficienti  $c_n$ . Infatti, moltiplicando la fase per  $|\psi_n, 0\rangle$ , si ottiene (secondo quanto dimostrato sopra):

$$|\psi, t\rangle = \sum_n c_n |\psi_n, t\rangle$$

Ricordiamo che questi risultati sono validi se assumiamo che l'operatore hermitiano non dipenda esplicitamente dal tempo.

### 2.6.2 Stazionarietà

Considerando l'evoluzione degli autostati sopra studiata, possiamo immediatamente caratterizzare gli autostati dell'hamiltoniano come **stati stazionari**, ovvero stati sui quali il valore di aspettazione  $\langle O \rangle$  di una generica osservabile  $O$  non varia sotto evoluzione temporale. Formalmente, se  $|\psi_n\rangle$  è uno stato stazionario, per qualsiasi operatore  $\hat{O}$  vale

$$\langle \psi_n, t | \hat{O} | \psi_n, t \rangle = \langle \psi_n, 0 | \hat{O} | \psi_n, 0 \rangle \quad (2.12)$$

Infatti, banalmente ricordando (2.10) si ha la tesi. Nel caso particolare in cui  $\hat{O}$  è proprio  $\hat{H}$ , l'espressione implica che

$$E_n(t) = E_n(0) \quad (2.13)$$

Tale equazione può anche essere derivata direttamente: se definiamo

$$\hat{H} |\psi_n, 0\rangle = E_n(0) |\psi_n, 0\rangle \quad \hat{H} |\psi_n, t\rangle = E_n(t) |\psi_n, t\rangle$$

utilizzando l'equazione (2.10) otteniamo allora

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

da cui la (2.13) segue in modo immediato.

Abbiamo ricavato una proprietà degli autostati di  $\hat{H}$  (indipendente dal tempo) che funziona per qualsiasi *operatore*; ricaviamo adesso una proprietà dell'operatore  $\hat{H}$  che funziona su qualsiasi *stato*. Fissando gli autostati a  $|\psi_n, 0\rangle$  e immaginando quindi che siano le componenti di  $|\psi\rangle$  in questa base ad evolvere, osserviamo che si conserva nel tempo la probabilità di osservare un determinato valore  $E_n$  di energia:

$$P_{E_n}(t) = \left| c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \right|^2 = |c_n|^2 = P_{E_n}(0)$$

dal momento che la fase ha modulo unitario. Dall'unione di questi ultimi risultati possiamo scrivere che

$$P_{E_n}(t) \cdot E_n(t) = P_{E_n}(0) \cdot E_n(0)$$

e dunque, sommando

$$\sum_n P_{E_n}(t) \cdot E_n(t) = \sum_n P_{E_n}(0) \cdot E_n(0)$$

Quindi, su un qualsiasi stato  $|\psi, t\rangle$ ,

$$\langle \hat{H}(t) \rangle = \langle \hat{H}(0) \rangle \quad (2.14)$$

ovvero, per  $\hat{H}$  indipendente dal tempo, il valore di aspettazione dell'osservabile  $H$  relativo a un generico stato si conserva sotto evoluzione temporale.

Inoltre dalla (2.13) segue che, scrivendo l'operatore hamiltoniano in rappresentazione spettrale

$$\hat{H} = \sum_n E_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

e sostituendo l'evoluzione degli autostati, si ottiene agevolmente

$$\hat{H} = \sum_n E_n |\psi_n, 0\rangle\langle\psi_n, 0|$$

dove si ricorda che l'evoluzione temporale di tali autostati è possibile solo in questa forma, ovvero tramite la moltiplicazione per la fase  $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$ , per combinazione dell'equazione di Schrödinger e della definizione di autostato dell'energia, ed è proprio questa combinazione a stabilire che l'operatore hamiltoniano varia nel tempo se e solo se variano nel tempo i suoi autovalori, indipendentemente dall'evoluzione della base di autostati.

### 2.6.3 Spettro continuo e spettro discreto

Come anticipato, per un operatore (qui hermitiano) in dimensione infinita sono consentiti, in linea di principio, autovalori appartenenti a un dominio discreto (finito oppure infinito numerabile) e/o continuo (infinito non numerabile). Avremo modo di vedere che l'operatore hamiltoniano discusso fino ad ora dispone, in generale, di entrambe queste possibilità, quindi nella rappresentazione dell'energia, un generico stato  $|\psi\rangle$  si scriverà come segue<sup>9</sup>:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle + \int \psi(E) |\psi_E\rangle dE$$

dove si ricordi che, come nel caso della rappresentazione in coordinate, la base discreta è ortonormale, ma quella continua è soltanto ortogonale. Valgono dunque le seguenti equazioni

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm} \quad \langle\psi_{E'}|\psi_E\rangle = \delta(E - E')$$

### 2.6.4 Spettri ed evoluzione temporale delle probabilità

Esiste un'importante caratterizzazione dei sistemi fisici in cui esistono basi spettrali discrete dell'hamiltoniano. Immaginiamo di descrivere un sistema di singola particella. Se esiste una base discreta di autostati

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

allora l'evoluzione temporale della distribuzione di probabilità  $|\langle x|\psi\rangle|^2$  è tale da rendere *limitato* il moto da essa descritto.

Più precisamente, consideriamo un sistema unidimensionale ed una regione  $\Omega \subset \mathbb{R}$ , e chiamiamo  $P_\Omega(t)$  la probabilità che la particella si trovi in  $\Omega$  all'istante  $t$ :

$$P_\Omega(t) = \int_\Omega dx |\psi(x, t)|^2 > 0$$

Se  $P_\Omega(t=0) > 0$ , cioè se la funzione d'onda non è identicamente nulla in  $\Omega$  all'istante iniziale, e ammesso che  $\hat{H}$  abbia uno **spettro discreto**, si ha

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T P_\Omega(t) dt > 0$$

In altri termini, la base discreta è associata ad un **moto limitato**, ossia la media temporale della probabilità  $P_\Omega$  non tende ad annullarsi, il che è come dire che la particella è asintoticamente confinata in una regione che comprende  $\Omega$ .

*Dimostrazione.* La dimostrazione avviene per verifica diretta: decomponendo come in (2.11)

$$|\psi, t\rangle = \sum_n a_n e^{-iE_n t} |\psi_n\rangle$$

(d'ora in poi porremo spesso  $\hbar = 1$  per alleggerire i conti) si trova

$$\begin{aligned} P_\Omega(t) &= \int_\Omega dx |\langle x | \psi, t \rangle|^2 \\ &= \int_\Omega dx \sum_{m,n} a_n^* a_m e^{-i(E_m - E_n)t} \psi_n^*(x) \psi_m(x) \end{aligned}$$

da cui

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T P_\Omega(t) dt &= \frac{1}{T} \int_\Omega dx \sum_{m,n} a_n^* a_m \psi_n^*(x) \psi_m(x) \int_0^T dt e^{-i(E_m - E_n)t} \\ &= \int_\Omega dx \sum_{m,n} a_n^* a_m \psi_n^*(x) \psi_m(x) \delta_{mn} \\ &= \int_\Omega dx \sum_n |a_n|^2 |\psi_n(x)|^2 = \sum_n |a_n|^2 \int_\Omega dx |\psi_n(x)|^2 > 0 \end{aligned}$$

dove si è usato che l'integrale del termine di fase nel tempo che compare vale  $T$  se  $m = n$  e una costante  $\mathcal{O}(1)$  se  $m \neq n$  (assumiamo uno spettro senza degenerazioni, cioè con  $E_n \neq E_m$  per  $n \neq m$ ).  $\square$

Il risultato si estende al caso multidimensionale in modo equivalente. Tuttavia, esso **non** vale qualora  $\hat{H}$  avesse uno spettro continuo, con le proprietà descritte nella sezione precedente. Infatti se la decomposizione in autostati si scrive

$$|\psi\rangle = \int dE a(E) |\psi_E\rangle e^{-iEt}$$

ed è vero che

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T dt e^{i(E-E')t} = 2\pi\delta(E - E')$$

(dove usiamo  $\hbar = 1$ ) allora vale

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt P_\Omega(t) = 0$$

*Dimostrazione.* Cominciamo scrivendo l'integrale da calcolare:

$$\frac{1}{T} \int_0^T P_\Omega(t) dt = \frac{1}{T} \int_\Omega dx \int dEdE' a^*(E) \psi_E^*(x) a(E') \psi_{E'}(x) \int_0^T dt e^{-i(E-E')t}$$

Di questo ci interessa la parte temporale: infatti, supponendo  $E \neq E'$ , vale

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{i(E'-E)t} &= \frac{1}{T} \frac{e^{i(E'-E)T} - 1}{i(E' - E)} \\ &= \frac{2e^{i(E'-E)T/2}}{(E' - E)T} \frac{e^{i(E'-E)T/2} - e^{-i(E'-E)T/2}}{2i} \\ &= e^{i\kappa} \frac{\sin \kappa}{\kappa} \end{aligned}$$

dove  $\kappa \equiv (E' - E)T/2$ . Si ha

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} e^{i\kappa} \frac{\sin \kappa}{\kappa} = 0$$

perché  $e^{i\kappa}$  rimane limitato. Questo comportamento vale per qualsiasi  $E' \neq E$ . Se invece  $E = E'$  si ha che, banalmente

$$\frac{1}{T} \int_0^T dt e^{i(E'-E)t} = 1$$

per cui possiamo scrivere

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{i(E'-E)t} \stackrel{*}{=} \delta_{E'E}$$

dove con  $\stackrel{*}{=}$  specifichiamo che l'uguaglianza va intesa come convergenza funzionale. Concludiamo che

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T P_\Omega(t) dt = \int_\Omega dx \int dEdE' a^*(E)\psi_E^*(x)a(E')\psi_{E'}(x)\delta_{E'E} = 0$$

dove la presenza di  $\delta_{E'E}$  induce un'integrazione bidimensionale (il differenziale è  $dEdE'$ ) su una retta, cioè un insieme a misura nulla.  $\square$

## NOTE

1. Questa definizione è preferibile a quella in cui si immagina di ripetere l'esperimento sulla stessa particella  $N$  volte, perché evita di confrontarsi con concetti ancora dibattuti come il collasso della funzione d'onda, che non sono oggetto del corso.
2. Si dimostra componendo con l'identità al centro la norma  $\langle \psi | \psi \rangle$ .
3. Calcolare **valore atteso** equivale a eseguire una sorta di media statistica su tutti i possibili risultati di una misura; in statistica esso è anche chiamato *valore di aspettazione* di un certo evento. Nel caso di un dado a sei facce equiprobabile, per esempio, si ha

$$E[n] = \sum_{n=1}^6 nP(n) = \frac{1}{6} \sum_{n=1}^6 n = 3.5$$

L'analogia deve però essere presa con le dovute precauzioni, perché mentre è vero in Mecanica Quantistica che - similmente all'esempio appena riportato - una singola misura non dice nulla sulle proprietà intrinseche del sistema, i.e. sull'equiprobabilità del dado, è ancora soggetto a dibattito il significato della parola *misura*. Di conseguenza questo paragone, che in analisi statistica dei dati fa riferimento al campionamento di una distribuzione di probabilità, non va inteso in senso assoluto.

4. Stiamo ovviamente parlando di un esperimento mentale, nella realtà intervergono fenomeni aleatori di natura sistematica; le misure sugli autostati non sono esatte cioè prive di errore,

ma esatte cioè non variabili al variare del numero di misure. Il punto della questione è che la teoria della Meccanica Quantistica ammette misure certe quando eseguite su autostati del sistema, ovviamente autostati dell'osservabile in questione.

5. La notazione formalmente corretta è  $|\eta_{mn}\rangle = |\psi_m\rangle \otimes |\phi_n\rangle$ .
6. Qui si fa riferimento ai cosiddetti *stati puri*, ed esiste un'altra importante classe, quella degli *stati misti* o *miscele statistiche*, che per il momento escludiamo dalla trattazione: saranno trattati nel capitolo 5.
7. Vedremo a fine sezione il legame tra la dipendenza temporale dell'operatore hamiltoniano e quella dei suoi autovalori.
8. Ciò è reso ancor più evidente se –come già visto– eliminiamo l'ambiguità della fase relazionando gli stati ai proiettori sugli stati stessi, anziché ai *ket*. Se gli stati che studiamo sono gli autostati dell'operatore  $\hat{H}$ , allora

$$|\psi_n, t\rangle \langle \psi_n, t| = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_n, 0\rangle \langle \psi_n, 0| e^{+\frac{i}{\hbar} E_n t} = |\psi_n, 0\rangle \langle \psi_n, 0|$$

Dato che le fasi si semplificano, l'evoluzione temporale manda tale proiettore (i.e. lo stato che questo rappresenta) in sé stesso.

9. Ricordiamo che uno stato  $|\psi\rangle$  astratto non descrive necessariamente contesti fisici a singola particella. Con *stato* di un sistema si può intendere anche qualcosa di più complesso.

## IN BREVE...

- ◊ Gli stati che consideriamo fisici nello Spazio di Hilbert sono normalizzati e definiti a meno di una fase (Assioma 1):

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 = \text{Tr} \rho \quad e^{i\phi} |\psi\rangle \sim |\psi\rangle$$

- ◊ A ciascuna osservabile fisica  $O$  associamo un operatore autoaggiunto  $\hat{O}$ . I risultati delle misure sono gli autovalori di  $\hat{O}$  (Assioma 2).
- ◊ Dato uno stato  $|\psi\rangle$  in termini di una base ortonormale di autostati di  $\hat{O}$

$$|\psi\rangle = \sum c_n |\phi_n\rangle$$

allora il valore atteso dell'osservabile sullo stato si calcola come

$$\langle O \rangle = \sum_n \lambda_n |c_n|^2$$

con  $\lambda_n$  autovalori di  $\hat{O}$  e  $|c_n|^2$  le relative probabilità di misura (Assioma 3).

- ◊ Dato un sistema  $\mathcal{S}$  composto di due sottosistemi  $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ , per osservabili del tipo  $\hat{O} = \hat{A} \otimes \hat{B}$  e stati  $|\psi\rangle = |a\rangle |b\rangle$ , cioè *fattorizzabili* o *separabili*, il valore di aspettazione di  $\hat{O}$  su  $|\psi\rangle$  è dato da

$$\langle O \rangle = \langle a | \hat{A} | a \rangle \langle b | \hat{B} | b \rangle$$

- ◊ La dinamica temporale degli stati nello spazio di Hilbert è regolata dall'**Equazione di Schrödinger**:

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

La richiesta che a ogni tempo valga  $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$  implica che  $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ . Se  $\hat{H}$  è indipendente dal tempo (ipotesi che in questo capitolo usiamo sempre), la soluzione all'equazione è data da

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

dove  $\hat{U}$  è l'**evolutore**.

- ◊ Nella **rappresentazione di Schrödinger**, la funzione d'onda evoluta si ottiene per convoluzione del **propagatore**  $U$  con la funzione d'onda non evoluta:

$$\psi(x, t) = \int_{\mathbb{R}} dy U(x, t; y, t_0) \psi(y, t_0)$$

- ◊ Nella **rappresentazione di Heisenberg** gli stati rimangono fissi e sono gli operatori a evolvere:

$$\hat{O}_H(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$$

La dinamica dell'evoluzione, per operatori (di Schrödinger)  $\hat{O}$  indipendenti dal tempo, è regolata dall'**Equazione di Heisenberg**

$$\frac{d}{dt} \hat{O}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}_H(t)]$$

- ◊ Dato l'operatore di stato  $\rho(t)$  (matrice densità), esso soddisfa la legge di evoluzione

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \rho(t)]$$

- ◊ Se l'operatore  $\hat{O}$  è indipendente dal tempo, è possibile definire l'**operatore derivata** tramite l'evoluzione dei valori di aspettazione di  $\hat{O}$ . Si trova che

$$\hat{O} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}]$$

- ◊  $\hat{H}$  ha a ogni istante un set completo e ortonormale di autostati  $\{|\psi_n\rangle\}$ . Tali autostati sono stazionari rispetto a qualsiasi osservabile  $\hat{O}$ , cioè vale

$$\forall |\psi_n(t)\rangle, \forall t : \langle \psi_n(t) | \hat{O} | \psi_n(t) \rangle = \langle \psi_n(t_0) | \hat{O} | \psi_n(t_0) \rangle$$

Questo implica che, detti  $E_n$  gli autovalori di  $\hat{H}$

$$E_n(t) = E_n(t_0)$$

- ◊ Su un qualsiasi stato  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  vale  $\langle \hat{H}(t) \rangle = \langle \hat{H}(t_0) \rangle$ .
- ◊ Se lo spettro dell'hamiltoniano è discreto, allora il moto descritto dai rispettivi stati è limitato; se è continuo allora è non limitato.

# 3

## SIMMETRIE E LEGGI DI CONSERVAZIONE

*Questo capitolo introduce il concetto di simmetria, e – a partire da quanto noto in Meccanica Classica – ne espone la fondamentale interconnessione con la proprietà di conservazione di specifiche quantità fisiche. Viene introdotto l’operatore Impulso, associato alla simmetria per traslazioni spaziali, e se ne analizza il legame profondo con l’operatore Posizione; vengono infine analizzate le rappresentazioni dei due operatori nelle coordinate e negli impulsi, e si introduce il Principio di Indeterminazione di Heisenberg, squisitamente quantistico e connesso alla struttura matematica della Teoria.*

### 3.1 TRASFORMAZIONI, SIMMETRIE E CONSERVAZIONI

In Meccanica Quantistica esiste un legame profondo tra il concetto di simmetria e l’esistenza di leggi di conservazione per i sistemi.

Supponiamo di disporre di un sistema quantistico con la proprietà di invarianza per traslazioni. Possiamo immaginarcici un apparato sperimentale costituito dal sistema nello stato  $|\psi\rangle$  e da uno strumento di misura, sensibile ad un’osservabile  $A$ , a cui è associato l’operatore  $\hat{A}$ .

L’invarianza per traslazioni, allora, si manifesta con il fatto che ripetendo l’esperimento dopo aver traslato l’intero apparato, gli esiti di una misura dell’osservabile trasformato  $A'$  sul nuovo sistema nello stato trasformato  $|\psi'\rangle$  sono gli stessi. Quella che stiamo descrivendo è una **trasformazione attiva**, in cui trasformiamo gli stati e l’operatore in modo che la fisica resti la stessa. È possibile concepire anche **trasformazioni passive** in cui a cambiare è la rappresentazione degli stati in termini di vettori di base (analogo al caso della Meccanica Classica, dove queste ultime corrispondono a cambi di sistema di coordinate).

#### Trasformazioni degli stati e delle osservabili

Le trasformazioni degli stati e le corrispondenti trasformazioni di osservabili devono soddisfare un certo numero di proprietà: se prima e dopo la trasformazione si ha rispettivamente

$$\hat{A} |\psi_n\rangle = a_n |\psi_n\rangle \quad \text{e} \quad \hat{A}' |\psi'_n\rangle = a'_n |\psi'_n\rangle$$

allora, poiché  $A$  e  $A'$  rappresentano la stessa osservabile fisica, essi dovranno avere lo stesso *set* di valori possibili, in altri termini i rispettivi operatori  $\hat{A}$  e  $\hat{A}'$  condivideranno il proprio spettro di autovalori:

$$a_n = a'_n$$

Per la stessa ragione, preso uno stato  $|\psi\rangle$  esso dovrà essere associato alle stesse distribuzioni di probabilità

$$|\psi\rangle = \sum c_n |\psi_n\rangle \quad |\psi'\rangle = \sum c'_n |\psi'_n\rangle \quad \Rightarrow \quad |c_n|^2 = |c'_n|^2$$

il che equivale a dire che la trasformazione deve preservare i prodotti scalari

$$|\langle\psi_n|\psi\rangle| = |\langle\psi'_n|\psi'\rangle|$$

Si può dimostrare (**Teorema di Wigner**) che gli unici operatori che soddisfano questa proprietà sono gli operatori **unitari**  $\hat{U}$ :<sup>1</sup> allora dovrà essere

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle \tag{3.1}$$

In effetti gli operatori unitari conservano il prodotto scalare, in quanto se scriviamo

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle \quad |\phi'\rangle = \hat{U}|\phi\rangle$$

allora la seguente espressione

$$\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$$

è sicuramente verificata qualora  $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \mathbb{1}$ .

Per quanto riguarda la corrispondente trasformazione  $\hat{A} \rightarrow \hat{A}'$  si ha che da una parte

$$\hat{A}'|\psi'_n\rangle = \hat{A}'\hat{U}|\psi_n\rangle$$

dall'altra

$$\hat{A}'|\psi'_n\rangle = a_n|\psi'_n\rangle = a_n\hat{U}|\psi_n\rangle = \hat{U}a_n|\psi_n\rangle = \hat{U}\hat{A}|\psi_n\rangle$$

dunque  $\hat{A}'\hat{U} = \hat{U}\hat{A}$ . Ma allora

$$\hat{U}^\dagger\hat{A}'\hat{U}|\psi_n\rangle = \hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{A}|\psi_n\rangle = \hat{A}|\psi_n\rangle$$

ossia, per ogni  $n$

$$(\hat{U}^\dagger\hat{A}'\hat{U} - \hat{A})|\psi_n\rangle = 0$$

da cui

$$\hat{U}^\dagger\hat{A}'\hat{U} = \hat{A}$$

Perciò impariamo che la trasformazione corrispondente a (3.1) per gli operatori è

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger \tag{3.2}$$

### Trasformazioni continue

Descriviamo adesso le trasformazioni unitarie dipendenti da un parametro continuo  $s \in \mathbb{R}$ , partendo da quelle infinitesime e “connesse” con l'identità, sviluppando al primo ordine<sup>2</sup>

$$\hat{U}(s) = \mathbb{1} + s \frac{d\hat{U}}{ds} \Big|_{s=0} + \mathcal{O}(s^2)$$

Se  $\hat{U}$  è unitario, deve valere

$$\begin{aligned} \mathbb{1} &= \hat{U}^\dagger(s)\hat{U}(s) = \left(\mathbb{1} + s\frac{d\hat{U}^\dagger}{ds}\Big|_{s=0} + \mathcal{O}(s^2)\right)\left(\mathbb{1} + s\frac{d\hat{U}}{ds}\Big|_{s=0}\right) \\ &= \mathbb{1} + s\left(\frac{d\hat{U}^\dagger}{ds}\Big|_{s=0} + \frac{d\hat{U}}{ds}\Big|_{s=0}\right) + \mathcal{O}(s^2) \end{aligned}$$

per cui

$$\frac{d\hat{U}^\dagger}{ds}\Big|_{s=0} = -\frac{d\hat{U}}{ds}\Big|_{s=0}$$

Infine possiamo immaginare di ricostruire l'elemento generico della famiglia  $\hat{U}(s)$  iterando un numero grande di volte una delle sopra citate trasformazioni infinitesime, definite dal cosiddetto **generatore**  $\hat{K}$  del gruppo di trasformazioni,

$$\hat{U} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \hat{U} \left( \frac{s}{N} \right) \right]^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \mathbb{1} + \frac{is\hat{K}}{N} \right]^N = e^{is\hat{K}}$$

dunque

$$\hat{U}^\dagger = e^{-is\hat{K}^\dagger}$$

con la condizione di unitarietà che diventa

$$i\hat{K} = \frac{d\hat{U}}{ds}\Big|_{s=0} = -\frac{d\hat{U}^\dagger}{ds}\Big|_{s=0} = -(-i\hat{K}^\dagger)$$

ossia  $\hat{K} = \hat{K}^\dagger$ , cioè il generatore deve essere autoaggiunto.

### 3.1.1 Il legame tra simmetrie e conservazioni

Tra le trasformazioni descritte in questa sezione, le **simmetrie** hanno un ruolo privilegiato. Ma quale significato possiamo dare a questo termine? Una definizione efficace che descrive l'evoluzione temporale dei sistemi fisici simmetrici sotto una specifica trasformazione è la seguente:

*L'evoluto del trasformato è uguale al trasformato dell'evoluto.*

Massimo d'Elia

Il riferimento, nel nostro caso, è all'evoluzione temporale, governata dall'operatore hamiltoniano mediante l'equazione di Schrödinger. La definizione afferma che, considerata una "traslazione" del sistema che costituisca una simmetria (sia essa una traslazione spaziale, una traslazione temporale, una rotazione, etc.) se trasliamo le condizioni iniziali, allora la dinamica del sistema è essenzialmente la stessa, soltanto traslata.

Il legame profondo tra simmetrie e leggi di conservazione è illustrato dal seguente risultato, che corrisponde concettualmente al **Teorema di Noether** dimostrato per la prima volta nel 1915 nell'ambito della Meccanica Classica.

Se  $\hat{O}$  è un **operatore unitario** di un gruppo dipendente da un **parametro continuo**  $s$ , i.e.  $\hat{O} = e^{is\hat{K}}$  con  $\hat{K}$  generatore del gruppo, e il sistema fisico in esame è **simmetrico** sotto la trasformazione  $|\psi\rangle \rightarrow \hat{O}|\psi\rangle$ , allora

$$[\hat{H}, \hat{K}] = 0$$

In altri termini, *ad ogni simmetria è associata una quantità conservata, il cui operatore corrispondente costituisce il generatore del gruppo di trasformazioni di simmetria.*

*Dimostrazione.* Se scriviamo la dinamica di uno stato  $|\psi\rangle$  a partire da un istante  $t_0$ , per cui il trasformato dell'istante iniziale è

$$|\psi'(t_0)\rangle = \hat{O}(s) |\psi(t_0)\rangle$$

allora possiamo utilizzare l'unitarietà dell'evoluzione temporale, scrivendo ad un istante successivo<sup>3</sup>

$$|\psi'(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi'(t_0)\rangle$$

Utilizziamo adesso il fatto che  $\hat{O}$  è una **simmetria del sistema**, scrivendo lo stato  $|\psi'(t)\rangle$  appena scritto (l'evoluto del traslato) come il traslato (mediante  $\hat{O}$ ) dell'evoluto<sup>4</sup> (cioè dello stato all'istante  $t$ )

$$|\psi'(t)\rangle = \hat{O}(s) |\psi(t)\rangle$$

Esploriamo le conseguenze della precedente uguaglianza, nel caso di  $\hat{H}$  indipendente dal tempo:

$$\begin{aligned} |\psi'(t)\rangle &= \hat{O}(s) |\psi(t)\rangle \\ &= \hat{O}(s) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle \\ &= \hat{O}(s) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \hat{O}^\dagger(s) \hat{O}(s) |\psi(t_0)\rangle \\ &= \hat{O}(s) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \hat{O}^\dagger(s) |\psi'(t_0)\rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo messo un'identità  $\mathbb{1} = \hat{O}^\dagger \hat{O}$  nel secondo passaggio. Confrontando il primo e l'ultimo termine si deduce una forma per l'evolutore

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} = \hat{O}(s) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \hat{O}^\dagger(s)$$

Se adesso consideriamo una evoluzione temporale infinitesima, cioè all'ordine più basso in  $t - t_0$

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)$$

sostituendo nell'evolutore precedente (e sottintendendo la dipendenza da  $s$  per comodità)

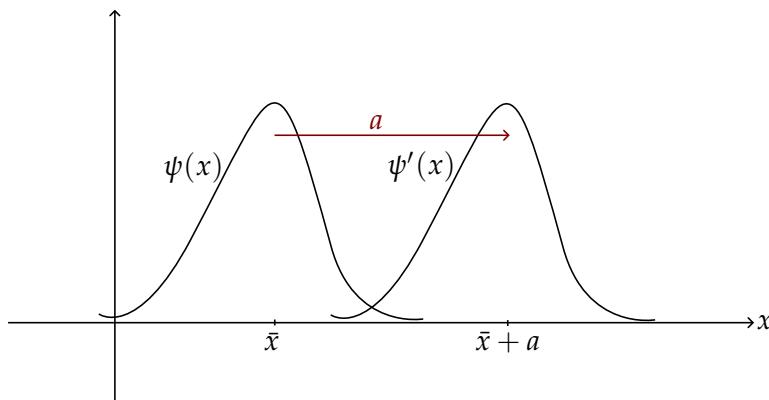
$$\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) = \hat{O} \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \right) \hat{O}^\dagger$$

da cui deduciamo immediatamente

$$-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) = -\hat{O} \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0) \hat{O}^\dagger \quad \implies \quad \hat{H} = \hat{O} \hat{H} \hat{O}^\dagger$$

da cui componendo a destra con  $\hat{O}$

$$\hat{H}\hat{O} = \hat{O}\hat{H} \implies [\hat{H}, \hat{O}] = 0$$



**Figura 3.1:** Illustrazione dell’azione di un operatore di traslazione sulla funzione d’onda unidimensionale (per semplicità reale)  $\psi(x)$ .

Arriviamo adesso alla tesi annunciata: se consideriamo (come è lecito dall’arbitrarietà del parametro  $s$ ) una trasformazione infinitesima

$$\hat{O}(s) = \mathbb{1} + is\hat{K}$$

e scriviamo la precedente relazione di commutazione

$$0 = [\hat{H}, \hat{O}] = [\hat{H}, \mathbb{1} + is\hat{K}] = is[\hat{H}, \hat{K}]$$

(l’identità commuta con tutto), concludiamo come asserito che

$$[\hat{H}, \hat{K}] = 0$$

cioè  $K$ , la variabile dinamica corrispondente al generatore  $\hat{K}$  della simmetria<sup>5</sup>, è una quantità conservata, nel senso che il suo valore atteso è indipendente dal tempo, come conseguenza dell’Eq. (2.9).  $\square$

Rimarchiamo quanto ricavato: dato un qualsiasi stato  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , la cui dinamica è regolata da un’hamiltoniana indipendente dal tempo  $\hat{H}$ , e data una simmetria continua generata dall’operatore indipendente dal tempo e hermitiano  $\hat{K}$  (che quindi commuta con  $\hat{H}$ ), allora l’operatore derivata associato a  $\hat{K}$  è identicamente nullo; questo equivale ad affermare che il valore atteso di  $\hat{K}$  su qualsiasi stato dello spazio di Hilbert non varia nel tempo:

$$\langle \psi(t) | \hat{K} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{K} | \psi(t_0) \rangle$$

### 3.1.2 L’operatore impulso

Mettiamo in pratica i profondi risultati appena discussi nel caso di traslazioni spaziali. Consideriamo il caso più semplice di un sistema unidimensionale, per cui la cosa più comoda è lavorare nella rappresentazione delle coordinate. A livello delle coordinate una trasformazione di traslazione  $T$ ,  $x' = Tx$ , agisce come

$$x \rightarrow x' = x + a \quad a \in \mathbb{R}$$

per cui una funzione d’onda centrata attorno a un certo  $\bar{x}$ , dopo la traslazione sarà centrata intorno a  $\bar{x} + a$  (si veda la Fig. 3.1). Qual è la forma

funzionale della nuova funzione d'onda? Praticamente la stessa, è sufficiente infatti ridefinire lo zero. Richiedendo che la traslazione non cambi la forma della funzione d'onda, i.e.

$$\psi(x) = \psi'(x') = \psi'(x+a)$$

si ottiene

$$\psi'(x) = \psi(x-a) = \psi(T^{-1}x)$$

La traslazione  $T$  è unitaria e dipendente da un parametro continuo  $a$ : questa volta chiamiamo il generatore del gruppo  $\hat{P}$ . Torniamo per un momento alla rappresentazione astratta a livello di stati:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle' = \hat{T}(a)|\psi\rangle \quad \text{con} \quad \hat{T}(a) = e^{-i\frac{a}{\hbar}\hat{P}}$$

e consideriamo una traslazione infinitesima

$$\hat{T}(a) = \mathbb{1} - i\frac{a}{\hbar}\hat{P} + \mathcal{O}(a^2)$$

allora

$$\langle x|\hat{T}(a)|\psi\rangle \equiv T\psi(x) = \psi'(x) = \psi(x-a)$$

l'uguaglianza appena scritta nasconde qual è l'azione dell'operatore  $\hat{P}$  nella rappresentazione delle coordinate. Infatti da un lato espandendo la relazione astratta di sinistra, al prim'ordine

$$\langle x|\hat{T}(a)|\psi\rangle \simeq \langle x|\mathbb{1} - i\frac{a}{\hbar}\hat{P}|\psi\rangle = \langle x|\psi\rangle - i\frac{a}{\hbar}\langle x|\hat{P}|\psi\rangle$$

dove non abbiamo riportato il termine  $\mathcal{O}(a^2)$ . Si ottiene con le solite identificazioni tra bra-ket e funzioni

$$T\psi(x) = \psi(x) - i\frac{a}{\hbar}P\psi(x) + \mathcal{O}(a^2)$$

mentre dall'altro lato, espandendo in serie di Taylor al primo ordine in  $a$

$$\psi(x-a) = \psi(x) - a\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) + \mathcal{O}(a^2)$$

dunque mettendo tutto insieme

$$\psi(x) - i\frac{a}{\hbar}P\psi(x) = \psi(x) - a\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

che implica

$$P\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

quanto appena trovato è l'**operatore impulso** nella rappresentazione delle coordinate:

$$\hat{P} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad (3.3)$$

La forma chiusa di questa rappresentazione dell'operatore non è casuale: come vedremo in Sez. 3.3, è simile alla rappresentazione dell'operatore posizione negli impulsi, e il collegamento matematico tra i due operatori ha radici profonde.

## 3.2 IL PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE

In questa sezione ci occupiamo di uno dei risultati più fondamentali e importanti di tutta la teoria: il **Principio di Indeterminazione**. Come vedremo nel seguito, le sue radici prettamente matematiche lo rendono un risultato sostanziale dell'intera Fisica, mentre le sue implicazioni rendono la Meccanica Quantistica una teoria radicalmente diversa (ancor più di quanto già potessimo sospettare) dalla Meccanica Classica.

### 3.2.1 Le relazioni di commutazione canoniche

Nella sezione precedente è stato introdotto l'operatore impulso. Vogliamo adesso dedurre una importante relazione tra questo e l'operatore posizione: molti fenomeni quantistici possono essere interpretati alla luce della non commutatività tra questi due operatori.

Consideriamo allora l'operatore posizione e i rispettivi autostati

$$\hat{Q} |x\rangle = x |x\rangle$$

e una traslazione  $\hat{T}$ , generata dall'operatore impulso  $\hat{P}$

$$|x\rangle \rightarrow |x\rangle' = |x + a\rangle = e^{-i\frac{a}{\hbar}\hat{P}} |x\rangle$$

Abbiamo visto che alle trasformazioni degli stati corrispondono delle trasformazioni degli operatori

$$\hat{Q} \rightarrow \hat{Q}' = \hat{T} \hat{Q} \hat{T}^\dagger$$

per cui possiamo scrivere, sostituendo  $\hat{T}$  e sviluppando al primo ordine

$$\begin{aligned} \hat{Q}' &= e^{-i\frac{a}{\hbar}\hat{P}} \hat{Q} e^{i\frac{a}{\hbar}\hat{P}} \\ &= \left( \mathbb{1} - i\frac{a}{\hbar}\hat{P} \right) \hat{Q} \left( \mathbb{1} + i\frac{a}{\hbar}\hat{P} \right) + \mathcal{O}(a^2) \\ &= \hat{Q} + i\frac{a}{\hbar} (\hat{Q}\hat{P} - \hat{P}\hat{Q}) + \mathcal{O}(a^2) \\ &= \hat{Q} + i\frac{a}{\hbar} [\hat{Q}, \hat{P}] + \mathcal{O}(a^2) \end{aligned}$$

D'altra parte, parlando di trasformazioni di operatori abbiamo richiesto che l'operatore trasformato  $\hat{Q}'$  condivida lo spettro con  $\hat{Q}$ , cioè

$$\hat{Q}' |x\rangle' = x |x\rangle' = x |x + a\rangle$$

Ma allora si deve avere

$$\hat{Q}' = \hat{Q} - a\mathbb{1}$$

in quanto

$$(\hat{Q} - a\mathbb{1}) |x + a\rangle = (x + a) |x + a\rangle - a |x + a\rangle = x |x + a\rangle$$

Confrontando allora questa espressione equivalente per  $\hat{Q}'$  con quella precedente che coinvolgeva il commutatore si conclude

$$i\frac{a}{\hbar} [\hat{Q}, \hat{P}] = -a\mathbb{1}$$

che non è altro che una delle **relazioni di commutazione canoniche** tra posizione ed impulso

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar \mathbb{1}$$

Nel caso tridimensionale (spesso l'operatore identità è sottinteso)

$$[\hat{Q}_i, \hat{P}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad [\hat{Q}_i, \hat{Q}_j] = 0 \quad [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0 \quad (3.4)$$

con  $i, j = \{1, 2, 3\}$ .

### 3.2.2 Il principio di indeterminazione di Heisenberg

Abbiamo già discusso a più riprese il legame tra gli stati quantistici e le distribuzioni di probabilità degli osservabili. In particolare, con l'Assioma 3 abbiamo identificato il valor medio di un osservabile  $O$  per un sistema nello stato  $|\psi\rangle$  con l'elemento di matrice

$$\bar{O} \equiv \langle O \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$$

Una grandezza altrettanto importante per descrivere una distribuzione di probabilità è la **varianza**  $\Delta_O^2$ , che definiamo in perfetta analogia con la statistica come lo scarto quadratico medio intorno a  $\bar{O}$

$$\Delta_O^2 = \langle (O - \bar{O})^2 \rangle \quad (3.5)$$

dove abbiamo sottinteso  $\bar{O} = \bar{O}\mathbb{1}$ .<sup>6</sup> D'altronde anche lo scarto quadratico è un osservabile, che nominiamo  $\hat{O}_s^2$ ; utilizzando l'assioma,

$$\Delta_O^2 = \langle \psi | (\hat{O} - \bar{O})^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O}_s^2 | \psi \rangle$$

La varianza misura la dispersione attorno al valor medio delle misure ripetute su copie di sistemi identici. Abbiamo visto nella Sez. 2.2 che le distribuzioni di probabilità hanno dispersione nulla se lo stato è un autostato dell'operatore  $\hat{O}$ .

Per la varianza si può usare anche la formula

$$\begin{aligned} \Delta_O^2 &= \langle (O - \bar{O})^2 \rangle \\ &= \langle O^2 \rangle - 2 \langle O \bar{O} \rangle + \langle \bar{O}^2 \rangle \\ &= \langle O^2 \rangle - 2 \langle O \rangle \bar{O} + \bar{O}^2 = \langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2 \end{aligned}$$

dove si è usato banalmente che  $\langle \bar{O} \rangle = \bar{O} \equiv \langle O \rangle$  e la linearità dell'operatore "valore di aspettazione".

Prendiamo due operatori non commutanti  $\hat{A}, \hat{B}$ , i.e.  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ . Vediamo che conseguenze ha sulle varianze  $\Delta_A^2$  e  $\Delta_B^2$  il fatto che gli operatori non commutino<sup>7</sup>.

Supponiamo quindi di eseguire delle misure, relative ai due osservabili  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$ , che siano completamente indipendenti: i sistemi fisici su cui le eseguiamo sono perfettamente identici e indistinguibili, preparati allo stesso stato iniziale e non interagenti. Possiamo scrivere:

$$[\hat{A}_s, \hat{B}_s] = [\hat{A} - \bar{A}, \hat{B} - \bar{B}] = [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$$

dove abbiamo usato che  $[\mathbb{1}, \hat{B}] = [\hat{A}, \mathbb{1}] = [\mathbb{1}, \mathbb{1}] = 0$ . Questa proprietà sarà utile tra poco.

Consideriamo un generico operatore  $\hat{T}$ , e guardiamo il valore di aspettazione dell'operatore  $\hat{T}^\dagger \hat{T}$  sullo stato  $|\psi\rangle$ :

$$\langle\psi|\hat{T}^\dagger \hat{T}|\psi\rangle \geq 0$$

Questa diseguaglianza è verificata perché la precedente espressione non è altro che la norma quadra del vettore  $|\phi\rangle = \hat{T}|\psi\rangle$ , che è definita positiva. Siano adesso, arbitrariamente:

$$\hat{T} \equiv \hat{A}_s + i\omega \hat{B}_s \quad \Rightarrow \quad \hat{T}^\dagger = \hat{A}_s^\dagger - i\omega \hat{B}_s^\dagger = \hat{A}_s - i\omega \hat{B}_s$$

Si trova quindi:

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

La ricerca del minimo  $\tilde{\omega}$  è immediata:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{d}{d\omega} \left( \langle\psi|\hat{A}_s^2|\psi\rangle + i\tilde{\omega} \langle\psi|[\hat{A}_s, \hat{B}_s]|\psi\rangle + \tilde{\omega}^2 \langle\psi|\hat{B}_s^2|\psi\rangle \right) \\ &= i \langle\psi|[\hat{A}_s, \hat{B}_s]|\psi\rangle + 2\tilde{\omega} \langle\psi|\hat{B}_s^2|\psi\rangle \end{aligned}$$

da cui, risolvendo per  $\tilde{\omega}$  e inserendo il risultato nella diseguaglianza:

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{T}^\dagger \hat{T}|\psi\rangle &= \langle\psi|\hat{A}_s^2|\psi\rangle + i \left( -\frac{i}{2} \frac{\langle\psi|[\hat{A}_s, \hat{B}_s]|\psi\rangle}{\langle\psi|\hat{B}_s^2|\psi\rangle} \right) \langle\psi|[\hat{A}_s, \hat{B}_s]|\psi\rangle \\ &\quad + \left( -\frac{i}{2} \frac{\langle\psi|[\hat{A}_s, \hat{B}_s]|\psi\rangle}{\langle\psi|\hat{B}_s^2|\psi\rangle} \right)^2 \langle\psi|\hat{B}_s^2|\psi\rangle \\ &= \Delta_A^2 + \frac{1}{2} \frac{\langle\psi|i\hat{C}|\psi\rangle^2}{\Delta_B^2} - \frac{1}{4} \frac{\langle\psi|i\hat{C}|\psi\rangle^2}{\Delta_B^2} \\ &= \Delta_A^2 + \frac{1}{4} \frac{\langle\psi|i\hat{C}|\psi\rangle^2}{\Delta_B^2} \geq 0 \end{aligned}$$

dove si è usato il risultato derivato in precedenza  $[\hat{A}_s, \hat{B}_s] = [\hat{A}, \hat{B}]$  e si sono introdotte le due varianze  $\Delta_A^2$  e  $\Delta_B^2$  secondo le rispettive definizioni. Concludiamo che deve essere

$$\Delta_A^2 \Delta_B^2 \geq \frac{\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle^2}{4}$$

ovvero in termini delle deviazioni standard

$$\Delta_A \Delta_B \geq \frac{|\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle|}{2}$$

Notiamo che questo è un risultato del tutto indipendente dalla specifica forma degli operatori  $\hat{A}, \hat{B}$ : l'unica cosa che qui conta è la relazione di commutazione che li lega. Vediamo dunque che vale il seguente fondamentale risultato:

Per operatori commutanti, i.e.  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , il prodotto delle rispettive varianze non ha limite inferiore. Questo implica che tali osservabili, dette **compatibili**, possono essere misurate simultaneamente con precisione arbitraria. Operatori non commutanti, relativi a osservabili **incompatibili**, possiedono limiti inferiori al prodotto delle varianze: misurare precisamente una significa inevitabilmente perdere precisione sull'altra.

Quando parliamo di precisione non ci riferiamo alla precisona dello strumento di misura, che niente ha a che fare con questo discorso. Ci riferiamo a quanto tenderanno a disporsi attorno alle rispettive medie le misure simultanee delle osservabili.

Prima di introdurre il celebre **Principio di Indeterminazione**, sottolineiamo che in tutta questa derivazione non è stato introdotto nulla di fisico, se non l'Assioma 3. Non abbiamo effettuato ipotesi né inferenze: è la **struttura matematica della teoria stessa** a determinare quanto trovato.

Sostituiamo dunque  $\hat{Q} \leftrightarrow \hat{A}$ ,  $\hat{P} \leftrightarrow \hat{B}$ . Ricordando quanto trovato circa le relazioni di commutazione canoniche sugli operatori coordinata e impulso – si veda a tal proposito (3.2.1) – possiamo scrivere:

$$\Delta_x \Delta_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.6)$$

che è il ben noto **Principio di Indeterminazione di Heisenberg**. Anche se la coppia  $(\hat{Q}, \hat{P})$  non è certamente l'unica coppia di osservabili a rispettare un principio di questo tipo, né ha intrinsecamente qualcosa di speciale rispetto ad altre coppie di osservabili, questa disuguaglianza è certamente teatrale e sconcertante: ad esempio, a livello puramente teorico, se misuriamo la posizione di una particella che occupa un autostato dell'impulso, abbiamo uguale probabilità di trovarla... ovunque.

**COME INTERPETARLO?** La storia della Meccanica Quantistica ha visto susseguirsi un gran numero di interpretazioni circa il Principio di indeterminazione, che – non avendo ancora nettamente separato il concetto di misura da quello di distribuzione di probabilità – spesso finivano per interpretare questo principio in modo non corretto.

Nella trattazione qui descritta, astratta e generale, l'equazione (3.6) è una disuguaglianza che coinvolge le larghezze di due distribuzioni di probabilità relative a osservabili *non compatibili*, cioè i cui operatori non commutano, nello specifico  $\hat{Q}$  e  $\hat{P}$ . Se disponiamo di varie copie di un sistema fisico nello stato  $|\psi\rangle$ , eseguendo un gran numero di misure di posizione e di impulso su stati ogni volta diversi, senza mai riutilizzare una delle copie, troveremo che le misure seguono ciascuna una statistica la cui distribuzione associata ha una larghezza tale da rispettare il Principio di Indeterminazione. Quest'ultimo insorge come necessità matematica legata non alla singola misura in sé, che nulla riesce a comunicarci in ogni caso, bensì alle proprietà della distribuzione, costruita con un numero di misure che tende idealmente a

infinito.

Sottolineiamo con particolare cura che non stiamo eseguendo prima una misura e poi l'altra sullo stesso sistema<sup>8</sup>, né le stiamo compiendo entrambe simultaneamente sulla medesima copia: i processi di campionamento avvengono nella più completa condizione di indipendenza statistica su due sistemi separati e indistinguibili. Come al solito, evitiamo accuratamente di studiare la fisica del sistema *dopo* che la misura è avvenuta.

### 3.3 IL LEGAME TRA IMPULSO E POSIZIONE

Passiamo ora ad occuparci più nello specifico delle osservabili Impulso e Posizione. Ricaveremo una forma esplicita per le autofunzioni di  $\hat{P}$  rappresentate in coordinate, e specificheremo come passare dalla rappresentazione in coordinate a quella in impulsi per una generica funzione d'onda  $\psi(x)$ .

Avevamo trovato, nella rappresentazione delle coordinate:

$$\hat{P} = -i\hbar\partial_x \quad \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla$$

dove la prima fa riferimento a uno spazio unidimensionale e la seconda tridimensionale. Concentriamoci sul caso unidimensionale: sappiamo che

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{Q}|\psi\rangle &= Q\psi(x) = x\psi(x) \\ \langle x|\hat{P}|\psi\rangle &= P\psi(x) = -i\hbar\partial_x\psi(x)\end{aligned}$$

Verifichiamo che tutto è coerente. Applichiamo alla funzione d'onda  $\psi(x)$  il commutatore tra posizione e impulso:

$$\begin{aligned}[Q, P]\psi(x) &= (QP - PQ)\psi(x) \\ &= Q(P\psi(x)) - P(Q\psi(x)) \\ &= Q(-i\hbar\partial_x\psi(x)) - P(x\psi(x)) \\ &= -i\hbar x\partial_x\psi(x) + i\hbar\psi(x) + i\hbar x\partial_x\psi(x) \\ &= i\hbar\psi(x)\end{aligned}$$

il che è in perfetto accordo con le relazioni (3.2.1).

#### 3.3.1 Gli autostati dell'operatore Impulso rappresentati in coordinate

L'operatore Impulso appare evidentemente connesso all'operatore Posizione; rispetto alla coordinata  $x$ , esso è il generatore delle traslazioni unidimensionali. Come visto precedentemente questo implica che  $\hat{P}$  è hermitiano, poiché l'operatore di traslazione è unitario (per convincersene basta rendersi conto che una pura traslazione di una coppia di vettori deve conservarne il prodotto scalare); verifichiamo in rappresentazione delle coordinate se vale la relazione:

$$\langle\psi|\hat{P}|\phi\rangle \stackrel{?}{=} \langle\phi|\hat{P}|\psi\rangle^*$$

Se questa relazione risulterà sempre verificata, potremo concludere che l'operatore  $\hat{P}$  è “sempre hermitiano”. In realtà vedremo che questo ha una

dipendenza dalla topologia dello spazio in cui lavoriamo.

Usando la relazione di completezza sulla base delle coordinate e la relazione  $\langle x|\hat{P}|\psi\rangle = \hat{P}\psi(x)$ , dobbiamo equivalentemente verificare:

$$\int dx \psi^*(x) P\phi(x) \stackrel{?}{=} \left( \int dx \phi^*(x) P\psi(x) \right)^*$$

Il primo dei due integrali può essere esplicitato e svolto per parti:

$$\begin{aligned} \int dx \psi^*(x) P\phi(x) &= \int dx \psi^*(x) (-i\hbar) \partial_x \phi(x) \\ &= \mathcal{B} - \int dx \phi(x) (-i\hbar) \partial_x \psi^*(x) \\ &= \mathcal{B} - \left( \int dx \phi^*(x) i\hbar \partial_x \psi(x) \right)^* \\ &= \mathcal{B} + \left( \int dx \phi^*(x) P\psi(x) \right)^* \end{aligned}$$

dunque la relazione risulta verificata a meno di un termine di *boundary*, i.e. di contorno, indicato con  $\mathcal{B}$ . Tale termine è nullo qualora il dominio considerato sia illimitato (dato che, ad esempio, le funzioni di  $L^2(\mathbb{R})$  si devono annullare all'infinito).

Tuttavia, notiamo che questa non è l'unica possibilità; se per esempio immaginiamo di avere un dominio unidimensionale e periodico (e.g. una circonferenza), sul quale è definito il nostro sistema fisico, allora il prodotto scalare

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_{x_i}^{x_f=x_i+X} dx \Psi^*(x) \Phi(x)$$

dove  $X$  è la lunghezza del cammino considerato – risulta ben definito, per tutte le funzioni d'onda normalizzabili e periodiche; infatti con questo prodotto scalare, l'elemento di matrice che vogliamo calcolare è, per definizione

$$\langle \psi | \hat{P} | \phi \rangle = \int_{x_i}^{x_i+X} dx \psi^*(x) P\phi(x)$$

e se lo sviluppiamo per parti come fatto poc'anzi otteniamo

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_i+X} dx \psi^*(x) P\phi(x) &= \int_{x_i}^{x_i+X} dx \psi^*(x) (-i\hbar) \partial_x \phi(x) \\ &= \mathcal{B} + \left( \int_{x_i}^{x_i+X} dx \phi^*(x) P\psi(x) \right)^* \end{aligned}$$

dove

$$\begin{aligned} \mathcal{B} &= -i\hbar \int_{x_i}^{x_i+X} dx \partial_x (\psi^*(x) \phi(x)) \\ &= -i\hbar (\psi^*(x_i+X) \phi(x_i+X) - \psi^*(x_i) \phi(x_i)) \\ &= 0 \end{aligned}$$

dove abbiamo usato la periodicità delle funzioni d'onda su questo cammino. Il termine di bordo qui si annulla, ma per ragioni diverse dalle precedenti.

Tuttavia in generale  $\hat{P}$  può essere non hermitiano; per quanto ci riguarda, assumiamo al momento che lo sia e lavoriamo di conseguenza. Ci aspettiamo che lo spettro di  $\hat{P}$  sia continuo per tre buone ragioni:

- non abbiamo alcun vincolo *a priori* sul valore che può assumere l'impulso misurato su uno stato quantistico;
- per analogia con l'operatore posizione, a cui  $\hat{P}$  appare collegato;
- deve valere il **principio di relatività galileiana**: dal momento che l'osservatore deve potersi muovere arbitrariamente, l'impulso deve poter trasformare con continuità nel passaggio tra un sistema di riferimento e l'altro, dunque deve poter variare con continuità.

Dati quindi gli autostati  $|p\rangle$  di  $\hat{P}$ , richiediamo che soddisfino la condizione di ortogonalità (con vincolo di normalizzazione, come sempre, a  $\delta$ ):

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$$

Come vedremo fra poco, questa richiesta sarà cruciale per determinare la rappresentazione nelle coordinate degli autostati dell'impulso.

Abbiamo dunque un set  $\{|p\rangle\}$  di autostati di  $\hat{P}$ . Passando alla rappresentazione delle coordinate:

$$\langle x|\hat{P}|p\rangle = P\psi_p(x) = -i\hbar\partial_x\psi_p(x)$$

dove  $\psi_p(x)$  è l'autofunzione d'onda associata a  $|p\rangle$  e abbiamo scritto l'operatore impulso come in (3.3). D'altronde, siccome  $\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle$ :

$$\langle x|\hat{P}|p\rangle = p\psi_p(x) = \hbar k\psi_p(x)$$

dove abbiamo reintrodotto  $\hat{P} = \hbar\hat{K}$  per semplificare la notazione, e sottinteso che

$$\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle = \hbar k|\hbar k\rangle = \hbar\hat{K}|\hbar k\rangle$$

Mettendo insieme i due risultati trovati, ricaviamo la seguente equazione differenziale:

$$k\psi_p(x) = -i\partial_x\psi_p(x)$$

che ha soluzione:

$$\psi_p(x) = c(k)e^{ikx}$$

Vogliamo determinare  $c(k)$ . Ricordiamo che deve valere, per imposizione

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') = \delta(\hbar k - \hbar k') = \hbar^{-1}\delta(k - k')$$

Per calcolo diretto troviamo:

$$\begin{aligned} \langle p|p'\rangle &= \int_{\mathbb{R}} dx \langle p|x\rangle \langle x|p'\rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx \langle x|p\rangle^* \langle x|p'\rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}} dx c^*(k)e^{-ikx} c(k')e^{ik'x} \\ &= c^*(k)c(k') \int_{\mathbb{R}} dx e^{-i(k-k')x} \\ &= c^*(k)c(k') \cdot 2\pi\delta(k - k') \end{aligned}$$

dove l'ultimo passaggio è giustificato dal fatto che la  $\delta$  è la Trasformata di Fourier della funzione costante. Confrontando le due scritture di  $\langle p|p' \rangle$ , concludiamo che

$$2\pi|c(k)|^2 = \hbar^{-1} \implies c(k) = c = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

il che ci permette di scrivere la funzione d'onda associata agli autostati dell'operatore impulso, ossia la loro rappresentazione in coordinate:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx} \quad (3.7)$$

### La distribuzione associata agli impulsi

La funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate  $\psi(x) = \langle x|\psi \rangle$  rappresenta una densità di probabilità, e fornisce la probabilità di misurare la posizione della particella (o, in generale, del sistema) nell'intervallo  $(x, x + dx)$ :

$$\mathcal{P}(x, x + dx) = |\psi(x)|^2 dx$$

In modo del tutto analogo possiamo intendere la funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi  $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi \rangle$  (il motivo della scelta tipografica sarà chiaro tra poco): la probabilità che il valore misurato dell'impulso appartenga all'intervallo  $(p, p + dp)$  è data da

$$\mathcal{P}(p, p + dp) = |\tilde{\psi}(p)|^2 dp$$

Al fine di indagare la connessione tra le due rappresentazioni, usiamo la relazione di completezza della base delle coordinate:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi \rangle = \int dx \langle p|x \rangle \langle x|\psi \rangle = \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ikx} \psi(x)$$

(dove  $k = p/\hbar$ ), da cui deduciamo che la funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi è la **Trasformata di Fourier** della funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate<sup>9</sup>.

Cogliamo l'occasione per accordarci sulle convenzioni. Noi lavoreremo definendo la trasformata di Fourier con la convenzione simmetrica, i.e.

$$\mathcal{F}(f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx f(x) e^{-ikx}$$

per cui scriveremo sinteticamente

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \mathcal{F}(\psi)$$

### 3.3.2 Operatori posizione e impulso e loro rappresentazioni

Abbiamo già caratterizzato l'azione dell'operatore impulso su funzioni d'onda rappresentate in coordinate, tramite la rappresentazione dell'impulso in coordinate:

$$P\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

Vogliamo ora caratterizzare l'operatore posizione nella rappresentazione degli impulsi. Per farlo, procediamo applicando l'operatore posizione alla funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi:

$$\begin{aligned} Q\tilde{\psi}(p) &= \langle p | \hat{Q} | \psi \rangle \\ &= \int dx \langle p | x \rangle \langle x | \hat{Q} | \psi \rangle \\ &= \int dx \langle p | x \rangle x\psi(x) \\ &= \int dx \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right) \right)^* x\psi(x) \\ &= \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left( -\frac{\hbar}{i} \right) \cdot \left( -\frac{i}{\hbar}x \right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) \psi(x) \\ &= \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} i\hbar \partial_p \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) \psi(x) \\ &= i\hbar \partial_p \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) \psi(x) = i\hbar \partial_p \tilde{\psi}(p) \end{aligned}$$

La differenza di segno tra Impulso rappresentato in coordinate e Posizione rappresentato in impulsi è cruciale: preserva le relazioni di commutazione canoniche in entrambe le rappresentazioni.

#### Stati di minima indeterminazione

Dopo aver trovato la nota relazione di indeterminazione

$$\Delta_x \Delta_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}$$

è lecito chiedersi se esistano degli stati fisici **di minima indeterminazione**, cioè stati che minimizzino, nei limiti del possibile, il prodotto  $\Delta_x \Delta_{p_x}$ , o ancora per i quali sia valida l'uguaglianza

$$\Delta_x \Delta_{p_x} = \frac{\hbar}{2}$$

**Teorema.** *Gli stati che si distribuiscono normalmente nella rappresentazione delle coordinate sono stati di minima indeterminazione.*

*Dimostrazione.* Consideriamo uno stato  $|\psi\rangle$  tale che  $|\psi(x)|^2$  sia una distribuzione normale, ovvero gaussiana, con media  $x_0$  varianza  $\Delta_x^2$ :

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta_x^2}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\Delta_x^2}\right)$$

Senza perdere di generalità, poniamo  $x_0 = 0$  per semplificare la scrittura. Da sopra si può trovare che

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\Delta_x^2}} \exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{x^2}{4\Delta_x^2}\right)$$

dove abbiamo aggiunto un eventuale termine di fase, che nella densità di probabilità in posizione scompare, poiché se ne calcola il modulo quadro.

Per trovare  $\Delta_p$ , cerchiamo innanzitutto l'ampiezza di probabilità in impulso  $\tilde{\psi}(p)$ , che è la trasformata di Fourier di  $\psi(x)$ :

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\Delta_x^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}p_0x - \frac{x^2}{4\Delta_x^2}\right) dx$$

Raccogliendo, si ottiene

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt[4]{(2\pi)^3\Delta_x^2\hbar^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_0-p)x - \frac{x^2}{4\Delta_x^2}\right) dx$$

Utilizziamo ora il completamento del quadrato:

$$\frac{i}{\hbar}(p_0-p)x - \frac{x^2}{4\Delta_x^2} = -\left(\frac{x}{2\Delta_x} - \frac{i}{\hbar}\Delta_x(p_0-p)\right)^2 - \frac{\Delta_x^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2$$

da cui  $\tilde{\psi}(p)$  diventa

$$\frac{\exp\left(-\frac{\Delta_x^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right)}{\sqrt[4]{(2\pi)^3\Delta_x^2\hbar^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\left(\frac{x}{2\Delta_x} - \frac{i}{\hbar}\Delta_x(p_0-p)\right)^2\right] dx$$

L'integrandino è adesso  $e^{-z^2}$  con  $z = ax + ib$ , con  $a, b \in \mathbb{R}$ . Si può dimostrare che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-z^2) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-a^2x^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a^2}} = \frac{\sqrt{\pi}}{a}$$

Nel caso in esame,  $a = (2\Delta_x)^{-1}$ , pertanto otteniamo

$$\tilde{\psi}(p) = \sqrt[4]{\frac{2\Delta_x^2}{\pi\hbar^2}} \exp\left(-\frac{\Delta_x^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right)$$

Da qui

$$|\tilde{\psi}(p)|^2 = \sqrt{\frac{2\Delta_x^2}{\pi\hbar^2}} \exp\left(-\frac{2\Delta_x^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right)$$

Si trova che la distribuzione di probabilità negli impulsi è ancora di tipo gaussiano (la trasformata di Fourier di una gaussiana è ancora una gaussiana):

$$|\tilde{\psi}(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta_p^2}} \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{2\Delta_p^2}\right)$$

Per confronto evinciamo che la media della distribuzione in impulso è  $p_0$ , e la sua varianza  $\Delta_p^2$  corrisponde a

$$\Delta_p^2 = \frac{\hbar^2}{4\Delta_x^2}$$

da cui la tesi del teorema è immediatamente dimostrata:

$$\Delta_x \Delta_{p_x} = \frac{\hbar}{2} \quad \square$$

In realtà, non ci siamo limitati a mostrare la tesi, ma abbiamo dato prova in un sol colpo che:

- gli stati che si distribuiscono normalmente nella rappresentazione delle coordinate sono stati di minima indeterminazione;
- gli stati che si distribuiscono normalmente nella rappresentazione delle coordinate si distribuiscono normalmente anche nella rappresentazione degli impulsi, e viceversa (basta trasformare e, rispettivamente, antitrasformare con Fourier);
- gli stati che si distribuiscono normalmente nella rappresentazione degli impulsi sono stati di minima indeterminazione (segue dalle due premesse).

## NOTE

1. Insieme agli anti-unitari, che escludiamo al momento dalla trattazione; ne parleremo nel Cap. 13, dedicato alle **simmetrie discrete** e in particolare nel contesto dell'operatore di *Inversione temporale*.
2. Le trasformazioni qui descritte sono legate ai concetti di gruppi ed algebre di Lie, che richiedono che la trasformazione abbia alcune proprietà ben precise. Glissiamo su tali dettagli matematici: basti sapere che le trasformazioni di nostro interesse, come le traslazioni e le rotazioni, posseggono la struttura di gruppo di Lie.
3. Questa scrittura è sempre legittima, per un opportuno evolutore temporale  $U(t, t_0)$ , e abbiamo mostrato che è vera per  $\hat{H}$  hermitiano. Soltanto nel caso di hamiltoniano indipendente dal tempo è possibile rappresentare l'evolutore semplicemente come  $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ .
4. Un modo semplice per giustificare questi passaggi può essere il seguente: se è vero che il sistema presenta una simmetria per traslazioni, ossia la fisica del sistema è uguale in  $x$  e in  $x + a$ , allora l'evoluzione temporale al netto di traslazioni non può essere dipendente dalla traslazione della condizione iniziale. Se il sistema potesse evolvere in  $x + a$  secondo una legge oraria che non fosse la semplice traslazione della legge oraria in  $x$ , questo distruggerebbe la simmetria per traslazioni spaziali, perché vorrebbe dire che spostare **l'intero sistema fisico** (e.g. l'intero atomo di idrogeno, sia l'elettrone **che il protone**) in uno spazio completamente simmetrico (e.g. piatto in ogni direzione) porta a risultati diversi in base alla condizione iniziale. Oltre a violare i postulati fondamentali della Fisica, sarebbe pure una bella seccatura.
5. Stiamo assumendo che  $\hat{K}$ , del quale sappiamo a rigore solo che è hermitiano, sia associato ad una variabile dinamica. Questa non è una necessità matematica, ma è frutto dell'intuizione fisica nei casi di nostro interesse: ad esempio, nel caso di traslazioni spaziali l'identificazione è naturale in base ai risultati analoghi della Meccanica Classica, come il teorema di Noether.
6.  $\hat{O}$  è il risultato della misura di  $O$  sullo stato  $|\psi\rangle$ , quindi un numero. La notazione che adotteremo più avanti sottintenderà spesso l'identità in contesti operatoriali.
7. Si potrebbe credere erroneamente che le varianze qui descritte siano legate agli esiti di misure ripetute interpretando queste ultime come misure degli osservabili ripetute sullo stesso sistema allo scorrere del tempo, o al più simultanee. Non è così: le conclusioni che seguono sono proprietà matematiche delle distribuzioni statistiche di diversi osservabili quando il sistema è in uno stato  $|\psi\rangle$ . Quello che diciamo è che, ripetendo  $N$  misure dell'osservabile  $A$  e  $M$  dell'osservabile  $B$ , tutte condotte *independentemente* (e.g. su un ensemble di stati preparati

identicamente) e costruendo istogrammi degli esiti di ogni misura, nel limite di  $N \rightarrow \infty$  e  $M \rightarrow \infty$  si otterranno due distribuzioni dei due osservabili con la varianza riportata nel testo.

8. Al contrario di quanto esposto da Heisenberg nei primi anni del secolo scorso, il Principio di Indeterminazione non è legato in modo fondamentale al concetto di "perturbazione". La diseguaglianza non deriva dalla variazione della distribuzione di una delle variabili dinamiche in seguito alla misura dell'altra.
9. A rigore, la variabile coniugata alla posizione è il numero d'onda  $k$ , non l'impulso. Pur essendo vero che le due differiscono per la sola costante moltiplicativa  $\hbar$ , bisogna tener conto del fatto che  $\hbar$  non è adimensionale!

## IN BREVE...

- ◊ Se consideriamo una trasformazione che agisce sia sugli stati sia sugli operatori, la richiesta che gli esiti delle misure rimangano invariati implica che la trasformazione è realizzata da un operatore unitario  $\hat{U}$  (Teorema di Wigner). Per un generico stato  $|\psi\rangle$  e un generico operatore  $\hat{A}$  si ha

$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{U}|\psi\rangle \quad \hat{A} \rightarrow \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger$$

- ◊ Se l'operatore  $\hat{U}(s)$  è una trasformazione parametrizzata da un parametro continuo, si dimostra che il generatore della trasformazione  $\hat{K}$  è hermitiano:

$$\hat{K}^\dagger = \hat{K}$$

- ◊ Assumiamo tutti gli operatori che seguono indipendenti dal tempo. Una trasformazione continua  $\hat{U}(s)$  rappresenta una simmetria del sistema se è generata da un operatore hermitiano  $\hat{K}$  che commuta con l'hamiltoniana:

$$\hat{U}(s) \text{ è una simmetria continua} \iff [\hat{H}, \hat{K}] = 0 \iff \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{K} \rangle = 0$$

- ◊ Il gruppo delle traslazioni unidimensionali, che contiene gli operatori di variabile continua  $\hat{T}(a)$ , è generato dall'operatore Impulso  $\hat{P}$ . Lavorando in rappresentazione delle coordinate e imponendo che su una qualsiasi funzione d'onda valga

$$\hat{T}(a)\psi(x) \stackrel{!}{=} \psi(x - a)$$

sviluppando in serie traslazioni infinitesime (nel limite  $a \rightarrow 0$ ) si trova la rappresentazione dell'Impulso nelle coordinate:

$$\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

- ◊ Una traslazione unidimensionale trasforma l'operatore Posizione come segue:

$$\hat{T}(a)\hat{Q}\hat{T}^\dagger(a) = \hat{Q} - a\mathbb{1}$$

- ◊ Dal punto precedente si deducono le relazioni di commutazione canoniche, che riportiamo già nella versione tridimensionale:

$$[\hat{Q}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad [\hat{Q}_i, \hat{Q}_j] = 0 \quad [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0$$

- ◊ La varianza di un operatore  $\hat{O}$  è definita come

$$\Delta_O^2 = \langle (O - \bar{O})^2 \rangle = \langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2$$

- ◊ Dati tre operatori  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  e  $\hat{C}$  legati dalla relazione

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$$

allora le rispettive varianze (calcolate sullo stato  $|\psi\rangle$ ) sono legate dalla condizione

$$\Delta_A \Delta_B \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle|$$

Poiché le relazioni di commutazione tra Impulso e Posizione sono indipendenti dallo stato su cui si calcolano le varianze, si deduce il **Principio di Indeterminazione di Heisenberg**:

$$\Delta_x \Delta_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

- ◊ L'operatore  $\hat{P}$  in generale hermitiano e continuo. Detti  $|p\rangle$  i suoi autostati, la scelta della condizione di ortogonalità

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$$

implica che le autofunzioni di  $\hat{P}$  si rappresentano in coordinate come

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

- ◊ La rappresentazione in impulsi di uno stato è legata alla rappresentazione in coordinate dalla relazione

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \mathcal{F}(\psi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x)$$

- ◊ Gli operatori Posizione e Impulso agiscono come segue:

Rappresentazione	Posizione	Impulso
Coordinate	$Q\psi(x) = x\psi(x)$	$P\psi(x) = -i\hbar\partial_x\psi(x)$
Impulsi	$Q\tilde{\psi}(p) = i\hbar\partial_p\tilde{\psi}(p)$	$P\tilde{\psi}(p) = p\tilde{\psi}(p)$

- ◊ Gli stati rappresentati in coordinate da funzioni d'onda gaussiane di distribuiscono normalmente anche nella rappresentazione degli impulsi, e sono stati di minima indeterminazione:

$$\Delta_x \Delta_{p_x} = \frac{\hbar}{2}$$

# 4

## ASPETTI GENERALI DELLA DINAMICA DEGLI STATI E SISTEMI NOTEVOLI

In questo capitolo è descritta una forma esplicita per l'operatore hamiltoniano per un sistema composto da  $n$  particelle quantistiche. Sono poi trattati alcuni aspetti generali di problemi unidimensionali, e sono presentate le soluzioni dei problemi di particella libera e dell'oscillatore armonico.

### 4.1 L'OPERATORE HAMILTONIANO

Finalmente, è giunto il momento di scrivere un'espressione per l'operatore hamiltoniano, che regola l'evoluzione temporale. D'ora in poi utilizzeremo in maniera interscambiabile e assolutamente equivalente le notazioni

$$\hat{Q} \leftrightarrow \hat{x} \quad \hat{P} \leftrightarrow \hat{p}$$

al fine di non appesantire eccessivamente la lettura.

#### 4.1.1 La particella libera

Esaminiamo innanzitutto il caso più semplice possibile: sia il nostro sistema una particella libera che si muove in una dimensione; in Meccanica Classica, la relativa funzione hamiltoniana è

$$\mathcal{H}(x, p) = \frac{p^2}{2m}$$

quindi per analogia<sup>1</sup> congetturiamo che, in ambito quantistico, l'operatore hamiltoniano sia

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

dove riconosciamo in  $\hat{p}$  l'operatore impulso e in  $m$  la massa della particella.

Questa è una relazione tra operatori, ma considerando che ogni autoket  $|E\rangle$  di  $\hat{H}$  con autovalore  $E$  deve essere anche autoket di  $\hat{p}$  con autovalore  $p$ , vale la relazione tra autovalori (ovviamente reali)

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Questa equazione costituisce la **relazione di dispersione** di una particella libera.

Possiamo scrivere  $\hat{H}$  in rappresentazione delle coordinate, cioè osservare come agisce sulle funzioni d'onda:

$$H = \frac{1}{2m} (i\hbar\partial_x)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2$$

Nello spazio tridimensionale, invece, è facile convincersi che l'hamiltoniano di particella libera sia

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \quad \text{con} \quad \hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$$

e, in rappresentazione delle coordinate,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

Prendendo in esame, in una sola dimensione, un numero  $N$  di particelle distinte, l'hamiltoniano si generalizza banalmente come

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{p}_j^2}{2m_j}$$

#### 4.1.2 L'operatore Potenziale

Il sistema che abbiamo sopra iniziato a trattare, costituito da  $N$  particelle libere, non ammette alcun tipo di interazione: come è possibile aggiungere quest'ultima all'hamiltoniano? In modo analogo a prima, laddove classicamente abbiamo una funzione hamiltoniana

$$\mathcal{H}(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

traduciamo questa scrittura in termini di operatori che agiscono sullo spazio di Hilbert degli stati:

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

In rappresentazione delle coordinate

$$\langle x | \hat{H} | \psi \rangle = H\psi(x) = \left[ -\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} + V(x) \right] \psi(x)$$

Aggiungiamo la dipendenza dal tempo e utilizziamo la (2.6) per arrivare all'equazione differenziale alle derivate parziali

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

che si generalizza in più dimensioni con

$$i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, t) \quad (4.1)$$

**INTERAZIONE E SIMMETRIE** Quando abbiamo scritto l'operatore di traslazione nella forma

$$\hat{T}(a) = e^{-ia\hat{P}/\hbar}$$

abbiamo considerato la traslazione attiva di *tutto* il sistema studiato, trovando che

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0 \iff \hat{T} \text{ è una simmetria del sistema}$$

Se ora a titolo d'esempio consideriamo un sistema di 2 particelle in una dimensione, con una interazione dipendente dalla loro distanza

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(|\hat{x}_1 - \hat{x}_2|)$$

sappiamo che la traslazione solidale di entrambe costituisce una simmetria del sistema scelto. Il generatore di tale trasformazione, che commuta con  $\hat{H}$  e rappresenta una quantità conservata, non è né  $\hat{p}_1$  né  $\hat{p}_2$ , bensì – prevedibilmente – l'operatore impulso totale

$$\hat{P}_{\text{tot}} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2$$

Gli operatori  $\hat{p}_1$  e  $\hat{p}_2$  sono chiaramente i generatori delle traslazioni attive della prima e della seconda particella separatamente, e la dinamica del sistema non risulta in generale invariante sotto tali applicazioni. In altri termini, applicare allo stato  $|x_1, x_2\rangle$  la trasformazione  $\hat{T}_j(a) = e^{-ia\hat{p}_j/\hbar}$ , con  $j = 1, 2$ , non rispetta la definizione di simmetria<sup>2</sup> a meno che il potenziale non sia identicamente nullo, nel qual caso il sistema si riduce a due particelle libere (non interagenti).

Nella rappresentazione delle coordinate, la funzione d'onda sarà una funzione di due variabili reali

$$\langle x_1, x_2 | \psi \rangle = \psi(x_1, x_2)$$

con  $|x_1, x_2\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ , mentre gli operatori  $\hat{p}_1$  e  $\hat{p}_2$  agiscono nel seguente modo:

$$p_1 = -i\hbar\partial_{x_1} \quad p_2 = -i\hbar\partial_{x_2}$$

#### 4.1.3 Equazione agli autovalori dell'hamiltoniano

Se  $\psi(x, t)$  è un'autofunzione dell'hamiltoniano, cioè se

$$H\psi(x, t) = E\psi(x, t)$$

dove  $E \in \mathbb{R}$ , usando l'equazione di Schrödinger nella forma (2.6) troviamo che

$$i\hbar\partial_t\psi(x, t) = E\psi(x, t)$$

Risolvendo, troviamo nuovamente che le autofunzioni dell'hamiltoniano evolvono tramite la moltiplicazione per la fase temporale  $\exp(-iEt/\hbar)$ , considerando  $t_0 = 0$ :

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x, 0)$$

Questo risultato, al solito, è valido per hamiltoniani indipendenti dal tempo. In generale, per dimensioni anche superiori ad uno, vale l'equazione agli autovalori

$$\left[ -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, t) = E\psi(\mathbf{x}, t) \quad (4.2)$$

con  $\Delta = \nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$ .

## 4.2 FLUSSO DI PROBABILITÀ ED EQUAZIONE DI CONTINUITÀ

Ci occupiamo adesso di definire una quantità, la **corrente di probabilità**, che tiene conto di un importante concetto fisico: l'evoluzione temporale deve essere unitaria nella nostra teoria, e di conseguenza la densità di probabilità deve "muoversi" nello spazio in modo che la funzione d'onda ammetta integrale unitario sull'intero spazio. Consideriamo in 3 dimensioni spaziali un sistema, e.g. una particella, per cui

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

allora la funzione d'onda di tale sistema evolverà secondo l'equazione differenziale (4.1).

Definito  $\Omega$  un volume nello spazio tridimensionale, la probabilità di trovare il sistema all'interno di  $\Omega$  all'istante  $t$  è

$$P_\Omega(t) = \int_{\Omega} dV |\psi(\mathbf{x}, t)|^2$$

Per studiare l'evoluzione temporale di  $P_\Omega(t)$ , deriviamola rispetto a  $t$ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_\Omega(t) &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} dV |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \\ &= \int_{\Omega} dV \left( \psi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{x}, t) + \psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} dV (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} dV \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \\ &= - \int_{\Omega} dV \nabla \cdot \mathbf{J} \end{aligned}$$

Tra la seconda e la terza riga usiamo l'equazione (4.1), dimostriamo poi l'equivalenza della quarta con la terza per calcolo diretto (i termini con i prodotti  $\partial_j \psi \partial_j \psi^*$  si semplificano) e abbiamo introdotto la notazione  $\psi = \psi(\mathbf{x}, t)$  per esigenze estetiche e di spazio. È stato inoltre definito il vettore **densità di corrente di probabilità**

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

scrivibile nella forma

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\{\psi^* \nabla \psi\} \quad (4.3)$$

Se indichiamo con  $\Sigma$  la superficie che racchiude  $\Omega$ , usando il teorema della divergenza

$$\frac{d}{dt} P_\Omega(t) = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{J} dV = - \int_{\Sigma} \mathbf{J} \cdot \bar{\mathbf{n}} d\Sigma$$

con  $\bar{\mathbf{n}}$  il versore uscente dall'elemento di superficie  $d\Sigma$ . Dal momento che quanto abbiamo derivato vale per ogni generico volume  $\Omega$ , l'equivalenza vale anche per gli integrandi. Da questo si deduce la relazione locale nota come **equazione di continuità** della probabilità

$$\partial_t |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (4.4)$$

**COSA SIGNIFICA?** Possiamo leggere l'equazione (4.4) in modo analogo all'equazione di continuità della carica elettrica:

$$\partial_t \varrho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$$

In entrambi i casi, l'evoluzione temporale conserva una certa grandezza totale (rispettivamente la carica e la probabilità, che è normalizzata ad 1 per definizione) distribuita in un dominio di definizione, tipicamente l'intero spazio. Essa non si crea né si distrugge, quindi integrando ovunque se ne dovrà trovare precisamente lo stesso valore ad ogni tempo. Se localmente, i.e. in un volume  $\Omega$ , la densità di tale grandezza è variata, necessariamente una parte di tale grandezza deve essere *fluita* attraverso la superficie  $\Sigma$  che contorna  $\Omega$  per entrarvi o per uscirne.

#### 4.2.1 L'operatore Velocità

Definiamo l'operatore velocità come l'operatore derivata dell'operatore  $\hat{x}$ : utilizzando la relazione (2.9), si trova che

$$\hat{v} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] \quad (4.5)$$

Siccome

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

e valgono ovviamente le relazioni

$$[V(\hat{x}), \hat{x}] = 0 \quad [\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$$

allora è immediato trovare che

$$\hat{v} = \frac{\hat{p}}{m} \quad (4.6)$$

*Dimostrazione.* Possiamo avvalerci della seguente proprietà dei commutatori:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

che implica:

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \hat{x} \right] = \frac{1}{2m} [\hat{p}\hat{p}, \hat{x}] = \frac{1}{2m} (\hat{p}[\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{p}) = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}$$

da cui si ottiene la tesi:

$$\hat{v} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{\hat{p}}{m}$$

□

Grazie all'operatore  $\hat{v}$ , possiamo scrivere la corrente di probabilità  $\mathbf{J}$  sopra riportata come

$$\mathbf{J} = \operatorname{Re}\{\psi^* \hat{v} \psi\}$$

riconoscendo che, in rappresentazione delle coordinate

$$\hat{v} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = -i \frac{\hbar}{m} \nabla$$

Bisogna notare che la forma dell'operatore velocità **dipende dall'hamiltoniano**: se è vero che in questo caso l'operatore  $\hat{v}$  si scrive come in Equazione (4.6), nel Capitolo 12 incontreremo sistemi con operatori hamiltoniani tali per cui la (4.6) non sarà più vera.

### 4.3 SPETTRO DELL'HAMILTONIANA DI UNA PARTICELLA LIBERA

Torniamo a considerare una particella libera, per cui

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

rispettivamente nello spazio degli stati e nello spazio delle funzioni d'onda (i.e. in rappresentazione delle coordinate).

Poiché il moto è non limitato, lo spettro di tale hamiltoniano deve essere continuo. Sia dunque  $\psi_E(\mathbf{x})$  un'autofunzione relativa all'autovalore  $E$ , allora vale l'equazione agli autovalori

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_E(\mathbf{x}) + E \psi_E(\mathbf{x}) = 0$$

che riscriviamo nella forma

$$\nabla^2 \psi_E(\mathbf{x}) + \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \right)^2 \psi_E(\mathbf{x}) = \nabla^2 \psi_E(\mathbf{x}) + k^2 \psi_E(\mathbf{x}) = 0$$

in cui introduciamo il numero d'onda  $k$ :

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

Nel caso unidimensionale, questa equazione si riduce a

$$\partial_x^2 \psi_E(x) = -k^2 \psi_E(x)$$

la cui soluzione è della forma

$$\psi_E(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

con  $A, B \in \mathbb{C}$  costanti.

Questi esponenziali sono sicuramente complessi; dal momento che vale l'equazione  $E = p^2/(2m)$ , con  $p \in \mathbb{R}$  (essendo autovalori di  $\hat{p}$ , operatore hermitiano), abbiamo  $E \geq 0$  da cui  $k \in \mathbb{R}^{\geq 0}$ .

In tre dimensioni, è chiaro che la soluzione sarà un'onda piana

$$\psi_E(\mathbf{x}, t) = A \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et + \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right) + B \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right)$$

ove per completezza abbiamo introdotto la dipendenza temporale, moltiplicando per  $\exp(-iEt/\hbar)$ . Possiamo riportare  $\psi_E(\mathbf{x}, t)$  in modo più conciso ammettendo valori del numero d'onda non solo positivi

$$k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

e ricordando che ai due valori discordi nel segno, ma uguali in modulo, è associata la stessa energia  $E$ .<sup>3</sup> In questo modo scriviamo l'autofunzione nella forma

$$\psi_E(\mathbf{x}, t) = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right) \quad (4.7)$$

sempre con la relazione di dispersione

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

e con  $C$  fissato dalla normalizzazione.

Data la continuità dello spettro, le autofunzioni non sono normalizzabili ad 1 (a nessun valore che sia finito) e dunque non sono fisicamente realizzabili<sup>4</sup>. Fissiamo dunque in modo arbitrario la normalizzazione: imponendo ad esempio

$$\langle \psi_E | \psi_{E'} \rangle = \delta(E - E')$$

troviamo nel caso tridimensionale  $C = (2\pi\hbar)^{-3/2}$  con calcoli analoghi a quelli utilizzati per arrivare a (3.7). Alternativamente, è possibile imporre

$$|\mathbf{J}| = 1$$

e, in tal caso  $C = |\mathbf{p}/m|^{-1/2} = 1/\sqrt{v}$ .

*Dimostrazione.* Ricordiamo la definizione della **densità di corrente di probabilità**:

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

Imponendo  $\psi(\mathbf{x}) \equiv \psi_E(\mathbf{x})$  come in (4.7), si ottiene:

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= -\frac{i\hbar}{2m} \left[ C^* \exp\left(\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right) \left(\frac{i\mathbf{p}}{\hbar}\right) C \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right) \right] \\ &\quad + \frac{i\hbar}{2m} \left[ C \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right) \left(-\frac{i\mathbf{p}}{\hbar}\right) C^* \exp\left(\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right) \right] \\ &= \frac{\mathbf{p}}{m} |C|^2 = \mathbf{v} |C|^2 \end{aligned}$$

da cui segue, imponendo  $C = |\mathbf{p}/m|^{-1/2}$ , che

$$\mathbf{J} = \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|}$$

che in effetti realizza  $|\mathbf{J}| = 1$ .  $\square$

In questo ultimo caso, la densità di corrente di probabilità coincide con il versore velocità. Questo risultato non è casuale: se riconosciamo nel risultato del calcolo di  $\mathbf{J}$  il fatto che  $|C|^2 = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \equiv \rho$  (densità di probabilità), ci possiamo accorgere che  $\mathbf{J}$  è coerente con la definizione “classica” di densità di corrente

$$\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}$$

La particella che stiamo studiando, libera nello spazio tridimensionale, occupa idealmente un autostato dell’hamiltoniana che, nella rappresentazione delle coordinate, si mostra come un’onda piana monocromatica di pulsazione  $E$  e **vettore numero d’onda**  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$  perfettamente definito. Infatti, eseguendo la Trasformata di Fourier della funzione d’onda, verifichiamo che la varianza della distribuzione degli impulsi attorno all’autovalore è nulla:

$$\mathcal{F}\left(Ce^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}\right) = \frac{C}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{x} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{x}/\hbar} \propto \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

indipendentemente dalla normalizzazione scelta. Ciò è in accordo con il Principio di Indeterminazione: la particella, occupando uno stato perfettamente definito negli impulsi e, equivalentemente, nel numero d’onda, ha una varianza infinita nella posizione, difatti il modulo quadro della funzione d’onda è una costante. Alla luce di questo, è naturale che il flusso coincida con il versore velocità: l’unica informazione che abbiamo sul sistema è la velocità con cui si muove la particella e la sua direzione spaziale, quindi il flusso di probabilità deve essere perfettamente simmetrico lungo tale direzione: se la probabilità di misurare la posizione della particella lungo tale asse non fosse uniforme, avremmo violato il Principio di indeterminazione.

Concludiamo con un’ultima osservazione. Le onde piane da noi trovate sono autofunzioni di  $\hat{p}$  e  $\hat{H}$  (dunque di  $\hat{k} = \hat{p}/\hbar$ ). L’operatore impulso è hermitiano, pertanto nello spazio di Hilbert  $L^2(\mathbb{R})$  esso ha una base completa di autofunzioni. Fisicamente (in base a quanto trovato in questa sezione) questo significa che ogni stato normalizzabile, con funzione d’onda  $\psi(x) \in L^2$ , può essere scritto come sovrapposizione continua di onde piane:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k)\psi_E(x)dk = \int_{-\infty}^{+\infty} C'(k)e^{ikx}dk$$

Ma allora possiamo osservare che l’affermazione secondo cui gli autostati dell’impulso sono completi è equivalente all’affermazione che *ogni funzione in  $L^2$  ammette trasformata di Fourier*.

#### 4.4 ASPETTI GENERALI DEI POTENZIALI 1D

Iniziamo ora a tenere conto della presenza di un certo termine di potenziale nell’operatore hamiltoniano del sistema, analizzandone le conseguenze.

Prima di ciò, dimostriamo il seguente

**Teorema (Non degenerazione).** *Se l'operatore hamiltoniano di un sistema unidimensionale ammette uno spettro discreto, allora gli autostati sono non degeneri.*

*Dimostrazione.* Ci poniamo nella rappresentazione delle coordinate. Supponiamo per assurdo che ad un certo valore di energia  $E$  siano associati due autostati distinti di  $\hat{H}$ , quindi due funzioni d'onda  $\psi_1^E(x, t)$  e  $\psi_2^E(x, t)$ . Queste saranno soluzioni dell'equazione (4.2), per uno stesso valore di  $E$  (e sicuramente di  $V(x)$ , se il sistema è lo stesso), quindi si avrà (indicando con "l'operazione  $\partial_x^2$ ):

$$\frac{\psi_1^E(x, t)''}{\psi_1^E(x, t)} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)) = \frac{\psi_2^E(x, t)''}{\psi_2^E(x, t)}$$

da cui

$$\psi_1^E(x, t)''\psi_2^E(x, t) - \psi_2^E(x, t)''\psi_1^E(x, t) = 0$$

che si può mostrare essere equivalente a

$$(\psi_1^E(x, t)'\psi_2^E(x, t) - \psi_2^E(x, t)'\psi_1^E(x, t))' = 0$$

e quindi

$$\psi_1^E(x, t)'\psi_2^E(x, t) - \psi_2^E(x, t)'\psi_1^E(x, t) = c$$

con  $c$  indipendente da  $x$ . Dato che lo spettro di autovalori di  $\hat{H}$  è discreto, ci aspettiamo che il moto sia limitato: questo implica che le singole funzioni d'onda  $\psi_1^E(x, t)$  e  $\psi_2^E(x, t)$  si debbano annullare asintoticamente, i.e. nei limiti  $x \rightarrow \pm\infty$ . Valutando l'espressione trovata nei limiti  $x \rightarrow \pm\infty$ , deduciamo che deve essere  $c = 0$ , ossia

$$\psi_1^E(x, t)'\psi_2^E(x, t) = \psi_2^E(x, t)'\psi_1^E(x, t)$$

D'altronde, per lo stesso motivo, le derivate prime  $\psi_1^E(x, t)'$  e  $\psi_2^E(x, t)'$  non possono divergere per  $x \rightarrow \pm\infty$ . Usando la regola di derivazione di un rapporto, si può riscrivere l'espressione precedente come

$$\begin{aligned} 0 &= \psi_1^E(x, t)'\psi_2^E(x, t) - \psi_2^E(x, t)'\psi_1^E(x, t) = [\psi_2^E(x, t)]^2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\psi_1^E(x, t)}{\psi_2^E(x, t)} \\ &= -[\psi_1^E(x, t)]^2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\psi_2^E(x, t)}{\psi_1^E(x, t)} \end{aligned}$$

e questo deve valere  $\forall x \in \mathbb{R}$ . Prendiamo la prima delle due espressioni finali:

- in tutti i punti  $\bar{x}$  dove non si annulla  $\psi_2^E$ , vale

$$\psi_2^E(\bar{x}, t) \neq 0 \quad \implies \quad \frac{\psi_1^E(\bar{x}, t)}{\psi_2^E(\bar{x}, t)} = \text{costante}$$

- nei punti  $\underline{x}$  in cui invece

$$\psi_2^E(\underline{x}, t) = 0$$

la derivata potrebbe essere nulla (in tal caso, vale la precedente conclusione) o non nulla: in questo ultimo caso basta guardare la seconda espressione per vedere che  $\psi_1^E(\underline{x}, t) = 0$ , quindi anche stavolta  $\psi_2^E \propto \psi_1^E$ .

Ne segue che

$$\forall x \in \mathbb{R} : \psi_1^E(x, t) \propto \psi_2^E(x, t)$$

ma tale conclusione, contraddicendo l'ipotesi di partenza, è assurda.  $\square$

Abbiamo dunque trovato

$$\text{moto limitato} \implies \text{spettro di } \hat{H} \text{ non degenere}$$

tuttavia è utile notare come la dimostrazione continui a valere nel caso di moti che, pur essendo illimitati, sono limitati soltanto in una delle due direzioni: per concludere che  $c = 0$ , è infatti sufficiente che le funzioni d'onda si annullino asintoticamente anche solo in una delle due direzioni, i.e. per  $x \rightarrow \infty$  oppure per  $x \rightarrow -\infty$ .

Quest'ultimo commento si rivelerà di fondamentale importanza nello studio di sistemi tridimensionali in coordinate sferiche: se è possibile separare le variabili e studiare una funzione puramente radiale, come faremo nel caso del modello dell'atomo di idrogeno (Cap. 7, Parte I), la funzione radiale sarà a tutti gli effetti una funzione d'onda unidimensionale limitata da un lato (deve essere  $r \geq 0!$ ), regolare nell'origine. Questo implicherà direttamente l'esistenza di soluzioni radiali non degeneri per **ciascuna equazione radiale**.

#### 4.4.1 Operatore Parità

Introduciamo il concetto di *invarianza per parità*: l'*operatore di parità*  $\hat{\mathcal{P}}$  è tale che

$$\hat{\mathcal{P}}\phi(x) = \phi(-x)$$

dove  $\phi(x)$  è una generica funzione complessa di variabile reale, associata – nella rappresentazione delle coordinate – ad una funzione d'onda. Osserviamo in particolare che

$$\hat{\mathcal{P}}^2 = \mathbb{1}$$

da cui deduciamo che gli autovalori di questo operatore sono  $+1$  e  $-1$ . Essi individuano rispettivamente i due sottospazi di funzioni *simmetriche* e *antisimmetriche* sotto parità, in cui è decomponibile l'intero spazio  $L^2$ .

Un sistema fisico presenta *invarianza per parità* se  $\hat{\mathcal{P}}$  è una sua simmetria, quindi se per una qualsiasi funzione d'onda  $\psi(x)$

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{P}}]\psi(x) = 0$$

che equivale a dire che l'operatore hamiltoniano del sistema non cambia sotto tale trasformazione. Infatti la precedente relazione si scrive anche come (omettendo  $\psi(x)$ )

$$\hat{H}\hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}\hat{H}$$

e quindi, dato che  $\hat{\mathcal{P}}$  è unitario (si vede dalla definizione)

$$\hat{\mathcal{P}}^{-1}\hat{H}\hat{\mathcal{P}} = \hat{H}$$

Da questo segue che, se scriviamo in generale

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)$$

allora, dato che

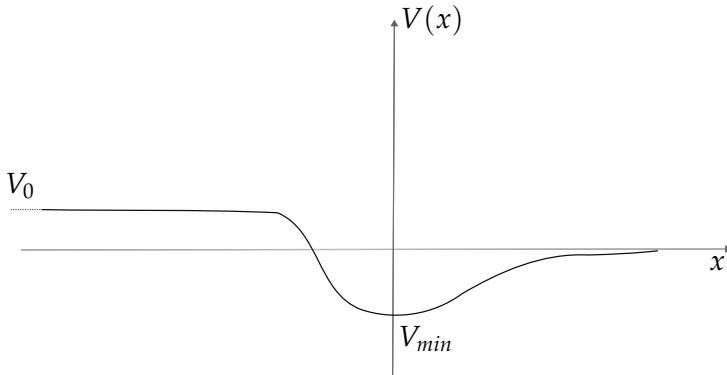
$$[-\partial_x^2, \hat{P}] \psi(x) = -\partial_x^2 \psi(-x) + \hat{P} \partial_x^2 \psi(x) = 0$$

L'invarianza del sistema sotto trasformazione di parità è esprimibile anche come

$$[V(\hat{x}), \hat{P}] \psi(x) = 0$$

In altri termini, la simmetria per inversione spaziale dell'intero problema, contenuta chiaramente nella commutatività tra l'hamiltoniano e la parità, si deduce rapidamente commutando il potenziale con la parità stessa: la parte relativa all'impulso commuterà naturalmente<sup>5</sup> con  $\hat{P}$ .

#### 4.4.2 Esempio: una particella immersa in un potenziale



**Figura 4.1:** Esempio generico di un possibile potenziale.

Immaginiamo che una particella di massa  $m$  sia soggetta ad un potenziale  $V(x)$  come quello rappresentato in figura 4.1. Assumendo che esista un minimo  $V_{min}$  per il potenziale  $V(x)$ , studiamo quale debba essere il valore minimo  $E_0$  per l'energia della particella. Tale valore minimo costituirà l'autovalore associato all'autostato che chiamiamo *fondamentale*:  $|\psi_{E_0}\rangle$ . Abbiamo già visto che vale:

$$\langle \psi_{E_0} | \hat{H} | \psi_{E_0} \rangle = E_0$$

da cui, inserendo  $\hat{H}$  in forma generica

$$\langle \psi_{E_0} | \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) | \psi_{E_0} \rangle = E_0$$

e siccome

$$\langle \psi_{E_0} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi_{E_0} \rangle \geq 0$$

si ottiene

$$E_0 \geq V_{min}$$

Il risultato è analogo al caso classico: tutti i valori –siano essi continui o discreti– di energia del sistema si collocano all'interno di  $[V_{\min}, \infty)$ .

Riprendiamo l'equazione differenziale per le funzioni d'onda degli auto-stati di  $\hat{H}$

$$\partial_x^2 \psi_E(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi_E(x) = 0 \quad (4.8)$$

e suddividiamo il problema in tre casi:

- $V_{\min} \leq E < 0$ : In questo caso, ci aspetteremmo classicamente un moto limitato. Infatti, nel limite in cui  $x \rightarrow +\infty$ ,  $V(x) \rightarrow 0$  e l'Eq. (4.8) si approssima a:

$$\partial_x^2 \psi_E(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_E(x) \simeq 0$$

che ha soluzione (scartando l'esponenziale che sarebbe divergente in questo limite; si ricordi a tal proposito che  $E < 0$ )

$$\psi_E(x) \simeq \psi_E(0) \exp \left( -\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} x \right) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$$

Dunque la probabilità di misurare una particella con questa energia  $E$  decresce esponenzialmente nello spazio per  $x > 0$ . In questo intervallo di energia, il moto è perciò limitato anche in ambito quantistico, e –come appena mostrato– lo spettro energetico non presenta degenerazione.

Si può ricavare un risultato simile nel caso in cui  $x \rightarrow -\infty$ , in cui si sostituisce semplicemente  $E$  con  $E - V_0$  all'esponente della soluzione approssimata dell'Eq. (4.8). La quantità  $E - V_0$  è negativa, ed analogamente a prima si ha

$$\psi_E(x) \simeq \psi_E(0) \exp \left( -\frac{\sqrt{2m(|E| + V_0)}}{\hbar} x \right) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$$

Come atteso, il moto è limitato, ma in senso probabilistico. La probabilità di trovare la particella in un intervallo spaziale arbitrariamente distante dall'origine non è –in generale– nulla, tuttavia tende a zero asintoticamente. Avendo concluso che il moto è limitato in questo senso, forti dei risultati precedenti, possiamo concludere che per  $V_{\min} \leq E < 0$  l'energia  $E$  assumerà valori discreti.

- $0 \leq E \leq V_0$ : le approssimazioni all'infinito per l'Eq. (4.8) rimangono invariate. Tuttavia, la forma delle soluzioni varia.

Per  $x \rightarrow +\infty$ , dato che ora  $E > 0$ , la soluzione sarà approssimativamente della forma

$$\psi_E(x) \simeq ae^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + be^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}$$

Per  $x \rightarrow -\infty$  si ha invece (al solito, scartando la soluzione divergente)

$$\psi_E(x) \simeq \psi_E(0) e^{-\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}x} \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} 0$$

ovvero il moto è limitato per  $x < 0$ , in quanto la probabilità di trovare il sistema decresce esponenzialmente per  $x \rightarrow -\infty$ . In generale, in tale intervallo energetico il moto è illimitato, il che coimplica uno spettro continuo di energie accessibili. Come abbiamo però avuto modo di puntualizzare, questo spettro è non degenere. La dimostrazione è identica a quella sopra riportata nel caso di moto limitato: è sufficiente che la probabilità in posizione tenda a zero →, equivalentemente, che il moto sia limitato- da un lato soltanto, cioè per  $x \rightarrow -\infty$  oppure per  $x \rightarrow +\infty$ .

- $E > V_0$ : in questo caso, in entrambi i limiti  $x \rightarrow \pm\infty$ , si ottengono soluzioni della forma

$$\psi_E(x) \simeq ae^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + be^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}$$

Queste soluzioni non sono normalizzabili, e dunque non possono essere interpretate in termini di probabilità.

Riportiamo infine l'enunciato del seguente Teorema, relativo alle autofunzioni di  $\hat{H}$  in rappresentazione delle coordinate:

**Teorema.** *L'autofunzione corrispondente all'autostato eccitato  $n$ -esimo di  $\hat{H}$  ha  $n$  zeri, chiamati nodi.*

Segue pertanto che l'autofunzione  $\psi_{E_0}(x)$ , corrispondente all'autostato ad energia minima, non si annulla mai, i.e. non presenta alcun nodo.

Tale autofunzione è necessariamente simmetrica, se il sistema presenta invarianza per trasformazione di parità. Infatti, se è vero che vale:

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{P}}] = 0$$

allora  $\hat{H}$  e  $\hat{\mathcal{P}}$  condividono una stessa base di autovettori. Ma questo implica che  $\psi_{E_0}(x)$  è autofunzione per  $\mathcal{P}$ . Se per assurdo questa fosse antisimmetrica, allora si annullerebbe per  $x = 0$ , in contraddizione con il teorema appena enunciato. Ne segue che  $\psi_{E_0}(x)$  deve essere simmetrica in  $x$ .

#### 4.4.3 Separazione dell'hamiltoniano: problemi a $n$ corpi

Supponiamo di avere un operatore hamiltoniano della forma

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^n \left( \frac{\hat{p}_k^2}{2m_k} + V(\hat{x}_k) \right) = \sum_{k=1}^n \hat{H}_k$$

allora lo stato

$$\left| \psi_{E_{j_1}}^{(1)} \right\rangle \left| \psi_{E_{j_2}}^{(2)} \right\rangle \dots \left| \psi_{E_{j_n}}^{(n)} \right\rangle$$

è autostato di  $\hat{H}$  per l'autovalore

$$E_{j_1} + E_{j_2} + \dots + E_{j_n} = \sum_{k=1}^n E_{j_k}$$

dove  $\left| \psi_{E_{j_k}}^{(k)} \right\rangle$  è l'autostato dell'hamiltoniano unidimensionale  $k$ -esimo, associato ad una certa energia  $E_{j_k}$  nello spettro di tale operatore. La verifica di

questo è immediata, a partire dalla forma di  $\hat{H}$  passando per le  $n$  definizioni di autostato:

$$\hat{H}_k \left| \psi_{E_{j_k}}^{(k)} \right\rangle = E_{j_k} \left| \psi_{E_{j_k}}^{(k)} \right\rangle$$

Tutto questo risulta particolarmente utile nello studio di sistemi a più corpi non interagenti, per i quali è possibile costruire un autostato globale, una volta nota la forma dell'autostato unidimensionale in una qualunque rappresentazione. Un esempio sono le applicazioni allo studio statistico di sistemi quantistici a molti corpi.

## 4.5 L'OSCILLATORE ARMONICO UNIDIMENSIONALE

In questa sezione studieremo il sistema fisico dell'oscillatore armonico, ben noto in Meccanica Classica ed estremamente importante anche in Meccanica Quantistica; vedremo insorgere differenze sostanziali tra il caso classico e quello quantistico, affrontando l'analisi con due approcci matematici indipendenti.

Come noto, in Meccanica Classica l'hamiltoniana per l'oscillatore armonico unidimensionale è data da:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

dunque, ragionando per analogia, costruiremo l'hamiltoniano quantistico del problema per pura estensione:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{Q}^2}{2} \quad (4.9)$$

### Costruzione delle scale associate all'oscillatore

Prima di affrontare la trattazione, ci soffermiamo su un approccio molto istruttivo al problema che fa uso dell'analisi dimensionale per dedurre specifiche proprietà fisiche del sistema *a priori*. L'hamiltoniano in (4.9) è caratterizzato dai parametri  $m$  e  $\omega$ ; congiuntamente con  $\hbar$ , questo set è l'intero insieme delle quantità fisiche che possiamo usare per costruire le **scale del problema**: quantità dimensionate che rappresentano l'ordine di grandezza su cui ci si aspetta una variabilità del problema (per fissare le idee, un scala di tempi fornisce l'ordine di grandezza di eventuali tempi caratteristici del sistema). Troviamo:

$$\begin{aligned} l_\omega &= [\text{lunghezza}] = \sqrt{\frac{[\text{energia}] \cdot [\text{tempo}]}{[\text{massa}] / [\text{tempo}]}} = \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \\ p_\omega &= [\text{impulso}] = \sqrt{[\text{energia}] \cdot [\text{massa}]} = (\hbar m\omega)^{1/2} \\ E_\omega &= [\text{energia}] = \hbar\omega \end{aligned}$$

L'importanza di queste scale sarà più chiara tra breve; possiamo sin da subito, però, intuire come queste scale ci possano guidare nell'approccio al

sistema fisico: ci aspettiamo e.g. che una variazione dell'impulso dell'ordine di  $p_\omega$  sia relativamente "pesante" all'interno dell'hamiltoniano, quindi  $p_\omega$  rappresenti effettivamente una scala ragionevole per gli impulsi coinvolti nel sistema.

Effettivamente le scale costruite sono sensate: se ridefiniamo

$$\hat{q} \equiv \frac{\hat{Q}}{l_\omega} \quad \hat{p} = \frac{\hat{P}}{p_\omega} \quad \Rightarrow \quad [\hat{q}, \hat{p}] = i$$

ricaviamo una scrittura equivalente per  $\hat{H}$ :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left[ \left( \frac{\hat{Q}}{l_\omega} \right)^2 + \left( \frac{\hat{P}}{p_\omega} \right)^2 \right] = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{q}^2 + \hat{p}^2)$$

che rende evidente come l'energia vari su una scala  $\hbar\omega$ , mentre le lunghezze e gli impulsi contribuiscano a tale variazione quando pesate con  $l_\omega$  e  $p_\omega$ .

#### 4.5.1 Autovalori dell'hamiltoniano: soluzione algebrica

La prima soluzione che forniamo all'equazione agli autovalori che insorge dall'Eq. (4.9) è di tipo algebrico, basata sulle proprietà degli operatori. Consideriamo l'hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{q}^2 + \hat{p}^2)$$

e definiamo un nuovo operatore  $\hat{a}$ :

$$\hat{a} \equiv \frac{\hat{q} + i\hat{p}}{\sqrt{2}} \quad \Rightarrow \quad \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{q} - i\hat{p}}{\sqrt{2}}$$

dove abbiamo utilizzato che  $\hat{q}$  e  $\hat{p}$  sono operatori hermitiani. Invertendo le relazioni, si trova

$$\hat{q} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \quad \hat{p} = -i \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}$$

In termini del nuovo operatore, l'hamiltoniano si scrive come

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left[ \left( \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \right)^2 + \left( -i \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \right)^2 \right] = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})$$

D'altronde, vale:

$$\begin{aligned} \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} &= [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} \\ &= \left[ \frac{\hat{q} + i\hat{p}}{\sqrt{2}}, \frac{\hat{q} - i\hat{p}}{\sqrt{2}} \right] + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} \\ &= \frac{i}{2}[\hat{p}, \hat{q}] - \frac{i}{2}[\hat{q}, \hat{p}] + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} \\ &= 1 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} \end{aligned}$$

Abbiamo mostrato *en passant* che  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ , vedremo in seguito come ciò si rivelerà utile. Segue dunque che

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

dove abbiamo definito l'operatore  $\hat{N}$ , hermitiano per costruzione

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

È evidente che  $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$ , quindi i due operatori devono condividere lo spettro. Cercare gli autostati  $|\nu\rangle$  di  $\hat{N}$  si rivela equivalente a cercare gli autostati di  $\hat{H}$ .

**COSA STIAMO CERCANDO?** L'analogia con la Meccanica Classica può essere usata per provare ad anticipare quanto troveremo più avanti: classicamente, l'oscillatore armonico unidimensionale può assumere qualsiasi energia, e sbadatamente si potrebbe pensare che non sia vincolato spazialmente; al contrario, per ogni energia finita l'oscillatore è vincolato in una regione finita di spazio. Ragionando per similitudine, possiamo quindi aspettarci che l'hamiltoniano abbia spettro *discreto* e *infinito*, in quanto un limite superiore allo spettro corrisponderebbe nella nostra analogia a una massima energia possibile per il sistema. Siccome ci aspettiamo uno spettro discreto, assumiamo che gli autostati  $|\nu\rangle$  di  $\hat{N}$  siano normalizzabili a 1:  $\langle \nu | \nu \rangle = 1$ .

Determiniamo gli autostati  $|\nu\rangle$ : a tal fine, studiamo l'azione degli operatori  $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$  su di essi.

Calcoliamo innanzitutto i commutatori  $[\hat{N}, \hat{a}^\dagger]$  e  $[\hat{N}, \hat{a}]$ , facendo uso della nota formula<sup>6</sup>:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

Quindi, sviluppando:

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

dove ci siamo avvalsi della proprietà, già derivata,  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ . Quanto trovato può essere usato per calcolare:

$$\hat{N}\hat{a} |\nu\rangle = [\hat{N}, \hat{a}] |\nu\rangle + \hat{a}\hat{N} |\nu\rangle = -\hat{a} |\nu\rangle + \nu\hat{a} |\nu\rangle = (\nu - 1)\hat{a} |\nu\rangle$$

per cui  $\hat{a} |\nu\rangle$  deve coincidere<sup>7</sup> con l'autostato  $|\nu - 1\rangle$  relativo all'autovalore  $\nu - 1$ . Nello spettro, l'operatore  $\hat{a}$  rappresenta una sorta di operatore di discesa unitario:

$$\hat{a} |\nu\rangle = |\nu - 1\rangle$$

D'altronde, il ragionamento può essere iterato su quest'ultimo: se esiste l'autostato  $|\nu - 1\rangle$ , deve analogamente esistere l'autostato  $|\nu - 2\rangle = \hat{a} |\nu - 1\rangle$ , e così via. A partire dall'autostato  $|\nu\rangle$ , quindi, se ne sono trovati (potenzialmente) infiniti.

Notiamo però che il ragionamento funziona fintanto che  $\hat{a} |\nu\rangle \neq 0$ :

$$\hat{a} |\nu\rangle = 0 \quad \implies \quad \hat{N}\hat{a} |\nu\rangle = 0$$

In tal caso l'equazione  $\hat{N}\hat{a} |\nu\rangle = (\nu - 1)\hat{a} |\nu\rangle$  è automaticamente risolta, quindi non possiamo dire nulla su  $\hat{a} |\nu\rangle$ .

Inoltre, deve essere  $\nu \geq 0$ : questo si vede bene calcolando la norma di  $\hat{a}|\nu\rangle$ , che necessariamente è positiva:

$$\|\hat{a}|\nu\rangle\|^2 = (\langle\nu|\hat{a}^\dagger)(\hat{a}|\nu\rangle) = \langle\nu|\hat{N}|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle = \nu$$

(ricordiamo che gli autostati sono normalizzabili in questo contesto) da cui la tesi. Rimettendo insieme quanto trovato, l'unico modo per mantenere coerenti tra loro le condizioni è che sia

$$\{\nu\} \subset \mathbb{N} \cup \{0\}$$

in quanto l'esistenza di infiniti autovalori negativi può essere impedita solo applicando l'operatore di discesa fino ad "atterrare" sull'autovalore 0, che non permette di proseguire oltre; per passi unitari, l'unica condizione necessaria e sufficiente è partire da un numero intero positivo.

Si ha quindi

$$\{\nu\} = \{0, 1, 2, \dots, k\}$$

Tuttavia è immediato dimostrare che  $k \rightarrow +\infty$ : in maniera del tutto analoga a prima, troviamo che  $\hat{a}^\dagger$  si comporta da operatore di salita (unitario) sugli autostati di  $\hat{N}$ :

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|\nu\rangle = (\nu + 1)\hat{a}^\dagger|\nu\rangle$$

per cui l'esistenza stessa di un qualsiasi autovalore intero positivo implica necessariamente

$$\{\nu\} \equiv \mathbb{N} \cup \{0\}$$

Lo spettro di  $\hat{N}$  è composto da tutti gli interi positivi; come ci aspettavamo, lo spettro di  $\hat{H}$  è discreto e infinito.

**NORMALIZZAZIONE DEGLI AUTOSTATI** Si può dimostrare che gli stati normalizzati, chiamati d'ora in poi semplicemente  $|n\rangle$ , possono essere scritti come:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}^\dagger\right)^n |0\rangle \quad (4.10)$$

dove lo stato  $|0\rangle$  è il fondamentale, con  $\hat{a}|0\rangle = 0$ .

*Dimostrazione.* Consideriamo l'operatore  $\hat{a}^\dagger$ : finora abbiamo usato senza preoccuparci  $\hat{a}^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle$ . Supponiamo adesso che sia

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = c_n|n+1\rangle$$

condizione che, come è evidente, non modifica la validità dell'equazione  $\hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle$ , e di conseguenza le conclusioni a cui siamo giunti. Possiamo calcolare il coefficiente  $c_n$  passando dal calcolo della norma di  $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ :

$$\begin{aligned} |c_n|^2\||n+1\rangle\|^2 &= \left\|\hat{a}^\dagger|n\rangle\right\|^2 \\ &= \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle \\ &= \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle + \langle n|\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right]|n\rangle \\ &= \langle n|\hat{N}|n\rangle + \langle n|n\rangle \\ &= (n+1)\||n\rangle\|^2 \end{aligned}$$

da cui, imponendo normalizzazione unitaria, segue immediatamente che

$$c_n = \sqrt{n+1} \quad \Rightarrow \quad \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

Ed in modo analogo troviamo che, per l'operatore di discesa, vale

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

La forma in Eq. (4.10) per gli autostati normalizzati di  $\hat{N}$  è una conseguenza evidente di questa derivazione.  $\square$

In conclusione, possiamo scrivere

$$\hat{H} |n\rangle = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \quad (4.11)$$

per cui lo spettro dell'hamiltoniana dell'oscillatore armonico sarà dato da

$$\left\{ \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \right\} = \left\{ \frac{\hbar\omega}{2}, \frac{3\hbar\omega}{2}, \frac{5\hbar\omega}{2}, \dots \right\}$$

#### 4.5.2 Autostati dell'hamiltoniano: soluzione analitica

Ci poniamo adesso il problema di rappresentare in coordinate (o in impulsi) gli autostati  $|n\rangle$  dell'hamiltoniano, ossia di trovare un'espressione per la **funzione d'onda**. Ricordando l'Eq. (4.9), detta  $\psi_n(x)$  la funzione d'onda relativa all'autovalore  $E_n$ :

$$H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

si ricava immediatamente, rappresentando l'operatore impulso nelle coordinate:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_n(x) + \frac{m\omega^2x^2}{2}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad (4.12)$$

Recuperiamo la definizione di  $l_\omega$  e definiamo come segue  $\lambda_n$ :

$$l_\omega = \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \quad \lambda_n \equiv \frac{2E_n}{\hbar\omega}$$

La (4.12) si riscrive equivalentemente come

$$\frac{d^2u}{dX^2} + (\lambda_n - X^2)u = 0$$

dove  $u(X) = \psi_n(x)$  ed ovviamente  $X = x/l_\omega$ . Questa è un'equazione differenziale dalla soluzione non immediata. Prima di fornire la soluzione, notiamo come l'equazione si semplifichi negli andamenti asintotici:

$$\frac{d^2u}{dX^2} - X^2u \simeq 0 \quad \text{per} \quad X \rightarrow \pm\infty$$

condizione equivalente a  $|x| \gg l_\omega$ . Una soluzione approssimata<sup>8</sup> a quest'equazione differenziale è data da

$$u(X) = e^{\pm X^2/2}$$

Evidentemente la soluzione positiva è fisicamente insensata, perché non normalizzabile. Di conseguenza, deve essere

$$u(X) = e^{-X^2/2}$$

Ricolleghiamo questo andamento con quanto abbiamo visto circa le scale fisiche associate al sistema: ci aspettiamo che per distanze molto maggiori della lunghezza tipica del sistema  $l_\omega$  la funzione d'onda abbia una soppressione gaussiana, ossia – coerentemente con le attese – sia praticamente impossibile misurare la posizione della particella a grandissime distanze dal centro dell'oscillatore.

Omettiamo la derivazione esatta delle soluzioni all'Eq. (4.12), che risultano essere

$$\psi_n(x) = \left( \frac{1}{\pi^{1/2} l_\omega 2^n n!} \right)^{1/2} H_n \left( \frac{x}{l_\omega} \right) \exp \left( -\frac{x^2}{2l_\omega^2} \right) \quad (4.13)$$

dove si sono scritti implicitamente i **polinomi di Hermite**:

$$H_n(y) = e^{y^2/2} \left( y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2/2}$$

di cui riportiamo i primi termini:

$$H_0(y) = 1 \quad H_1(y) = 2y \quad H_2(y) = 4y^2 - 2 \quad \dots$$

Nella derivazione della soluzione, la condizione di normalizzazione impone che sia

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

che è esattamente lo spettro che abbiamo trovato con minore sofferenza nella derivazione algebrica in Sez. 4.5.1.

Scritta così, l'autofunzione d'onda è normalizzata:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_n(x) = 1$$

e ha le dimensioni fisiche di  $[\text{lunghezza}]^{-1/2}$ , coerentemente con il fatto che l'integrale in  $dx$  di  $|\psi_n(x)|^2$  deve essere unitario e adimensionale.

Possiamo infine scrivere lo **stato fondamentale** dell'oscillatore armonico quantistico a partire dall'Eq. (4.13):

$$\psi_0(x) = \left( \frac{1}{\pi^{1/2} l_\omega} \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{x^2}{2l_\omega^2} \right) \quad (4.14)$$

### 4.5.3 Relazione tra posizione e impulso

Si nota abbastanza facilmente, ricordando quanto esposto in Sez. 3.3.2, come si possa rappresentare l'Eq. (4.9) in due modi equivalenti:

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{m\omega^2x^2}{2} && \text{Coordinate} \\ H &= \frac{p^2}{2m} + \hbar^2\frac{m\omega^2}{2}\partial_p^2 && \text{Impulsi} \end{aligned}$$

Le due sono formalmente identiche e perciò devono avere analoghe soluzioni. Questo si vede particolarmente bene sullo stato fondamentale appena calcolato in Eq. (4.14): ha forma gaussiana, per cui – in virtù di quanto visto in Sez. 3.3.2 – la sua trasformata di Fourier, i.e. l'autostato  $|0\rangle$  nella rappresentazione degli impulsi, deve essere ancora gaussiana. Valgono dunque per entrambe le rappresentazioni le medesime considerazioni fisiche: la densità di probabilità di posizione e impulso scalano gaussianamente rispetto alle scale fisiche tipiche del sistema, i.e.  $l_\omega$  e  $p_\omega$ .

### 4.5.4 \* Parità degli autostati

Adesso vogliamo occuparci della parità degli autostati di  $\hat{H}$ . Cominciamo notando che

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{P}}] = 0$$

quindi ciascun autospazio di  $\hat{H}$  è un sottospazio invariante di  $\hat{\mathcal{P}}$ . Siccome il problema è unidimensionale, i livelli energetici sono non degeneri: questo implica che gli autospazi di  $\hat{H}$  hanno tutti dimensione 1, quindi ciascun autostato di  $\hat{H}$  è anche autostato di  $\hat{\mathcal{P}}$ . In altri termini, gli autostati dell'oscillatore armonico unidimensionale hanno parità definita.

Il calcolo della parità degli autostati è semplice: ricordiamo la scrittura (4.10)

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

per cui, se calcoliamo  $\hat{\mathcal{P}}|n\rangle$  e usiamo  $\hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{\mathcal{P}}^{-1}$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{\mathcal{P}} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \cdots \hat{a}^\dagger |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{\mathcal{P}} \hat{a}^\dagger \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{\mathcal{P}} \hat{a}^\dagger \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{\mathcal{P}} \cdots \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{\mathcal{P}} \hat{a}^\dagger \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{\mathcal{P}} |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{\mathcal{P}} \hat{a}^\dagger \hat{\mathcal{P}}^\dagger)^n \hat{\mathcal{P}} |0\rangle \end{aligned}$$

Lo stato fondamentale è pari: lo si vede semplicemente mandando  $x \rightarrow -x$  in (4.14), oppure ricordando che nel caso di spettro discreto e potenziale che commuta con la parità lo stato fondamentale ha necessariamente funzione d'onda pari e senza nodi. D'altra parte è noto come agisce la parità sugli operatori Impulso e Posizione, per cui si deriva immediatamente che

$$\hat{\mathcal{P}} \hat{a}^\dagger \hat{\mathcal{P}}^\dagger = -\hat{a}^\dagger$$

motivo per cui, in ultima analisi

$$\hat{\mathcal{P}} |n\rangle = (-1)^n |n\rangle$$

#### 4.5.5 \* Quanti di oscillazione

I risultati ottenuti sul sistema dell'oscillatore armonico unidimensionale possono essere interpretati in una prospettiva che a primo impatto può apparire creativa. L'idea sostanziale è che, dato che

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{e} \quad \begin{aligned} \hat{a}^\dagger |n\rangle &\propto |n+1\rangle & \forall n \\ \hat{a} |n\rangle &\propto |n-1\rangle & \text{se } n \neq 0 \\ \hat{a} |0\rangle &= 0 \end{aligned}$$

allora si può interpretare il livello energetico  $n$ -esimo come popolato da  $n$  particelle di energia identica  $\hbar\omega$  (più un termine, detto **energia di vuoto** pari a  $\hbar\omega/2$ ), piuttosto che da una sola particella di energia  $E_n$ . In questa prospettiva, gli operatori di salita e di discesa svolgono il compito di aggiungere e rimuovere particelle dalla popolazione dell'oscillatore, e per questo vengono chiamati

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger &\quad \text{operatore di creazione} \\ \hat{a} &\quad \text{operatore di distruzione} \end{aligned}$$

in quanto "creano" e "distruggono" **quanti di oscillazione**.

D'altra parte, l'operatore  $\hat{N}$  è chiamato **operatore numero**, dal momento che i suoi autovalori sono il numero di quanti di eccitazione dell'oscillatore, infatti, considerato un autostato  $|n\rangle$  dell'hamiltoniano,

$$\hat{N} |n\rangle = \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle = n |n\rangle$$

Se immaginiamo di mettere da parte il termine di energia di vuoto, che è una costante additiva, e poniamo  $\hbar\omega = 1$ , è facile notare come l'operatore numero  $\hat{N}$  costituisca il cuore dell'hamiltoniano dell'oscillatore armonico.

Può sembrare che questa prospettiva non aggiunga nulla alla descrizione, e a questo livello effettivamente è così; tuttavia può risultare comodo, al crescere del numero di dimensioni ragionare in termini di operatori di creazione e distruzione lungo certi assi (o certe combinazioni di assi) per capire "come viene distribuita l'energia". Ci ritorneremo: per adesso, questa rimane un'interpretazione intuitiva.

#### NOTE

- <sup>1</sup>. Naturalmente il discorso è ben più formale di una semplice analogia: rimandiamo a [3] per una discussione sulla quantizzazione dell'hamiltoniana classica in coordinate generalizzate. Anche [5] tratta l'argomento, ma la prospettiva che adotta (postulato di quantizzazione) è stata volontariamente esclusa in questo corso.
- <sup>2</sup>. Ricordiamo infatti che una trasformazione è una simmetria quando l'evoluzione e la trasformazione sono azioni commutative in ogni tempo. Un esempio classico che può aiutare a capire come mai in questo caso non stiamo trattando una simmetria può essere il modello

dell'elettrone in orbita attorno al nucleo: traslare unicamente l'elettrone e lasciar evolvere il sistema è chiaramente un'operazione non coincidente con l'applicazione della traslazione in seguito all'evoluzione del sistema. Una simmetria, invece, è applicare la traslazione sia all'elettrone sia al nucleo: in questo modo, assumendo chiaramente che non intervengano effetti esterni, è garantita la commutatività delle due azioni – il sistema deve evolvere allo stesso modo, ovviamente a meno di una traslazione.

3. La degenerazione degli autovettori di energia ed impulso è *impropria*. Ciò risulta evidente dal fatto che la relazione di dispersione  $E(k)$  non è biunivoca.
4. In tal caso è improprio interpretare la funzione d'onda ed il suo modulo quadro come, rispettivamente, ampiezza e densità di probabilità, in quanto il secondo assioma di Kolmogorov, che concerne appunto la normalizzazione, non è rispettato.
5. Si può vedere bene il motivo di questa naturale proprietà della parte cinetica dell'hamiltoniano con un paragone classico: una particella che si muova in una dimensione con un impulso determinato, avrà identica energia cinetica sia muovendosi "lungo  $x$ " che "lungo  $-x$ ". In un certo senso, poiché nell'hamiltoniano l'impulso compare al quadrato, stiamo naturalmente "pareggiando" il termine cinetico.
6. Si può dimostrare per calcolo diretto:

$$[AB, C] = ABC - CAB = ABC - ACB + ACB - CAB = A[B, C] + [A, C]B$$

7. In realtà, andrebbe bene anche solo  $\hat{a}|\nu\rangle \propto |\nu - 1\rangle$ , in quanto una costante moltiplicativa a destra e a sinistra non cambia le cose. Questo, come si intuisce facilmente, ha a che vedere con la normalizzazione degli stati, e verrà ripreso più avanti.
8. Infatti, derivandola due volte si trova:

$$\frac{d^2u}{dX^2} = (X^2 \pm 1)e^{\pm X^2/2} \approx X^2 e^{\pm X^2/2} = X^2 u$$

## IN BREVE...

- ◊ Per una particella libera nello spazio tridimensionale l'hamiltoniano assume la forma:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \implies H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

Le autofunzioni e lo spettro del problema sono dati da

$$\psi_E(\mathbf{x}, t) = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right) \quad E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

con  $C$  costante di normalizzazione. Lo spettro è continuo (moto non limitato) e doppiamente degenero (l'energia è la stessa per  $|\mathbf{p}|$  e  $-|\mathbf{p}|$ ).

- ◊ Se è presente un potenziale dipendente dalla posizione, la dinamica di una particella di massa  $m$  è regolata dall'hamiltoniano

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

dove  $V(\hat{\mathbf{x}})$  è l'**operatore Potenziale**, esprimibile analiticamente come serie di potenze dell'operatore Posizione  $\hat{\mathbf{x}}$ . L'Eq. di Schrödinger conduce alla seguente equazione differenziale

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x})\right]\psi(\mathbf{x}, t)$$

la cui soluzione regola la dinamica del problema.

- ◊ In presenza di due (o più, con le dovute estensioni al seguente discorso) particelle soggette a un potenziale che dipende unicamente dalla distanza tra esse

$$V(|\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2|)$$

il sistema risulta invariante per traslazioni globali, che lascino quindi invariata la distanza; il generatore della simmetria del problema è l'Impulso totale  $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2$ .

- ◊ La richiesta che la dinamica dei sistemi quantistici sia unitaria, i.e. che ad ogni istante  $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$  abbia integrale su tutto lo spazio unitario, conduce alla definizione della corrente di probabilità  $\mathbf{J}$ . Vale l'**equazione di continuità**:

$$\partial_t|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$$

che esprime la conservazione della probabilità.

- ◊ Per hamiltoniani della forma

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

la corrente di probabilità si scrive come

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

- ◊ L'**operatore Velocità** è l'operatore derivata "rispetto" all'operatore Posizione, e si scrive come

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{x}}]$$

e per hamiltoniani come quello riportato al punto precedente si dimostra che

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}$$

- ◊ Date le autofunzioni  $\psi_E$  riportate al primo punto, la scelta della normalizzazione conduce a due diverse imposizioni su  $C$ :

$$\begin{aligned}\langle \psi_E | \psi_{E'} \rangle &\stackrel{!}{=} \delta(E - E') & \Rightarrow & C = (2\pi\hbar)^{-3/2} \\ |\mathbf{J}| &\stackrel{!}{=} 1 & \Rightarrow & C = \sqrt{m/|\mathbf{p}|}\end{aligned}$$

- ◊ Per sistemi unidimensionali vale il seguente risultato:

**Teorema** (Non degenerazione). *Se l'operatore hamiltoniano di un sistema unidimensionale ammette uno spettro discreto, allora gli autostati sono non degeneri.*

D'altra parte un moto limitato implica uno spettro discreto; ogni volta che il moto è limitato, si ha automaticamente la non-degenerazione. Nella dimostrazione del teorema è possibile richiedere che le funzioni d'onda si annullino all'infinito anche solo da un lato: basta che il moto sia limitato da una parte sola per ottenere uno spettro non degenere.

- ◊ L'**operatore Parità** è definito operativamente come l'operatore che realizza

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \psi(-x) \quad \hat{\mathcal{P}}^2 = \mathbb{1}$$

Per hamiltoniani unidimensionali delle forma

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

vale il risultato

$$[V(\hat{x}), \hat{\mathcal{P}}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{la parità è una simmetria del problema}$$

nel qual caso  $\hat{H}$  e  $\hat{\mathcal{P}}$  devono condividere una base di autostati. Se vale il Teorema di non degenerazione, tutti gli autostati di  $\hat{H}$  hanno parità definita.

- ◊ L'**oscillatore armonico unidimensionale** è un sistema quantistico descritto dall'hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{Q}^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{p}^2 + \hat{q}^2)$$

dove  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$  sono gli operatori Impulso e Posizione riscalati:

$$\hat{p} \equiv \frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar m \omega}} \quad \hat{q} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{Q}$$

Lo spettro si trova algeleticamente definendo gli operatori  $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ :

$$\hat{a} \equiv \frac{\hat{q} + i\hat{p}}{\sqrt{2}} \quad \hat{a}^\dagger \equiv \frac{\hat{q} - i\hat{p}}{\sqrt{2}}$$

e la derivazione si regge sulle relazioni di commutazione tra Impulso e Posizione. Gli autostati e le energie sono parametrizzati da  $n \in \mathbb{N}$ :

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

e si hanno le relazioni:

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

con il risultato  $\hat{\mathcal{P}} |n\rangle = (-1)^n |n\rangle$ . La forma esplicita delle autofunzioni si trova attraverso i **Polinomi di Hermite**, moltiplicati per un termine comune gaussiano (dedotto da argomenti asintotici).

# 5

## SISTEMI INTERAGENTI ED ENTANGLEMENT

Questo capitolo è dedicato a una formalizzazione degli strumenti necessari alla descrizione di sistemi quantistici interagenti, nonché a un primo impatto con fenomeni squisitamente quantistici di entanglement. L'obiettivo è mostrare come la descrizione di un sistema composto da sottosistemi interagenti non possa prescindere da una descrizione delle correlazioni quantistiche tra questi, ossia come la dinamica del sistema globale sia qualcosa di più della “somma” della dinamica dei suoi sottosistemi. Nell'affrontare il problema, ci scontreremo con l'impossibilità di descrivere alcuni stati misti se non attraverso le relative matrici densità, e introdurremo alcune manipolazioni algebriche che permetteranno di mantenere l'informazione entangled pur “dimenticandosi” di parte del sistema in esame.

### 5.1 SISTEMI QUANTISTICI INTERAGENTI

In questa sezione vogliamo porre le basi per una descrizione più generale degli stati quantistici: finora abbiamo avuto a che fare con singoli sistemi isolati, e abbiamo descritto solo gli stati *puri*, che sono solo una sottoclassificazione degli stati che si possono definire in contesti di sottosistemi interagenti o in Meccanica Statistica.

Abbiamo già descritto (Sez. 2.4) cosa significhi, da un punto di vista matematico, considerare un sistema globale  $\mathcal{S}$  come composto da due sottoinsiemi  $\mathcal{S}_1$  e  $\mathcal{S}_2$  non interagenti. Anche per sottosistemi interagenti è possibile costruire una base dello spazio di Hilbert complessivo  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  a partire da due basi complete dei due spazi di Hilbert

$$\{|a_n\rangle\} \subset \mathcal{H}_1 \quad \text{e} \quad \{|b_n\rangle\} \subset \mathcal{H}_2$$

prendendo come base di  $\mathcal{H}$  il prodotto tensore delle basi, in modo da scrivere un generico vettore di  $\mathcal{H}$  come

$$|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} |a_n\rangle \otimes |b_m\rangle \equiv \sum_{n,m} c_{nm} |a_n b_m\rangle$$

Tuttavia, nel caso in cui  $\mathcal{S}_1$  e  $\mathcal{S}_2$  sono interagenti, la scrittura precedente non corrisponde in generale ad uno stato separabile

$$|\psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \tag{5.1}$$

questo è il caso di sistemi *entangled*, in cui la correlazione tra i sottosistemi fa sì che non sia possibile ricostruire lo stato del sistema  $\mathcal{S}$  a partire da una coppia di stati (puri) parziali di  $\mathcal{S}_1$  e  $\mathcal{S}_2$ .

Prima di entrare nel dettaglio di questi sistemi, mostriamo come si comportano in  $\mathcal{H}$  gli operatori associati ad osservabili di uno dei due sottosistemi, per esempio

$$\hat{E}^{(1)} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1 \quad \hat{F}^{(2)} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_2$$

questi possono essere ridefiniti su  $\mathcal{H}$  nel modo più naturale, cioè come

$$\hat{E}^{(1)} = \hat{E}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} \quad \hat{F}^{(2)} = \mathbb{1}^{(1)} \otimes \hat{F}^{(2)}$$

dove con leggero abuso di notazione il membro di sinistra è da pensare come un operatore di  $\mathcal{H}$ . Dunque scriveremo un generico elemento di matrice come

$$\begin{aligned} \langle a_{n'} b_{m'} | \hat{E}^{(1)} \hat{F}^{(2)} | a_n b_m \rangle &= \langle a_{n'} | \langle b_{m'} | \hat{E}^{(1)} \hat{F}^{(2)} | a_n \rangle | b_m \rangle \\ &= \langle a_{n'} | \hat{E}^{(1)} | a_n \rangle \langle b_{m'} | \hat{F}^{(2)} | b_m \rangle \end{aligned}$$

e usando questo risultato, se gli  $|a_n\rangle$  sono una base ortonormale di autostati per  $\hat{A}^{(1)}$  allora preso un generico stato  $|\psi\rangle$  scritto come sovrapposizione degli elementi di base

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A}^{(1)} | \psi \rangle &= \left[ \sum_{n',m'} c_{n'm'}^* \langle a_{n'} b_{m'} | \right] \hat{A}^{(1)} \left[ \sum_{n,m} c_{nm} | a_n b_m \rangle \right] \\ &= \sum_{n,n',m,m'} c_{n',m'}^* c_{nm} \langle a_{n'} b_{m'} | \hat{A}^{(1)} | a_n b_m \rangle \\ &= \sum_{n,n',m,m'} c_{n',m'}^* c_{nm} \langle a_{n'} | \hat{A}^{(1)} | a_n \rangle \langle b_{m'} | \mathbb{1}^{(2)} | b_m \rangle \\ &= \sum_{n,n',m,m'} c_{n',m'}^* c_{nm} a_n \delta_{n,n'} \delta_{m,m'} = \sum_{n,m} |c_{nm}|^2 a_n \end{aligned}$$

### 5.1.1 Esempio: due sistemi a due livelli

Per fare un esempio di sistemi correlati e potenzialmente interagenti, possiamo considerare un sistema a due *qubit*, o particelle di spin 1/2, analizzati in dettaglio in Sez. 8.1.3 e in Parte II, Sez. 1. Molti dei dettagli ivi descritti sono qui inessenziali: ci importa ricordare che lo spazio di Hilbert di singola particella (di singolo *qubit*) è bidimensionale, e generato dalla base ortonormale  $\{| \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle\}$ . Procedendo come descritto all'inizio di questa sezione, è immediato trovare una base per il sistema globale

$$\{| \uparrow\uparrow \rangle, | \uparrow\downarrow \rangle, | \downarrow\uparrow \rangle, | \downarrow\downarrow \rangle\}$$

dove la prima e la seconda freccia si riferiscono rispettivamente al primo e al secondo *qubit*. Uno stato come

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow\uparrow \rangle + | \downarrow\uparrow \rangle)$$

è separabile, poiché si può scrivere (sfruttando la linearità) come

$$|\psi\rangle = \left[ \frac{| \uparrow \rangle + | \downarrow \rangle}{\sqrt{2}} \right] \otimes | \uparrow \rangle$$

cioè è della forma  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ , mentre al contrario lo stato

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow\downarrow \rangle - | \downarrow\uparrow \rangle)$$

non è separabile, ma *entangled*.

### 5.1.2 Operatori di stato e miscele statistiche

Abbiamo già definito cos'è un **operatore di stato**  $\rho$ : per stati puri  $|\psi\rangle$  è sostanzialmente un proiettore

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

in corrispondenza biunivoca con gli stati (visti come raggi dello spazio di Hilbert). Per stati puri, gli operatori di stato hanno le seguenti proprietà:

- $\text{Tr } \rho = \text{Tr } |\psi\rangle\langle\psi| = 1$ ;
- sono autoaggiunti, cioè  $\rho^\dagger = \rho$ ;
- sono idempotenti, i.e.  $\rho^2 = \rho$ :

$$\rho^2 = |\psi\rangle \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{\text{norm.}} \langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi|$$

Questo risultato, oltre a essere **una prerogativa degli stati puri**, ha un'implicazione apparentemente banale ma che risulterà importante nel seguito:

$$\text{Tr } \rho^2 = \text{Tr } \rho = 1$$

Consideriamo adesso un sistema isolato  $S$  dato dall'unione di un sottosistema  $S_1$  ed il suo complementare  $S_2$ . In generale l'evoluzione temporale sarà data da un operatore hamiltoniano della forma

$$\hat{H}_S = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_{12}$$

composto cioè da una parte dipendente separatamente da ciascuno dei singoli sottosistemi e da una parte di interazione.

Possiamo adesso introdurre euristicamente il concetto di **stato misto**, detto anche **miscela statistica**. Immaginiamo di lavorare coi soliti sottosistemi  $S_1, S_2$  di un comune spazio di Hilbert la cui base è, come sempre, il prodotto tensore delle due basi, e di "estrarre" il sottosistema  $S_1$  all'istante  $t = 0$  e renderlo istantaneamente isolato. Consideriamo un operatore

$$\hat{O}: \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$$

associato ad una variabile dinamica di tale sottosistema  $S_1$ , che adesso coincide con il nuovo sistema fisico in esame. Esso sarà associato, come sappiamo, ad una distribuzione di probabilità, e conoscendo lo stato  $|\psi_1\rangle$  del sistema  $S_1$  potremmo calcolare il valore atteso per  $O$

$$\langle O \rangle = \langle \psi_1 | \hat{O} | \psi_1 \rangle$$

Tuttavia, se lo stato del sistema a  $t < 0$  non era separabile, nel senso di Eq. (5.1), data la nostra attuale ignoranza (per  $t \geq 0$ ) sul sistema  $S_2$  (in sostanza lo spazio  $\mathcal{H}_2$  è a noi inaccessibile), possiamo al massimo attribuire una probabilità al fatto che il sistema  $S_1$  occupi uno degli stati dell'insieme

$\{|n\rangle\}$ . Dunque scriviamo il valor medio di  $O$  come una *media pesata di valori medi*

$$\langle O \rangle = \sum_n w_n \langle n | \hat{O} | n \rangle \quad (5.2)$$

dove il peso è una probabilità

$$w_n = \mathcal{P}(\text{il sistema } \mathcal{S}_1 \text{ è nello stato } |n\rangle)$$

e deve verificare le condizioni

$$0 \leq w_n < 1 \quad \text{e} \quad \sum_n w_n = 1$$

Fermiamoci un attimo e spieghiamo meglio questa scrittura: stiamo affermando che quando computiamo il valor medio di un osservabile  $O$  lavorando solamente sul primo sottosistema, non calcoliamo “il valore atteso dell’operatore sullo stato  $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$ ”, ma sommiamo con pesi relativi i valori attesi dell’osservabile su molti stati  $|n\rangle \in \mathcal{H}_1$ . Il motivo è che la nozione di “trovarsi in uno stato di  $\mathcal{H}_1$ ” risulta mal definita in questo contesto, perché l’attuale stato *entangled* in cui il sistema  $\mathcal{S}_1$  si trova **non è affatto indipendente dallo stato del sistema complementare**. Con un esempio concreto l’intero discorso può apparire più chiaro: supponiamo di partire dallo stato *entangled*

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

e di separare i due sistemi al tempo  $t$ . Se adesso volessimo calcolare come al solito il valore di aspettazione dell’osservabile, non potremmo esprimere lo stato in cui ci troviamo come una somma di stati del solo primo sottospazio. Come procediamo?

Per esporre la questione in modo informale e euristico, all’atto del calcolo dobbiamo tenere in considerazione sia la possibilità che il sistema sia  $\uparrow$  che  $\downarrow$ , proprio perché **non stiamo calcolando il valore atteso su uno stato definito ma su uno stato entangled** e di conseguenza al calcolo del valor medio dobbiamo tenere in conto sia il peso relativo della configurazione  $\uparrow$  che quello della configurazione  $\downarrow$ .<sup>1</sup>

Questo discorso può ancora apparire oscuro: cambiamo approccio, e ragioniamo in termini statistici di *ensembles*<sup>2</sup>: supponiamo di avere  $N$  copie del nostro sistema quantistico, di cui  $N_\psi$  nello stato  $|\psi\rangle$  e  $N_\phi$  nello stato  $|\phi\rangle$ , con  $N = N_\psi + N_\phi$ . Possiamo ad esempio immaginare di star lavorando con un gas di particelle tra lo stato fondamentale e il primo stato eccitato. Nel momento in cui vogliamo eseguire una misura di un osservabile  $\hat{O}$  **sull’intero sistema**, i.e. su ogni copia dell’ensemble – o se vogliamo su ogni particella del gas – dobbiamo tenere conto del fatto che, oltre alla statistica associata all’osservabile misurato sul singolo stato, conterà anche la statistica associata al fatto che non tutte le copie sono nello stesso stato. In altri termini di più immediata comprensione: estraendo una copia a caso dall’ensemble, le probabilità che sia in uno stato  $|\psi\rangle$  o  $|\phi\rangle$  sono banalmente date da

$$w_\psi = \frac{N_\psi}{N} \quad w_\phi = \frac{N_\phi}{N}$$

Siano adesso  $p_i^{(\psi)}$ ,  $p_i^{(\phi)}$  le probabilità (date dalla *regola di Born*) di misurare l'osservabile nel suo autovalore  $O_i$  rispettivamente sullo stato  $|\psi\rangle$  e  $|\phi\rangle$ : ne segue che **complessivamente** la probabilità  $p_i$  di misurare  $O_i$  sarà data dalla somma delle probabilità di misurarlo su  $|\psi\rangle$  e su  $|\phi\rangle$ , tenendo conto della probabilità di estrazione di ciascuno dei due stati:

$$p_i = w_\psi p_i^{(\psi)} + w_\phi p_i^{(\phi)}$$

per cui la statistica associata all'osservabile  $O$  è data da

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \sum_i O_i p_i \\ &= \sum_i O_i w_\psi p_i^{(\psi)} + \sum_i O_i w_\phi p_i^{(\phi)} \\ &= w_\psi \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle + w_\phi \langle \phi | \hat{O} | \phi \rangle \end{aligned}$$

dove riconosciamo la scrittura introdotta in precedenza.

Ora: come si connette questo discorso, facilmente interpretabile nel caso e.g. di un gas, a un sistema fisico *entangled*?

La risposta è che noi trattiamo sempre i sistemi quantistici come *ensembles*, e quando computiamo i valori medi stiamo immaginando di avere un gran numero di copie dello stesso sistema e di prenderne la statistica sulle misure. Prendiamo come esempio il solito stato

$$\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

per due sistemi a due livelli in interazione. Se ci restringiamo a guardare solamente il sistema  $S_1$ , abbiamo una probabilità del 50% di estrarre uno stato  $\uparrow$  e del 50% di estrarlo  $\downarrow$  (rimandiamo alla Sez. 5.1.4 per una importante precisazione sul significato di questa affermazione). Quindi, il calcolo esposto appena sopra può essere eseguito in modo esattamente identico a sopra:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{2} \langle \uparrow | \hat{O} | \uparrow \rangle + \frac{1}{2} \langle \downarrow | \hat{O} | \downarrow \rangle$$

Concludiamo questa sezione con una breve discussione su quali siano le  $w_i$ : per un sistema semplice come l'ultimo esposto si possono dedurre banalmente dalla scrittura dello stato entangled nello spazio di Hilbert globale, ma in contesto applicativo reale quasi sempre di deve fare i conti con una certa dose di ignoranza sul sistema. Ad esempio, per un gas di  $N \sim N_{AV}$  particelle, sarà impossibile scrivere lo stato di una di queste: in questi casi dovremo dedurre le  $w_i$  a partire da informazioni di tipo statistico (e.g. per un gas di bosoni dalla Distribuzione di Bose-Einstein, per un gas di fermioni da quella di Fermi-Dirac...). In questo senso, in Meccanica Statistica (ma anche per sottosistemi interagenti con l'interpretazione degli *ensembles*) le  $w_i$  sono interpretabili come probabilità **classiche**, legate alla nostra ignoranza su quale stato ciascuna particella occupi. L'informazione fondamentale di tutta questa derivazione è la seguente: *per sistemi quantistici composti da sottosistemi interagenti, il valore di aspettazione di un osservabile non si calcola sul singolo stato del sottosistema ma pesando tutti gli stati in cui il sottosistema potrebbe trovarsi considerando l'interazione col resto del sistema*.

### 5.1.3 La matrice densità

Adesso siamo pronti a definire e caratterizzare l'**operatore di stato** nella veste di **matrice densità**. In particolare usando la relazione di completezza per due basi complete  $\{|i\rangle\}$  e  $\{|j\rangle\}$ , possiamo scrivere

$$\begin{aligned}\langle O \rangle &= \sum_n w_n \langle n | \hat{O} | n \rangle = \sum_n w_n \sum_{i,j} \langle n | j \rangle \langle j | \hat{O} | i \rangle \langle i | n \rangle \\ &= \sum_{n,i,j} w_n \langle i | n \rangle \hat{O}_{ji} \langle n | j \rangle\end{aligned}\quad (5.3)$$

ma se adesso definiamo un operatore, detto **matrice densità**:

$$\rho \equiv \sum_n w_n |n\rangle\langle n| \quad (5.4)$$

ossia se definiamo un suo elemento di matrice  $\rho_{ij} = \langle i | \rho | j \rangle$  come

$$\rho_{ij} = \sum_n w_n \langle i | n \rangle \langle n | j \rangle$$

allora, usando la definizione di traccia e di prodotto riga per colonna

$$\text{Tr } \rho \hat{O} = \sum_i (\rho \hat{O})_{ii} = \sum_{i,j} \rho_{ij} \hat{O}_{ji}$$

ma inserendo in quest'ultima espressione la nostra definizione di  $\rho_{ij}$ , e confrontando il risultato con l'Eq. (5.3) si conclude che

$$\langle O \rangle = \text{Tr } \rho \hat{O} \quad (5.5)$$

che è la versione più completa, **valida in generale**, dell'Assioma 3 che abbiamo usato per costruire la teoria. Conviene sottolineare il fatto che questa equazione è **sempre applicabile**, indipendentemente dal fatto che lo stato su cui operiamo sia misto o puro.

Mettiamo in evidenza alcune proprietà della matrice densità:

- $\text{Tr } \rho = 1$ . Infatti usando la nostra definizione per l'elemento  $\rho_{ii}$

$$\begin{aligned}\text{Tr } \rho &= \sum_i \rho_{ii} = \sum_i \sum_n w_n \langle i | n \rangle \langle n | i \rangle \\ &= \sum_n w_n \sum_i \langle n | i \rangle \langle i | n \rangle \\ &= \sum_n w_n \langle n | n \rangle \\ &= \sum_n w_n = 1\end{aligned}$$

dove abbiamo usato la relazione di completezza per la base  $\{|i\rangle\}$  e il fatto che  $\langle n | n \rangle = 1$ .

- $\rho = \rho^\dagger$ : questo è evidente dalla definizione di  $\rho$ , ricordando in particolare che  $w_n \in \mathbb{R}$ , essendo delle probabilità.

- A differenza del caso particolare di stati puri, la quantità  $\text{Tr } \rho^2$  vale

$$\begin{aligned}\text{Tr } \rho^2 &= \text{Tr} \left( \sum_n w_n |n\rangle\langle n| \sum_m w_m |m\rangle\langle m| \right) \\ &= \text{Tr} \left( \sum_{n,m} w_n |n\rangle \delta_{nm} w_m \langle m| \right) \\ &= \text{Tr} \left( \sum_n w_n^2 |n\rangle\langle n| \right) \\ &= \sum_i \sum_n w_n^2 \langle i|n\rangle\langle n|i\rangle = \sum_n w_n^2\end{aligned}$$

dove abbiamo usato la definizione di traccia usando la base degli  $|i\rangle$ , mentre dal penultimo all'ultimo passaggio i calcoli sono identici a quelli per  $\text{Tr } \rho$ , con la sostituzione  $w_n \rightarrow w_n^2$ .

Osserviamo che per proprietà dei numeri reali, poiché i  $w_n$  sono minori o uguali a 1 e sommano a 1 (dunque  $w_n^2 \leq w_n$ ):

$$\sum_n w_n^2 \leq 1$$

mentre

$$\sum_n w_n^2 = 1 \iff w_n = \delta_{kn} \text{ per un certo } k$$

cioè in generale

$$\text{Tr } \rho^2 \leq 1 \quad (5.6)$$

e l'uguaglianza vale solo per stati puri (che corrispondono al caso in cui la somma ha un solo termine, e.g.  $w_k = 1$ ).

Dunque abbiamo trovato un modo operativo per distinguere gli stati puri dagli stati misti: più avanti legheremo il valore di  $\text{Tr } \rho^2$  alla cosiddetta *entropia di entanglement*.

- Vale, per un arbitrario stato  $|\psi\rangle$

$$\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$$

Infatti questa condizione è equivalente alla positività dei pesi probabilistici  $w_n$ , in quanto usando la definizione in (5.4):

$$\langle \psi | \rho | \psi \rangle = \sum_n w_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_n w_n |\langle n | \psi \rangle|^2 \geq 0$$

in particolare è legittimo considerare questa scrittura per  $\rho$  perché si può dimostrare che l'operatore di stato di qualunque stato misto può essere scritto come in (5.4) per degli opportuni stati puri  $\{|n\rangle\}$ .<sup>3</sup>

#### 5.1.4 \* Stati misti e sovrapposizione di stati

Vogliamo adesso specificare in modo chiaro la differenza tra uno stato puro, formato da una sovrapposizione di stati, e uno stato non puro (o miscela

statistica). Supponiamo che un sistema a due livelli si trovi nello stato  $|\psi\rangle$ , con

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$$

Bisogna prestare particolare attenzione al fatto che lo stato  $|\psi\rangle$  è puro: altrimenti non sarebbe stato possibile scriverlo come una combinazione lineare di *ket*. Inoltre, questo **non** indica affatto una situazione in cui lo stato è nel 50% dei casi  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  nell'altro 50%. C'è anzi una probabilità pari allo 0% che lo stato sia  $|\uparrow\rangle$  o  $|\downarrow\rangle$ , ed una del 100% che sia  $|\psi\rangle$ , cioè una sovrapposizione dei due: ne abbiamo la certezza. Il punto centrale è che questa affermazione si riferisce ad un momento collocato **prima** di ogni processo di misura. È corretto asserire che, se il sistema è in questo stato, effettuando una misura dell'osservabile "up o down" c'è il 50% di probabilità che l'esito della misura sia l'autovalore relativo a  $|\uparrow\rangle$  e il 50% che sia l'autovalore di  $|\downarrow\rangle$ .

Al contrario, la situazione precedentemente descritta, in cui il sistema si trova nello stato  $|\uparrow\rangle$  o in  $|\downarrow\rangle$  in modo equiprobabile, corrisponde ad uno stato che non è puro, ma costituisce un esempio di miscela statistica, scrivibile tramite l'operatore di stato  $\rho_{\text{mix}}$

$$\rho_{\text{mix}} = \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|)$$

che, nella base  $\mathcal{B} = \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ , si scrive come matrice densità

$$\rho_{\text{mix}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Non abbiamo una sovrapposizione, bensì una genuina incertezza sullo stato del sistema.

La matrice densità relativa allo stato puro  $|\psi\rangle$ , che chiameremo invece  $\rho_{\text{pure}} = |\psi\rangle\langle\psi|$ , è

$$\rho_{\text{pure}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

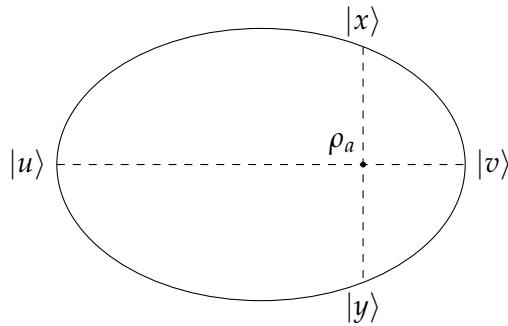
ovviamente nella base  $\mathcal{B}$ . Se adesso eseguiamo un cambiamento di base ed utilizziamo il set  $\mathcal{B}' = \{|+\rangle, |-\rangle\}$ , con

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$$

possiamo facilmente renderci conto del fatto che la matrice densità  $\rho_{\text{pure}}$  si scrive come

$$\rho_{\text{pure}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

in quanto  $|\psi\rangle = |+\rangle$ . Possiamo in generale affermare che gli stati puri corrispondono a proiettori di rango 1, mentre le matrici densità di rango superiore sono relative a stati misti. Se è vero che, in seguito ad una misura di "up o down", i due stati si comportano in maniera identica, non possiamo tuttavia dire che siano uguali, poiché sono distinguibili in questo modo: basta sottoporre il nostro sistema ad una misura di "+" o "-" (se il sistema è uno spin 1/2 e la base iniziale è di autostati di  $\sigma_z$ , allora  $|\pm\rangle$  sono gli autostati di  $\sigma_x$ ). Se esso è nello stato  $|\psi\rangle = |+\rangle$  allora l'apparato di misura darà il risultato + nel 100% dei casi, invece se lo stato del sistema è quello di  $\rho_{\text{mix}}$ , allora in metà dei casi leggeremo + e nell'altra metà -.



**Figura 5.1:** Illustrazione della scrittura degli stati misti come combinazioni di diversi stati puri. Argomento tratto da [1].

### 5.1.5 \* Non univocità della scrittura degli stati misti

Un'altra osservazione necessaria riguardante la scrittura degli stati misti riguarda il fatto che la scrittura di una matrice densità come combinazione convessa (i.e.  $0 \leq w_n \leq 1$ ,  $\sum w_n = 1$ ) di proiettori su stati puri

$$\rho = \sum w_n |n\rangle\langle n|$$

**non è univoca**, e pertanto soprattutto in contesti di *entanglement* la nozione enunciata all'inizio di questa sezione con

$$w_n = \mathcal{P}(\text{il sistema } \mathcal{S}_1 \text{ è nello stato } |n\rangle)$$

che è un modo utile di intuire uno stato misto, non è perfettamente definita.

Consideriamo un esempio. Dati degli stati puri  $\{|u\rangle, |v\rangle\} \in \mathcal{H}$  ortogonali, lo stato misto

$$\rho_a = \frac{1}{4} |u\rangle\langle u| + \frac{3}{4} |v\rangle\langle v|$$

può essere riscritto in termini di due altri stati puri

$$|x\rangle = \frac{1}{2} |u\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} |v\rangle \quad |y\rangle = \frac{1}{2} |u\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2} |v\rangle$$

e risulta

$$\rho_a = \frac{1}{2} |x\rangle\langle x| + \frac{1}{2} |y\rangle\langle y|$$

come si può verificare per calcolo diretto, e analogamente si possono variare i coefficienti per ottenere un continuo di coppie diverse di stati che danno luogo a  $\rho_a$ . Questa riscrittura è illustrata schematicamente in Fig. 5.1. Possiamo immaginare che, in questo esempio bidimensionale, gli stati puri siano sul bordo della figura, mentre gli stati misti si trovano all'interno. Infatti se pittoricamente al posto degli stati puri avessimo dei punti su un piano ( $\mathbb{R}^2$ ), una combinazione lineare convessa rappresenterebbe un punto intermedio alla congiungente tra i due stati e spostato maggiormente verso quello con coefficiente maggiore. In generale, vale il seguente

**Teorema.** *La matrice densità di uno stato misto può sempre essere espressa come combinazione convessa di proiettori,  $\rho = \sum w_n |n\rangle\langle n|$  in infiniti modi diversi, mentre per uno stato puro la somma è composta da solo un termine.*

## 5.2 MATRICE DENSITÀ RIDOTTA PER UN SOTTOSISTEMA QUANTISTICO

In Fisica non sempre è di nostro interesse – spesso è proprio impossibile – eseguire misure, i.e. conoscere “quantisticamente”, l’interessa di un sistema quantistico costituito da più sottosistemi interagenti. In questa sezione ci occupiamo di formalizzare il problema analizzando il semplice caso, con estensione diretta, di due sottosistemi interagenti.

Supponiamo di avere due sistemi  $\mathcal{S}_1$  e  $\mathcal{S}_2$ , i.e. due spazi di Hilbert  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ , ciascuno descritto dalla propria hamiltoniana e dotato di una base ortonormale formata dagli autostati di tale hamiltoniana

$$\mathcal{S}_1: \hat{H}_1, \mathcal{B}_1 = \{|a_n\rangle\} \quad \mathcal{S}_2: \hat{H}_2, \mathcal{B}_2 = \{|b_m\rangle\}$$

Sappiamo già che, dato lo spazio prodotto

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

una buona base è data da  $\mathcal{B} \equiv \mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_2$ , indipendentemente dal fatto che i sistemi siano interagenti e persino dalla natura delle due basi  $\mathcal{B}_1, \mathcal{B}_2$ , che possono essere indipendentemente discrete, continue, ecc. La base  $\mathcal{B}$  sarà dunque formata da **tutti i possibili prodotti** (tensori) degli autostati delle hamiltoniane, ma questo chiaramente non implica che gli autostati dell’hamiltoniana globale  $\hat{H}$  siano parte di  $\mathcal{B}$ .

Infatti, per quanto la base  $\mathcal{B}$  sia effettivamente **descrittiva** di tutto lo spazio  $\mathcal{H}$  (i.e.  $\mathcal{B}$  genera, nel senso dell’algebra lineare, tutte le possibili coppie di stati in cui i due sistemi possono trovarsi), essa è connessa alle due parti separabili dell’hamiltoniana globale  $\hat{H}$ , che – come già esposto nella sezione precedente – contiene invece per definizione di sistemi interagenti dei termini di interazione:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_{12}$$

con ovvio significato dei simboli. Di conseguenza, un generico autostato di  $\hat{H}$  si scriverà come

$$|\phi_k\rangle = \sum_{n,m} c_{nm}^{(k)} |a_n b_m\rangle$$

che risulterà in generale non separabile.

Consideriamo un generico operatore  $\hat{O} = \hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(2)}$ : volendo calcolare il suo valore di aspettazione su un generico stato  $|\psi\rangle$  di  $\mathcal{H}$ :

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle &= \text{Tr} \left( \rho \hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(2)} \right) \\ &= \sum_{n,m} \langle a_n b_m | \rho \hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(2)} | a_n b_m \rangle \\ &= \sum_{n,m} \sum_{n',m'} \langle a_n b_m | \rho | a_{n'} b_{m'} \rangle \langle a_{n'} b_{m'} | \hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(2)} | a_n b_m \rangle \\ &= \sum_{n,m} \sum_{n',m'} \langle a_n b_m | \rho | a_{n'} b_{m'} \rangle \langle a_{n'} | \hat{A}^{(1)} | a_n \rangle \langle b_{m'} | \hat{B}^{(2)} | b_m \rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo sfruttato la relazione di completezza associata alla base  $\mathcal{B}$  e fatto agire indipendentemente gli operatori sui relativi spazi. Ricordiamo inoltre che, se  $|\psi\rangle$  è uno stato puro,  $\rho \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$ . In questa sommatoria

compaiono quattro indici:  $n, n', m, m'$ ; d'altronde, sappiamo dalla sezione precedente che il calcolo del valore di aspettazione dell'operatore

$$\hat{A}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}$$

sullo stato  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  porta a:

$$\langle \psi | \hat{A}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} | \psi \rangle = \cdots = \sum_{n, n', m} c_{n'm}^* c_{nm} \langle a_{n'} | \hat{A}^{(1)} | a_n \rangle$$

Possiamo quindi immaginare che gli indici  $m, m'$  debbano contrarre, quando l'operatore che agisce sullo spazio  $\mathcal{H}_2$  è banale. Sostituendo  $\hat{B}^{(2)} \rightarrow \mathbb{1}^{(2)}$  e sfruttando l'ortonormalità della base  $|b_m\rangle$  si trova

$$\langle \psi | \hat{A}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} | \psi \rangle = \sum_{n, n', m} \langle a_n b_m | \rho | a_{n'} b_m \rangle \langle a_{n'} | \hat{A}^{(1)} | a_n \rangle \quad (5.7)$$

Ma se definiamo il seguente operatore, mediante un suo elemento di matrice:

$$\rho_{n'n}^{(1)} \equiv \sum_m \langle a_n b_m | \rho | a_{n'} b_m \rangle$$

(facciamo notare che la somma è sulla base del sistema 2, ossia su  $m$ ) allora l'Eq. (5.7) si può riscrivere come

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} | \psi \rangle &= \sum_{n, n'} \left( \sum_m \langle a_n b_m | \rho | a_{n'} b_m \rangle \right) \langle a_{n'} | \hat{A}^{(1)} | a_n \rangle \\ &= \sum_{n, n'} \rho_{n'n}^{(1)} \hat{A}_{n'n}^{(1)} \\ &= \sum_n (\rho^{(1)} \hat{A}^{(1)})_{nn} \end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo notato che la somma sull'indice muto  $n'$  descrive un prodotto riga per colonna. Dunque la precedente espressione corrisponde ad una somma sugli elementi di matrice diagonali del sistema  $\mathcal{S}_1$ : scriveremo allora

$$\langle \psi | \hat{A}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} | \psi \rangle = \text{Tr} \rho \hat{A}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} = \text{Tr}_1 \rho^{(1)} \hat{A}^{(1)}$$

dove il pedice 1 indica che questa è una **traccia parziale**, i.e. una contrazione limitata allo spazio  $\mathcal{H}_1$ . Abbiamo quindi definito un nuovo oggetto  $\rho^{(1)}$ , che caratterizzeremo più avanti e chiameremo, non a caso, **matrice densità ridotta del sistema  $\mathcal{S}_1$** . L'operatore  $\rho^{(1)}$  è definito per mezzo dei suoi elementi di matrice:

$$\rho_{nn'}^{(1)} \equiv \langle n | \rho^{(1)} | n' \rangle = \sum_m \langle a_n b_m | \rho | a_{n'} b_m \rangle$$

**COSA CAMBIA TRA TRACCIA E TRACCIA PARZIALE?** Quando guardiamo che differenza ci sia tra computare una traccia e una traccia parziale, dobbiamo ricordare cosa si intende nel nostro formalismo per traccia: data una base  $\{|i\rangle\}$  e un operatore  $M$ , si ha in generale

$$\text{Tr } M = \sum_i \langle i | M | i \rangle$$

Ora: nel nostro contesto, la base è data da

$$\mathcal{B} = \left\{ \begin{array}{cccc} |a_1 b_1\rangle & |a_1 b_2\rangle & |a_1 b_3\rangle & \dots \\ |a_2 b_1\rangle & |a_2 b_2\rangle & & \\ |a_3 b_1\rangle & & & \\ \vdots & & & \ddots \end{array} \right\}$$

In questo caso,  $|i\rangle = |a_h b_k\rangle$  per qualche  $h, k$ . La traccia “totale” somma su tutti gli elementi diagonali di matrice. Quando eseguiamo una traccia parziale, stiamo fissando uno tra  $h$  e  $k$  e sommando sugli elementi diagonali variando l’altro indice. In questo senso, la traccia parziale equivale a una somma su una sola delle righe (o delle colonne) della base  $\mathcal{B}$ , qui rappresentata come matrice. Partiamo dalla matrice  $(n \cdot m) \times (n \cdot m)$  relativa a  $\rho$ , con  $n, m$  numero di stati di base del sistema 1 e 2 rispettivamente. Se eseguiamo la traccia totale, otteniamo un numero in  $\mathbb{C}$ , mentre con la traccia parziale  $\text{Tr}_1 (\text{Tr}_2)$ , siccome stiamo lasciando liberi gli indici  $k (h)$ , abbiamo come risultato un operatore  $\rho^{(2)} (\rho^{(1)})$  la cui matrice è di dimensioni  $m \times m$  ( $n \times n$ ) e che lavora in modo non banale sullo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}_2 (\mathcal{H}_1)$ . Volendo fare un paragone improprio ma che può chiarire le idee, l’operazione può ricordare l’integrazione di una distribuzione multivariata su una sola delle due variabili, operazione che permette di studiare il comportamento della distribuzione “dimenticandosi” della variabile su cui si è integrato.

La matrice densità ridotta  $\rho_{nm}^{(1)}$  è la rappresentazione nella base **dello spazio  $\mathcal{H}_1$**  del nuovo oggetto che abbiamo introdotto: si può euristicamente interpretare come una riduzione della matrice densità. Dimostriamo ora che effettivamente  $\text{Tr}_1 \rho^{(1)} \hat{A}^{(1)} = \text{Tr} \rho \hat{O}$ .

*Dimostrazione.* Calcoliamo direttamente:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_1 \rho^{(1)} \hat{A}^{(1)} &= \sum_n \left( \rho^{(1)} \hat{A}^{(1)} \right)_n \\ &= \sum_n \sum_k \rho_{nk}^{(1)} A_{kn}^{(1)} \\ &= \sum_{n,k} \left( \sum_m \langle a_n b_m | \rho | a_k b_m \rangle \right) \langle a_k | \hat{A}^{(1)} | a_n \rangle \\ &= \sum_{n,n',m} \langle a_n b_m | \rho | a_{n'} b_m \rangle \langle a_{n'} | \hat{A}^{(1)} | a_n \rangle \end{aligned}$$

dove nell’ultimo passaggio abbiamo rinominato  $k \rightarrow n'$ , azione legittima perché gli indici interni sono muti. Nell’ultimo passaggio ritroviamo esattamente la forma trovata prima per  $\text{Tr} \rho \hat{O}$ , con  $\hat{O} = \hat{A}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}$ .  $\square$

Soffermiamoci su quanto trovato: per un generico operatore  $\hat{O}$  nello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ , sappiamo che

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr} \rho \hat{O}$$

mentre, quando l’operatore agisce in modo banale su una parte dello spazio – come nel caso di  $\hat{A}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)}$  – il valore di aspettazione di tale operatore su uno stato **relativo allo spazio globale** è dato da

$$\langle \hat{O} = \hat{A}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} \rangle = \text{Tr}_1 \rho^{(1)} \hat{A}^{(1)}$$

La somiglianza è evidente. In modo assolutamente euristico e informale, possiamo dire che l'operazione di traccia parziale accoppiata con la matrice densità ridotta  $\rho^{(1)}$  permetta di calcolare il valore di aspettazione sul sottosistema di interesse "come se fosse disaccoppiato", **limitatamente al caso di operatori che si comportano in modo non banale soltanto in uno dei due sottosistemi.**

Notiamo che nella definizione di  $\rho^{(1)}$  c'è una somma su  $m$ : questa può essere contratta in una traccia sullo spazio  $\mathcal{H}_2$ , ossia

$$\rho_{nn'}^{(1)} = \sum_m \langle a_n b_m | \rho | a_{n'} b_m \rangle = (\text{Tr}_2 \rho)_{nn'}$$

che, ricordiamo, è un operatore.

Ricapitolando, un qualsiasi valore di aspettazione sugli stati di  $\mathcal{H}$  relativo a un operatore banale su parte dello spazio può essere calcolato a partire dalla matrice densità relativa allo stato, tracciata sullo spazio "banale".

### 5.2.1 Proprietà della matrice densità "ridotta"

Sulla scia della sezione precedente, dimostriamo alcune proprietà della matrice  $\rho^{(1)}$ :

- $\text{Tr} \rho^{(1)} = 1$ : infatti, per calcolo diretto

$$\text{Tr} \rho^{(1)} = \sum_n \rho_{nn}^{(1)} = \sum_{n,m} \langle a_n b_m | \rho | a_n b_m \rangle = \text{Tr} \rho = 1$$

- $\rho^{(1)} = (\rho^{(1)})^\dagger$ : anche questa proprietà si verifica immediatamente ricordando che  $\rho = \rho^\dagger$

$$\begin{aligned} \rho_{ij}^{(1)} &= \sum_m \langle a_i b_m | \rho | a_j b_m \rangle \\ &= \sum_m \langle a_j b_m | \rho^\dagger | a_i b_m \rangle^* \\ &= \left( \sum_m \langle a_j b_m | \rho | a_i b_m \rangle \right)^* = (\rho_{ji}^{(1)})^* \end{aligned}$$

- Dato un generico  $u^{(1)} \in \mathcal{H}_1$ , si ha

$$\langle u^{(1)} | \rho^{(1)} | u^{(1)} \rangle \geq 0 \quad \text{con } |u^{(1)}\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle$$

Infatti si può ragionare nel modo seguente: preso un generico  $|b_m\rangle \in \mathcal{B}_2$  (base dello spazio 2), definiamo

$$|\psi_m\rangle \equiv |u^{(1)}\rangle \otimes |b_m\rangle = |u^{(1)} b_m\rangle$$

Ricordando che la matrice densità totale  $\rho$  è semidefinita positiva su qualsiasi stato  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ :

$$\langle \psi_m | \rho | \psi_m \rangle \geq 0 \Rightarrow \langle u^{(1)} b_m | \rho | u^{(1)} b_m \rangle \geq 0$$

Se questo è vero per ogni scelta di  $|b_m\rangle$ , allora vale:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \sum_m \langle u^{(1)} b_m | \rho | u^{(1)} b_m \rangle \\ &= \sum_m \sum_n c_n^* \langle a_n b_m | \rho \sum_k c_k | a_k b_m \rangle \\ &= \sum_{nk} c_n^* c_k \underbrace{\sum_m \langle a_n b_m | \rho | a_k b_m \rangle}_{\rho_{nk}^{(1)}} \\ &= \sum_{nk} c_n^* \rho_{nk}^{(1)} c_k = \langle u^{(1)} | \rho^{(1)} | u^{(1)} \rangle \end{aligned}$$

usando il fatto che

$$\rho_{nk}^{(1)} = \langle a_n | \rho^{(1)} | a_k \rangle$$

La tesi è così dimostrata.

- $0 \leq \text{Tr} (\rho^{(1)})^2 \leq 1$

La cosa più facile risulta dimostrare che  $\text{Tr} (\rho^{(1)})^2 \geq 0$ , infatti basta scrivere

$$\begin{aligned} \text{Tr} (\rho^{(1)})^2 &= \sum_{nk} \rho_{nk}^{(1)} \rho_{kn}^{(1)} \\ &= \sum_{nk} \sum_{ml} \langle a_n b_m | \rho | a_k b_m \rangle \langle a_k b_l | \rho | a_n b_l \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

dal momento che  $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$  per ogni  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ .

Il limite superiore può essere dedotto a partire dalle prime tre proprietà di questa sezione. Poiché  $\rho^{(1)}$  è autoaggiunta, essa ammette un *set* completo di autovettori ortonormali con autovalori reali

$$\rho^{(1)} |n^{(1)}\rangle = \lambda_n |n^{(1)}\rangle \quad \text{con} \quad \lambda_n \in \mathbb{R}, \quad |n^{(1)}\rangle \in \mathcal{H}_1$$

e una relativa decomposizione spettrale

$$\rho^{(1)} = \sum_n \lambda_n |n^{(1)}\rangle \langle n^{(1)}|$$

Ma essendo semidefinita positiva,

$$\lambda_n = \langle n^{(1)} | \rho^{(1)} | n^{(1)} \rangle \geq 0$$

Inoltre la traccia è la somma degli autovalori, pertanto

$$1 = \text{Tr} (\rho^{(1)}) = \sum_n \lambda_n \implies \lambda_n \leq 1$$

D'altro canto l'operatore al quadrato ha come autovalori i quadrati degli autovalori:

$$\text{Tr} (\rho^{(1)})^2 = \sum_n \lambda_n^2$$

e una dimostrazione alternativa di quest'ultima uguaglianza è quella fatta in Sez. 5.1.3 per la matrice densità. Adesso, poiché  $\lambda_n^2 \leq \lambda_n$ , concludiamo che

$$0 \leq \text{Tr} (\rho^{(1)})^2 \leq 1$$

Gli stati composti da stati puri di  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$  godono di una particolare proprietà: nell'ipotesi di stato separabile, cioè avente forma

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \equiv |\psi_1\psi_2\rangle \quad \longrightarrow \quad \rho = |\psi_1\psi_2\rangle\langle\psi_1\psi_2|$$

si verifica che

$$\text{Tr}(\rho^{(1)})^2 = 1$$

*Dimostrazione.*

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho^{(1)})^2 &= \sum_k (\rho^{(1)})_{kk}^2 \\ &= \sum_{k,m} \langle a_k b_m | \rho | a_h b_m \rangle \sum_{h,n} \langle a_h b_n | \rho | a_k b_n \rangle \\ &= \sum_{k,m} \sum_{h,n} \langle a_k b_n | \psi_1 \psi_2 \rangle \langle \psi_1 \psi_2 | a_h b_n \rangle \langle a_h b_n | \psi_1 \psi_2 \rangle \langle \psi_1 \psi_2 | a_k b_n \rangle \\ &= \sum_k \sum_m \sum_h \sum_n \langle a_k | \psi_1 \rangle \langle b_m | \psi_2 \rangle \langle \psi_1 | a_h \rangle \\ &\quad \cdot \langle \psi_2 | b_m \rangle \langle a_h | \psi_1 \rangle \langle b_n | \psi_2 \rangle \langle \psi_1 | a_k \rangle \langle \psi_2 | b_n \rangle \\ &= \sum_k |\langle a_k | \psi_1 \rangle|^2 \sum_m |\langle b_m | \psi_2 \rangle|^2 \sum_h |\langle a_h | \psi_1 \rangle|^2 \sum_n |\langle b_n | \psi_2 \rangle|^2 \end{aligned}$$

La tesi segue immediatamente dal fatto che tutte le sommatorie hanno 1 come risultato.  $\square$

Questa proprietà è un modo di affermare che lo stato parziale del sottosistema 1 nel caso di stato globale separabile è uno stato puro. Infatti

$$\rho = |\psi_1\psi_2\rangle\langle\psi_1\psi_2| \implies \rho^{(1)} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$$

in quanto

$$\rho^{(1)} = \text{Tr}_2 \rho = \text{Tr}_2 |\psi_1\psi_2\rangle\langle\psi_1\psi_2| = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| \text{Tr}_2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$$

dove l'ultima uguaglianza è vera per la normalizzazione di  $|\psi_2\rangle$ . Per i più sospettosi, dal momento che c'è un rischio non nullo di star abusando della notazione, riportiamo il calcolo fatto in termini di una base:

$$\begin{aligned} \rho_{ij}^{(1)} &= \sum_m \langle a_i b_m | \rho | a_j b_m \rangle \\ &= \sum_m \langle a_i b_m | \psi_1 \psi_2 \rangle \langle \psi_1 \psi_2 | a_j b_m \rangle \\ &= \langle a_i | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | a_j \rangle \sum_m \langle b_m | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | b_m \rangle \\ &= \langle a_i | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | a_j \rangle \end{aligned}$$

Questo caso è particolarmente interessante perché le correlazioni quantistiche date dall'entanglement sono nulle: facendo la traccia parziale si giunge ad uno stato puro del sottosistema 1, che risulta indipendente da  $\mathcal{S}_2$ .

### 5.2.2 Evoluzione di uno stato misto

Lavoriamo nel solito spazio  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ :

$$\mathcal{H}_1: \rho^{(1)} = \text{Tr}_2 \rho \quad \mathcal{H}_2: \rho^{(2)} = \text{Tr}_1 \rho$$

Sia l'hamiltoniana dotata di termini di interazione:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_{12}$$

Supponiamo di partire con uno stato misto, nel sistema globale. L'evoluzione della matrice densità di uno dei sistemi finché i sottosistemi sono in interazione è data da

$$\rho^{(1)}(t) = \text{Tr}_2 \rho(t) = \text{Tr}_2 \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \rho(t_0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \right\}$$

dove si è supposta hamiltoniana indipendente dal tempo. Se al tempo  $t_1$  separiamo istantaneamente<sup>4</sup> i due sottosistemi, l'evoluzione successiva ha come condizione iniziale lo stato di arrivo  $\rho^{(1)}(t_1)$  dell'evoluzione precedente, ed evolverà chiaramente secondo

$$\rho^{(1)}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_1(t-t_1)} \rho^{(1)}(t_1) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_1(t-t_1)}$$

Il punto fondamentale qui è che lo stato di partenza per l'evoluzione separata non è più esprimibile come stato puro, ma solo come matrice densità<sup>5</sup>. In qualche modo, nello stato misto di partenza è conservata parte dell'informazione della precedente interazione con l'altro sottosistema, informazione che non può essere codificata in termini di stati del singolo sottosistema  $\mathcal{H}_1$ .

### 5.2.3 Esempio: ancora sui sistemi a due livelli

Torniamo a considerare un sistema a due livelli  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ :

$$|\psi\rangle = a |\uparrow\rangle + b |\downarrow\rangle \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

In Sez. 8.1.4 e in Parte II, Sez. 1 è svolta un'analisi approfondita di sistemi di questo tipo, per cui saltiamo direttamente alle conclusioni. La generica hamiltoniana per un sistema di questo tipo è data da

$$\hat{H} = \alpha_0 \mathbb{1}_{2 \times 2} + \sum_{j=x,y,z} \alpha_j \sigma^j$$

(questa proprietà sarà illustrata in Sez. 8.1.3 e può essere data per buona qui) dove le  $\sigma^j$  sono le **matrici di Pauli**

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

e gli stati  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  sono autostati di  $\sigma^z$ :

$$\sigma^z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \quad \sigma^z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$$

Lavoriamo con l'hamiltoniana

$$\hat{H} \equiv \frac{1}{4} \sum_{j=x,y,z} \left( \sigma_{(1)}^j + \sigma_{(2)}^j \right)^2 = \frac{1}{4} \left( \boldsymbol{\sigma}_{(1)} + \boldsymbol{\sigma}_{(2)} \right)^2$$

dove col pedice  $(i)$  indichiamo le matrici relative allo spazio di Hilbert  $i$ -esimo. Più avanti, un'hamiltoniana di questa forma assumerà un preciso senso fisico. Costruita la base (ordinata)

$$\mathcal{B} \equiv \left\{ \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle_{(1)} |\uparrow\rangle_{(2)} \\ |\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle_{(1)} |\downarrow\rangle_{(2)} \\ |\downarrow\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle_{(1)} |\uparrow\rangle_{(2)} \\ |\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle_{(1)} |\downarrow\rangle_{(2)} \end{array} \right\}$$

è possibile mostrare per calcolo diretto che l'hamiltoniana assume la forma

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

alla quale sono associati due autovalori: 0, con degenerazione nulla, e 2, con degenerazione tripla. Consideriamo il *ground-state*, in questo contesto fornito da:

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Ad esso è associata la matrice densità

$$\rho = |0\rangle\langle 0| = \frac{1}{2} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) (\langle\uparrow\downarrow| - \langle\downarrow\uparrow|)$$

da cui possiamo determinare, tracciando lo spazio  $\mathcal{H}_2$ , la forma della matrice densità ridotta:

$$\rho^{(1)} = \langle\downarrow|_{(2)} \rho |\downarrow\rangle_{(2)} + \langle\uparrow|_{(2)} \rho |\uparrow\rangle_{(2)}$$

dove abbiamo indicato esplicitamente gli indici per ricordare che stiamo sommando **sulla seconda componente**. Portando in fondo il calcolo, si trova

$$\rho^{(1)} = \frac{|\uparrow\rangle_{(1)} \langle\uparrow|_{(1)} + |\downarrow\rangle_{(1)} \langle\downarrow|_{(1)}}{2} = \frac{|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|}{2} \Big|_{(1)}$$

Per mostrare il funzionamento della tecnica appena sviluppata, calcoliamo e.g. il valore di aspettazione di  $\sigma_{(1)}^z$  sul *ground-state* sia tramite gli stati che tramite la matrice densità.

Cominciamo col conto diretto tramite gli stati. Si ha

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{(1)}^z \otimes \mathbb{1}^{(2)} \rangle &= \frac{\langle\uparrow\downarrow| - \langle\downarrow\uparrow|}{\sqrt{2}} \sigma_{(1)}^z \otimes \mathbb{1}^{(2)} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{1}{2} \left[ \langle\uparrow\downarrow| \sigma_{(1)}^z \otimes \mathbb{1}^{(2)} |\uparrow\downarrow\rangle - \langle\uparrow\downarrow| \sigma_{(1)}^z \otimes \mathbb{1}^{(2)} |\downarrow\uparrow\rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle\downarrow\uparrow| \sigma_{(1)}^z \otimes \mathbb{1}^{(2)} |\uparrow\downarrow\rangle + \langle\downarrow\uparrow| \sigma_{(1)}^z \otimes \mathbb{1}^{(2)} |\downarrow\uparrow\rangle \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[ \langle\uparrow|\uparrow\rangle_{(1)} \langle\downarrow|\downarrow\rangle_{(2)} + \langle\uparrow|\downarrow\rangle_{(1)} \langle\downarrow|\uparrow\rangle_{(2)} \right. \\ &\quad \left. - \langle\downarrow|\uparrow\rangle_{(1)} \langle\uparrow|\downarrow\rangle_{(2)} - \langle\downarrow|\downarrow\rangle_{(1)} \langle\uparrow|\uparrow\rangle_{(2)} \right] = 0 \end{aligned}$$

con ovvia notazione.

Eseguiamo adesso lo stesso calcolo con la nuova tecnica: nei primi passaggi riporteremo gli indici per completezza (è importante sottolineare che l'operatore che agisce nello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  è  $\sigma_{(1)}^z \otimes \mathbb{1}^{(2)}$  e non il solo  $\sigma_{(1)}^z$ ), poi alleggeriremo la notazione in quanto l'unico indice a comparire sarà (1):

$$\begin{aligned}\left\langle \sigma_{(1)}^z \otimes \mathbb{1}^{(2)} \right\rangle &= \text{Tr}_1 \rho^{(1)} \sigma_{(1)}^z \\ &= \text{Tr}_1 \left\{ \frac{|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|}{2} \Big|_{(1)} \sigma_{(1)}^z \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left[ \langle\uparrow|\uparrow\rangle \langle\downarrow|\sigma^z|\downarrow\rangle + \langle\uparrow|\downarrow\rangle \langle\downarrow|\sigma^z|\uparrow\rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle\downarrow|\uparrow\rangle \langle\uparrow|\sigma^z|\downarrow\rangle + \langle\downarrow|\downarrow\rangle \langle\uparrow|\sigma^z|\uparrow\rangle \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[ \langle\uparrow|\uparrow\rangle \langle\downarrow|\downarrow\rangle + \langle\uparrow|\downarrow\rangle \langle\downarrow|\uparrow\rangle - \langle\downarrow|\uparrow\rangle \langle\uparrow|\downarrow\rangle - \langle\downarrow|\downarrow\rangle \langle\uparrow|\uparrow\rangle \right] = 0\end{aligned}$$

Il risultato è coerente con quanto trovato prima<sup>6</sup>: come anticipato, i due calcoli apparentemente scorrelati sono per la verità equivalenti.

Avremmo potuto procedere anche in un altro modo, sicuramente più rapido, ma che avrebbe richiesto qualche puntualizzazione: supponiamo di voler dare una rappresentazione matriciale di  $\rho^{(1)}$ , che conosciamo già in termini degli stati del sistema 1:

$$\rho^{(1)} = \frac{|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|}{2} \Big|_{(1)} \implies [\rho^{(1)}] = \begin{bmatrix} 1/2 & \\ & 1/2 \end{bmatrix}$$

Se consideriamo la forma matriciale dell'operatore  $\hat{\sigma}_{(1)}^z$ , il calcolo diviene rapido:

$$\left\langle \sigma_{(1)}^z \right\rangle = \text{Tr}_1 \rho^{(1)} \sigma_{(1)}^z = \text{Tr}_1 \begin{bmatrix} 1/2 & \\ & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \\ & -1 \end{bmatrix} = 0$$

e la forma matriciale di  $\rho^{(1)}$  permette di determinare immediatamente che  $|0\rangle$  **non è uno stato puro** rispetto allo spazio  $\mathcal{H}_1$ :

$$\text{Tr}(\rho^{(1)})^2 = \text{Tr} \begin{bmatrix} 1/4 & \\ & 1/4 \end{bmatrix} \neq 1$$

per cui possiamo calcolare l'**entropia di entanglement** relativa al *ground-state*:

$$S = -\text{Tr}_1 \rho^{(1)} \ln \rho^{(1)} = \text{Tr}_1 \begin{bmatrix} 1/2 & \\ & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ln 2 & \\ & \ln 2 \end{bmatrix} = \ln 2 > 0$$

#### 5.2.4 \* Uno sguardo da vicino alla matrice densità

La matrice densità ridotta può apparire fumosa. Cerchiamo di capire *in che senso* tale matrice può rappresentare stati non rappresentabili nei singoli sottosistemi. Per farlo, trattiamo ancora il caso del sistema a due livelli: si illustra in maniera relativamente facile e la trattazione può essere estesa.

Lavoriamo nelle condizioni della sezione precedente: la base è data da

$$\mathcal{B} = \{|11\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |00\rangle\}$$

Lo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ , dunque, è quadri-dimensionale. Sia dunque  $|\psi\rangle$  un generico stato normalizzato:

$$|\psi\rangle = \alpha|11\rangle + \beta|10\rangle + \gamma|01\rangle + \delta|00\rangle \quad \sqrt{|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2} = 1$$

La matrice densità può essere calcolata facilmente:

$$[\rho] = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{bmatrix} [\alpha & \beta & \gamma & \delta]^* = \begin{bmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* & \alpha\gamma^* & \alpha\delta^* \\ \beta\alpha^* & |\beta|^2 & \beta\gamma^* & \beta\delta^* \\ \gamma\alpha^* & \gamma\beta^* & |\gamma|^2 & \gamma\delta^* \\ \delta\alpha^* & \delta\beta^* & \delta\gamma^* & |\delta|^2 \end{bmatrix}$$

dalla cui scrittura si vede evidentemente che deve essere  $\text{Tr } \rho = 1$ .

A partire da questa matrice, possiamo determinare la matrice ridotta tracciando lo spazio  $\mathcal{H}_2$ :

$$[\rho^{(1)}] = \begin{bmatrix} |\alpha|^2 + |\beta|^2 & \alpha\gamma^* + \beta\delta^* \\ \gamma\alpha^* + \delta\beta^* & |\gamma|^2 + |\delta|^2 \end{bmatrix}$$

Come possiamo interpretare questi elementi di matrice? Per una matrice densità "pura", cioè associata a uno stato puro, sappiamo che

$$\rho_{ij} = \langle i|\rho|j\rangle = \langle i|\psi\rangle \langle \psi|j\rangle = \langle i|\psi\rangle \langle j|\psi\rangle^*$$

per cui gli elementi diagonali sono esattamente le probabilità associate alla misura di ciascun autovalore. Possiamo dare un'interpretazione analoga agli elementi diagonali della  $\rho^{(1)}$ : per esempio, l'elemento (1, 1) è stato calcolato tramite

$$[\rho^{(1)}]_{(1,1)} = \sum_m \langle 1m|\rho|1m\rangle$$

ossia sommando su tutti gli stati dello spazio globale per i quali il primo qubit fosse  $|1\rangle$ ; in questo senso, gli elementi diagonali della matrice densità ridotta misurano la probabilità che il sistema risulti nello stato  $|1m\rangle$ , indipendentemente dallo stato del secondo qubit. Non a caso, allora, tali elementi diagonali sono proprio la somma di tutte le probabilità che si realizzi tale evento: nel nostro caso, per avere il sistema nello stato  $|1m\rangle$  si devono sommare le probabilità associate a  $|11\rangle$  e a  $|10\rangle$ .

Cosa accade se consideriamo uno stato **separabile**, cioè composto dal prodotto tensore di due stati puri per i relativi sottosistemi? In tal caso, scriveremo

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= (a|1\rangle_{(1)} + b|0\rangle_{(1)}) \otimes (c|1\rangle_{(2)} + d|0\rangle_{(2)}) \\ &= ac|11\rangle + ad|10\rangle + bc|01\rangle + bd|00\rangle \end{aligned}$$

con le ovvie condizioni di normalizzazione

$$\sqrt{|a|^2 + |b|^2} = 1 \quad \sqrt{|c|^2 + |d|^2} = 1$$

In questo contesto, la matrice densità risulta della forma

$$[\rho] = \begin{bmatrix} ac \\ ad \\ bc \\ bd \end{bmatrix} [ac \ ad \ bc \ bd]^* = \begin{bmatrix} |ac|^2 & |a|^2 cd^* & ab^*|c|^2 & ab^*cd^* \\ |a|^2 c^*d & |ad|^2 & ab^*c^*d & ab^*|d|^2 \\ a^*b|c|^2 & a^*bcd^* & |bc|^2 & |b|^2 cd^* \\ a^*bc^*d & a^*b|d|^2 & |b|^2 c^*d & |bd|^2 \end{bmatrix}$$

Tutto ciò che è stato detto fino ad adesso, chiaramente, è ancora perfettamente valido: notiamo però che, stavolta, grazie alle condizioni di normalizzazione la matrice ridotta si semplifica:

$$\left[ \rho^{(1)} \right] = \begin{bmatrix} |a|^2 & ab^* \\ a^*b & |b|^2 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} [a \ b]^*$$

che coincide esattamente con la matrice densità che avremmo ottenuto lavorando sin dal principio nello spazio  $\mathcal{H}_1$  dimenticandoci completamente di  $\mathcal{H}_2$ . Questo è perfettamente coerente con la nozione di indipendenza che caratterizza stati come  $|\phi\rangle$ : infatti, guardando come prima gli elementi diagonale della  $\rho^{(1)}$ , si vede come essi siano esattamente le probabilità associate in  $\mathcal{H}_1$  alla misura dello stato  $|1\rangle$  sul primo qubit.

Cosa è cambiato, dunque? Dal punto di vista prettamente matematico, la matrice densità associata al più generale  $|\psi\rangle$  ha  $4 - 1 = 3$  parametri, per via di un vincolo di normalizzazione, mentre nel caso specifico di  $|\phi\rangle$  ne ha  $4 - 2 = 2$  perché stavolta i vincoli di normalizzazione sono due. Dunque (non è una grande scoperta) la condizione di fattorizzabilità in stati puri abbassa i gradi di libertà<sup>7</sup>, rendendo evidente come possano esistere perfettamente stati non fattorizzabili. Più interessante è il confronto tra le due. Con ovvio significato dei simboli:

$$\det \left[ \rho_{\phi}^{(1)} \right] = 0 \quad \det \left[ \rho_{\psi}^{(1)} \right] = |\alpha\delta - \beta\gamma|^2$$

In generale varrà  $|\alpha\delta - \beta\gamma| \neq 0$ , per cui  $\ker \rho^{(1)}$  conterrà il solo vettore nullo. Questo implica che tale matrice non può rappresentare un proiettore nel senso di  $\mathcal{H}_1$ , poiché lavoriamo in uno spazio a prodotto scalare definito positivo, per cui ogni proiettore (che non sia l'identità) è dotato di spazio ortogonale – ossia di nucleo. In sintesi, la condizione di purezza degli stati è l'unica che rispetta la metrica dello spazio, poiché permette di definire la condizione di ortogonalità; senza quella, non c'è alcuna speranza di codificare lo stato come sovrapposizione coerente degli stati di base.

D'altronde, abbiamo già visto che la matrice densità ridotta non comporta perdita di informazione, poiché raccoglie intrinsecamente l'informazione sullo stato globale “traducendola” in una forma utile e compatta, che permette di eseguire i calcoli con operatori ristretti al sottosistema.

## NOTE

1. Se la seguente frase è ancora presente nella corrente versione pubblicata, allora gli autori non hanno ancora capito il significato dell'*entanglement*. Quando questa frase sparirà dalla versione pubblica di queste dispense, allora probabilmente sarà stata colpa di un *bug* perché gli autori non hanno una reale speranza di capire l'*entanglement*.

2. Per approfondire questo tipo di approccio, si veda la discussione di L.E. Picasso [5].
3. Nello specifico,  $\rho$  è un operatore autoaggiunto, pertanto ammette una decomposizione spettrale che ha la forma  $\rho = \sum w_n |n\rangle\langle n|$  dove  $w_n$  sono i suoi autovalori e  $|n\rangle$  i relativi autostati.
4. Da intendersi: impiegando nel processo di separazione tempi molto minori di qualsiasi scala dei tempi del sistema.
5. È importante notare la sostanziale differenza con la semplice evoluzione di un sistema isolato a partire da uno stato puro: in questo caso, lo stato di partenza per l'evoluzione non può essere codificato dalla base completa per lo spazio  $\mathcal{H}_1$  in cui *adesso* stiamo lavorando.
6. Conviene notare un fatto interessante: la somma che compare nell'ultimo passaggio, dove ovunque è sottinteso l'indice (1), è formalmente analoga a quella dell'ultimo passaggio del metodo meno raffinato esposto poco sopra, dove tuttavia i vari bra-ket vengono spartiti tra indici (1) e (2). Alla luce di questo, ovviamente il risultato è identico – ma è assolutamente interessante vedere direttamente come, in un sistema semplice come questo, la manipolazione algebrica che abbiamo fatto abbia “trasferito” quest’informazione sugli stati (1).
7. L’azione della condizione di normalizzazione è da leggersi nella seguente forma: noti  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$  allora  $\delta$  è determinato a meno di una fase.

## IN BREVE...

- ◊ In un sistema composito lo spazio di Hilbert è dato dal prodotto tensore dei sottosistemi:  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Una buona base è data dal prodotto tensore di due basi, una di ciascun sottospazio. Un generico stato di  $\mathcal{H}$  non sempre è fattorizzabile in stati puri per ogni sottospazio:

$$\begin{array}{ll} |\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle & \text{stato separabile} \\ |\psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle & \text{stato } entangled \end{array}$$

- ◊ La nozione più generale di stato quantistico si descrive in termini di **matrice densità** o **operatore di stato**  $\rho$ . Gli stati puri sono scrivibili anche come *ket*, mentre l'operatore di stato di uno stato misto si può scrivere come combinazione di proiettori, con  $0 < w_n < 1$ ,  $\sum w_n = 1$ :

Stati puri	Stati misti
$\rho =  \psi\rangle\langle\psi $	$\rho = \sum_n w_n  n\rangle\langle n $
$\rho^\dagger = \rho, \quad \rho \geq 0$	$\rho^\dagger = \rho, \quad \rho \geq 0$
$\text{Tr } \rho = \langle\psi \psi\rangle = 1$	$\text{Tr } \rho = \sum_n w_n = 1$
$\text{Tr } \rho^2 = 1$	$\text{Tr } \rho^2 < 1$
$\langle O \rangle = \text{Tr } \rho O = \langle\psi O \psi\rangle$	$\langle O \rangle = \text{Tr } \rho O = \sum_n w_n \langle n O n\rangle$

- ◊ Una possibile interpretazione degli stati misti è come miscele statistiche: attribuiamo una probabilità classica  $w_n$  al fatto che il sistema occupi ciascuno degli stati  $\{|n\rangle\}$  e calcoliamo i valori medi di conseguenza. Tuttavia, fissata  $\rho$ , c'è un'arbitrarietà nella scelta dei  $w_n$  e dei  $\{|n\rangle\}$  per cui tale interpretazione non è univoca.
- ◊ Per calcolare valori medi delle osservabili agenti solo su  $\mathcal{H}_1$  si introduce l'operatore **matrice densità ridotta**  $\rho^{(1)} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$ , definita da

$$\rho^{(1)} = \text{Tr}_2 \rho$$

cioè l'operatore i cui elementi di matrice si ottengono da quelli di  $\rho$  sommando sugli elementi diagonali della base di  $\mathcal{H}_2$ . In questo modo se  $O_1$  è un operatore che agisce solo sul sottosistema 1, ossia  $O_1 = O_1 \otimes \mathbb{1}_2$ , allora

$$\langle O_1 \rangle = \text{Tr } \rho^{(1)} O_1$$

- ◊ Anche la matrice densità ridotta è autoaggiunta, semidefinita positiva ed ha traccia unitaria.
- ◊ Se uno stato di  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  è *entangled*, la matrice densità ridotta per il sottosistema 1 corrisponde ad uno stato misto per il sottosistema. Dunque se due sottosistemi hanno interagito per esempio a tempi  $t < 0$ , arrivando ad uno stato *entangled*, per tutti i tempi successivi e dopo aver separato i sottosistemi si conserva l'informazione sulla loro interazione precedente, per esempio sotto forma di correlazioni.

# 6

## SISTEMI TRIDIMENSIONALI

In questo capitolo si introduce il concetto di simmetria per rotazione, arrivando a definire l'algebra delle rotazioni e connettendo l'elemento infinitesimo del gruppo con l'operatore momento angolare. Di tale operatore viene analizzata la natura algebrica, le relazioni con altri operatori già introdotti; viene descritto lo spettro, sia algebricamente che analiticamente; e sono descritte applicazioni a potenziali centrali.

Nel capitolo 3 abbiamo introdotto la tipologia più semplice di trasformazioni: le traslazioni unidimensionali della forma

$$T(a) : x \longrightarrow x' = x + a$$

che generalizziamo al caso tridimensionale in modo banale come

$$T(\mathbf{a}) : \mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{a}$$

L'applicazione  $T$  costituisce un automorfismo dello spazio vettoriale delle coordinate, quindi manda  $\mathbb{R}^3$  in sé stesso; se invece cerchiamo l'applicazione relativa a  $T$  nello spazio di Hilbert degli stati, i.e. la forma della traslazione in  $\mathcal{H}$ , troviamo l'operatore unitario  $\hat{U}_T$ :

$$\hat{U}_T = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{P}}}$$

dove

$$\hat{\mathbf{P}} = \begin{bmatrix} \hat{P}_x \\ \hat{P}_y \\ \hat{P}_z \end{bmatrix}$$

è il vettore degli operatori impulso, *generatori* della traslazione.

Sempre nel capitolo 3 abbiamo affermato che  $\hat{U}$  trasforma su  $\mathcal{H}$  sia gli stati, sia gli operatori

$$|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle \quad \hat{O}' = \hat{U} \hat{O} \hat{U}^{-1}$$

e che, se l'applicazione  $\hat{U}$  costituisce una simmetria del sistema in esame allora supponendo

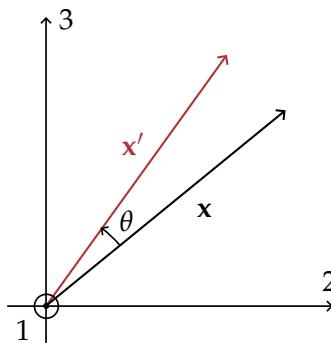
$$\hat{O} |\psi\rangle = \omega |\psi\rangle$$

vale

$$\begin{aligned} \hat{O}' |\psi'\rangle &= \hat{U} \hat{O} \hat{U}^{-1} \hat{U} |\psi\rangle = \hat{U} (\omega |\psi\rangle) \\ &= \omega |\psi'\rangle \end{aligned}$$

Introduciamo adesso un gruppo di trasformazioni differente: quello delle **rotazioni**.

## 6.1 ROTAZIONI E MOMENTO ANGOLARE



**Figura 6.1:** Esempio di rotazione di un vettore nello spazio  $\mathbb{R}^3$ .

Nella Figura 6.1 è mostrata la rotazione con un angolo  $\theta$  attorno all'asse uscente 1 di un vettore di  $\mathbb{R}^3$ :

$$R(\theta) : \mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}' \equiv R\mathbf{x}$$

Nello spazio vettoriale  $\mathbb{R}^3$ , ogni matrice di rotazione è ottenibile come composizione, intesa nel senso di prodotto matriciale, di 3 rotazioni attorno a 3 assi indipendenti, chiamati 1, 2, 3, rispettivamente con angoli  $\theta, \phi, \gamma$ .

$$\begin{aligned} R_1(\theta) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \\ R_2(\phi) &= \begin{bmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{bmatrix} \\ R_3(\gamma) &= \begin{bmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Per quanto concerne le **rotazioni infinitesime** attorno all'asse  $k$ , sviluppando in serie di Taylor attorno a 0 le matrici sopra esposte elemento per elemento, troviamo

$$R_k(\varepsilon) = \mathbb{1} - i\varepsilon\Omega_k \quad k = 1, 2, 3$$

dove  $\varepsilon$  è il parametro angolare infinitesimo e

$$\Omega_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \quad \Omega_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \Omega_3 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

La terna matriciale generatrice delle rotazioni appena esposta<sup>1</sup> può essere riassunta per mezzo della  $\epsilon$  di Ricci-Levi Civita:

$$(\Omega_k)_{ij} = -i\epsilon_{kij}$$

Queste matrici godono della relazione di commutazione

$$[\Omega_i, \Omega_j] = i\epsilon_{ijk}\Omega_k$$

Scriviamo la rotazione infinitesima attorno a  $k$  come

$$R_k(\varepsilon) = \mathbb{1} - i\varepsilon\Omega_k \quad k = 1, 2, 3$$

Si evince facilmente – componendo le tre rotazioni ed eliminando i termini di ordine superiore al primo – che la più generale rotazione infinitesima attorno a un generico asse  $\bar{\mathbf{n}}$  ha forma

$$R_{\bar{\mathbf{n}}} = \mathbb{1} - i\varepsilon_k\Omega_k$$

scommendo sull'indice ripetuto  $k$ . Sottintendiamo la dipendenza della trasformazione dalla terna  $\vec{\varepsilon}$  di angoli infinitesimi. Come appena mostrato, ciò equivale a scrivere

$$R_{\bar{\mathbf{n}}} = \mathbb{1} - \varepsilon_k\epsilon_{ijk}$$

Applicando la rotazione ad un vettore  $\mathbf{x} = x_1\hat{1} + x_2\hat{2} + x_3\hat{3}$ , troviamo la nota equazione

$$\mathbf{x}' = R_{\bar{\mathbf{n}}}\mathbf{x} = \mathbf{x} + \delta\theta\bar{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}$$

con la ridefinizione  $\vec{\varepsilon} = \delta\theta\bar{\mathbf{n}}$ .

**NON COMMUTATIVITÀ DELLE ROTAZIONI** A differenza delle traslazioni, le rotazioni costituiscono un **gruppo non commutativo**: l'ordine di applicazione è rilevante

$$R^I \circ R^{II} = R^{III} \neq R^{II} \circ R^I = R^{IV}$$

Dal momento che i corrispondenti operatori di rotazione  $\hat{U}_R$  in  $\mathcal{H}$  si trovano in corrispondenza biunivoca con le rotazioni  $R : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ , anche per loro vale la medesima considerazione:

$$\hat{U}_{R^I} \circ \hat{U}_{R^{II}} = \hat{U}_{R^{III}} \neq \hat{U}_{R^{II}} \circ \hat{U}_{R^I} = \hat{U}_{R^{IV}}$$

### 6.1.1 Il momento angolare come generatore delle rotazioni

Consideriamo ora una generica trasformazione  $g$  tale che  $g : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ . Per definizione, scriviamo sulle coordinate

$$\mathbf{x} \xrightarrow{g} \mathbf{x}' = g\mathbf{x}$$

mentre sugli stati

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\hat{U}_g} |\psi'\rangle = \hat{U}_g |\psi\rangle$$

con  $\hat{U}_g : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ . A questo punto, per passare alla rappresentazione delle coordinate è sufficiente moltiplicare per  $\langle \mathbf{x}|$ :

$$\psi(\mathbf{x}) \xrightarrow{U_g} \psi'(\mathbf{x}) = U_g \psi(\mathbf{x})$$

in cui  $U_g : L^2 \rightarrow L^2$ . D'altro canto, conosciamo bene l'effetto di  $U_g$  sulle funzioni d'onda:

$$U_g \psi(\mathbf{x}) = \psi(g^{-1}\mathbf{x})$$

Dunque possiamo concludere che

$$\psi(\mathbf{x}) \xrightarrow{U_g} \psi'(\mathbf{x}) = U_g \psi(\mathbf{x}) = \psi(g^{-1}\mathbf{x})$$

Fin qui non abbiamo specificato la trasformazione, né il gruppo in cui lavoriamo. Nel Cap. 3 avevamo discusso il caso dei Gruppi di Lie, le cui trasformazioni sono parametrizzate da un set di parametri continui  $\mathbf{s}$ . In tale contesto si dimostra che le trasformazioni “macroscopiche” si scrivono in rappresentazione esponenziale come una composizione di trasformazioni infinitesime:

$$\mathcal{R}(g(\mathbf{s})) = e^{i\mathbf{s} \cdot \hat{\mathbf{X}}}$$

dove  $\mathcal{R}$  indica la rappresentazione della trasformazione e  $\hat{\mathbf{X}}$  è il vettore dei generatori infinitesimi. Abbiamo già usato questo risultato nel caso delle **traslazioni**:

$$g \equiv T(\mathbf{a}) : \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{a}$$

da cui segue la forma traslata della funzione d’onda

$$\psi'(\mathbf{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \cdot \mathbf{P}} \psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} - \mathbf{a})$$

Nel caso in cui  $g$  sia una **rotazione**, abbiamo invece

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

in cui  $\hat{\mathbf{n}}$  individua l’asse di rotazione,  $\theta$  descrive l’angolo e

$$\hat{\mathbf{J}} = \begin{bmatrix} \hat{j}_1 \\ \hat{j}_2 \\ \hat{j}_3 \end{bmatrix}$$

è il vettore degli operatori hermitiani del **momento angolare**, generatori infinitesimi delle rotazioni tridimensionali attorno ai relativi assi.

**RELAZIONI DI COMMUTAZIONE DEL MOMENTO ANGOLARE** Per le componenti del momento angolare, vale la seguente relazione di commutazione:

$$[\hat{j}_a, \hat{j}_b] = i\hbar \epsilon_{abc} \hat{j}_c \quad (6.1)$$

che, formalmente, fornisce le **costanti di struttura** del gruppo delle rotazioni tridimensionali.

*Dimostrazione.* Come prima, partiamo da una generica trasformazione  $g(\varepsilon) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  dipendente dal parametro  $\varepsilon$ . Allora su  $\mathcal{H}$  le corrisponde in modo biunivoco l’operatore

$$\hat{U}_g(\varepsilon) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{K}_g}$$

L’operatore  $\hat{K}_g$  è hermitiano e costituisce il generatore della trasformazione. Inoltre, nel caso in cui  $\hat{U}_g$  fosse una simmetria del sistema,  $\hat{K}_g$  corrisponderebbe ad una variabile dinamica conservata.

Consideriamo ora sullo spazio delle funzioni d’onda l’operatore

$$U_G = U_{g_1 g_2 g_3 g_4} = U_{g_1} U_{g_2} U_{g_3} U_{g_4} = e^{i\varepsilon \hat{K}_a} e^{i\varepsilon \hat{K}_b} e^{-i\varepsilon \hat{K}_a} e^{-i\varepsilon \hat{K}_b}$$

dove, per brevità,  $G = g_1 g_2 g_3 g_4$  e la dipendenza dal parametro  $\varepsilon$  è sottintesa. Inoltre, abbiamo posto  $\hbar = 1$  per snellire i calcoli. In questo modo

$$\psi'(\mathbf{x}) = U_G(\varepsilon)\psi(\mathbf{x}) = \psi\left(G^{-1}\mathbf{x}\right)$$

Per  $\varepsilon \simeq 0$ , è lecito sviluppare  $U_G(\varepsilon)$  in serie di Taylor. Nel farlo, dobbiamo necessariamente fermarci al primo ordine non banale: in questo caso al secondo, poiché tutti i termini del primo si cancellano.

$$\begin{aligned} U_G &= U_{g_1} U_{g_2} U_{g_3} U_{g_4} \\ &\simeq \left(1 + \varepsilon K_a + \frac{\varepsilon^2}{2} K_a^2\right) \left(1 + \varepsilon K_b + \frac{\varepsilon^2}{2} K_b^2\right) \\ &\quad \cdot \left(1 - \varepsilon K_a + \frac{\varepsilon^2}{2} K_a^2\right) \left(1 - \varepsilon K_b + \frac{\varepsilon^2}{2} K_b^2\right) \\ &\simeq 1 + \varepsilon^2 [K_a, K_b] \end{aligned}$$

dunque

$$\psi'(\mathbf{x}) = (1 + \varepsilon^2 [K_a, K_b]) \psi(\mathbf{x})$$

D'altra parte,

$$\psi'(\mathbf{x}) = \psi\left(G^{-1}\mathbf{x}\right) = \psi\left(g_4^{-1} g_3^{-1} g_2^{-1} g_1^{-1} \mathbf{x}\right)$$

Nel caso in cui

$$K_a = P_a \quad K_b = P_b$$

cioè con le  $g_i$  corrispondenti a traslazioni, è evidente che

$$g_4^{-1} g_3^{-1} g_2^{-1} g_1^{-1} \mathbf{x} = \mathbf{x}$$

Troviamo pertanto

$$\psi'(\mathbf{x}) = (1 + \varepsilon^2 [P_a, P_b]) \psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x})$$

da cui segue subito la relazione

$$[P_a, P_b] = 0$$

Abbiamo finalmente mostrato in modo formale che gli impulsi commutano tra loro.

Considerando invece delle rotazioni infinitesime attorno a due assi, ossia

$$K_a = \hat{J}_2 \quad K_b = \hat{J}_1$$

abbiamo al secondo ordine

$$\begin{aligned} R_G &= R_2(-\varepsilon)R_1(-\varepsilon)R_2(\varepsilon)R_1(\varepsilon) \\ &= (1 + \varepsilon^2 [\Omega_1, \Omega_2]) \\ &= (1 + i\varepsilon^2 \Omega_3) \equiv R_3(-\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Qui ci siamo avvalsi delle relazioni di commutazione delle matrici  $\Omega_k$  che generano le rotazioni, inoltre ricordiamo che lo sviluppo al secondo ordine,

non riportato per esteso, deve essere svolto per ognuno dei quattro termini separatamente. Ciò significa che

$$\begin{aligned}\psi'(\mathbf{x}) &= U_{R_G} \psi(\mathbf{x}) \\ &= \psi(R_G^{-1} \mathbf{x}) \\ &= \psi(R_3(\varepsilon^2) \mathbf{x}) \\ &= e^{+i\varepsilon^2 J_3} \psi(\mathbf{x}) \simeq (\mathbb{1} + i\varepsilon^2 \hat{J}_3) \psi(\mathbf{x})\end{aligned}$$

sempre utilizzando lo sviluppo di Taylor. Adesso è sufficiente confrontare

$$\psi'(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) (\mathbb{1} + \varepsilon^2 [\hat{J}_1, \hat{J}_2]) = (\mathbb{1} + i\varepsilon^2 \hat{J}_3)$$

o più correttamente, reintegrando  $\hbar$ ,

$$\psi'(\mathbf{x}) = \left( \mathbb{1} + \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} [\hat{J}_1, \hat{J}_2] \right) \psi(\mathbf{x}) = \left( \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \varepsilon^2 \hat{J}_3 \right) \psi(\mathbf{x})$$

da cui troviamo

$$[\hat{J}_1, \hat{J}_2] = i\hbar \hat{J}_3$$

Più in generale:

$$[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar \epsilon_{abc} \hat{J}_c$$

il che conclude la dimostrazione.  $\square$

Mostriamo ora che valgono anche le seguenti relazioni di commutazione

$$[\hat{Q}_a, \hat{J}_b] = i\hbar \epsilon_{abc} \hat{Q}_c \quad (6.2)$$

dove  $\hat{Q}_a$  – per  $a = 1, 2, 3$  – sono gli operatori di coordinata, che ricordiamo essere definiti nello spazio di Hilbert degli stati dalla seguente equazione agli autovalori

$$\hat{Q}_a |x_a\rangle = x_a |x_a\rangle$$

con  $|x_a\rangle$  elemento generico della base completa  $a$ -esima, associato al corrispondente valore di coordinata  $x_a$ .

*Dimostrazione.* Consideriamo, nello spazio vettoriale  $\mathbb{R}^3$ , una rotazione infinitesima di un angolo  $\delta\theta$  attorno ad un asse  $\hat{\mathbf{n}}$ :

$$R(\delta\theta) : \mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \delta\theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}$$

Anche in questo caso – come già apprezzato nel caso di traslazioni generiche nello spazio – si deve conservare il risultato della misura di posizione su un autostato dell’osservabile  $\hat{Q}$ . Sia  $\hat{Q}'_n$  l’operatore associato alla misura della coordinata  $n$ -esima nella posizione  $\mathbf{x}'$ . Deve valere la seguente equazione

$$\hat{Q}'_n |x'_a\rangle = x_a |x'_a\rangle \quad (6.3)$$

dove l’operatore trasformato è

$$\hat{Q}'_n = \hat{U}_R(\delta\theta) \hat{Q}_n \hat{U}_R(\delta\theta)^{-1} \quad (6.4)$$

ottenuto trasformando  $\hat{Q}_a$  tramite l'operatore unitario

$$\hat{U}_R(\delta\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\delta\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}} \xrightarrow{\delta\theta \rightarrow 0} \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}} + \mathcal{O}(\delta\theta^2)$$

Sostituendo questo ultimo risultato nell'equazione (6.4), si ha

$$\hat{Q}'_a = \hat{Q}_a - \frac{i}{\hbar}\delta\theta[\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}, \hat{Q}_a] + \mathcal{O}(\delta\theta^2)$$

Scrivendo invece la rotazione infinitesima per la componente  $a$ -esima del vettore  $\mathbf{x}$ , e usando la relazione  $\mathbf{x} = \mathbf{x}' - \delta\theta\bar{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}$  l'equazione (6.3) si riduce a

$$\begin{aligned} \hat{Q}'_a |x'_a\rangle &= x_a |x'_a\rangle \\ &= (x'_a - \delta\theta(\bar{\mathbf{n}} \times \mathbf{x})_a) |x'_a\rangle \\ &= (\hat{Q}_a - \delta\theta(\bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{Q}}')_a) |x'_a\rangle \end{aligned}$$

che deve essere valida per ogni autostato  $|x'_a\rangle$ , quindi infine otteniamo

$$\hat{Q}'_a = \hat{Q}_a - \delta\theta(\bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{Q}}')_a$$

dove  $\mathbf{x}'$  e  $\hat{\mathbf{Q}}'$  rappresentano rispettivamente il vettore di autovalori  $x'_a$  e il vettore di operatori  $\hat{Q}_a$ . Ci siamo avvalse, in particolare, della condizione

$$\hat{Q}_a |x'_a\rangle = x'_a |x'_a\rangle$$

che è lecita, dato che il vettore ruotato  $\mathbf{x}'$  resta all'interno dello spazio di partenza: dunque  $|x'_a\rangle$  è sicuramente un autovettore di  $\hat{Q}_a$  per l'autovalore  $x'_a$ . Confrontiamo le equazioni ottenute per  $\delta\theta \rightarrow 0$

$$\hat{Q}'_a = \hat{Q}_a - \frac{i}{\hbar}\delta\theta[\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}, \hat{Q}_a] \quad \text{e} \quad \hat{Q}'_a = \hat{Q}_a - \delta\theta(\bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{Q}}')_a$$

Approssimando la seconda come

$$\hat{Q}_a = \hat{Q}'_a + \delta\theta(\bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{Q}}')_a \simeq \hat{Q}'_a + \delta\theta(\bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{Q}})_a + \mathcal{O}(\delta\theta^2)$$

(il termine correttivo è di ordine 1 in  $\delta\theta$ , per cui abbiamo sostituito lì dentro lo sviluppo di ordine 0 di  $\hat{\mathbf{Q}}'$ ) si ottiene

$$[\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}, \hat{Q}_a] = -i\hbar(\bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{Q}})_a$$

che in notazione indiciale, usando la convenzione di Einstein, si riduce a

$$n_b [\hat{J}_b, \hat{Q}_a] = -i\hbar\epsilon_{abc} n_b \hat{Q}_c$$

Infine, sfruttando l'indipendenza lineare tra le componenti  $n_b$  del versore  $\bar{\mathbf{n}}$ , possiamo riscrivere la precedente espressione come

$$[\hat{J}_b, \hat{Q}_a] = -i\hbar\epsilon_{abc} \hat{Q}_c$$

e, per la proprietà di antisimmetria del commutatore, ottenere il risultato atteso

$$[\hat{Q}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\epsilon_{abc} \hat{Q}_c$$

□

È possibile ripetere questi passaggi per un vettore  $\mathbf{p}$  nello spazio  $\mathbb{R}^3$  degli impulsi, considerando gli operatori  $\hat{P}_a$  associati a ciascuna componente. Il risultato sarà, per analogia

$$[\hat{P}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{P}_c \quad (6.5)$$

e lo stesso vale per qualsiasi operatore **vettoriale** rispetto a  $\hat{\mathbf{L}}$ , cioè che trasformi come  $\hat{\mathbf{x}}$  (come un vettore) sotto rotazioni spaziali. Torneremo su questa e su altre simili definizioni nel Cap. 10.

**IL MOMENTO ANGOLARE ORBITALE** Prima di analizzare le proprietà generali dell'operatore momento angolare, consideriamo una sua applicazione specifica. Per un dato sistema fisico, sappiamo che è classicamente possibile definire il **momento angolare orbitale**

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

Mostriamo che – rinominando momentaneante come  $\hat{\mathbf{L}}$  il vettore di operatori  $\hat{\mathbf{J}}$  fin ora considerato – **nella rappresentazione delle coordinate** è valida la seguente espressione

$$\mathbf{L}\psi(\mathbf{x}) = -i\hbar\mathbf{x} \times \nabla\psi(\mathbf{x}) \quad (6.6)$$

*Dimostrazione.* Partiamo dalla trasformazione della funzione d'onda sotto una rotazione infinitesima di angolo  $\delta\theta$ , attorno ad un asse  $\bar{\mathbf{n}}$ :

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

che corrisponde alla riscrittura di  $\hat{U}_R\psi(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x})$ . Sviluppiamo quindi in serie di Taylor ambo i membri fino al primo ordine lineare in  $\delta\theta$ :

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{L}\right)\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) - \delta\theta(\bar{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x})$$

Infine otteniamo

$$\bar{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{L}\psi(\mathbf{x}) = -i\hbar(\bar{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x})$$

e notando che  $(\bar{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla = \bar{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{x} \times \nabla)$ ,

$$\bar{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{L}\psi(\mathbf{x}) = -i\hbar\bar{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{x} \times \nabla\psi(\mathbf{x}))$$

La tesi deriva dal fatto che ciò debba valere per una qualsiasi scelta arbitraria di  $\bar{\mathbf{n}}$

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

□

## 6.2 IL MOMENTO ANGOLARE: SPETTRO ED AUTOSTATI

Fino ad ora abbiamo considerato il vettore di operatori  $\hat{\mathbf{J}}$  come generatore infinitesimo delle rotazioni. Risulta evidente un'analogia con il momento

lineare, che sappiamo interpretare come il generatore infinitesimo delle traslazioni nello spazio. Come il momento lineare, anche il momento angolare è associato classicamente ad un'osservabile; è quindi lecito chiedersi quali possano essere le sue proprietà operatoriali in ambito quantistico. Nel corso della presente trattazione, continueremo ad indicare con  $\hat{J}_i$  gli operatori associati alle componenti del momento angolare, senza specificare il contesto fisico in esame. Vedremo poi che è possibile introdurre una nuova tipologia di momento angolare, che si distingue dal noto **momento angolare orbitale**. Questa nuova osservabile – che non ha un analogo classico – prenderà il nome di **spin** e verrà trattato nel Cap. 8.

### 6.2.1 Autovalori di $J^2$ e $J_z$

Per il calcolo degli autovalori dell'operatore momento angolare, segue una procedura del tutto simile a quella impiegata nel calcolo dei livelli energetici concessi in un oscillatore armonico quantistico; anche qui, sarà utile definire degli opportuni operatori di *salita* e di *discesa*.

Introduciamo ora un nuovo operatore, definito **operatore di Casimir** del gruppo delle rotazioni

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \quad (6.7)$$

che si dimostra facilmente essere hermitiano. Calcolando il commutatore con uno degli operatori  $\hat{J}_i$  ed utilizzando le relazioni di commutazione trattate nella sezione precedente, si può mostrare che vale

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i] = 0$$

Poiché i due operatori commutano, sono simultaneamente diagonalizzabili, i.e. possiedono una base di autovettori in comune. Ci concentriamo in particolare sulla coppia di operatori  $(\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z)$ . Siano quindi date le definizioni di autovettore per i due operatori in questione

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

D'ora in poi fisseremo  $\hbar = 1$ , in modo da snellire la notazione.

Indichiamo quindi con  $|\beta, m\rangle$  l'autostato generico in comune, definito in modo tale da avere

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |\beta, m\rangle &= \beta |\beta, m\rangle & \forall m \\ \hat{J}_z |\beta, m\rangle &= m |\beta, m\rangle & \forall \beta \end{aligned}$$

con  $\beta, m \in \mathbb{R}$  – perché sia  $\hat{J}_z$  che  $\hat{\mathbf{J}}^2$  sono hermitiani. Calcolando il valore di aspettazione di  $\hat{\mathbf{J}}^2$  su uno di questi autostati, arriviamo a

$$\beta \langle \beta, m | \beta, m \rangle = \langle \beta, m | \hat{\mathbf{J}}^2 | \beta, m \rangle \geq \langle \beta, m | \hat{J}_z^2 | \beta, m \rangle$$

La diseguaglianza risulta giustificata dalla definizione

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

in cui osserviamo, per la relazione di commutazione  $[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0$ , che  $\hat{J}^2$  condividerà un'altra base di autostati anche con gli operatori  $\hat{J}_x$  e  $\hat{J}_y$ , seppur composta da autostati distinti da quelli comuni a  $\hat{J}_z$  appena definiti<sup>2</sup>. Notando in particolare che gli operatori hermitiani  $\hat{J}_x^2$  e  $\hat{J}_y^2$  sono definiti positivi, è dimostrata la diseguaglianza. Sviluppando il membro destro della disequazione si ottiene infine

$$\beta \langle \beta, m | \beta, m \rangle \geq m^2 \langle \beta, m | \beta, m \rangle$$

Siccome questa relazione deve essere soddisfatta per ogni autostato  $|\beta, m\rangle$ , deriviamo la condizione

$$m^2 \leq \beta \implies |m| \leq \sqrt{\beta} \quad (6.8)$$

Introduciamo ora una coppia di operatori  $\hat{J}_{\pm}$ , definiti dalle relazioni

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$$

Tramite le regole di commutazione tra gli operatori  $\hat{J}_i$ , è facile notare che per questi valgono le relazioni

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] &= \pm \hat{J}_{\pm} \\ [\hat{J}_+, \hat{J}_-] &= 2\hat{J}_z \end{aligned} \quad (6.9)$$

Mostriamo ora che gli operatori  $\hat{J}_+$  e  $\hat{J}_-$  possono essere associati ad opportuni operatori di *salita* e di *discesa*. Consideriamo quindi l'operazione

$$\hat{J}_z \hat{J}_+ |\beta, m\rangle$$

che si riduce a

$$\begin{aligned} \hat{J}_z \hat{J}_+ |\beta, m\rangle &= (\hat{J}_+ \hat{J}_z + \hat{J}_+) |\beta, m\rangle \\ &= (m+1) \hat{J}_+ |\beta, m\rangle \end{aligned}$$

dove in particolare ci siamo avvalsi della prima delle equazioni (6.9). Notiamo allora che sono possibili le seguenti due soluzioni

$$\hat{J}_+ |\beta, m\rangle = \begin{cases} C_+ |\beta, m+1\rangle \\ 0 \end{cases}$$

Ciò equivale a dire che l'operatore  $\hat{J}_+$  può agire sull'autostato  $|\beta, m\rangle$  trasformandolo nell'autostato *successivo*, ovvero quello corrispondente all'autovalore successivo, con un incremento unitario, indipendente da  $m$ ; precisiamo inoltre che la costante complessa  $C_+$  è inserita per tenere conto di un qualsiasi vettore proporzionale a  $|\beta, m+1\rangle$ , che prendiamo normalizzato ad uno, come il precedente. Tuttavia è anche ammessa la soluzione banale, in cui lo stato trasformato è quello nullo.

D'altronde l'equazione (6.8) impone un limite massimo agli autovalori  $m$ . Possiamo quindi aspettarci che la soluzione nulla ponga un limite superiore all'applicabilità dell'operatore  $\hat{J}_+$  sugli autostati di  $\hat{J}_z$ : di fatto possiamo interrompere la *catena* di applicazione reiterativa ( $m \rightarrow m+1 \rightarrow m+2 \rightarrow \dots$ ) soltanto se esiste un autostato – e quindi un autovalore  $\tilde{m}$  – tale che

$$\hat{J}_+ |\beta, \tilde{m}\rangle = 0$$

dopodichè, per ricorsività, non sarà possibile ottenere un autostato diverso da quello nullo avente autovalore maggiore di  $\tilde{m}$ .

In questo senso, definiamo il massimo autovalore dell'operatore  $\hat{j}_z$

$$\max(m) \equiv m_{\max}$$

Determiniamo ora il valore di  $m_{\max}$  previsto da questa scelta; avendo imposto che

$$\hat{j}_+ |\beta, m_{\max}\rangle = 0$$

applicando l'operatore  $\hat{j}_-$  ad entrambi i membri si ottiene

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{j}_- \hat{j}_+ |\beta, m_{\max}\rangle \\ &= (\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z) |\beta, m_{\max}\rangle \\ &= (\beta - m_{\max}^2 - m_{\max}) |\beta, m_{\max}\rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo banalmente applicato le definizioni di  $\hat{j}_+$ ,  $\hat{j}_-$  e  $\hat{j}_z$ . Dovendo ciò valere per un autostato generico  $|\beta, m_{\max}\rangle$ , per definizione non nullo, si ottiene

$$\beta = m_{\max}(m_{\max} + 1)$$

che fissa, a  $\beta$  definito, il valore di  $m_{\max}$ . In particolare, risolvendo l'equazione di secondo grado per  $m_{\max}$  e scartando la soluzione negativa, si ha

$$m_{\max} = \frac{1}{2} \left( \sqrt{1 + 4\beta} - 1 \right)$$

Un discorso analogo vale per l'operatore  $\hat{j}_-$ . Si mostra in maniera del tutto simile che

$$\hat{j}_- |\beta, m\rangle = \begin{cases} C_- |\beta, m-1\rangle \\ 0 \end{cases}$$

ed imponendo che

$$\hat{j}_- |\beta, m_{\min}\rangle = 0$$

si ottiene infine

$$\beta = m_{\min}(m_{\min} - 1)$$

da cui, risolvendo l'equazione per  $m_{\min}$  e scartando la soluzione positiva

$$m_{\min} = -\frac{1}{2} \left( \sqrt{1 + 4\beta} - 1 \right)$$

Osserviamo in particolare che

$$m_{\max} = -m_{\min} \equiv j$$

benchè questo si potesse anche dedurre eguagliando le due equazioni implizite che legano  $m_{\max}$  ed  $m_{\min}$  a  $\beta$ . Questo implica che

$$\beta = j(j+1)$$

Data questa dipendenza, cambiamo notazione: scriveremo direttamente

$$|\beta = j(j+1), m\rangle \rightarrow |j, m\rangle$$

ossia, riassumendo quanto trovato fino ad ora

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle \quad \hat{J}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle \quad (6.10)$$

In definitiva abbiamo che

$$m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$$

ovvero  $m$  può assumere  $2j+1$  valori. Essendo richiesto di correre da  $-j$  al suo esatto opposto  $j$  in passi da 1, è immediato osservare che  $j$  raggiunge soltanto valori **interi** ( $j = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ ) o **semi-interni** ( $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \dots$ ). Vedremo in seguito gli effetti di queste due possibilità sulle tipologie di momento angolare menzionate all'inizio di questa sezione.

Concludiamo con un cenno alle costanti di normalizzazione  $C_+$  e  $C_-$ , osservando che, poiché  $\langle j, m \pm 1 | j, m \pm 1 \rangle = 1$ , allora

$$\langle j, m | \hat{J}_{\mp} \hat{J}_{\pm} | j, m \rangle = |C_{\pm}|^2$$

da cui si ottengono, riutilizzando il calcolo già svolto in precedenza

$$C_+ = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$$

$$C_- = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$$

### 6.2.2 Autofunzioni: le armoniche sfériche

Nella sezione precedente abbiamo determinato esplicitamente lo spettro degli autovalori del momento angolare, diagonalizzando simultaneamente  $\hat{J}^2$  e  $\hat{J}_z$ . Anticipiamo che  $\hat{\mathbf{J}}$  sarà riconosciuto come il **momento angolare totale**, mentre adesso definiamo il **momento angolare orbitale** nella rappresentazione delle coordinate come

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

e lo riconosciamo come una parte di  $\hat{\mathbf{J}}$ . Abbiamo dunque descritto per via algebrica anche lo spettro del momento angolare orbitale: è giunta l'ora di tradurre i risultati trovati nella rappresentazione delle coordinate. Col linguaggio usato allora, stiamo cercando  $\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | l, m \rangle$ , cioè la forma delle autofunzioni del modulo quadro e della proiezione di  $\hat{\mathbf{L}}$  lungo  $\bar{\mathbf{z}}$ .

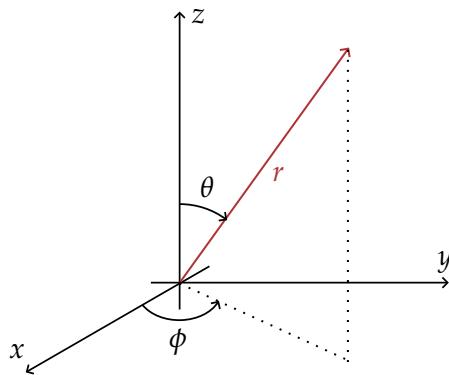
Le coordinate più utili in questo contesto sono le coordinate sferiche: d'altronde, sono quelle che rendono lampante l'invarianza per rotazioni di tanti sistemi fisici.

Ricordiamo che l'utilizzo di coordinate curvilinee complica un po' l'utilizzo degli operatori differenziali vettoriali, nel senso che un generico vettore di  $\mathbb{R}^3$  si può scrivere

$$\mathbf{v} = v_x \bar{\mathbf{x}} + v_y \bar{\mathbf{y}} + v_z \bar{\mathbf{z}} = v_r \bar{\mathbf{r}} + v_\theta \bar{\boldsymbol{\theta}} + v_\phi \bar{\boldsymbol{\phi}}$$

scegliendo l'asse  $\bar{\mathbf{z}}$  come asse polare (si faccia riferimento alla Fig. 6.2). L'operatore gradiente, che in coordinate cartesiane si scrive semplicemente

$$\nabla = \bar{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \bar{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y} + \bar{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z}$$



**Figura 6.2:** Illustrazione della scrittura di un vettore di  $\mathbb{R}^3$  in coordinate sferiche  $(r, \theta, \phi)$ .

in coordinate sferiche ha la forma più articolata

$$\nabla = \bar{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \bar{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \bar{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Possiamo allora calcolare, ricordando che i versori formano una terna cartesiana

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = (r \bar{\mathbf{r}}) \times (-i\hbar \nabla) \\ &= (-i\hbar) \left( \bar{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \bar{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)\end{aligned}$$

Da questa espressione si può calcolare la forma (in rappresentazione delle coordinate) degli operatori che abbiamo diagonalizzato in forma astratta. Facendo i calcoli<sup>3</sup> e sfruttando la forma del laplaciano in coordinate sferiche si arriva a

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \quad (6.11)$$

dove il termine tra parentesi tonde è da intendersi come la derivata di un prodotto

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) = \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$

mentre calcolando la proiezione di  $\hat{\mathbf{L}}$  sull'asse  $\bar{\mathbf{z}}$ , osservando che tra le coordinate sferiche e cartesiane vale la relazione

$$\bar{\mathbf{z}} = \cos \theta \bar{\mathbf{r}} - \sin \theta \bar{\theta}$$

in quanto il versore  $\bar{\phi}$  vive sul piano  $xy$ , mentre  $\bar{\theta}$  giace nel piano generato dai vettori  $\bar{\mathbf{z}}$  e  $\bar{\mathbf{r}}$  e poiché  $\bar{\theta} \perp \bar{\mathbf{r}}$  forma un angolo  $\theta$  col piano  $xy$ , dunque forma un angolo pari a  $\pi/2 + \theta$  col versore  $\bar{\mathbf{z}}$ ; si ottiene

$$\hat{L}_z = \hat{\mathbf{L}} \cdot \bar{\mathbf{z}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (6.12)$$

La profonda connessione del momento angolare con le rotazioni spaziali è evidente anche da queste espressioni, che coinvolgono soltanto la parte angolare delle funzioni d'onda.

Siamo pronti per risolvere le equazioni alle autofunzioni simultanee

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2\psi(r,\theta,\phi) &= l(l+1)\psi(r,\theta,\phi) \\ \hat{L}_z\psi(r,\theta,\phi) &= m\psi(r,\theta,\phi)\end{aligned}$$

dove gli operatori sono i (6.11) e (6.12). Abbiamo posto temporaneamente  $\hbar = 1$  per facilitare i calcoli.

Per attaccare il problema proviamo con la tanto cara separazione delle variabili: cerchiamo una soluzione della forma

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

sostituendola in una qualunque delle equazioni agli autovalori, dato che gli operatori non agiscono sulla parte radiale,  $R$  si semplifica dai due lati dell'uguaglianza. Abbiamo dunque addomesticato un poco il problema, che si riduce alla ricerca di soluzioni

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

che verifichino

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2Y(\theta,\phi) &= l(l+1)Y(\theta,\phi) \\ \hat{L}_zY(\theta,\phi) &= mY(\theta,\phi)\end{aligned}$$

Risolviamo la seconda delle equazioni:

$$\begin{aligned}-i\frac{\partial}{\partial\phi}[\Theta(\theta)\Phi(\phi)] &= m\Theta(\theta)\Phi(\phi) \\ \implies -i\Theta(\theta)\frac{\partial\Phi}{\partial\phi} &= m\Theta(\theta)\Phi(\phi) \\ \implies \frac{\partial\Phi}{\partial\phi} &= im\Phi(\phi)\end{aligned}$$

che si integra immediatamente e dà  $\Phi \propto e^{im\phi}$ . Ricordando che  $m$  varia tra  $-l$  e  $+l$ , scriviamo

$$\Phi_m(\phi) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$$

La costante di normalizzazione è legata ad una nozione di ortonormalità che si può definire per le soluzioni al problema della diagonalizzazione del momento angolare: in sostanza, così facendo

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\phi)\Phi_{m'}'(\phi)d\phi = \delta_{m,m'}$$

Ma  $\Phi$  non è una qualsiasi funzione di variabile reale, bensì deve essere una funzione sul cerchio  $\Phi: S_1 \rightarrow \mathbb{C}$ , ossia dato che l'angolo azimutale  $\phi$  torna in se stesso dopo  $2\pi$  richiediamo che la funzione sia *monodromia*, ossia ad un solo valore

$$\Phi_m(\phi + 2\pi) = \Phi_m(\phi)$$

ma questo è equivalente a imporre

$$e^{im(\phi+2\pi)} = e^{im\phi} \iff e^{i2\pi m} = 1 \iff m \in \mathbb{Z}$$

ossia la condizione è verificata solo se  $m$  è un numero intero. Concludiamo in questo modo che il momento angolare orbitale ha un vincolo più forte allo spettro (rispetto a quanto visto in generale nella sezione precedente): la componente assiale  $\hat{L}_z$  può soltanto assumere i valori **intei** (ricordiamo che stiamo lavorando in unità di  $\hbar$ )

$$L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \dots$$

Adesso che conosciamo la soluzione azimutale non ci resta che inserirla nell'equazione per  $\hat{\mathbf{L}}^2$ : otteniamo

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2\Theta(\theta)\Phi_m(\phi) &= -\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\Theta(\theta)\Phi_m(\phi) \\ &= -\left[-\frac{m^2}{\sin^2\theta} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\Theta(\theta)\Phi_m(\phi)\end{aligned}$$

dove abbiamo usato  $\partial_\phi\Phi = -m^2\Phi$ . Così facendo l'equazione agli autovalori dipende soltanto dalla variabile  $\theta$

$$\begin{aligned}-\left[-\frac{m^2}{\sin^2\theta} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\Theta(\theta)\Phi_m(\phi) &= l(l+1)\Theta(\theta)\Phi_m(\phi) \\ \Rightarrow -\left[-\frac{m^2}{\sin^2\theta} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\Theta(\theta) &= l(l+1)\Theta(\theta)\end{aligned}$$

che non è integrabile a vista... Riportiamo direttamente la soluzione, in cui emerge di nuovo che, oltre ad  $m$ , anche  $l$  deve essere quantizzato e  $|m| \leq l$ :

$$\Theta_{lm}(\theta) = c_m P_l^m(\cos\theta)$$

per un'opportuna costante di normalizzazione  $c_m$ , ottenuta richiedendo

$$\int_{-1}^1 \Theta_{lm}^* \Theta_{l'm'} d\cos\theta = \delta_{ll'}$$

mentre  $P_l^m(x)$  è la funzione associata all' $l$ -esimo **polinomio di Legendre**, definita dall'operazione

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \left(\frac{d}{dx}\right)^m P_l(x) \quad (6.13)$$

dove il polinomio di Legendre  $P_l$  è espresso tramite la **formula di Rodrigues**

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2 - 1)^l \quad (6.14)$$

La cosa più importante, al netto della questione tecnica sulle soluzioni analitiche del problema, è che le autofunzioni del momento angolare sono le cosiddette **armoniche sferiche**

$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta)$$

Riportiamo soltanto per completezza la costante di normalizzazione

$$C_{lm} = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

scelta in modo tale che le armoniche sferiche siano **ortonormali** nel senso scritto sopra, che è equivalente a, detto  $d\Omega$  il differenziale dell'angolo solido,

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

Esse formano una base completa ortonormale per lo spazio di Hilbert delle funzioni a quadrato sommabile: una generica funzione  $f(\theta, \phi) \in L^2$ , dipendente dalle usuali variabili angolari  $\theta, \phi$  si può espandere in serie di Fourier come

$$f(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi)$$

Di seguito scriviamo le prime di queste funzioni:

$$\begin{aligned} Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} & Y_1^0 &= i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_1^{-1} &= i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} & Y_1^1 &= i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \end{aligned}$$

È interessante notare che  $Y_0^0$  è a simmetria sferica: questo è coerente col fatto intuitivo che il momento angolare è nullo, il sistema non possiede direzioni preferenziali, i.e. è invariante per rotazioni.

Nel seguito della trattazione useremo entrambe le scritture  $Y_{lm}$  e  $Y_l^m$ , che sono da intendersi come equivalenti.

### 6.2.3 Autofunzioni e parità

La presenza di un'invarianza per rotazioni può essere connessa al comportamento delle autofunzioni sotto l'azione dell'operatore parità, già introdotto al Cap. 4. Infatti, dal momento che

$$\hat{\mathcal{P}} f(\mathbf{x}) = f(-\mathbf{x})$$

la trasformazione  $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$  può essere interpretata come una rotazione di angolo  $\pi$  attorno a un asse ortogonale a  $\mathbf{x}$ .<sup>4</sup>

Evidentemente l'operatore parità  $\hat{\mathcal{P}}$  commuta con il momento angolare  $\hat{\mathbf{L}}$ , essendo

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

con  $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$  entrambi dispari sotto parità, i.e. considerando una qualsiasi funzione d'onda  $\psi(\mathbf{r})$  vale l'equazione

$$\hat{\mathcal{P}} \hat{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) = -\mathbf{r} \psi(-\mathbf{r}) = -\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{P}} \psi(\mathbf{r})$$

Ciò significa che

$$\hat{\mathcal{P}} \hat{\mathbf{r}} = -\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{P}}$$

ovvero  $\hat{\mathcal{P}}$  e  $\hat{\mathbf{r}}$  anticommutano, e l'analogo vale per l'impulso:

$$\hat{\mathcal{P}} \hat{\mathbf{p}} = -\hat{\mathbf{p}} \hat{\mathcal{P}}$$

Segue che la parità e gli operatori  $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$  devono condividere una base di autostati comuni. D'altra parte abbiamo già derivato l'unico possibile set di

autostati comuni di  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{L}_z$ : si tratta degli stati  $|l, m\rangle$ . Allora, grazie alle relazioni di commutazione con la parità, deduciamo che questi devono essere anche<sup>5</sup> autostati di  $\hat{\mathcal{P}}$ : poniamo

$$\hat{\mathcal{P}}|l, m\rangle = \lambda_{l,m}|l, m\rangle$$

D'altronde, se  $[\hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathbf{L}}] = 0$ , cioè se  $[\hat{\mathcal{P}}, \hat{L}_i] = 0$  con  $i = x, y, z$ , allora segue subito che  $[\hat{\mathcal{P}}, \hat{L}_\pm] = 0$ . Infatti  $\hat{L}_\pm$  sono due combinazioni lineari delle componenti del vettore di operatori  $\hat{\mathbf{L}}$ . Da questa relazione di commutazione, ricordando che

$$\hat{L}_\pm |l, m\rangle \propto |l, m \pm 1\rangle$$

si evince che devono essere uguali le due seguenti espressioni

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{P}}\hat{L}_+|l, m\rangle &= \hat{\mathcal{P}}c_+|l, m\rangle = \lambda_{l,m+1}c_+|l, m\rangle \\ \hat{L}_+\hat{\mathcal{P}}|l, m\rangle &= \hat{L}_+\lambda_{l,m}|l, m\rangle = c_+\lambda_{l,m}|l, m\rangle\end{aligned}$$

da cui deriva  $\lambda_{l,m} = \lambda_{l,m+1}$  (e l'analogo vale ovviamente per l'operatore di discesa). Abbiamo quindi derivato un'importante proprietà: **la parità delle autofunzioni del momento angolare dipende unicamente da  $l$** , quindi possiamo scrivere direttamente

$$\hat{\mathcal{P}}|l, m\rangle = \lambda_l|l, m\rangle$$

La dipendenza da  $l$  può essere calcolata rapidamente. Con riferimento alla Fig. 6.2, ricordando l'azione globale di  $\hat{\mathcal{P}}$  in coordinate sferiche

$$r \rightarrow r \quad \theta \rightarrow \pi - \theta \quad \phi \rightarrow \pi + \phi$$

se andiamo a considerare l'armonica sferica  $l$ - $m$ -esima

$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta)$$

ci basterà calcolare l'azione della parità nel solo caso  $m = l$  per determinarne il comportamento sull'intera famiglia a  $l$  fissato. Ricordando le forme esplicite riportate in Eq. (6.13) e Eq. (6.14), in questo caso il calcolo si semplifica notevolmente, essendo

$$\begin{aligned}P_l^l(x) &= (1-x^2)^{l/2} \left(\frac{d}{dx}\right)^l \left[\frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2-1)^l\right] \\ &\propto (1-x^2)^{l/2}\end{aligned}$$

dove abbiamo banalmente derivato  $2l$  volte un polinomio di grado  $2l$ . Inseriamo quest'informazione nel calcolo dell'azione della parità sull'autofunzione  $l$ - $l$ -esima ( $A_l \in \mathbb{C}$ ):

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{P}}Y_l^l(\theta, \phi) &= \hat{\mathcal{P}}A_l(1-\cos^2 \theta)^{l/2} e^{il\phi} \\ &= A_l \sin^l(\pi - \theta) e^{il(\pi+\phi)} \\ &= A_l \sin^l \theta e^{il\phi} e^{il\pi} = (-1)^l Y_l^l(\theta, \phi)\end{aligned}$$

per cui possiamo concludere che **l'intera famiglia di armoniche  $l$ - $m$ -esime ha parità  $(-1)^l$**  i.e. per  $l$  pari le autofunzioni del momento angolare<sup>6</sup> sono pari, per  $l$  dispari sono dispari.

### 6.3 SISTEMI A POTENZIALE CENTRALE

Ci apprestiamo adesso ad analizzare quantisticamente la dinamica di sistemi fisici a potenziale centrale, cioè sottoposti a un potenziale  $U(r)$  unicamente dipendente dalla distanza tra il centro di forza e il punto di applicazione. Come vedremo, la trattazione ci porterà naturalmente a descrivere il modello quantistico dell'atomo di idrogeno.

Cominciamo scrivendo l'hamiltoniana di una particella libera in un potenziale centrale

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{r}})$$

di cui possiamo immediatamente dare una rappresentazione in coordinate

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r)$$

Per determinare lo spettro dell'hamiltoniana, l'equazione da risolvere è

$$\hat{H}\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r})$$

La risoluzione di questa equazione non è banale, dal momento che la forma generale dell'hamiltoniana produce in coordinate cartesiane diverse equazioni differenziali accoppiate. Come visto precedentemente, l'approccio migliore consiste nel passaggio alle coordinate sferiche – che sono la scelta più naturale nella descrizione di problemi invarianti sotto rotazioni, come in questo caso.

Una parentesi molto istruttiva, e dalla quale si ricava naturalmente la soluzione al nostro problema – oltre che le correzioni alla soluzione approssimata del problema alle autofunzioni del semplice sistema dell'atomo di idrogeno – è data dalla trattazione generale del problema di due corpi interagenti secondo un potenziale unicamente dipendente dalla distanza relativa. Sistemi di questo tipo sono frequenti e di sicuro interesse fisico: la prossima sezione è dedicata a evidenziare come la soluzione a problemi centrali possa essere immediatamente applicata in sistemi fisici rilevanti.

#### 6.3.1 Il problema a due corpi in interazione

Consideriamo dunque un sistema isolato composto di due particelle  $m_1, m_2$ ; il termine di potenziale dell'hamiltoniano sia dipendente dalla distanza relativa, i.e.

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

Il problema può essere notevolmente semplificato passando alle coordinate relativa e del centro di massa

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad \mathbf{R} \equiv \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}$$

Si può dimostrare che, riscritta in queste coordinate, l'hamiltoniana si riduce alla forma a variabili separate

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(\hat{r})$$

dove abbiamo definito la **massa totale**  $M \equiv m_1 + m_2$  e la **massa ridotta**  $\mu \equiv m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  e i due impulsi relativo e del centro di massa, rappresentabili in coordinate come

$$\hat{\mathbf{P}} \equiv -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}} \quad \hat{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$$

In questa forma le variabili sono separate, quindi possiamo già intuire che la soluzione al problema differenziale sarà fattorizzata. In rappresentazione delle coordinate, avremo dunque l'equazione alle autofunzioni

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + U(r) \right] \psi_{E_{\text{tot}}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E_{\text{tot}} \psi_{E_{\text{tot}}}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

Cerchiamo una soluzione a variabili separate:

$$\psi_{E_{\text{tot}}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi_{E_M}(\mathbf{R}) \phi_{E_\mu}(\mathbf{r})$$

dove abbiamo distinto i contributi all'energia in quello associato alla massa totale, connessa alla coordinata del centro di massa, e della massa ridotta, connessa alla coordinata relativa. Questa separazione, la cui ragione sarà chiara tra breve, permette di mappare esattamente il problema presente in quello di una particella di massa  $\mu$  soggetta a un potenziale centrale.

Ponendo  $E_{\text{tot}} = E_M + E_\mu$ , il problema alle autofunzioni si può riscrivere come

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + U(r) \right] \Phi_{E_M}(\mathbf{R}) \phi_{E_\mu}(\mathbf{r}) = (E_M + E_\mu) \Phi_{E_M}(\mathbf{R}) \phi_{E_\mu}(\mathbf{r})$$

che, si separa immediatamente nelle due equazioni

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \Phi_{E_M}(\mathbf{R}) &= E_M \Phi_{E_M}(\mathbf{R}) \\ \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + U(r) \right] \Phi_{E_\mu}(\mathbf{r}) &= E_\mu \Phi_{E_\mu}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

La parte relativa alla  $\mathbf{R}$  è risolta evidentemente da un'autofunzione "onda piana" con apposita relazione di dispersione, come già discusso nel Cap. 4:

$$\Phi_{E_M}(\mathbf{R}) \propto \exp\{-i\mathbf{K}_M \cdot \mathbf{R}\} \quad E_M = \frac{\hbar^2 K_M^2}{2M}$$

rendendo il centro di massa completamente equivalente a una particella libera<sup>7</sup> nello spazio tridimensionale – in modo coerente con quanto noto in Meccanica Classica.

D'altronde, la parte descritta dalla coordinata relativa  $\mathbf{r}$  è del tutto equivalente a quella di una particella di massa  $\mu$  immersa in campo centrale (che studieremo nella prossima sezione), per cui una soluzione generale al problema di due corpi interagenti secondo un  $U(r)$  è data dalla moltiplicazione di una soluzione al problema di particella libera e di una al problema di particella legata in campo centrale.

Quando poi una delle due masse coinvolte è molto maggiore dell'altra, e.g.  $m_2 \gg m_1$ , si ha che

$$M \rightarrow m_2 \quad \mu \rightarrow m_1$$

Questo è il caso dell'atomo di idrogeno: come vedremo, una buona soluzione approssimata è data proprio dallo studio del protone come "massa libera" del sistema, sostanzialmente inalterato nella posizione dalla presenza dell'elettrone, e di quest'ultimo come massa legata in un potenziale centrale a centro fisso.

### 6.3.2 Una particella in campo centrale

Come visto nella precedente sezione, la soluzione a un problema centrale è utile alla descrizione di svariati sistemi fisici; consideriamo dunque una particella immersa in un campo centrale. L'equazione agli autovalori rappresentata in coordinate si riduce a

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi(\mathbf{r}) = 0$$

Scegliamo le coordinate sferiche: l'espressione del laplaciano si complica

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)}_{= -\hat{\mathbf{L}}^2 / (r\hbar)^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

ma può essere notevolmente semplificata riconoscendo la presenza dell'operatore  $\hat{\mathbf{L}}^2$  come espresso in Eq. (6.11):

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbf{I}}^2}{r^2}$$

dove abbiamo definito  $\hat{\mathbf{I}} \equiv \hat{\mathbf{L}}/\hbar$ . In questa forma, l'equazione agli autovalori può essere ridotta a puramente radiale: infatti, cercando una soluzione del tipo

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (6.15)$$

dove la parte angolare è composta da armoniche sferiche (come trattato nelle sezioni precedenti), autofunzioni dell'operatore  $\hat{\mathbf{I}}^2$  per l'autovalore  $l(l+1)$

$$\hat{\mathbf{I}}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi)$$

per cui, sostituendo e semplificando nell'equazione alle autofunzioni:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) R(r) = 0 \quad (6.16)$$

Quest'equazione è chiaramente valida per qualsiasi scelta del potenziale centrale  $U(r)$ ; determinata la  $R(r)$ , una semplice moltiplicazione per la parte angolare – fornita dalle  $Y_l^m$  – costituisce la soluzione completa al problema.

Definiamo la nuova funzione  $\chi(r)$ , detta **funzione radiale ridotta**, e il **potenziale efficace**  $U_{\text{eff}}(r)$

$$\chi(r) = rR(r) \quad U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

L'Eq. (6.16) diviene quindi:

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

Questa scrittura è evidentemente simile alle equazioni differenziali trovate nel caso di potenziali in una dimensione; nel Cap. 4 se ne sono discussi gli andamenti asintotici, e alcuni casi semplici sono stati trattati nel Cap. 2 della Parte II. In questo contesto, una "buca di potenziale efficace"  $U_{\text{eff}}(r)$  può essere intesa come una "regione abitabile" per la particella, fuori dalla quale la funzione d'onda decade molto rapidamente definendo l'analogico quantistico del concetto classico di orbita radialmente limitata in una corona circolare<sup>8</sup>.

Al momento della definizione di  $\chi(r)$  abbiamo implicitamente imposto una condizione al bordo: poiché non ammettiamo divergenze in  $R(r)$ , deve essere sempre vero

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\chi(r)}{r} = \lim_{r \rightarrow 0} R(r) = 0$$

il che implica  $\chi(0) = 0$ .

La regione accessibile al moto è ovviamente limitata inferiormente:  $r > 0$ . Nello studio delle caratteristiche generali dei potenziali unidimensionali (Sez. 4.4), abbiamo dimostrato che la limitatezza del moto implica la non-degenerazione degli autovalori di  $\hat{H}$  rispetto alle autofunzioni  $\psi(x)$ <sup>9</sup>. In questo caso, possiamo utilizzare tale risultato per osservare che la coppia di autovalori di  $\hat{H}$  e  $\hat{l}^2$  è non degenera rispetto alle funzioni radiali  $R_{El}(r)$ . Ciò equivale ad affermare che ogni coppia di autovalori  $E, l$  è in relazione biunivoca con una funzione radiale  $R_{El}(r)$ , anche se in base ad Eq. (6.15) essa è associabile a più autofunzioni differenti, grazie alla variabilità di  $m$ . Risulta quindi evidente che

$$\{|E, l, m\rangle\} \quad \text{è un set completo non degenero}$$

i cui elementi sono definiti al variare di  $E, l$  e  $m$  – che presto in contesto atomico chiameremo **numeri quantici principale, secondario e magnetico**.

Per concludere, notiamo che la normalizzazione delle funzioni d'onda dipende senz'altro dalla dinamica del sistema:

$$\int d^3x R_{E'l'}^* Y_{l'm'}^* R_{El} Y_l^m \stackrel{?}{=} \delta_{E'E} \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

Infatti, mentre la parte angolare è già normalizzata (ricordiamo che nella nostra soluzione è rappresentata dalle armoniche sferiche normalizzate)

$$\int \sin \theta d\theta d\phi Y_{l'm'}^* Y_l^m = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

per moti superiormente limitati, i.e. a spettro discreto, sarà possibile normalizzare anche la parte radiale, mentre nel caso continuo ci si ridurrà a una *delta di Dirac*:

$$\int r^2 dr R_{E'l'}^* R_{El} \delta_{l'l} \delta_{m'm} = \begin{cases} \delta_{E'E} \delta_{l'l} \delta_{m'm} & \text{nel caso limitato;} \\ \delta(E' - E) \delta_{l'l} \delta_{m'm} & \text{nel caso non limitato.} \end{cases}$$

### 6.3.3 Andamento della funzione d'onda nell'origine

Consideriamo una coppia di particelle 1, 2, rispettivamente di massa  $m_1, m_2$ , che interagiscono sotto l'effetto di un potenziale  $U(r)$ , dove  $r$  è ovviamente il modulo della posizione di una relativamente all'altra. Assumiamo inoltre che

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 U(r) = 0$$

In altre parole, ci stiamo restringendo alla classe di potenziali che, nel limite  $r \rightarrow 0$ , divergono in modo non più violento di  $1/r^2$ . Un buon esempio di sistema così costituito è il *positronio*, cioè una coppia legata elettrone-positrone ( $e^+e^-$ ) che sopravvive, sull'orlo dell'annichilazione, per un tempo sempre molto breve, ma variabile a seconda dello stato quantistico in cui si trova. In tal caso, il potenziale di interazione tra i due corpi è quello Coulombiano, divergente come  $1/r$ .

Come abbiamo visto, il problema a due corpi è mappato in un problema a corpo singolo di massa  $\mu = (m_1 m_2) / (m_1 + m_2)$ , che si muove in un potenziale centrale. La funzione d'onda del sistema è, al solito,

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

ovvero risulta fattorizzabile in una parte angolare, con la forma di *armonica sferica*, e in una radiale, che deve soddisfare un'equazione differenziale corrispondente alla Eq. (6.16), in cui a  $m$  sostituiamo la massa ridotta  $\mu$ .

Se siamo interessati alla probabilità di collisione tra 1 e 2, in termini quantistici dobbiamo studiare il modulo quadro della funzione d'onda nell'intorno di  $r = 0$ <sup>10</sup>. Moltiplicando l'equazione radiale per  $r^2$  otteniamo

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) - l(l+1)R(r) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E - U(r)) R(r) = 0$$

Assumendo che  $E$  sia una costante ed in condizioni sufficientemente regolari, rammentando l'ipotesi su  $U(r)$ , nel limite  $r \rightarrow 0$  l'equazione si riduce a

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) - l(l+1)R(r) \simeq 0 \quad (6.17)$$

avente soluzione

$$R(r) \propto r^l$$

*Dimostrazione.* La verifica è immediata per calcolo diretto: posto  $R(r) = \alpha r^l$ , con  $\alpha \in \mathbb{C}$ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) &= \alpha \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} r^l \right) \\ &= \alpha l \frac{\partial}{\partial r} r^{l+1} \\ &= l(l+1)\alpha r^l = l(l+1)R(r)\end{aligned}$$

il che, banalmente, dimostra quanto affermato.  $\square$

Ricordiamo che tale soluzione è valida soltanto a distanze molto minori di quelle tipiche del problema, i.e. per  $r \ll d$ .

Per  $l = 0$ , cioè per un cosiddetto **stato s**, la probabilità di collisione è non nulla, poiché la densità di probabilità in posizione  $dP = |\psi|^2 \propto |R|^2$  è diversa da zero nell'origine. Per stati con  $l \neq 0$ , la probabilità di avere uno scontro è invece soppressa sempre più al crescere di  $l$ . Questo risultato presenta un'interessante analogia con la Meccanica Classica, in cui un momento angolare non nullo determina l'esistenza di una barriera di potenziale che impedisce la sovrapposizione di due corpi puntiformi. Nel caso del positronio, ci attendiamo quindi che gli autostati dell'energia siano tanto più stabili quanto è maggiore l'autovalore del momento angolare a loro relativo.

#### 6.3.4 Ancora sulla particella libera

La particella libera costituisce il caso più semplice di sistema a simmetria centrale. Ovviamente, in tal caso qualsiasi punto dello spazio è un possibile centro di simmetria. Nella trattazione di questo sistema quantistico, abbiamo derivato le autofunzioni dell'hamiltoniano, corrispondenti a **onde piane**

$$\psi_k(\mathbf{r}) = C \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = C \exp[i(k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3)] \quad (6.18)$$

con  $k_i, x_i \{i = 1, 2, 3\}$  coordinate cartesiane di  $\mathbf{k}, \mathbf{r}$ . L'energia è legata al modulo del vettore numero d'onda  $\mathbf{k}$  dalla relazione di dispersione

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

con  $k = |\mathbf{k}|$ . Lo spettro è evidentemente continuo: ogni valore di  $E$  è infinitamente degenero, poiché  $\forall E$  esistono infiniti vettori  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$  tali da soddisfare la relazione di dispersione: basta cambiarne la direzione. Inoltre tali autofunzioni non sono normalizzabili se non a meno di una delta di Dirac:

$$\int d^3x \psi_k^* \psi_{k'} = \delta(k - k')$$

Per studiare il sistema della particella libera dal punto di vista della simmetria centrale, con un cambiamento di coordinate potremmo riscrivere l'equazione (6.18) in coordinate sferiche, altrimenti una via praticabile consiste nel risolvere direttamente in coordinate sferiche l'equazione per le autofunzioni

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E \right) \psi_{Elm}(\mathbf{r}) = 0$$

con

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{El}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

In coordinate sferiche, quindi, la parte radiale  $R_{El}(r)$  deve risolvere

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \right] R_{El}(r) = 0 \quad (6.19)$$

o, equivalentemente, indicando con un apice le derivate rispetto a  $r$ ,

$$R''_{El} + \frac{2}{r} R'_{El} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{El} = 0$$

mentre la parte angolare è sempre costituita dalle armoniche sferiche. Le soluzioni dell'equazione (6.19) sono

$$\psi_{klm}(r, \theta, \phi) = j_l(kr)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

dove indichiamo con  $j_l(kr)$  le **funzioni di Bessel sferiche**.

## NOTE

1. In realtà, questa terna è solo una delle possibili scelte.
  2. Infatti, dal momento che le tre componenti di  $\hat{\mathbf{J}}$  non commutano, i.e.  $[\hat{J}_n, \hat{J}_m] = i\hbar\epsilon_{nmk}\hat{J}_k$ , esse non possono condividere lo spettro. Conseguentemente è impossibile diagonalizzare simultaneamente  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e l'intero  $\hat{\mathbf{J}}$ .
  3.  $\hat{\mathbf{L}}^2$  può essere calcolato in modo tedioso, sviluppando il prodotto scalare
- $$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[ \bar{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} - \bar{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \cdot \left[ \bar{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \bar{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right]$$
- e tenendo a mente un'altra caratteristica delle coordinate sferiche, cioè le derivate non banali dei versori:
- $$\partial_\theta \bar{\theta} = -\bar{r}, \quad \partial_\theta \bar{\phi} = 0, \quad \partial_\phi \bar{\theta} = \bar{\phi} \cos \theta, \quad \partial_\phi \bar{\phi} = -\bar{r} \sin \theta - \bar{\theta} \cos \theta$$
4. Non stiamo assolutamente affermando che la parità sia una rotazione! Stiamo dicendo che ciascun punto  $x$  viene mappato dalla parità nello stesso punto in cui verrebbe mappato da una rotazione di angolo  $\pi$  attorno ad un asse ortogonale a  $x$ ; proprio perché l'asse dipende dal punto, non esiste una rotazione **globale** di angolo  $\pi$  attorno a qualche asse che riproduca l'azione della parità.
  5. Qui facciamo un passaggio sottile: se tre operatori  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  e  $\hat{C}$  commutano tra loro, allora devono condividere una base comune di autostati simultanei; tuttavia non è affatto detto che una *qualsiasi* base di autostati simultanei, e.g. di  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  sia anche una base di autostati di  $\hat{C}$ . Qui il discorso è diverso: i due numeri quantici  $l, m$  descrivono esattamente *tutti e soli* gli autostati simultanei di  $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$ . Per dirla in altri termini: è vero che le funzioni d'onda descritte da  $f_1(r)Y_l^m(\theta, \phi)$  e  $f_2(r)Y_l^m(\theta, \phi)$ , con  $f_1 \neq f_2$ , rappresentano in generale stati diversi; tuttavia la parte radiale è trasparente agli operatori  $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z$ , le cui autofunzioni sono parametrizzate completamente dai numeri quantici  $l, m$ .
  6. Chiaramente abbiamo sottinteso che la parte radiale di tali autofunzioni è invariante sotto parità, per cui l'abbiamo direttamente esclusa dai calcoli.
  7. Lo spettro associato alla "particella"  $M$  sarà ovviamente continuo e fortemente degenere, come del resto è lecito aspettarsi per una particella libera: per ciascuna energia, la relazione di dispersione fornisce infinite soluzioni  $\mathbf{K}_M$ , in quanto ogni direzione risolve tale relazione.
  8. Un esempio classico è il problema dell'orbita di una massa attorno a un'altra sotto l'interazione gravitazionale: a fissato momento angolare, è possibile determinare l'esistenza di una

distanza minima e/o massima tra i due corpi, che definiscono proprio i limiti inferiore e superiore alla coordinata relativa tra i due.

9. Per la verità, il teorema enunciato dimostra che gli autostati di un'hamiltoniana **a spettro discreto** sono non degeneri; è possibile ripercorrere la dimostrazione assumendo moto limitato e ottenere lo stesso risultato. Peraltro, la limitatezza del moto da un lato (per noi è  $r = 0$ ) non pone problemi: basta calcolare i limiti asintotici nella dimostrazione del problema per  $r \rightarrow -\infty$ , dove la funzione d'onda si annulla, anche se questa operazione non ha una interpretazione matematica diretta. La dimostrazione è ugualmente valida, garantendo la legittimità della nostra successiva deduzione.
10. Studiamo il limite per  $r \rightarrow 0$  in approssimazione di particelle puntiformi. In generale, però, dovremo analizzare un intorno del punto  $r = 0$  con una larghezza determinata dalle scale caratteristiche della collisione specifica. Ad esempio, nel caso del positronio la distanza di collisione è dell'ordine della lunghezza d'onda Compton dell'elettrone

$$\lambda_e^C = \frac{\hbar}{m_e c} \simeq 2.43 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

## IN BREVE...

- Il gruppo delle **rotazioni** tridimensionali è un gruppo non commutativo. Per descrivere le proprietà della sua azione sulle coordinate,

$$R(\theta) : \mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}' \equiv R\mathbf{x}$$

è utile considerarne il comportamento intorno all'identità. Le tre matrici  $\Omega_i$

$$\Omega_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \quad \Omega_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \Omega_3 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

sono una possibile scelta di generatori, in quanto

$$R_k(\varepsilon) = \mathbb{1} - i\varepsilon\Omega_k \quad k = 1, 2, 3$$

rappresenta una rotazione infinitesima intorno all'asse cartesiano  $\hat{\mathbf{k}}$ . Poiché compattamente  $(\Omega_i)_{jk} = -i\epsilon_{ijk}$  una generica rotazione infinitesima attorno ad un asse  $\hat{\mathbf{n}}$  si scrive

$$R_{\hat{\mathbf{n}}} = \mathbb{1} - \varepsilon_k \epsilon_{ijk} \implies \mathbf{x}' = R_{\hat{\mathbf{n}}}\mathbf{x} = \mathbf{x} + \delta\theta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}$$

- Definiamo il **momento angolare**  $\hat{\mathbf{j}}$  come il **generatore** del gruppo continuo delle rotazioni. Pertanto un operatore unitario di rotazione sullo spazio di Hilbert si scriverà

$$\hat{U}_R(\hat{\mathbf{n}}, \theta) = e^{-i\theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{j}}/\hbar}$$

Sfruttando l'azione nota delle rotazioni nello spazio delle coordinate:

$$U_R \psi(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x})$$

si può dimostrare, avvalendoci di rotazioni infinitesime, che gli operatori momento angolare devono soddisfare le seguenti relazioni di commutazione

$$[\hat{j}_a, \hat{j}_b] = i\hbar \epsilon_{abc} \hat{j}_c$$

Invece i vettori  $\hat{\mathbf{v}}$ , come ad esempio la posizione  $\hat{\mathbf{x}}$  e l'impulso  $\hat{\mathbf{p}}$  sono caratterizzati dalla relazione

$$[\hat{v}_a, \hat{j}_b] = i\hbar \epsilon_{abc} \hat{v}_c$$

- Come conseguenza delle relazioni di commutazione, il momento angolare è quantizzato in modo universale. L'operatore momento angolare totale

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 \quad [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_a] = 0$$

può essere diagonalizzato simultaneamente a  $\hat{j}_z$ , e ne risulta che gli autovalori possibili, con la convenzione

$$\hat{\mathbf{j}}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad \hat{j}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

corrispondono a numeri quantici solo interi o semi-interi

$$m \in \{-j, \dots, j\} \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

- In rappresentazione delle coordinate  $\hat{\mathbf{j}}$  agisce come **momento angolare orbitale**  $\hat{\mathbf{L}}$ :

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

Esso risulta legato alle derivate rispetto agli angoli in coordinate sferiche. Le autofunzioni simultanee di  $\hat{\mathbf{L}}^2$  e  $\hat{L}_z$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \langle \mathbf{x}|l, m\rangle$$

sono le **armoniche sferiche** e si possono trovare scrivendo l'equazione agli autovalori in termini di suddette derivate, e separando le variabili. La condizione che debba essere  $Y_{lm}(\theta, \phi + 2\pi) = Y_{lm}(\theta, \phi)$  impone che  $m$  sia intero, e dunque anche  $l$ . Esplicitamente

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = C_{lm} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta)$$

dove  $P_l^m$  sono associati ai polinomi di Legendre. La parità delle armoniche sferiche dipende solo da  $l$ :

$$\hat{\mathcal{P}} Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi)$$

- ◊ Il problema di due particelle interagenti secondo un potenziale che dipende solo dalla distanza reciproca

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

si disaccoppia passando alla coordinata del centro di massa  $\mathbf{R}$  e a quella relativa  $\mathbf{r}$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(\hat{r})$$

ed è dunque equivalente ad un problema di particella libera di massa pari alla massa totale, e a quello di una particella di massa pari alla massa ridotta  $\mu$  sottoposta ad un potenziale centrale.

- ◊ Per un moto in campo centrale, l'equazione agli autovalori di  $\hat{H}$ ,  $\hat{H}\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x})$  si risolve separando la variabile radiale da quelle angolari. La funzione d'onda radiale  $R(r)$  soddisfa un'equazione simile al caso unidimensionale, a patto di definire

$$U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad \chi(r) = rR(r)$$

Infatti risulta

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

a cui corrisponde un set discreto di soluzioni  $R_{nl}$ . La parte angolare è data dall'armonica sferica  $l$ - $m$ -esima:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

- ◊ Se il potenziale  $U(r)$  non diverge troppo violentemente nell'origine, cioè se per  $r \rightarrow 0$ , si ha  $r^2 U(r) \rightarrow 0$ , allora si ha l'andamento asintotico per "piccoli"  $r$

$$R(r) \propto r^l$$

dunque la probabilità di trovare la particella vicino all'origine è sempre più soppressa al crescere di  $l$ .

- ◊ L'equazione  $\hat{H}\psi = E\psi$  per particella libera può essere risolta in coordinate sferiche, e dà luogo alle *funzioni di Bessel sferiche*.



# 7

## L'ATOMO DI IDROGENO E L'OSCILLATORE ARMONICO 3D

In questo capitolo è discusso uno dei sistemi quantistici tridimensionali più importanti a livello storico e concettuale: l'atomo di idrogeno, la cui descrizione quantistica risolve l'imbarazzo dovuto all'incompatibilità tra la stabilità osservata della materia e le predizioni classiche della teoria dell'irraggiamento. È inoltre trattata la naturale estensione tridimensionale del problema dell'oscillatore armonico, con le relative considerazioni sulla separabilità dei moti sulle 3 coordinate cartesiane.

### 7.1 L'ATOMO DI IDROGENO

Finalmente possediamo i mezzi per iniziare la trattazione dell'atomo: un sistema fisico che, come abbiamo visto, ha un comportamento che si mostra in evidente disaccordo con le predizioni classiche, e il cui studio è stato cruciale nel gettare le fondamenta della Meccanica Quantistica. Per non montarci troppo la testa, consideriamo l'atomo più semplice di tutti: quello di idrogeno, composto da un elettrone di carica  $-e$  e massa  $m_e$ , e da un protone con carica  $+e$  e massa  $m_p$ , legati dal potenziale Coulombiano, che in MKS si scrive

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Ovviamente  $r = |\mathbf{r}|$ , dove  $\mathbf{r}$  è la posizione dell'elettrone rispetto al protone:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$$

Seguendo quanto abbiamo appreso nella sezione precedente, questo problema a due corpi può essere convertito in un problema equivalente, in cui una particella di massa

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

si muove nel potenziale centrale

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Notiamo che, essendo  $m_e/m_p \simeq 1/1836$ , la differenza fra  $m_e$  e  $\mu$  è relativamente piccola:

$$\mu = m_e \frac{1}{1 + m_e/m_p} \simeq m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right)$$

Nel calcolo che segue, possiamo quindi porre direttamente  $\mu \simeq m_e$ .

### 7.1.1 Le autofunzioni del sistema

In questa sezione ci occuperemo di riscrivere l'equazione (6.16) in una forma adimensionale, che ci porterà a trovare le autofunzioni del sistema. Non le deriveremo direttamente: giungeremo all'equazione differenziale che definisce il problema e là termineremo tutte le nostre abilità di risoluzione di EDP, affidandoci incondizionatamente al lavoro di qualcun altro.

**SCALE CARATTERISTICHE DEL PROBLEMA** Come sappiamo, è sempre consigliabile conoscere le scale dimensionali tipiche del problema che stiamo trattando, soprattutto in vista di una imminente riscrittura delle equazioni differenziali in **unità naturali**. Nel caso presente, conosciamo le quantità

$$\begin{aligned} \text{massa dell'elettrone} \quad m_e &\simeq 0.5 \text{ MeV}/c^2 \\ \text{costante di Planck ridotta} \quad \hbar &\simeq 6.58 \cdot 10^{-16} \text{ eVs} \\ \text{costante di struttura fine} \quad \alpha &= e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) \simeq 1/137 \end{aligned}$$

da cui possiamo definire

- il **raggio di Bohr** come lunghezza caratteristica:

$$r_B = \frac{\hbar}{m_e c \alpha} = \frac{\hbar^2 4\pi \epsilon_0}{m_e e^2} \simeq 0.5 \text{ \AA}$$

pari a  $\lambda_e^C / \alpha$ , dove  $\lambda_e^C$  è la lunghezza d'onda Compton dell'elettrone.

- un impulso caratteristico:

$$p_B = m_e c \alpha = \frac{\hbar}{r_B}$$

- una energia tipica  $E_B$ , corrispondente alla **costante di Rydberg**:

$$E_B = \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 = 1 \text{ Ry} \simeq 13.6 \text{ eV}$$

- un periodo caratteristico  $T_B$ :

$$T_B = \frac{\hbar}{E_B} \sim 10^{-17} \text{ s}$$

Nel riconoscimento delle scale tipiche, la potenza di  $\alpha$  non è deducibile da ragioni dimensionali, essendo  $\alpha$  un numero puro, tuttavia ci possono venire in aiuto da un lato le osservazioni sperimentali, dall'altro l'analogia con la Fisica Classica. Ad esempio, per quanto riguarda la costante di Rydberg, possiamo affermare che rappresenti correttamente la scala energetica caratteristica sia dopo aver misurato le energie relative alle righe spettrali dell'atomo di idrogeno, sia perché corrisponde alla formula classica non relativistica  $E = mv^2/2$ . Ripetiamo che, in queste espressioni, abbiamo utilizzato l'approssimazione  $\mu \simeq m_e$ : se anziché l'atomo di idrogeno stessimo studiando il positronio, allora il raggio di Bohr non potrebbe che essere scritto come

$$r_B = \frac{\hbar}{\mu c \alpha}$$

Ridefiniamo quindi le variabili adimensionali

$$\bar{r} = \frac{r}{r_B} \quad \bar{E} = \frac{E}{E_B}$$

In questo modo, l'equazione (6.16) è scritta in unità naturali

$$\left[ \partial_{\bar{r}}^2 + \frac{2}{\bar{r}} \partial_{\bar{r}} - \frac{l(l+1)}{\bar{r}^2} + 2 \left( \bar{E} + \frac{1}{\bar{r}} \right) \right] R(\bar{r}) = 0$$

Definiamo poi

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2\bar{E}}} \quad \rho = \frac{2\bar{r}}{n}$$

dove assumiamo  $\bar{E} < 0 \implies E < 0$ . Stiamo infatti studiando degli stati legati, relativi a moti limitati ed aventi evidentemente energia negativa. Per fare un'analogia, in Meccanica Classica avremmo potuto affermare di stare analizzando il caso di orbite chiuse. Com'è ovvio, abbiamo posto al livello  $E = 0$  l'energia del sistema nella condizione in cui l'elettrone è libero, asintotica nel limite  $r \rightarrow \infty$ . Moltiplicando per  $n^2/4$  l'equazione appena riportata, è facile giungere a

$$\left[ \partial_{\rho}^2 + \frac{2}{\rho} \partial_{\rho} + \left( -\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} \right) \right] R(\rho) = 0$$

dove il termine  $1/4$  compreso nella parentesi è tutto ciò che resta dell'autovalore  $E$  dopo la riscrittura in unità naturali.

**COMPORTEMENTI ASINTOTICI** Analizziamo le soluzioni a grandi e piccole distanze, in modo da semplificare la struttura delle soluzioni.

- Per  $\rho \ll 1$  si trova, in modo analogo a quanto visto per l'equazione (6.17), che la soluzione è approssimata con

$$R(\rho) \propto \rho^l$$

- Per  $\rho \gg 1$  l'equazione differenziale si riduce a

$$\partial_{\rho}^2 R(\rho) - \frac{1}{4} R(\rho) = 0$$

risulta da

$$R(\rho) \propto \exp\left(\pm \frac{\rho}{2}\right)$$

Per moti limitati, solo la soluzione con il segno  $-$  è accettabile.

Come *Ansatz* possiamo porre

$$R(\rho) = C\rho^l e^{-\rho/2} L(\rho)$$

forzando la compatibilità con gli andamenti asintotici appena trovati e restringendo la nostra ricerca alla sola  $L(\rho)$ . Chiaramente, un vincolo sulle possibili soluzioni  $L(\rho)$  è che esse non compromettano i risultati relativi ai due comportamenti asintotici: ad esempio,  $L(\rho) = \exp(-\rho/3)$  o  $L(\rho) = \rho^2$  non sono accettabili.

Come equazione differenziale per  $L(\rho)$  abbiamo

$$\left[ \rho \partial_\rho^2 + (2l + 2 - \rho) \partial_\rho + (n - l - 1) \right] L(\rho) = 0$$

risolta da funzioni note con il nome poco rassicurante di *ipergeometriche confluenti*

$$L(\rho) = F(-n + l + 1, 2(l + 1), \rho)$$

In tale insieme funzionale si trovano, come casi particolari, anche le funzioni di Bessel e i polinomi di Hermite, che abbiamo già incontrato. Non tutte queste funzioni costituiscono delle soluzioni accettabili al problema, poiché deve essere rispettata la condizione energetica

$$n \in \mathbb{N} \wedge n \geq l + 1$$

che riduce le  $F$  ai **polinomi generalizzati di Laguerre**.

I polinomi di Laguerre semplici sono

$$L_k(\rho) = e^\rho \frac{d^k}{d\rho^k} (\rho^k e^{-\rho})$$

mentre quelli generalizzati derivano dai semplici secondo la definizione

$$L_k^{(s)}(\rho) = \frac{d^s}{d\rho^s} L_k(\rho)$$

Al solito, per ottenere la soluzione completa delle autofunzioni di  $\hat{H}$ , dobbiamo moltiplicare la soluzione radiale  $R_{El}(r)$  per le armoniche sferiche, che contengono la dipendenza dalle variabili angolari  $\theta, \phi$ : ponendo tutto assieme

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = -\sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{(nr_B)^3 n [(n+l)!]^3}} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (7.1)$$

dove abbiamo sostituito il pedice  $E$  con  $n$ , essendo questi in corrispondenza biunivoca secondo la definizione

$$E_n = -\frac{m_e \alpha^2 c^2}{2n^2} \quad (7.2)$$

**LO STATO FONDAMENTALE E LA SUA NORMALIZZAZIONE** Osservando l'equazione (7.2), risulta naturale definire la minima energia del sistema come

$$E_1 = -\frac{m_e \alpha^2 c^2}{2}$$

dunque anche la funzione d'onda associata a tale stato, che secondo l'equazione (7.1) sarà

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} e^{-r/r_B} \quad (7.3)$$

dove ricordiamo in particolare che, dovendo essere  $n \geq l + 1$  e  $|m| \leq l$  ed avendo fissato  $n = 1$ , le uniche possibilità per i numeri quantici rimanenti sono  $l = 0$  e  $m = 0$ .

Per esercizio, mostriamo che la funzione d'onda appena ottenuta è effettivamente normalizzata. Per fare ciò – e per rendere agevole il calcolo di integrali simili in futuro – sarà utile ricavare il risultato del seguente integrale

$$\int_0^\infty x^k e^{-\alpha x} dx$$

dove assumeremo – per i nostri scopi – di avere  $k, \alpha \in \mathbb{N}$ .<sup>1</sup> Calcolando la derivata

$$\frac{d^k}{d\alpha^k} e^{-\alpha x} = (-x)^k e^{-\alpha x} = (-1)^k x^k e^{-\alpha x}$$

riconosciamo l'integrando interessato; invertendo questa espressione ed inserendola nell'integrale da risolvere otteniamo

$$\begin{aligned} \int_0^\infty (-1)^k \frac{d^k}{d\alpha^k} e^{-\alpha x} dx &= (-1)^k \frac{d^k}{d\alpha^k} \left[ \frac{e^{-\alpha x}}{-\alpha} \right]_0^\infty \\ &= (-1)^k \frac{d^k}{d\alpha^k} \frac{1}{\alpha} \end{aligned}$$

e quindi infine

$$\int_0^\infty x^k e^{-\alpha x} dx = \frac{k!}{\alpha^{k+1}} \quad (7.4)$$

Questa tecnica risolutiva viene informalmente definita *Trucco di Feynman*. Lo stesso risultato si può ottenere riconoscendo nell'integrale da calcolare la Funzione Gamma di Eulero:

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^{+\infty} t^{z-1} e^{-t} dt \quad z\Gamma(z) = \Gamma(z+1)$$

per cui si ha

$$\Gamma(n+1) = n! \quad \text{con } n \in \mathbb{N}$$

Basta infatti eseguire un cambio di variabile nell'integrale da calcolare:

$$\int_0^\infty x^k e^{-\alpha x} dx = \frac{1}{\alpha^{k+1}} \int_0^\infty (\alpha x)^k e^{-\alpha x} d(\alpha x) = \frac{\Gamma(k+1)}{\alpha^{k+1}} = \frac{k!}{\alpha^{k+1}}$$

che è lo stesso risultato di prima.

Imponendo la condizione di normalizzazione per la funzione d'onda in Eq. (7.3), giungiamo a

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_{100}|^2 d^3 x = \int_0^{4\pi} d\Omega \int_0^\infty r^2 |\psi_{100}|^2 dr = 1$$

dove abbiamo separato l'integrazione su tutto l'angolo solido  $\Omega$  da quella sul raggio  $r$ , vista la dipendenza della funzione d'onda dalla sola variabile  $r$ . Sostituendo l'espressione per l'autofunzione otteniamo

$$\begin{aligned} 4\pi \int_0^\infty r^2 \frac{1}{\pi r_B^3} e^{-2r/r_B} dr &= 4 \int_0^\infty \frac{1}{r_B^3} r^2 e^{-2r/r_B} dr \\ &= 4 \int_0^\infty s^2 e^{-2s} ds \end{aligned}$$

avendo considerato il cambiamento di variabile  $s = r/r_B$ , in modo da ridurci alle condizioni dell'integrale sopra ricavato, dal quale otteniamo quindi

$$4 \int_0^\infty s^2 e^{-2s} ds = 4 \frac{2!}{2^3} = 1$$

come atteso.

Similmente si può verificare che l'autofunzione corrispondente alla terna  $n = 2, l = 0, m = 0$ , risulta normalizzata se espressa nella forma

$$\psi_{200}(r, \theta, \phi) = R_{20}(r)Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{8\pi r_B^3}} e^{-r/2r_B} \left(1 - \frac{r}{2r_B}\right)$$

### 7.1.2 Considerazioni sui risultati e analisi

In questa sezione ci occuperemo di analizzare più nel dettaglio i risultati ottenuti, ricavando innanzitutto la degenerazione dei livelli energetici. Passeremo poi a valutare la velocità tipica del moto dell'elettrone: il calcolo che proponiamo è svolto sul livello fondamentale, ma è concettualmente analogo al calcolo dal svolgere su qualsiasi altro livello. Infine passeremo a valutare la bontà della definizione di  $r_B$  come raggio atomico: scopriremo che, svolgendo il calcolo nel formalismo quantistico, risulterà fisicamente inesatto definire il raggio di Bohr come raggio atomico. Nell'ultima parte ci occuperemo di derivare la forma delle autofunzioni nella rappresentazione degli impulsi.

**DEGENERAZIONE DELLE AUTOFUNZIONI** Come abbiamo già avuto modo di constatare, se  $n \geq 2$ , allora ad un dato valore di  $n$  (quindi di energia  $E_n$ ) possono corrispondere in generale diversi valori (interi) di  $l$ , compresi tra 0 e  $n - 1$ ; a sua volta, il numero quantico  $m$  può assumere valori interi tra  $-l$  ed  $l$ , per ogni  $l$  fissato. Tuttavia, ogni terna  $nlm$  individua univocamente un'autofunzione dell'energia nella **rappresentazione delle coordinate**. Il passaggio a tale rappresentazione corrisponde alla classificazione in *orbitali* atomici degli stati occupabili da un elettrone nel sistema legato considerato (qui il semplice atomo di idrogeno), e che di solito vengono brutalmente presentati nei programmi scolastici di Chimica o di Chimica Generale all'Università.

Per l'atomo di idrogeno in particolare, riconosciamo gli orbitali di tipo **s** in tutti gli stati a simmetria sferica, ovvero con autofunzioni della forma

$$\psi_{n00}(r, \theta, \phi) = Y_{00}(\theta, \phi)R_{n0}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{n0}(r)$$

ossia tali da avere  $l = 0$ . Riconosciamo invece gli orbitali di tipo **p** nelle autofunzioni della forma

$$\psi_{n1m}(r, \theta, \phi) = R_{n1}(r)Y_{1m}(\theta, \phi)$$

ovvero con  $l = 1$  e tripla degenerazione per via dei valori di  $m = -1, 0, 1$  – corrispondenti ai tre orbitali  $p_x, p_y$  e  $p_z$ , per una data scelta degli assi spaziali; e così via.

Possiamo quindi concludere che ad un qualsiasi autovalore dell'hamiltoniano  $\hat{H}$  diverso da quello fondamentale, corrispondono un certo numero di autostati degeneri. Proviamo a formalizzare la questione, chiedendoci quale debba essere il livello di degenerazione – che indichiamo con  $\text{Deg}(n)$  – a  $n$  fissato: dato che per ogni  $l \in (0, n - 1)$  si hanno  $2l + 1$  valori possibili per  $m$ , la risposta è formalmente la seguente

$$\text{Deg}(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1)$$

Spezzando la somma e rammentando qualche risultato di base sulle serie numeriche, si ottiene

$$\text{Deg}(n) = 2 \sum_{l=0}^{n-1} l + \sum_{l=0}^{n-1} 1 = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n$$

da cui infine

$$\text{Deg}(n) = n^2$$

**VELOCITÀ TIPICHE: SIAMO IN REGIME NON-RELATIVISTICO?** Ci chiediamo se quanto costruito fino ad ora sia consistente con l'aver trascurato gli effetti relativistici. Sappiamo che l'hamiltoniana classica

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

non è sufficiente a descrivere il moto di una particella libera a velocità prossime a  $c$ . Sarebbe necessario introdurre dei termini correttivi, derivanti dalla più generale definizione di energia cinetica relativistica

$$T = E - mc^2 = \sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2} - mc^2 \xrightarrow{v \ll c} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \dots$$

Siamo ormai coscienti del fatto che in ambito quantistico non è banale definire la velocità di una particella. Tuttavia, possediamo gli strumenti per poter calcolare la velocità media su una certa distribuzione di probabilità; questa tecnica può senz'altro fornirci un'idea di quale possa essere l'ordine di grandezza delle velocità tipiche che un elettrone possiede statisticamente nell'atomo di idrogeno – per esempio – allo stato fondamentale.

Consideriamo quindi proprio lo stato fondamentale dell'atomo di idrogeno; come primo tentativo, si potrebbe provare a calcolare il valore atteso dell'osservabile vettoriale  $\hat{\mathbf{v}}$ , che ha come componenti gli operatori velocità  $\hat{v}_x$ ,  $\hat{v}_y$  e  $\hat{v}_z$ , definiti dalla relazione

$$\hat{v}_i = \frac{\hat{P}_i}{m}$$

Tale relazione era stata ricavata assumendo un'operatore hamiltoniano della forma

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

con  $V(\hat{x})$  potenziale generico.

Calcoliamo dunque il valore di aspettazione della velocità **vettoriale**, sullo stato fondamentale (nella notazione  $|nlm\rangle$ )

$$\langle \hat{\mathbf{v}} \rangle = \langle 100 | \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} | 100 \rangle$$

Abbiamo visto che, nella rappresentazione delle coordinate, la funzione d'onda  $\psi_{100}(r, \theta, \phi)$  associata a tale stato presenta simmetria sferica, dunque è anche vero che

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \psi_{100}(r, \pi - \theta, \phi + \pi) \quad \forall \theta, \phi$$

(si veda Sez. 6.2.3), e ciò equivale formalmente a dire che il sistema allo stato fondamentale è invariante sotto l'operazione di parità

$$\hat{\mathcal{P}} : \mathbf{x} \longrightarrow -\mathbf{x}$$

Dato che  $\hat{\mathcal{P}} \equiv \hat{\mathcal{P}}^\dagger$ , possiamo riscrivere il valore di aspettazione come

$$\langle \hat{\mathbf{v}} \rangle = \langle 100 | \hat{\mathcal{P}} \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} \hat{\mathcal{P}} | 100 \rangle$$

e quindi, dovendo valere anche  $\hat{\mathcal{P}} \equiv \hat{\mathcal{P}}^{-1}$ , otteniamo

$$\langle \hat{\mathbf{v}} \rangle = \langle 100 | \hat{\mathcal{P}} \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} \hat{\mathcal{P}}^{-1} | 100 \rangle$$

Ricordiamo inoltre che l'operazione di parità è costruita nello spazio degli impulsi in maniera identica secondo la definizione

$$\hat{\mathcal{P}} : \mathbf{p} \longrightarrow -\mathbf{p}$$

che equivale a scrivere

$$\hat{\mathcal{P}} \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} \hat{\mathcal{P}}^{-1} = -\frac{\hat{\mathbf{P}}}{m}$$

da cui infine otteniamo

$$\langle \hat{\mathbf{v}} \rangle = \langle 100 | \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} | 100 \rangle = - \langle 100 | \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} | 100 \rangle = -\langle \hat{\mathbf{v}} \rangle$$

e quindi<sup>2</sup>

$$\langle \hat{\mathbf{v}} \rangle = 0$$

Questo risultato somiglia a quello che si otterrebbe per un moto circolare uniforme classico in due dimensioni, in cui il vettore velocità medio è nullo su un periodo.

A causa delle simmetrie del sistema in esame, questa strategia non risulta vincente. Notiamo inoltre che ciò a cui siamo interessati è – classicamente parlando – il *modulo* della velocità, a prescindere da quale sia la sua direzione. Potremmo essere tentati dal definire un operatore associato alla osservabile  $|\mathbf{v}|$ , tuttavia ci risulta più agevole lavorare con l'operatore  $\hat{\mathbf{v}}^2 \equiv \hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2 + \hat{v}_z^2$ , che sappiamo ricondurre al già noto operatore impulso  $\hat{\mathbf{P}}$ . Proviamo quindi a ricavare il valore di aspettazione

$$\langle \hat{\mathbf{v}}^2 \rangle = \langle 100 | \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{m^2} | 100 \rangle$$

che possiamo facilmente verificare essere non nullo, ripetendo i passaggi del caso precedente.

Per questo calcolo ci poniamo nella rappresentazione delle coordinate, rammentando che l'espressione di partenza può quindi essere riscritta come segue

$$\langle 100 | \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{m^2} | 100 \rangle = -\frac{\hbar^2}{m^2} \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{100}^*(\mathbf{x}) \nabla^2 \psi_{100}(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}$$

dove è stata sostituita la rappresentazione dell'operatore  $\mathbf{P}$  nello spazio delle coordinate. Ricordiamo in particolare che  $\psi_{100}(\mathbf{x})$  è a valori reali, per cui  $|\psi_{100}(\mathbf{x})|^2 \equiv (\psi_{100}(\mathbf{x}))^2$ . Integrando per parti per mezzo della relazione

$$f(\mathbf{x}) \nabla^2 f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \nabla^2 (f(\mathbf{x}))^2 - (\nabla f(\mathbf{x}))^2$$

otteniamo

$$\frac{\hbar^2}{m^2} \left[ \int_{\mathbb{R}^3} (\nabla \psi_{100}(\mathbf{x}))^2 d^3\mathbf{x} - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla^2 (\psi_{100}(\mathbf{x}))^2 d^3\mathbf{x} \right]$$

Il secondo integrale può essere riscritto come

$$\int_{\mathbb{R}^3} \nabla \cdot [\nabla (\psi_{100}(\mathbf{x}))^2] d^3\mathbf{x} \equiv \oint_S \nabla (\psi_{100}(\mathbf{x}))^2 \cdot d\mathbf{s}$$

dove è stato usato il Teorema della Divergenza, avendo indicato con  $S$  una superficie fittizia all'infinito – contenente, nel limite, tutto lo spazio  $\mathbb{R}^3$  – e con  $\mathbf{s}$  il vettore area ortogonale a tale superficie. Questo integrale sarà nullo, dato che l'integrandi

$$\nabla (\psi_{100}(\mathbf{x}))^2 = 2\psi_{100}(\mathbf{x}) \nabla \psi_{100}(\mathbf{x}) \xrightarrow{\mathbf{x} \in S} 0$$

essendo  $\nabla \psi_{100}(\mathbf{x})$  sicuramente limitata all'infinito.

Rimane dunque da valutare

$$\langle \hat{\mathbf{v}}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{m^2} \int_{\mathbb{R}^3} (\nabla \psi_{100}(\mathbf{x}))^2 d^3\mathbf{x}$$

che, vista la simmetria del problema, risulta comodo calcolare in coordinate sferiche; in questo sistema di coordinate, notiamo che l'azione dell'operatore differenziale  $\nabla$  sull'autofunzione  $\psi_{100}(\mathbf{x})$ , si riduce a

$$\nabla \psi_{100}(r, \theta, \phi) = \partial_r \psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \partial_r R_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{2}{r_B^{3/2}} e^{-r/r_B} \right)$$

vista l'indipendenza di questa dalle variabili angolari  $\theta$  e  $\phi$ . Abbiamo quindi che

$$\langle \hat{\mathbf{v}}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{m^2} \int_0^{4\pi} d\Omega \int_0^\infty \left( -\frac{2}{\sqrt{4\pi r_B^5}} e^{-r/r_B} \right)^2 r^2 dr$$

da cui, sviluppando il quadrato ed effettuando il cambiamento di variabile  $\rho = r/r_B$

$$\langle \hat{\mathbf{v}}^2 \rangle = \frac{4\hbar^2}{m^2 r_B^2} \int_0^\infty e^{-2\rho} \rho^2 d\rho$$

Possiamo infine risolvere l'integrale adimensionale tramite la formula (7.4) ed ottenere

$$\langle \hat{v}^2 \rangle = \frac{4\hbar^2}{m^2 r_B^2} \frac{2!}{2^3} = \frac{\hbar^2}{m^2 r_B^2} = \alpha^2 c^2$$

essendo  $m$  la massa dell'elettrone. Abbiamo quindi che

$$\sqrt{\langle \hat{v}^2 \rangle} = v_{\text{RMS}} = \alpha c \simeq \frac{c}{137} \approx 7.3 \cdot 10^{-3} c$$

che corrisponde a un fattore di Lorentz

$$\gamma_{\text{RMS}} \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - v_{\text{RMS}}^2/c^2}} \approx 1 + 2 \times 10^{-5}$$

quindi possiamo ritenere il regime poco relativistico, anche se effettivamente le velocità in gioco sono enormi! Torneremo nel Cap. 11 su questa questione, nel contesto della Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo, dove vedremo la prima correzione relativistica allo spettro dell'atomo di idrogeno. Per adesso, accontentiamoci di una (buona) approssimazione non relativistica.

**IL RAGGIO DI BOHR** Abbiamo definito il *raggio di Bohr*

$$r_B \equiv \frac{\hbar}{m_e c \alpha} \approx 0.529 \text{ \AA}$$

concepito dal fisico danese Niels Bohr, nel proporre un primo modello quantistico stabile per l'atomo di idrogeno, basato sulla quantizzazione del modello angolare orbitale in unità di  $\hbar$ . La formulazione di Schrödinger della Meccanica Quantistica ha poi raffinato questo modello, proponendo delle distribuzioni di probabilità in posizione attorno al nucleo; tuttavia, in questa formulazione non è previsto alcun momento angolare orbitale per lo stato fondamentale.

Cerchiamo di inserire il raggio di Bohr in questo contesto, calcolando la probabilità che un elettrone allo stato  $|1\ 00\rangle$ , si trovi ad una distanza maggiore del raggio di Bohr. Per fare ciò, ci poniamo in coordinate sferiche e consideriamo la densità di probabilità  $|\psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2$  associata all'autofunzione in questione. Recuperando quanto già ricavato nella verifica della normalizzazione dello stato fondamentale, si vede presto che si ha

$$\mathcal{P}(|\mathbf{x}| > r_B) = \int_{|\mathbf{x}| > r_B} |\psi_{100}|^2 d^3x = 4 \int_1^\infty \rho^2 e^{-2\rho} d\rho$$

dove  $\rho = r/r_B$ . Utilizzando la stessa tecnica che ha portato al risultato in equazione (7.4), si ottiene

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(|\mathbf{x}| > r_B) &= 4 \frac{d^2}{dk^2} \left[ -\frac{e^{-k\rho}}{k} \right]_{\rho=1}^{\rho=\infty} \Big|_{k=2} \\ &= 4 \frac{d^2}{dk^2} \left[ \frac{e^{-k}}{k} \right] \Big|_{k=2} \\ &= 4e^{-k} \left[ \frac{1}{k} + \frac{2}{k^2} + \frac{2}{k^3} \right] \Big|_{k=2} \\ &= \frac{5}{e^2} \approx 0.67 \end{aligned}$$

Quindi si ha una probabilità (circa) del 67% di trovare l'elettrone in un qualsiasi punto dello spazio tra il raggio di Bohr e l'infinito. Ne segue che la probabilità di trovarlo entro un raggio di Bohr è circa 33 %.

Non possiamo quindi associare il raggio d Bohr ad un vero e proprio raggio atomico, tantomeno ad un raggio di *cut-off*. Esso fissa tuttavia una scala di lunghezza caratteristica per la distribuzione della densità di probabilità elettronica intorno all'atomo di idrogeno.

**AUTOFUNZIONI NELLA RAPPRESENTAZIONE DEGLI IMPULSI** Lo studio svolto nella rappresentazione delle coordinate può essere anche esteso alla rappresentazione degli impulsi. Sappiamo infatti che è possibile passare da una rappresentazione all'altra attraverso una trasformata di Fourier. Questo è valido anche per le autofunzioni dell'hamiltoniano  $\hat{H}$ , per cui possiamo ricavare gli autostati  $|nlm\rangle$  nella rappresentazione degli impulsi

$$\tilde{\psi}_{nlm}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{nlm}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}/\hbar} d^3\mathbf{x}$$

e chiederci – ad esempio – quale sia la probabilità di trovare un elettrone nel lo stato fondamentale, con un impulso maggiore di un certo  $p_B$  caratteristico. Risulta naturale definire un impulso tipico nel seguente modo

$$p_B \equiv mv_{\text{RMS}} = mac$$

in maniera consistente con quanto valutato nelle sezioni precedenti.

Il primo passo da fare è il calcolo dell'autofunzione per lo stato fondamentale: introducendo il vettore d'onda  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$  si deve calcolare

$$\tilde{\psi}_{100}(\mathbf{k}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{100}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d^3\mathbf{x}$$

Per svolgere l'integrale tridimensionale la scelta più comoda è utilizzare coordinate sferiche, scegliendo l'asse polare ("asse z") in modo che sia allineato con l'impulso  $\mathbf{p}$  (i.e. con  $\mathbf{k}$ ), che è il punto in cui stiamo calcolando la trasformata. Allora, poiché

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} = k r \cos \theta$$

si ha

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_{100}(\mathbf{k}) &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int_0^{+\infty} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \psi_{100}(r) e^{-r/r_B} e^{-ikr \cos \theta} r^2 dr d\theta d\phi \\ &= \frac{2\pi}{\sqrt{\pi}r_B^{3/2}(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_0^{+\infty} dr r^2 e^{-r/r_B} \int_{-1}^1 dy e^{-ikry} \\ &= \frac{2\pi}{\sqrt{\pi}r_B^{3/2}(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_0^{+\infty} dr r^2 e^{-r/r_B} \frac{e^{-ikry}}{-ikr} \Big|_{-1}^1 \\ &= \frac{1}{ik(r_B\hbar)^{3/2}\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} dr re^{-r/r_B} (e^{ikr} - e^{-ikr}) \end{aligned}$$

dove si è eseguito subito l'integrale in  $y = \cos \theta$ . Si ottengono due integrali che possono essere svolti per parti, e risultano uguali a

$$\int_0^{+\infty} dr r e^{-r/r_B} e^{-ikr} = \frac{r_B^2}{(1 + ikr_B)^2}$$

e analogamente l'altro con la sostituzione  $k \rightarrow -k$ . Allora

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_{100}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{ik(r_B\hbar)^{3/2}\sqrt{2\pi}} \left[ \frac{r_B^2}{(1 - ikr_B)^2} - \frac{r_B^2}{(1 + kr_B)^2} \right] \\ &= \frac{r_B^2}{ik(r_B\hbar)^{3/2}\sqrt{2\pi}} \frac{(1 + ikr_B)^2 - (1 - ikr_B)^2}{(1 + k^2r_B^2)^2} \\ &= \frac{r_B^2}{ik(r_B\hbar)^{3/2}\sqrt{2\pi}} \frac{4ikr_B}{(1 + k^2r_B^2)^2} \\ &= \frac{2\sqrt{2}r_B^{3/2}}{\pi\hbar^{3/2}} \frac{1}{(1 + k^2r_B^2)^2}\end{aligned}$$

pertanto la funzione d'onda dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno nello spazio degli impulsi è

$$\langle \mathbf{p}|100\rangle = \tilde{\psi}_{100}(\mathbf{p}) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \left( \frac{r_B}{\hbar} \right)^{3/2} \frac{1}{(1 + p^2 r_B^2 / \hbar^2)^2}$$

e, ricordando che  $p_B = \hbar/r_B$ :

$$\tilde{\psi}_{100}(\mathbf{p}) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi p_B^{3/2}} \frac{1}{(1 + p^2/p_B^2)^2}$$

### 7.1.3 Coerenza col Principio di indeterminazione

Verifichiamo, almeno sullo stato fondamentale dell'atomo di idrogeno, la coerenza con il Principio di indeterminazione di Heisenberg. In particolare, sappiamo che vale

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad \Delta x_i \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ij}$$

dove avevamo definito le **varianze** come

$$\begin{aligned}\Delta x_i^2 &= \langle \psi | (\hat{x}_i - \langle \psi | \hat{x}_i | \psi \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{x}_i^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{x}_i | \psi \rangle^2 \\ \Delta p_j^2 &= \langle \psi | (\hat{p}_j - \langle \psi | \hat{p}_j | \psi \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{p}_j^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{p}_j | \psi \rangle^2\end{aligned}$$

Nella precedente sezione abbiamo verificato che sullo stato fondamentale, per parità, valgono

$$\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle_{100} = \langle 100 | \hat{\mathbf{x}} | 100 \rangle = 0 \quad \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle_{100} = \langle 100 | \hat{\mathbf{p}} | 100 \rangle = 0$$

e chiaramente lo stesso vale su ciascuna della componenti degli operatori posizione e impulso. Questo riduce il calcolo delle varianze al calcolo dei valori di aspettazione degli operatori  $\hat{x}_i^2$  e  $\hat{p}_j^2$  sullo stato fondamentale  $|100\rangle$ . Necessariamente, vale la relazione

$$\langle 100 | \hat{x}_i^2 | 100 \rangle \langle 100 | \hat{p}_j^2 | 100 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \delta_{ij}$$

che possiamo trasformare, sommando da entrambi i lati su  $i$  e  $j$ , in

$$\sum_i \sum_j \langle 100 | \hat{x}_i^2 | 100 \rangle \langle 100 | \hat{p}_j^2 | 100 \rangle \geq \frac{3}{4} \hbar^2$$

ed è pur vero che vale

$$\sum_i \hat{x}_i^2 = \hat{\mathbf{x}}^2 \quad \sum_j \hat{p}_j^2 = \hat{\mathbf{p}}^2$$

per cui, banalmente sostituendo e prendendo la radice del risultato, si ricava che deve essere verificato

$$\Delta_{\mathbf{r}} \Delta_{\mathbf{p}} \geq \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

La verifica del Principio di indeterminazione si riduce a mostrare che vale questa diseguaglianza.

Possiamo però fornire anche un limite inferiore più grande: infatti, la completa simmetria per rotazioni del sistema permette di scrivere per ciascuna componente

$$\langle 100 | \hat{x}_i^2 | 100 \rangle = \frac{1}{3} \langle 100 | \hat{\mathbf{x}}^2 | 100 \rangle \quad \langle 100 | \hat{p}_j^2 | 100 \rangle = \frac{1}{3} \langle 100 | \hat{\mathbf{p}}^2 | 100 \rangle$$

in quanto se così non fosse, i.e. se una componente avesse raggio quadratico medio (lo stesso vale per l'impulso) maggiore delle altre, questo implicherebbe l'assenza di una reale simmetria globale per rotazioni: in altri termini, il sistema avrebbe una "direzione preferenziale", mentre sappiamo che il *ground-state* è completamente simmetrico per rotazioni.

Da qui, sostituendo direttamente nel caso  $i = j$ , si trova che

$$\langle 100 | \hat{x}_i^2 | 100 \rangle \langle 100 | \hat{p}_i^2 | 100 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \Rightarrow \quad \Delta_{\mathbf{r}}^2 \Delta_{\mathbf{p}}^2 \geq \frac{9}{4} \hbar^2$$

per cui affermiamo ben contenti che il Principio di indeterminazione è soddisfatto, e la Fisica è salva ancora una volta. Vedremo nella prossima sezione come questo valore sia esattamente il prodotto delle varianze di posizione e impulso nel caso dell'**oscillatore armonico tridimensionale**: infatti, il ragionamento qui fatto può essere tranquillamente applicato in un caso in cui, al posto della completa simmetria per rotazioni, sussista la **completa simmetria per scambio delle tre componenti spaziali**.

Il calcolo del prodotto delle varianze può essere eseguito esattamente in questo semplice caso, partendo direttamente dall'operatore Posizione in coordinate sferiche  $\hat{\mathbf{r}}$ . Naturalmente vale  $\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = 0$ , per cui siamo unicamente interessati a  $\langle \hat{\mathbf{r}}^2 \rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle 100 | \hat{\mathbf{r}}^2 | 100 \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d\Omega r^2 dr \psi_{100}^*(r, \theta, \phi) r^2 \psi_{100}(r, \theta, \phi) \\ &= \frac{4\pi}{\pi r_B^3} \int_0^{+\infty} dr r^4 e^{-2r/r_B} \\ &= \frac{4}{r_B^3} \frac{r_B^5}{32} \int_0^{+\infty} ds s^4 e^{-s} = 3r_B^2 \end{aligned}$$

dove, come al solito, abbiamo svolto l'integrale facendo uso del noto *trucco di Feynman*. Il calcolo di  $\langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle$  è leggermente più complicato:

$$\begin{aligned}\langle \psi_{100} | \hat{\mathbf{p}}^2 | \psi_{100} \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \psi_{100}^*(r, \theta, \phi) \left( -\hbar^2 \nabla^2 \right) \psi_{100}(r, \theta, \phi) \\ &= \hbar^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \nabla \cdot [\psi_{100}^*(r, \theta, \phi) (-\nabla) \psi_{100}(r, \theta, \phi)] \\ &\quad + \hbar^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \nabla \psi_{100}^* \cdot \nabla \psi_{100}\end{aligned}$$

Usiamo sul primo integrale il Teorema della Divergenza trasformandolo in un integrale di superficie, che poniamo uguale a zero: come sempre, le funzioni d'onda sono nulle a distanze infinite. Il secondo integrale può essere notevolmente semplificato notando che lo stato fondamentale dipende banalmente da  $\theta$  e  $\phi$ , per cui  $\nabla = \bar{\mathbf{r}}\partial_r$  (dove  $\bar{\mathbf{r}}$  indica il versore radiale). L'integrale si riduce quindi a

$$\begin{aligned}\hbar^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \nabla \psi_{100}^* \cdot \nabla \psi_{100} &= \hbar^2 \int_{\Omega} d\Omega \int_0^{+\infty} r^2 dr |\partial_r \psi_{100}|^2 \\ &= 4\pi \hbar^2 \int_0^{+\infty} dr r^2 \left( \frac{1}{\pi^{1/2} r_B^{3/2}} \frac{e^{-r/r_B}}{-r_B} \right)^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2r_B^2} \int_0^{+\infty} ds s^2 e^{-s} = \frac{\hbar^2}{r_B^2}\end{aligned}$$

il che permette di concludere, in definitiva, che

$$\langle 100 | \hat{\mathbf{r}}^2 | 100 \rangle \langle 100 | \hat{\mathbf{p}}^2 | 100 \rangle = 3\hbar^2$$

che è un risultato coerente con quelli precedenti.

## 7.2 L'OSCILLATORE ARMONICO TRIDIMENSIONALE

Analogamente alla Meccanica Classica, in cui il *Teorema di Bertrand* assicura che gli unici potenziali centrali a garantire (per stati legati) orbite chiuse e limitate sono quello armonico ( $\propto r^2$ ) e quello coulombiano ( $\propto r^{-1}$ ), anche in Meccanica Quantistica è di interesse fondamentale studiare il modello dell'**oscillatore armonico tridimensionale**. Per banale estensione di quanto già visto nel Cap. 4, l'hamiltoniano di tale sistema si può scrivere come

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{\mathbf{r}}^2$$

D'altronde, la fattorizzazione in tre hamiltoniani indipendenti<sup>3</sup> è immediata: poiché  $\hat{\mathbf{r}}^2 = \sum \hat{x}_j^2$ ,  $\hat{\mathbf{p}}^2 = \sum \hat{p}_j^2$ , si ha che

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^3 \left( \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}_j^2 \right) \equiv \sum_{j=1}^3 \hat{H}_j$$

Ci si aprono due strade: studiare il problema in coordinate cartesiane, sfruttando il naturale disaccoppiamento dell'hamiltoniano, oppure sferiche,

facendo uso dei risultati già noti sulla forma degli autostati dell'hamiltoniano di una particella in un potenziale centrale. Nella prossima sezione tratteremo il problema nelle coordinate cartesiane, mentre per quanto riguarda la trattazione angolare rimandiamo alla Sez. 10.2 per una discussione dettagliata.

### 7.2.1 Spettro dell'hamiltoniano e principio di indeterminazione

Iniziamo ricordando quanto già sappiamo su ciascuno dei singoli oscillatori unidimensionali: dato un hamiltoniano della forma

$$\hat{H}_j = \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}_j^2$$

l'equazione agli autovalori, come ampiamente discusso nel Cap. 4, è risolta da:

$$\hat{H}_j |n_j\rangle = E_{n_j} |n_j\rangle \quad E_{n_j} = \hbar\omega \left( n_j + \frac{1}{2} \right) \quad n_j \in \mathbb{N}$$

Si dimostra immediatamente che gli stati  $|n_1 n_2 n_3\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle$ , dove  $|n_j\rangle$  sono gli autostati dell'hamiltoniano  $\hat{H}_j$ , sono autostati di  $\hat{H}$ :

$$\hat{H} |n_1 n_2 n_3\rangle = \sum_{j=1}^3 \hat{H}_j |n_1 n_2 n_3\rangle = (E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3}) |n_1 n_2 n_3\rangle$$

Deduciamo subito la forma dello spettro di  $\hat{H}$ :

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega \left( n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right)$$

Com'era lecito aspettarsi, lo spettro dell'oscillatore armonico tridimensionale è ancora **infinito e discreto**.

Abbiamo già discusso la soluzione algebrica al problema dell'oscillatore armonico unidimensionale, passando attraverso gli operatori *di creazione e di distruzione* (che in modo meno violento avevamo ai tempi chiamato *di salita e di discesa*):

$$\hat{a}_j \equiv \frac{\hat{q}_j + i\hat{k}_j}{\sqrt{2}} \quad \hat{a}_j^\dagger \equiv \frac{\hat{q}_j - i\hat{k}_j}{\sqrt{2}} \quad \hat{q}_j \equiv \frac{\hat{x}_j}{l_\omega} \quad \hat{k}_j \equiv \frac{\hat{p}_j}{p_\omega}$$

dove  $l_\omega = (\hbar/m\omega)^{1/2}$  e  $p_\omega = (\hbar m\omega)^{1/2}$ , attraverso i quali l'hamiltoniano assume la forma particolarmente semplice:

$$\hat{H}_j = \frac{\hbar\omega}{2} \left( \hat{q}_j^2 + \hat{k}_j^2 \right)$$

Si può mostrare facilmente che l'oscillatore armonico unidimensionale minimizza il Principio di indeterminazione: infatti, dimenticandoci per un attimo dell'indice  $j$  sulle componenti tridimensionali, vale (con ovvio significato della notazione)

$$\hat{x} = l_\omega \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \quad \hat{p} = p_\omega \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}$$

e ricordando che, per costruzione,  $\hat{a}|0\rangle = 0$  e quindi  $\langle 0|\hat{a}^\dagger = 0$ , si ricava:

$$\langle 0|\hat{x}|0\rangle = \frac{l_\omega}{\sqrt{2}} [\langle 0|\hat{a}|0\rangle + \langle 0|\hat{a}^\dagger|0\rangle] = 0$$

e analogamente per l'impulso  $\langle 0|\hat{p}|0\rangle = 0$ <sup>4</sup>. Ci serve quindi calcolare solamente  $\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle$ ,  $\langle 0|\hat{p}^2|0\rangle$ . Poiché  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ , si trova che

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle &= \frac{l_\omega^2}{2} [\langle 0|\hat{a}^2|0\rangle + \langle 0|(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle + \langle 0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0\rangle + \langle 0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle] \\ &= \frac{l_\omega^2}{2} \langle 0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0\rangle \\ &= \frac{l_\omega^2}{2} \langle 0|\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right]|0\rangle + \frac{l_\omega^2}{2} \langle 0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle = \frac{l_\omega^2}{2}\end{aligned}$$

e in modo analogo si verifica

$$\langle 0|\hat{p}^2|0\rangle = \frac{p_\omega^2}{2}$$

Reintroduciamo adesso l'indice  $j$ : ovviamente quanto ricavato vale per ciascuna coordinata. Ne deduciamo immediatamente che:

$$\begin{aligned}\langle 000|\hat{\mathbf{r}}^2|000\rangle &= \langle 000|\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2 + \hat{x}_3^2|000\rangle \\ &= \frac{l_\omega^2}{2} + \frac{l_\omega^2}{2} + \frac{l_\omega^2}{2} = \frac{3}{2}l_\omega^2\end{aligned}$$

e analogamente

$$\langle 000|\hat{\mathbf{p}}^2|000\rangle = \frac{3}{2}p_\omega^2$$

Questo permette di concludere che per l'oscillatore armonico tridimensionale si ha, sullo stato fondamentale:

$$\Delta_{\mathbf{r}}\Delta_{\mathbf{p}} = \frac{3}{2}\hbar$$

essendo  $l_\omega p_\omega = \hbar$ . Nella sezione appena precedente abbiamo visto che questo numero era il minimo possibile sostenibile dal Principio di indeterminazione: in questo senso, diciamo che

L'oscillatore armonico isotropo  $n$ -dimensionale realizza stati fondamentali di minima indeterminazione.

Questa affermazione dovrebbe evidenziare come, fra tutti i sistemi fisici, l'oscillatore armonico abbia un ruolo "speciale". Possiamo facilmente intuire il motivo di questa specialità, notando che l'hamiltoniana di un oscillatore armonico unidimensionale è puramente quadratica sia negli impulsi che nelle posizioni, evidenziando una lampante simmetria che non può non avere ripercussioni fisiche.

### 7.2.2 \* Autostati e parità

Gli autostati dell'oscillatore tridimensionale sono a parità definita: questo si vede in modo semplice ricordando che, valendo per l'oscillatore unidimensionale

$$\hat{\mathcal{P}}|n\rangle = (-1)^n|n\rangle$$

ed essendo la naturale estensione della parità al caso tridimensionale

$$\hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}^{(1)} \otimes \hat{\mathcal{P}}^{(2)} \otimes \hat{\mathcal{P}}^{(3)}$$

(dove l'apice indica lo spazio di azione dell'operatore) allora

$$\hat{\mathcal{P}} |n_1 n_2 n_3\rangle = (-1)^{n_1 + n_2 + n_3} |n_1 n_2 n_3\rangle$$

Il fatto che questi autostati siano a parità definita, ovviamente, non è casuale: il punto è che la parità commuta separatamente con ciascuna delle  $\hat{H}_j$  e tutte queste commutano tra loro; gli stati  $|n_1 n_2 n_3\rangle$  sono tutti e soli gli autostati simultanei di  $\hat{H}_1$ ,  $\hat{H}_2$ ,  $\hat{H}_3$ , quindi devono essere anche autostati di  $\hat{\mathcal{P}}$ .

### 7.2.3 Degenerazione dei livelli energetici

Abbiamo visto che gli autostati e gli autovalori dell'oscillatore tridimensionale sono particolarmente semplici:

$$|n_1 n_2 n_3\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle |n_3\rangle \quad E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega \left( n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right)$$

per cui, se vogliamo calcolare la funzione d'onda ad essi associate:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | n_1 n_2 n_3 \rangle = \langle x_1 | n_1 \rangle \langle x_2 | n_2 \rangle \langle x_3 | n_3 \rangle$$

Consideriamo, per esempio, lo stato  $|000\rangle$ . Naturalmente, in questo caso

$$E_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

e, ricordando la forma degli autostati dell'oscillatore armonico unidimensionale, si ha subito

$$\langle x_1 | 0 \rangle \langle x_2 | 0 \rangle \langle x_3 | 0 \rangle = C^3 \exp \left( -\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{2l_\omega^2} \right) = C_0^3 e^{-r^2/2l_\omega^2}$$

con  $C_0$  costante di normalizzazione. Lo stato fondamentale è non degenero, come era lecito aspettarsi. Nel caso dei potenziali unidimensionali avevamo derivato un teorema (Cap. 4, Sez. 4.4) che connetteva spettro discreto e non degenerazione: è importante notare che **nel caso tridimensionale** tale risultato smette di funzionare. Infatti, nella dimostrazione, si faceva uso di ragionamenti spiccatamente unidimensionali (tra cui la soluzione a variabili separate) che non possono essere estesi al caso multidimensionale. Per convincersene, basta guardare i primi stati eccitati dell'oscillatore tridimensionale:

$$E_{100} = E_{010} = E_{001} = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

Ricavare le autofunzioni associate è immediato:

$$\begin{aligned} \psi_{100}(\mathbf{x}) &= C_0^2 C_1 \frac{x_1}{l_\omega} \exp \left( -\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{2l_\omega^2} \right) \\ \psi_{010}(\mathbf{x}) &= C_0^2 C_1 \frac{x_2}{l_\omega} \exp \left( -\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{2l_\omega^2} \right) \\ \psi_{001}(\mathbf{x}) &= C_0^2 C_1 \frac{x_3}{l_\omega} \exp \left( -\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{2l_\omega^2} \right) \end{aligned}$$

D'altronde è del tutto naturale che insorga questo tipo di degenerazione: volendo fare un paragone classico, proprio nel caso dell'oscillatore armonico tridimensionale, una particella in oscillazione può avere la stessa energia oscillando lungo ciascuna delle tre direzioni nel momento in cui sussiste un'invarianza per scambio tra esse. Detto in altri termini, i modi normali di oscillazione nelle tre direzioni di oscillazione in un oscillatore tridimensionale classico invariante per scambio sono invarianti per scambio.

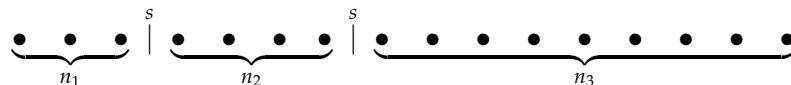
Analogamente, all'energia  $7\hbar\omega/2$  sono associati 6 stati, perché esistono 6 modi diversi in cui tre numeri naturali  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_3$  possono sommare a 2. In generale, possiamo notare che l'oscillatore armonico isotropo in 3 dimensioni è caratterizzato dalla degenerazione

$$\text{Deg}(n) = \binom{n+2}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}$$

Come mai? Un argomento grafico semplice è il seguente: immaginiamo di avere  $n$  elementi, che rappresentiamo nella figura seguente come •



e di volerli separare in tre sottoinsiemi:



Il problema è equivalente a posizionare due separatori,  $s$  in figura, e assegnare al primo gruppo gli  $n_1$  elementi a sinistra, al secondo gli  $n_2$  al centro e al terzo gli  $n_3$  a destra. Il numero delle possibili combinazioni di queste tre popolazioni coincide col numero  $\mathcal{N}$  di modi in cui possiamo posizionare i separatori  $s$ . Le posizioni possibili sono  $n+2$  (possiamo anche posizionarli agli estremi o sovrapporli!) per cui

$$\mathcal{N} = \binom{n+2}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}$$

Naturalmente il numero totale di elementi non dipende dal partizionamento:  $n_1 + n_2 + n_3 = n$ . Questo problema è equivalente a chiedersi quante combinazioni di interi sommino allo stesso intero, che è quello che vogliamo sapere per calcolare la degenerazione dei livelli energetici. Naturalmente questo argomento può essere esteso a un numero superiore di dimensioni.

## NOTE

1. In verità ciò che andremo a dimostrare ha una validità ben più ampia. Si tratta in particolare di un risultato ottenibile nel contesto delle **Trasformate di Laplace**, dove  $\int_0^\infty t^n e^{-st} dt \equiv \mathcal{L}(t^n) = \frac{n!}{s^{n+1}}$ , con  $t \in \mathbb{R}$  e  $s \geq 0$  e  $s \in \mathbb{C}$ .
2. Essendo tutti gli stati  $|nlm\rangle$  a parità ben definita  $(-1)^l$ , allora il valore di aspettazione di impulso e posizione è sempre nullo su qualunque di questi stati.
3. Formalmente, la decomposizione operata è:

$$\hat{H} = (\hat{H}_1 \otimes \mathbb{1}_2 \otimes \mathbb{1}_3) + (\mathbb{1}_1 \otimes \hat{H}_2 \otimes \mathbb{1}_3) + (\mathbb{1}_1 \otimes \mathbb{1}_2 \otimes \hat{H}_3)$$

che nel testo è sottintesa per motivi di leggibilità. Come sempre, quando decomponiamo l'operazione di un operatore in più "sotto-operatori", dobbiamo ricordarci che il motivo per cui, e.g. " $\hat{H}_3$  agisce solamente su  $|n_3\rangle$ " è che " $\mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \hat{H}_3$  agisce banalmente sugli spazi 1 e 2 relativamente allo stato  $|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle$ ".

4. Naturalmente si può giungere a risultati identici ragionando in termini di parità:

$$-\langle n|\hat{x}|n\rangle = \langle n|\hat{\mathcal{P}}\hat{x}\hat{\mathcal{P}}|n\rangle = (-1)^{2n} \langle n|\hat{x}|n\rangle$$

per cui  $\langle n|\hat{x}|n\rangle = 0$ . Lo stesso vale ovviamente per l'impulso.

## IN BREVE...

- ◊ Il modello dell'**atomo di idrogeno** è descritto dall'hamiltoniano

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_p^2}{2m_p} + V(|\hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{r}}_p|)$$

dove i pedici  $e$  si riferiscono all'elettrone  $e$  e  $p$  al protone. Siccome  $m_p \gg m_e$ , il problema si disaccoppia nel moto libero della massa totale  $M \simeq m_p$  e in quello vincolato da un potenziale coulombiano centrale della massa ridotta  $\mu \simeq m_e$ . Si studia quindi l'hamiltoniana

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{k}{r}$$

- ◊ Le scale tipiche del problema sono:

$$r_B = \frac{\hbar}{m_e \alpha c}, \quad p_B = \frac{\hbar}{r_B} = m_e \alpha c, \quad E_B = \frac{1}{2} m_e \alpha^2 c^2, \quad T_B = \frac{\hbar}{E_B} = \frac{2\hbar}{m_e \alpha^2 c^2}$$

- ◊ Il potenziale è centrale, quindi l'hamiltoniana  $\hat{H}$  commuta con  $\hat{\mathbf{L}}$ ; allora esiste una base di autostati comuni di  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{L}_z$ . Come visto nel Cap. 6, nel caso di potenziale centrale le autofunzioni sono della forma  $R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$ ; il problema è ridotto a determinare la funzione radiale (unidimensionale)  $R_{El}(r)$ . Il Teorema di non degenerazione (Cap. 4) implica che le soluzioni all'equazione radiale, a ogni  $l$  fissato, sono non degeneri; la soluzione analitica permette di parametrizzarle con  $n \in \mathbb{N}$ . Accoppiando ciascuna soluzione alle  $m$  armoniche sferiche associate e facendo infine variare  $l$ , si trova che

$|nlm\rangle$  è un set completo di autostati simultanei.

- ◊  $|nlm\rangle$  sono autostati di  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$  e  $\hat{L}_z$ :

$$\hat{H}|nlm\rangle = -\frac{E_B}{n^2}|nlm\rangle, \quad \hat{\mathbf{L}}^2|nlm\rangle = l(l+1)\hbar^2|nlm\rangle, \quad \hat{L}_z|nlm\rangle = m\hbar|nlm\rangle$$

- ◊ Il potenziale coulombiano diverge meno rapidamente di  $r^{-2}$ : coerentemente con quanto esposto nel Cap. 6, si hanno i comportamenti asintotici generali

$$r \rightarrow 0 : R_{nl} \simeq r^l \quad r \rightarrow +\infty : R_{nl} \simeq e^{-r/(nr_B)}$$

- ◊ Insorge una degenerazione nello spettro: a ciascun livello energetico sono associati tutti i possibili momenti angolari con  $0 \leq l \leq n-1$ , e a ogni  $l$  fissato sono associate  $2l+1$  diverse proiezioni  $m$ . Lo spettro è quindi siffatto:

$$E_n = -\frac{E_B}{n^2} \quad \text{Deg}(n) = n^2$$

- ◊ La parità  $\hat{\mathcal{P}}$  commuta con  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{L}_z$ ; siccome la terna  $n, l, m$  specifica univocamente ciascun autostato simultaneo (non possono esisterne altri), questi sono anche autostati di  $\hat{\mathcal{P}}$ . La loro parità è data da

$$\hat{\mathcal{P}}|nlm\rangle = (-1)^l|nlm\rangle$$

in quanto le armoniche sferiche sono a parità definita e qualsiasi funzione puramente radiale è pari ( $\hat{\mathcal{P}}: r \rightarrow r$ ).

- ◊ Essendo a parità definita, su ciascuno stato vale

$$\langle nlm|\hat{\mathbf{x}}|nlm\rangle = 0 \quad \langle nlm|\hat{\mathbf{p}}|nlm\rangle = 0$$

quindi su ogni stato la varianza è data da  $\Delta_{\mathbf{x}}^2 = \langle \hat{\mathbf{x}}^2 \rangle$ ,  $\Delta_{\mathbf{p}}^2 = \langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle$ .

- ◊ Il *ground-state* è caratterizzato dalle funzioni d'onda (in coordinate e impulsi)

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} e^{-r/r_B} \quad \tilde{\psi}_{100}(\mathbf{p}) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi p_B^{3/2}} \frac{1}{(1 + p^2/p_B^2)^2}$$

e ha indeterminazione  $\Delta_{\mathbf{r}}\Delta_{\mathbf{p}} = \sqrt{3}\hbar$ , coerentemente col Principio di indeterminazione. Il **Raggio di Bohr**  $r_B \approx 0.5 \text{ \AA}$  è una buona scala di lunghezze, ma non rappresenta un buon raggio atomico: la probabilità di localizzare l'elettrone a  $r > r_B$  è circa del 67%.

- ◊ Si può valutare la bontà dell'approssimazione non relativistica: usando il risultato del punto precedente e il fatto che  $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{p}}/m$  (per un hamiltoniano con parte cinetica puramente quadratica), sul *ground-state* si trova

$$v_{\text{RMS}} = \alpha c \simeq \frac{c}{137} \quad \Rightarrow \quad \gamma_{\text{RMS}} - 1 \approx 2 \times 10^{-5}$$

per cui le velocità in gioco sono grandi ma è buona l'approssimazione non relativistica. L'argomento viene ripreso nel Cap. 11.

- ◊ **L'oscillatore armonico tridimensionale** (isotropo) è un sistema descritto dall'hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^3 \hat{H}_j \quad \text{con} \quad \hat{H}_j = \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}_j^2$$

che, essendo fattorizzato, ha autostati della forma  $|n_1 n_2 n_3\rangle$  con spettro:

$$E_n = \hbar\omega \left( n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \quad n = n_1 + n_2 + n_3$$

con degenerazione

$$\text{Deg}(n) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

- ◊ Il *ground-state* è uno stato di minima indeterminazione. Questa affermazione si può estendere a un numero di dimensioni arbitrario.
- ◊ La parità degli autostati è data da

$$\hat{\mathcal{P}}|n_1 n_2 n_3\rangle = (-1)^{n_1+n_2+n_3}|n_1 n_2 n_3\rangle$$

il che implica che su qualsiasi stato vale

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{\mathbf{x}} | n_1 n_2 n_3 \rangle = 0 \quad \langle n_1 n_2 n_3 | \hat{\mathbf{p}} | n_1 n_2 n_3 \rangle = 0$$

- ◊ Essendo l'hamiltoniana a **variabili separabili**, le autofunzioni del problema si fattorizzano. Detta  $\varphi_n$  la  $n$ -esima autofunzione dell'oscillatore armonico unidimensionale, si ha

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3) = \varphi_{n_1}(x_1) \varphi_{n_2}(x_2) \varphi_{n_3}(x_3)$$



# 8 | LO SPIN

In questo capitolo introdurremo uno degli osservabili quantistici privi di controparte classica. Descriveremo infatti il legame tra lo spin e il momento angolare orbitale finora considerato, cercando di evidenziare le differenze più rilevanti e introducendo alcuni concetti che saranno approfonditi più avanti.

## 8.1 INTRODUZIONE AL CONCETTO DI SPIN

Nel capitolo 6, sezione 6.2.2, abbiamo stabilito la forma del **momento angolare orbitale** nella rappresentazione delle coordinate

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

ed abbiamo notato che il suo spettro soddisfa delle condizioni più stringenti di quelle trovate per lo spettro di  $\hat{\mathbf{J}}$ . Nello specifico, mentre gli autovalori  $l$  sono solo interi a causa della richiesta di monodromia delle funzioni armoniche sferiche, gli autovalori  $j$  possono assumere valori sia interi sia semi-interi. Questo costituisce già un indizio del fatto che, in generale,

$$\hat{\mathbf{L}} \neq \hat{\mathbf{J}}$$

e nello specifico ci potrebbe indurre a pensare che  $\hat{\mathbf{L}}$  non esaurisca  $\hat{\mathbf{J}}$ .

Dobbiamo considerare che alcuni sistemi fisici non sono descrivibili mediante una sola funzione d'onda, ma da un oggetto più complicato come una funzione d'onda vettoriale, costituita da *più componenti* e chiamata **spinore**

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \psi_N(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

A breve spiegheremo da dove deriva la necessità di definire tale oggetto, e questo chiarirà anche l'origine del suo nome. Da un punto di vista matematico, è come se il sistema quantistico fosse descrivibile da un campo vettoriale, che a ogni punto  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  associa un vettore di  $\mathbb{C}^N$ .

### 8.1.1 \* Spinori e gradi di libertà aggiuntivi

All'ordine zero, immaginiamo che il nostro solito sistema quantistico, descritto da una funzione d'onda, acquisisca un nuovo grado di libertà discreto: in altri termini, immaginiamo di estendere il nostro solito spazio di

Hilbert  $\mathcal{H}$  con uno spazio finito-dimensionale che per adesso chiameremo semplicemente  $V$ . Poniamo che

$$\dim V = N \in \mathbb{N}$$

per cui il nostro stato quantistico sarà completamente specificato quando ne conosciamo lo stato orbitale e lo stato in questo nuovo spazio. In altri termini i nostri stati diventeranno vettori del tipo

$$|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |v_1\rangle + |\psi_2\rangle \otimes |v_2\rangle + \cdots \quad \text{con} \quad |\psi_j\rangle \in \mathcal{H}, |v_j\rangle \in V$$

Per semplicità, ma senza alcuna perdita di generalità, poniamo di lavorare con due stati puri in entrambi gli spazi, i.e. con uno stato separabile: poniamo

$$|\Phi\rangle = |\psi\rangle |a\rangle \implies \Phi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) \otimes \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \forall j : a_j \in \mathbb{C}$$

moltiplicando a sinistra per  $\langle \mathbf{x}|$ , come di consueto. Naturalmente a partire da oggetti di questo tipo possiamo costruire stati anche non separabili, come lo spinore che abbiamo già visto:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \psi_1(\mathbf{x}) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(\mathbf{x}) \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \cdots = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \psi_N(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

per cui ci basta capire come funziona una rotazione su uno stato del tipo  $|\psi\rangle |a\rangle$  e usare il risultato trovato ovunque<sup>1</sup>.

Come descriviamo questo spazio? Si tratta di uno spazio a dimensione finita  $N$ , ne vogliamo trovare una base che sia completa e ortonormale, ma soprattutto “comoda” rispetto al resto della struttura matematica che fino ad ora abbiamo costruito.

L’idea fondamentale è la seguente: quando noi eseguiamo una **rotazione** su un oggetto come  $\Phi(\mathbf{x})$ , questa deve agire coerentemente su tutto l’oggetto matematico che si trova davanti. Sappiamo come ruota una semplice funzione d’onda

$$R\psi(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x})$$

ma per quanto riguarda il vettore?

Dobbiamo fare una netta distinzione tra **gruppo di trasformazioni** e sua **rappresentazione**. Senza scendere nei dettagli, definiamo un gruppo come un insieme di trasformazioni **astratte** che rispettano certe regole di composizione; inoltre un gruppo  $\mathcal{G}$  è tale se

- è dotato di una legge di composizione interna:

$$\forall g_1, g_2 \in \mathcal{G} : g_1 g_2 = g_3 \in \mathcal{G}$$

e in generale è **non commutativo**, i.e.  $g_1 g_2 \neq g_2 g_1$ ;

- tale legge è associativa:

$$\forall g_1, g_2, g_3 \in \mathcal{G} : g_1(g_2g_3) = (g_1g_2)g_3$$

- ammette per ogni elemento del gruppo un inverso ( $g^{-1}$ ) e una identità ( $e$ ):

$$\begin{aligned} \forall g \in \mathcal{G} \quad & \exists g^{-1} : gg^{-1} = g^{-1}g = e \\ \exists e \text{ t.c. } & \forall g \in \mathcal{G} : ge = eg = g \end{aligned}$$

Ad esempio, il gruppo discreto della parità si descrive come

$$\mathbb{Z}_2 : \{e, g\} \quad \text{con} \quad eg = ge \quad g^2 = e \quad e^2 = e$$

Invece una rappresentazione del gruppo è un modo in cui scriviamo tali oggetti, dotandoli di una legge di composizione (il prodotto complesso per i numeri complessi, quello righe per colonne per le matrici...) e facendo in modo che questi oggetti **concreti**, quando composti sotto tale legge, rispettino le regole che definiscono il gruppo.

Formalmente, definiamo **rappresentazione di un gruppo**  $\mathcal{G}$  una mappa che manda  $\mathcal{G}$  in un *gruppo generale lineare*  $GL(V)$ , definito sullo spazio vettoriale  $V$ :

$$\mathcal{R} : \mathcal{G} \rightarrow GL(V) \quad \text{t.c.} \quad \mathcal{R}(g_1) \cdot \mathcal{R}(g_2) = \mathcal{R}(g_1 \circ g_2) \quad \forall g_1, g_2 \in \mathcal{G} \quad (8.1)$$

dove indichiamo con  $\cdot$  l'operazione di composizione tra elementi della rappresentazione, mentre con  $\circ$  la composizione gruppale. Per la precisione, le rappresentazioni di questo tipo si dicono **rappresentazioni ordinarie**, per distinguerle dalle **rappresentazioni proiettive**, di cui faremo menzione più avanti. La dimensione dello spazio di rappresentazione  $V$  è definita **dimensione della rappresentazione**. Si definisce sottorappresentazione un sottospazio  $W$  di  $V$  che risulta invariante sotto l'azione dell'intero gruppo. Se  $V$  ha solo le due sottorappresentazioni triviali, ovvero il sottospazio nullo e  $V$  medesimo, allora abbiamo una **rappresentazione irriducibile** del gruppo  $\mathcal{G}$ . In caso avverso, la rappresentazione è riducibile. Evidentemente, le rappresentazioni che ci interessano sono solamente quelle irriducibili, poiché quelle riducibili non ci danno alcuna informazione e ci riportano a rappresentazioni di dimensione inferiore.

Per esempio, si possono dare più rappresentazioni del gruppo  $\mathbb{Z}_2$ , che denotiamo con  $\mathcal{R}$ :

$$\mathcal{R}_{1D}(e) = 1 \quad \mathcal{R}_{1D}(g) = -1 \quad (\text{moltiplicazione tra reali})$$

$$\mathcal{R}_{2D}(e) = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix} \quad \mathcal{R}_{2D}(g) = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{prodotto righe per colonne})$$

dove tra parentesi abbiamo scritto qual è la legge di composizione che associamo a ciascuna rappresentazione. Si può verificare rapidamente che usando tale legge, gli oggetti rappresentati in una e due dimensioni eseguono effettivamente le trasformazioni che definiscono il gruppo  $\mathbb{Z}_2$ . La prima rappresentazione, unidimensionale, è irriducibile, mentre la seconda è bidimensionale e riducibile: ovviamente in tal caso

$$W_1 = \text{Span} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ \end{pmatrix} \right\} \quad W_2 = \text{Span} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

costituiscono due sottospazi invarianti sotto l'azione delle due matrici rappresentative del gruppo. Il fatto che la rappresentazione sia riducibile è anche reso evidente dal fatto che, in una base opportuna, la rappresentazione assume la forma di matrici diagonali a blocchi. Tali blocchi corrispondono poi ad una rappresentazione del gruppo di dimensione inferiore, in questo caso quella unidimensionale, riportata appena sopra.

A questo punto, il più è fatto. La risposta alla domanda “come ruota un vettore a  $N$  componenti” è semplicemente questa: dato il gruppo delle rotazioni tridimensionali, quando una trasformazione di questo gruppo agisce su un vettore a  $N$  componenti, tale trasformazione sarà **rappresentata** da una matrice  $N \times N$ . Il gruppo delle rotazioni tridimensionali è chiamato  $SO(3)$ : la sua rappresentazione fondamentale sono le matrici ortogonali  $3 \times 3$  a determinante 1. Si dimostra che questo gruppo è equivalente al gruppo  $SU(2)$ , il gruppo che ha come rappresentazione fondamentale le matrici unitarie  $2 \times 2$  a determinante 1; in realtà questa equivalenza non è globale, ma affetta da questioni topologiche: le approfondiremo in Sez. 8.2.4.

Il punto fondamentale è che  $SO(3)$  identifica un gruppo di trasformazioni **astratte**, che possono essere rappresentate come matrici quadrate a  $N$  dimensioni; quando una trasformazione astratta agisce su un oggetto come  $\Psi(\mathbf{x})$ , a livello concreto la trasformazione viene rappresentata simultaneamente

- come la legge di trasformazione a cui siamo abituati, che agisce sulle coordinate;
- come il rappresentativo della stessa trasformazione in forma matriciale  $N \times N$ , che agisce sul vettore.

Non scenderemo ulteriormente nei dettagli: volendo formalizzare il discorso dovremmo introdurre formalmente diversi concetti di Teoria dei Gruppi.

Nella prossima sezione ragioneremo come segue: quando nel Cap. 6 abbiamo derivato la forma degli autostati di un generico momento angolare  $\hat{\mathbf{j}}^2$ , abbiamo visto che ogni famiglia di autostati a  $j$  fissato ha una degenerazione  $2j + 1$ , che poi viene completamente risolta (cioè “etichettata”) dalla diagonalizzazione di  $\hat{j}_z$ . Non l'abbiamo detto esplicitamente, ma per ruotare uno di questi stati – che possiamo rappresentare proprio come un vettore di  $2j + 1$  componenti – a livello algebrico dobbiamo applicargli il rappresentativo matriciale  $(2j + 1) \times (2j + 1)$  della trasformazione di rotazione.

Qui possiamo ragionare al contrario: partiamo da un vettore a  $N$  componenti, e vogliamo ruotarlo col giusto rappresentativo. La rappresentazione da usare è quella in cui, per qualche  $s$ , vale

$$N = 2s + 1 \quad \implies \quad s = \frac{N - 1}{2}$$

per cui ci basterà scegliere nello spazio  $V$  una base di autostati simultanei del generatore delle rotazioni al quadrato e della sua proiezione, in modo analogo a quanto fatto nel Cap. 6. In altri termini stiamo **riorganizzando** lo spazio  $V$ , che trasforma comunque coi suoi rappresentativi ben dimensionati del gruppo  $SU(2)$ , in termini di una base che sia comoda sotto rotazioni

tridimensionali.

Ultimo punto degno di nota: se  $N \in \mathbb{N}$ , allora  $s$  può in generale assumere sia valori interi che seminteri. Questo, come vedremo, non ci turberà: nello spazio orbitale avevamo escluso i valori seminteri, perché violavano la condizione di monodromia delle autofunzioni d'onda sotto rotazioni. Tale condizione non sarà qui necessaria: nello spazio  $V$  non ci sono funzioni d'onda da richiedere monodrome.

### 8.1.2 Lo Spin e il Momento Angolare totale

A questo punto sappiamo ruotare uno spinore. Sotto l'azione di un operatore di rotazione  $U_R$ , a trasformare in modo non banale sono in generale sia le coordinate  $\mathbf{x}$

$$\mathbf{x} \xrightarrow{R(\bar{\mathbf{n}}, \theta)} R(\bar{\mathbf{n}}, \theta)\mathbf{x}$$

sia la funzione d'onda complessiva  $\Psi$ , in modo tale che ognuna delle sue componenti può essere mappata in una combinazione lineare delle  $\psi_i(\mathbf{x})$ . Una trasformazione più generale della ormai nota  $\psi'(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x})$  si può dunque scrivere nella forma

$$U_R \Psi = U_R \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \psi_N(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} \psi_1(R^{-1}\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \psi_N(R^{-1}\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (8.2)$$

dove  $D$  è una matrice  $N \times N$ , che dipende solo dalle componenti  $\psi_i$  e non dalle coordinate  $\mathbf{x}$  e che dunque racchiude l'effetto della rotazione sul vettore delle funzioni d'onda. Di nuovo, pensiamo a  $\Psi$  come a un campo vettoriale: in generale, una rotazione modificherà non soltanto le coordinate, cioè il punto di applicazione considerato, ma anche le componenti del vettore che è applicato in tale posizione ruotata.

Dunque l'operatore di rotazione (attorno ad un asse  $\bar{\mathbf{n}}$  e di angolo  $\theta$ ) si scriverà come

$$\hat{U}_R(\bar{\mathbf{n}}, \theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}} \hat{D}(\bar{\mathbf{n}}, \theta)$$

per un opportuno operatore  $\hat{D}(\bar{\mathbf{n}}, \theta)$ , che agisce sulle componenti  $\psi_i$ , come accade con  $D$  in rappresentazione delle coordinate. Affinché  $\hat{U}_R$  sia unitario, occorre che  $\hat{D}^\dagger \hat{D} = \mathbb{1}$ , cioè che anche  $\hat{D}$  sia unitario. Ricordiamo che stiamo lavorando nel contesto delle trasformazioni parametrizzate da parametri continui (l'angolo  $\theta$ ), quindi siamo nell'ambito della Teoria dei Gruppi di Lie: anche in questo caso possiamo individuare un operatore tridimensionale hermitiano che faccia da generatore della trasformazione, che questa volta chiamiamo  $\hat{\mathbf{S}}$ :

$$\hat{D}(\bar{\mathbf{n}}, \theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}}$$

Per quanto asserito, poiché l'azione di  $e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}}$  e quella di  $\hat{D}$  avvengono l'una sulle coordinate, l'altra sulla forma intrinseca delle funzioni d'onda, possiamo affermare che esse siano indipendenti, e quindi lo stesso vale per i generatori infinitesimi, che dovranno pertanto commutare:

$$[\hat{L}_i, \hat{S}_j] = 0$$

D'altronde, per la formula BCH (Baker-Campbell-Hausdorff), se  $A$  e  $B$  sono due operatori

$$e^A e^B = e^{A+B+1/2[A,B]+\dots}$$

con i termini di correzione successivi che sono nulli se  $[A, B] = 0$ . Dunque se due operatori commutano,  $e^A e^B = e^{A+B}$ . Ne segue che

$$\hat{U}_R(\bar{\mathbf{n}}, \theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}} \equiv e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}} \quad (8.3)$$

Ponendo  $\hbar = 1$ , l'equazione diventa

$$\hat{U}_R(\bar{\mathbf{n}}, \theta) = \exp(-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}) \exp(-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}) = \exp(-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) \quad (8.4)$$

Il generatore "complessivo" della trasformazione di rotazione è il **momento angolare totale**

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \quad (8.5)$$

cioè è dato dalla somma del momento angolare orbitale e del **momento angolare intrinseco**  $\hat{\mathbf{S}}$ , altrimenti detto **spin**<sup>2</sup>.

**CHE COS'È LO SPIN?** Lo spin costituisce un grado di libertà aggiuntivo di alcuni sistemi, ed è una proprietà intrinseca delle particelle fondamentali. Per le nostre menti sublunari, questo concetto risulta sicuramente sfuggente, anche perché non ha una vera controparte in Meccanica Classica.

*E se le fantasie nostre son basse  
a tanta altezza, non è maraviglia;  
ché sopra'l sol non fu occhio ch'andasse*

Par. X, 46-48

Vediamo quindi quali siano queste nostre basse fantasie: in modo forse efficace, ma forzato, si pone lo spin in analogia con il momento angolare di una trottola di dimensioni infinitesime, idealmente puntiforme. Oppure in altri testi, per tradurre in linguaggio classico l'equazione (8.5),  $\hat{\mathbf{L}}$  ed  $\hat{\mathbf{S}}$  sono confrontati, rispettivamente, con il momento angolare del CM di un sistema ed il momento angolare del sistema stesso rispetto al proprio CM.

Dalla relazione (8.5), ricordando le regole di commutazione

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \quad \text{e} \quad [\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k$$

si deduce come atteso che

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k \quad (8.6)$$

Concludiamo quindi che  $\hat{\mathbf{L}}$  ed  $\hat{\mathbf{S}}$  soddisfano le stesse regole di commutazione. Dal momento che operano su variabili diverse, ripetiamo, le componenti di  $\hat{\mathbf{L}}$  ed  $\hat{\mathbf{S}}$  commutano:

$$[\hat{L}_i, \hat{S}_j] = 0$$

Notiamo inoltre che, in generale, l'invarianza per rotazione implica che  $\hat{\mathbf{J}}$  è conservato, *non* che  $\hat{\mathbf{L}}$  e  $\hat{\mathbf{S}}$  siano conservati.

In modo analogo a quanto abbiamo visto per  $\hat{\mathbf{J}}$  e  $\hat{\mathbf{L}}$ , per l'operatore  $\hat{\mathbf{S}}$  avremo, come autovalore relativo a  $\hat{\mathbf{S}}^2$

$$\zeta = s(s+1)$$

con  $s = \max\{\sigma\}$ , dove indichiamo con  $\sigma$  i possibili autovalori di  $\hat{S}_z$ . Differenziamente dal caso di  $l$ ,  $s$  può essere intero o semi-intero: qui non abbiamo alcuna funzione d'onda da richiedere monodroma. Gli autovalori  $\sigma$  sono equispaziati, con distanza 1, tra gli estremi  $-s$  e  $+s$ :

$$\sigma = -s, \dots, +s$$

In questo modo, ogni stato ad  $s$  fissato ha una degenerazione  $2s+1$  legata alla variabilità di  $\sigma$ .

Aggiungiamo questo grado di libertà nella rappresentazione degli stati in termini di funzioni d'onda:

$$\langle \mathbf{x}, \sigma | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}, \sigma) = \psi_\sigma(\mathbf{x})$$

Questa notazione indica la componente  $\sigma$  di uno spinore: lo stato è descritto da  $2s+1$  funzioni d'onda, indicizzate dall'autovalore  $\sigma$  di  $\hat{S}_z$ . Gli spinori abitano all'interno di  $\mathcal{H}$ , spazio di cui sono eponimi e che chiameremo appunto **spazio degli spinori**. Questo non è altro che il prodotto tensore

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_s$$

dove  $\mathcal{H}_x$  è lo **spazio dello stato orbitale**, mentre  $\mathcal{H}_s$  costituisce lo **spazio dello stato di spin**.

In questo spazio allargato, vale

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int d^3x \sum_{\sigma} \phi_{\sigma}^*(\mathbf{x}) \psi_{\sigma}(\mathbf{x})$$

A  $\sigma$  fissato,

$$|\psi_{\sigma}(\mathbf{x})|^2 d^3x$$

è la probabilità di trovare il sistema nel volume  $d^3x$  con la proiezione di spin  $\sigma$ , per la probabilità di trovarlo in  $d^3x$  con una proiezione di spin arbitraria basta invece sommare su  $\sigma$ :

$$\sum_{\sigma} |\psi_{\sigma}(\mathbf{x})|^2 d^3x$$

E non ci sorprende che la condizione di normalizzazione sia

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \sum_{\sigma} |\psi_{\sigma}(\mathbf{x})|^2 = 1$$

### 8.1.3 Spin 1/2

Il caso dello spin 1/2, che significa  $s = 1/2$ , è particolarmente rilevante dal momento che interessa gli elettroni. Siccome  $s = 1/2$ , con valori di  $\sigma$  compresi tra  $-1/2$  e  $1/2$  e spaziati di 1, abbiamo

$$\sigma = 1/2 \quad \text{oppure} \quad \sigma = -1/2$$

Tale sistema quindi è descritto da uno spinore con 2 componenti, i.e. da una coppia di funzioni d'onda, la prima relativa allo spin *up* e l'altra allo spin *down*.

Vogliamo adesso dare una rappresentazione del gruppo delle rotazioni su questo spazio vettoriale: qui  $\hat{\mathbf{S}}$  è un operatore hermitiano che trasforma spinori a 2 componenti in altri spinori a 2 componenti. Siccome vogliamo che la trasformazione

$$\hat{U}(\bar{\mathbf{n}}, \theta) = e^{-i\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}/\hbar}$$

sia rappresentata da una matrice **unitaria**, bisogna che  $\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = n_i \hat{S}_i$  sia una matrice  $2 \times 2$  hermitiana a traccia nulla. Infatti se sviluppiamo al primo ordine (poniamo  $\hbar = 1$ )

$$\begin{aligned} U(\bar{\mathbf{n}}, \theta)^\dagger U(\bar{\mathbf{n}}, \theta) &\simeq (\mathbb{1} + i\theta n_i S_i^\dagger)(\mathbb{1} - i\theta n_j S_j) \\ &= \mathbb{1} + i\theta(n_i S_i^\dagger - n_j S_j) + \mathcal{O}(\theta^2) \stackrel{!}{=} \mathbb{1} \end{aligned}$$

affinché l'uguaglianza sia verificata per  $\bar{\mathbf{n}}$  arbitrario deve essere  $S_i^\dagger = S_i$  con  $i = \{1, 2, 3\}$ . Inoltre

$$1 \stackrel{!}{=} \det U = \det e^{-i\theta n_i S_i / \hbar} = e^{-i\theta n_i \text{Tr } S_i}$$

dove abbiamo usato un'identità valida per matrici  $2 \times 2$ , pertanto  $\text{Tr } S_i = 0$ .

Lo spazio vettoriale delle matrici  $2 \times 2$  hermitiane a traccia nulla ha dimensione 3, ed una buona base è data dalle **matrici di Pauli**

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (8.7)$$

Poiché si può verificare per calcolo diretto che

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$

concludiamo che una buona scelta dei generatori per il gruppo delle rotazioni di spin 1/2 è

$$S_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad S_y = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad S_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

in quanto è con questo prefattore che questi generatori verificano le giuste relazioni di commutazione

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}S_k$$

In forma compatta, e reintroducendo  $\hbar$ ,

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (8.8)$$

quindi una generica rotazione si scriverà

$$\hat{U}_R(\bar{\mathbf{n}}, \theta) = e^{-i\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} e^{-i\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}/(2\hbar)}$$

### 8.1.4 Le matrici di Pauli

In questa sezione elenchiamo alcune delle importanti proprietà delle matrici di Pauli che abbiamo incontrato un attimo fa:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

- Le matrici di Pauli, insieme alla matrice identità, sono una buona base per lo spazio vettoriale (su campo  $\mathbb{R}$ ) delle matrici hermitiane  $2 \times 2$ . Infatti

$$c_0 \mathbb{1} + c_1 \sigma_x + c_2 \sigma_y + c_3 \sigma_z = \begin{bmatrix} c_0 + c_3 & c_1 - ic_2 \\ c_1 + ic_2 & c_0 - c_3 \end{bmatrix}$$

al variare dei  $c_i \in \mathbb{R}$ , è la più generale matrice hermitiana  $2 \times 2$ .

- Vale la seguente formula per il prodotto

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

- Da essa discendono la relazione già scritta per il commutatore

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

e per l'anticommutatore

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij} \mathbb{1}$$

- Le matrici di Pauli hanno come autovalori  $\pm 1$  e come autovettori

$$\begin{aligned} \sigma_x &\rightarrow v_+^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad v_-^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ \sigma_y &\rightarrow v_+^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad v_-^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \\ \sigma_z &\rightarrow v_+^z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad v_-^z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

spesso (ma con diverse eccezioni) ci riferiremo nel seguito agli autostati di  $\hat{S}_x$  con  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ , ed a quelli di  $\hat{S}_z$  con  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$  o  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ .

- Esiste una formula esplicita per il seguente esponenziale, dove  $\bar{n}$  è un versore (di modulo 1) e  $a \in \mathbb{R}$ :

$$e^{ia\bar{n} \cdot \sigma} = \mathbb{1} \cos a + i\bar{n} \cdot \sigma \sin a \quad (8.9)$$

*Dimostrazione.* Dalle proprietà per il prodotto si verifica che

$$(\bar{n} \cdot \sigma)^2 = (n_i \sigma_i)(n_j \sigma_j) = n_i n_j \delta_{ij} \mathbb{1} = |\bar{n}|^2 \mathbb{1} = \mathbb{1}$$

da questo segue per induzione che le potenze pari di  $\bar{n} \cdot \sigma$  sono la matrice identità, mentre quelle dispari sono uguali a  $\bar{n} \cdot \sigma$  stessa. Per esempio

$$(\bar{n} \cdot \sigma)^3 = (\bar{n} \cdot \sigma)(\bar{n} \cdot \sigma)^2 = \bar{n} \cdot \sigma$$

Dalla definizione di esponenziale di una matrice,

$$\begin{aligned}
 e^{ia\bar{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(ia\bar{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma})^k}{k!} \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(ia)^{2k} (\bar{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2k}}{(2k)!} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(ia)^{2k+1} (\bar{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2k+1}}{(2k+1)!} \\
 &= \mathbb{1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k a^{2k}}{(2k)!} + i\bar{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{2k+1} a^{2k+1}}{(2k+1)!} \\
 &= \mathbb{1} \cos a + i\bar{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin a
 \end{aligned}$$

□

### 8.1.5 Spin 1

I sistemi con spin 1 sono descritti da spinori a 3 componenti, poiché per  $s = 1$ :

$$|s, \sigma\rangle = \begin{cases} |1, +1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \end{cases}$$

Adesso  $\hat{\mathbf{S}}$  è rappresentato da matrici  $3 \times 3$  hermitiane. In modo analogo al caso  $1/2$ , definiamo

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad S_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \quad S_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

ovviamente in unità di  $\hbar$ .

## DEGENERAZIONE DELLO STATO FONDAMENTALE DELL'ATOMO DI IDROGENO

## 8.2 FORMA MATRICIALE DELLE ROTAZIONI TRIDIMENSIONALI

In questa sezione ci occupiamo di dare una forma esplicita (matriciale) agli operatori di rotazione tridimensionale, in particolare introducendo gli **Angoli di Eulero** (un'utile riscrittura delle rotazioni tridimensionali) e poi derivando le **Matrici di Wigner**, che rappresentano completamente le rotazioni.

### 8.2.1 Angoli di Eulero e Matrici di Wigner

L'equazione (8.4) esprime, con la convenzione  $\hbar = 1$ , la forma generale di una rotazione sullo spazio degli spinori a  $N = 2s + 1$  componenti. Benché questa parametrizzazione della rotazione sia valida, non mostra in modo semplice la connessione tra gli elementi di matrice ed i parametri  $\theta$ . Normalmente si introduce una seconda parametrizzazione, per mezzo degli **angoli di Eulero**. Ogni rotazione può essere identificata da 3 rotazioni in successione. Consideriamo inizialmente un sistema di assi ortogonali  $x, y, z$

- Ruotiamo il sistema di un angolo  $\alpha$  attorno a  $z$ . L'asse  $y$  è trasformato nell'asse  $v$ .
- Effettuiamo una rotazione di angolo  $\beta$  attorno a  $v$ , in modo tale che  $z$  si trasformi nell'asse  $\zeta$ .
- Terminiamo ruotando di  $\gamma$  attorno a  $\zeta$ . L'asse ruotato di  $x$  è  $\xi$ .

Quindi la rotazione generale si scrive come

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R(\zeta, \gamma)R(v, \beta)R(z, \alpha)$$

a cui corrisponde l'operatore sullo spazio di Hilbert

$$\hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\gamma\hat{\zeta} \cdot \hat{\mathbf{j}}) \exp(-i\beta\hat{v} \cdot \hat{\mathbf{j}}) \exp(-i\alpha\hat{z} \cdot \hat{\mathbf{j}})$$

Il difetto di questa espressione è che le rotazioni non sono riferite rispetto al sistema di assi originario. Con alcune manipolazioni, è possibile però arrivare a

$$\hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\alpha\hat{J}_z) \exp(-i\beta\hat{J}_y) \exp(-i\gamma\hat{J}_z)$$

dove  $\hat{J}_y, \hat{J}_z$  sono –finalmente e per nostra fortuna– riferiti agli assi posti all'inizio.

Calcoliamo gli elementi di matrice di  $\hat{U}_R$ :

$$\langle j'm' | \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) | jm \rangle$$

La base degli stati  $|jm\rangle$  diagonalizza simultaneamente  $\hat{\mathbf{j}}^2$  e  $\hat{J}_z$ :

$$\hat{\mathbf{j}}^2 |jm\rangle = j(j+1) |jm\rangle \quad \hat{J}_z |jm\rangle = m |jm\rangle$$

Non è difficile notare che, siccome  $[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{J}_k] = 0$  per ogni componente  $k$  del momento angolare totale, allora

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma)] = 0$$

Dal momento che  $\hat{\mathbf{j}}^2$  e  $\hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma)$  commutano, l'autospazio di uno costituisce un sottospazio invariante per l'altro<sup>3</sup>, per cui gli elementi di matrice di  $\hat{U}_R$  relativi ad una base di autostati di  $\hat{\mathbf{j}}^2$ , se sono calcolati tra autospazi diversi ( $j \neq j'$ ), risultano nulli. Possiamo scrivere cioè

$$\begin{aligned} \langle j'm' | \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) | jm \rangle &= \delta_{jj'} \langle j'm' | \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) | jm \rangle \\ &= \delta_{jj'} \langle jm' | \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) | jm \rangle \\ &\equiv \delta_{jj'} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \end{aligned}$$

In altri termini, partendo da uno stato nell'autospazio relativo all'autovalore  $j$ , una rotazione non può mappare tale stato al di fuori dell'autospazio: questo fatto è rappresentato dalla presenza del termine  $\delta_{jj'}$ , che rende nulla la “proiezione” su  $|j'm'\rangle$  del ruotato di  $|jm\rangle$  se  $j' \neq j$ . Questo chiaramente è un fatto generale delle rotazioni<sup>4</sup>: non abbiamo ancora specificato se stiamo trattando di momento angolare orbitale, di spin o altro ancora. Inoltre, da qui segue naturalmente che, utilizzando una base come  $|j, m\rangle$  di autovettori

per  $\hat{\mathbf{J}}^2$ , la matrice rotazionale assume una forma **diagonale a blocchi**, con ciascun blocco relativo all'autospazio  $j$  di  $\hat{\mathbf{J}}^2$ .

Poiché la base  $|jm\rangle$  diagonalizza  $\hat{J}_z$ , scrivendo la rotazione  $\hat{U}_R$  come trovato precedentemente e applicando a sinistra e a destra gli operatori  $\hat{J}_z$  esponenziati, giungiamo a

$$\begin{aligned} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle jm' | \exp(-i\alpha\hat{J}_z) \exp(-i\beta\hat{J}_y) \exp(-i\gamma\hat{J}_z) | jm \rangle \\ &= \exp(-i\alpha m' - i\gamma m) \langle jm' | \exp(-i\beta\hat{J}_y) | jm \rangle \end{aligned}$$

dove definiamo

$$\langle jm' | \exp(-i\beta\hat{J}_y) | jm \rangle \equiv d_{m'm}^{(j)}(\beta)$$

Le matrici  $D^{(j)}$  e  $d^{(j)}$  prendono il nome di **matrici di Wigner**.

Le matrici di Wigner sono a tutti gli effetti le rappresentazioni matriciali, dette **rappresentazioni di spin- $j$** , delle rotazioni tridimensionali<sup>5</sup> per oggetti a  $(2j+1)$  componenti. In altri termini, per ogni famiglia di autostati a  $j$  fissato, poiché una rotazione –come abbiamo visto poco fa– non può variarne il  $j$ , si può immaginare di eseguire una rotazione del vettore a  $(2j+1)$  componenti applicandogli la rispettiva matrice di Wigner di spin- $j$ . La prossima sezione è dedicata a capire meglio questa affermazione.

### 8.2.2 ≈ Rappresentazioni irriducibili del gruppo delle rotazioni

Nella scorsa sezione abbiamo derivato la forma delle Matrici di Wigner: sostanzialmente abbiamo mappato qualsiasi rotazione tridimensionale in una composizione di operatori “comodi da usare” rispetto a una base di autostati simultanei di  $\hat{\mathbf{J}}^2$ ,  $\hat{J}_z$ . Abbiamo visto il punto fondamentale per cui, **su autostati dell’operatore di Casimir  $\hat{\mathbf{J}}^2$ , una qualsiasi rotazione tridimensionale non varia  $j$** . Ma che forma assume, allora, la rotazione applicata a uno stato generico?

In molti sistemi – ad esempio nell’Atomo di Idrogeno – una base di autostati  $|nlm\rangle$  degli operatori  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$  e  $\hat{J}_z$  descrive completamente lo spazio di Hilbert. Caliamoci proprio in quest’esempio concreto, e proviamo a capire quale sia l’aspetto di una matrice di rotazione.

Il sistema è invariante per rotazioni, quindi vale  $[\hat{H}, \hat{U}_R] = 0$ : questo ci permette di dire che, **quando usiamo una qualsiasi base di autostati dell’hamiltoniana**, la forma matriciale della rotazione dovrà essere diagonale a blocchi. In particolare, dovrà annullarsi qualsiasi elemento di matrice del tipo

$$\langle n * * | \hat{U}_R | m * * \rangle \quad \text{con} \quad n \neq m$$

Passeremo adesso a una sorta di notazione vettoriale esplicita: per metterci al riparo da eventuali ambiguità, specifichiamo che daremo al vettore (di dimensione infinita!) un ordinamento

- crescente in  $n$ ;
- a  $n$  fissato, crescente in  $l$  (non usiamo  $j$  perché stiamo parlando di un atomo di idrogeno trascurando lo spin);

- a  $n$  e  $l$  fissati, crescente in  $m$ .

In altri termini, se per un generico stato  $\psi$  chiamiamo  $\psi_{nlm}$  la sua proiezione su  $|nlm\rangle$ :

$$\psi_{nlm} = \langle nlm|\psi\rangle$$

allora la sua rappresentazione “vettoriale” sarà della forma

$$|\psi\rangle \stackrel{*}{=} \begin{pmatrix} \psi_{100} \\ \psi_{200} \\ \psi_{21-1} \\ \psi_{210} \\ \psi_{21+1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

dove con “ $\stackrel{*}{=}$ ” indichiamo il leggero abuso di notazione. Avendo concordato la convenzione con cui scrivere matrici e vettori, vediamo che la matrice di rotazione  $U_R$  avrà una forma del tipo

$$U_R = \begin{pmatrix} [U_R^{(1)}] & & & \\ & [U_R^{(2)}] & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$$

dove con  $U_R^{(n)}$  denominiamo il blocco della matrice di rotazione riferito all’ $n$ -esimo autospazio dell’hamiltoniana. Spostiamoci dunque ad analizzare nel dettaglio ciascun blocco.

In realtà, giunti a questo punto siamo già in possesso della risposta. La base  $|nlm\rangle$  è costituita di autostati dell’operatore di Casimir delle rotazioni tridimensionali e della sua proiezione lungo l’asse  $z$ : quindi, poiché in ciascun autospazio di  $\hat{H}$  deve valere

$$0 \leq l \leq n - 1$$

e gli elementi di matrice tra diverse  $l$  devono essere nulli, ne segue che dovremo avere, all’interno del singolo blocco  $n$ -esimo, una matrice di rotazione della forma

$$U_R^{(n)} = \begin{pmatrix} [D^{(0)}] & & & \\ & [D^{(1)}] & & \\ & & \ddots & \\ & & & [D^{(n-1)}] \end{pmatrix}$$

dove i blocchi diagonali  $D^{(l)}$  sono esattamente le matrici di Wigner appena calcolate, di dimensione  $(2l + 1) \times (2l + 1)$ . Complessivamente la matrice di rotazione  $U_R$  si riduce quindi a una forma diagonale a blocchi, in cui per ciascun autospazio compaiono tutte le matrici di Wigner in ordine per tutte le possibili coppie  $(l, m)$  ammesse.

Questo è naturalmente un argomento generale che non dipende dallo specifico sistema fisico: non abbiamo mai esplicitato la forma dell'hamiltoniana. In generale, possiamo scrivere il seguente enunciato:

**Asserzione.** *Dato un sistema fisico in cui gli operatori  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{j}}^2$  e  $\hat{J}_z$  commutano e la loro base di autostati  $|Ejm\rangle$  è completa, allora in tale base la matrice di rotazione assume una forma diagonale a blocchi in cui all'interno di ciascun autospazio dell'hamiltoniana compaiono tutte le possibili matrici di Wigner.*

### 8.2.3 La rotazione degli spinori

La legge di rotazione degli spinori a  $N = 2s + 1$  componenti è

$$U_R \psi_\sigma(\mathbf{x}) = D_{\sigma\sigma'}^{(j)} \psi_{\sigma'}(R^{-1}\mathbf{x}) \quad (8.10)$$

dove sottindendiamo la somma su  $\sigma'$  e omettiamo la dipendenza dagli angoli  $\alpha, \beta, \gamma$ . Questa equazione è di fatto la riscrittura, in termini di singola componente, della (8.2), ma possiamo dare anche la seguente

*Dimostrazione.* Innanzitutto, chiariamo che, sotto una rotazione  $R(\theta, \bar{\mathbf{n}})$ , una componente dello spinore trasforma per definizione come

$$U_R \psi_\sigma(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{U}_R | \Psi \rangle$$

dove  $\hat{U}_R$  è l'operatore di rotazione nello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ :

$$\hat{U}_R = \exp(-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{j}}) = \exp(-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}) \exp(-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}})$$

tenendo  $\hbar = 1$ .

Possiamo quindi trovare la soluzione osservando come agisce tale operatore sul *bra*. Sappiamo che vale

$$\begin{aligned} \hat{U}_R |\mathbf{x}, \sigma\rangle &= \hat{D}_R |R\mathbf{x}, \sigma\rangle \\ &= \sum_{\sigma'} |\sigma'\rangle \langle \sigma'| e^{-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}} |\sigma\rangle |R\mathbf{x}\rangle \\ &= \sum_{\sigma'} D_{R|\sigma'\sigma}^{(j)} |R\mathbf{x}, \sigma'\rangle \end{aligned}$$

dove prima compare l'operatore di rotazione  $\hat{D}_R$ , agente solamente su  $\mathcal{H}_s$ , poi riconosciamo la matrice di Wigner  $D_{R|\sigma'\sigma}^{(j)}$ . Nel pedice indichiamo separatamente sia la rotazione  $R$  cui si fa riferimento, sia gli indici matriciali. Usando la convenzione della somma sugli indici ripetuti, scriviamo

$$\hat{U}_R |\mathbf{x}, \sigma\rangle = D_{R|\sigma'\sigma}^{(j)} |R\mathbf{x}, \sigma'\rangle$$

da cui segue subito la versione

$$\langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{U}_R^\dagger = \left( D_{R|\sigma'\sigma}^{(j)} \right)^* \langle R\mathbf{x}, \sigma' | = D_{R|\sigma\sigma'}^{(j)} {}^\dagger \langle R\mathbf{x}, \sigma' |$$

Dobbiamo ricordare che  $\hat{U}_R$  è unitario:

$$\hat{U}_R = \hat{U}_{R^{-1}}^\dagger \quad \text{o equivalentemente} \quad \hat{U}_{R^{-1}} = \hat{U}_R^\dagger$$

e che la stessa cosa vale per  $\hat{D}_R$ .<sup>6</sup> Allora

$$\langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{U}_R = \langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{U}_{R^{-1}}^\dagger = D_{R^{-1}|\sigma\sigma'}^{(j)} {}^\dagger \left\langle R^{-1}\mathbf{x}, \sigma' \right| = D_{R|\sigma\sigma'}^{(j)} \left\langle R^{-1}\mathbf{x}, \sigma' \right|$$

e da qui si ottiene che

$$\langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{U}_R | \Psi \rangle = \psi'_\sigma(\mathbf{x}) = D_{R|\sigma\sigma'}^{(j)} \left\langle R^{-1}\mathbf{x}, \sigma' \right| \Psi = D_{R|\sigma\sigma'}^{(j)} \psi_\sigma(R^{-1}\mathbf{x})$$

□

Nel caso  $j = 1/2$ , con  $l = 0$  e spin  $s = 1/2$ , possiamo quindi sostituire  $\hat{J}_y = \hat{\sigma}_y/2$ , ottenendo

$$\begin{aligned} d^{(1/2)}(\beta) &= \exp\left(-i\frac{\sigma_y}{2}\beta\right) = \mathbb{1} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - i\sigma_y \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ &= \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

dove abbiamo usato l'identità (8.9).

Esiste più di un modo per computare le matrici di Wigner, e in particolare è degno di nota che, a partire dalla matrice  $d^{(1/2)}$ , è possibile trovare, armati di sufficiente pazienza, tutte le  $d^{(j)}$  che desideriamo. A tempo debito (Sez. 9.2.2), quando avremo imparato a eseguire una *composizione di momenti angolari*, potremo tornare su questo argomento.

Dalla forma di  $d^{(1/2)}$  possiamo notare che emerge un fatto nuovo, puramente quantistico e che porterà (come vedremo nella prossima sezione) a conseguenze davvero controintuitive; questo fenomeno è la base stessa della moderna Fisica delle Interazioni Fondamentali e delle Particelle, permettendo la classificazione in fermioni (particelle di spin semi-intero) e bosoni (spin intero). Nel caso spin  $1/2$ , ad esempio, si vede immediatamente come una rotazione di angolo  $\beta = 2\pi$  produca la matrice

$$d^{(1/2)}(2\pi) = -\mathbb{1}$$

In altri termini, nel mondo quantistico esistono spinori tali che le rotazioni di  $2\pi$  e l'identità non sono lo stesso operatore

$$\hat{R}_{2\pi} \not\equiv \mathbb{1}$$

anzi, sono opposti! Ciò significa che applicare una rotazione di  $2\pi$  radianti a tale particella corrisponde a moltiplicare il suo stato di spin per una fase globale  $-1$ . Tuttavia, ancora una volta, la Fisica è salva: non basta ruotare attorno a un fermione per cambiarne lo stato di spin, è infatti necessario rammentare che **consideriamo spazi di Hilbert proiettivi**, in cui gli stati sono definiti a meno di fasi globali. In questo modo possiamo apprezzare che, fisicamente, ruotare di  $2\pi$  un fermione è **comunque equivalente a non ruotarlo affatto**.

### 8.2.4 ≈ L'equivalenza topologica locale tra $SO(3)$ e $SU(2)$

Il motivo di questa stranezza ha origine dalle differenze topologiche tra i gruppi  $SO(3)$  ed  $SU(2)$ , su cui adesso vogliamo porre la nostra attenzione. Ricordiamo prima di tutto che, nella sottosezione 8.1.1 di questo capitolo, ci siamo permessi di considerare  $SU(2)$  come gruppo di riferimento per le rotazioni al posto di  $SO(3)$ , invocando una forma di **equivalenza** tra i due gruppi. Inoltre, abbiamo appena visto una rappresentazione irriducibile del gruppo delle rotazioni tridimensionali nello spazio di spin 1/2, che ha due dimensioni. Il motivo per cui è necessario passare da  $SO(3)$  ad  $SU(2)$  appare qui manifesto: non esistono rappresentazioni ordinarie, irriducibili e bidimensionali del gruppo  $SO(3)$ . Infatti, la rappresentazione ordinaria in due dimensioni del gruppo  $SO(3)$  si riduce alla sola matrice

$$\mathbb{1}_2 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$$

Evidentemente, questa non ci permette di rappresentare le rotazioni sullo spazio  $\mathcal{H}_{\text{spin}}$  di spin 1/2: le condizioni che stiamo richiedendo sono troppo stringenti. Potremmo ragionevolmente supporre di rilassare qualche richiesta. Non possiamo certo rinunciare al numero di dimensioni dello spazio su cui ci interessa operare, né all'irriducibilità. A pensarci bene, però, non è necessario che la rappresentazione sia ordinaria. Lo spazio di Hilbert su cui stiamo lavorando è **proiettivo**, ovvero stati che differiscono per una fase globale moltiplicativa sono equivalenti. Allora, la rappresentazione di  $SO(3)$  che cerchiamo potrà essere, più in generale, una **rappresentazione proiettiva**, ovvero una mappa  $\mathcal{R} : \mathcal{G} \rightarrow GL(V)$  tale che

$$\mathcal{R}(g_1) \cdot \mathcal{R}(g_2) = e^{i\theta(g_1, g_2)} \mathcal{R}(g_1 \circ g_2) \quad \forall g_1, g_2 \in \mathcal{G}$$

con  $\theta(g_1, g_2) \in \mathbb{R}$ . La fase moltiplicativa, in generale dipendente dalla coppia  $(g_1, g_2)$ , non determina alcun problema, grazie alla proprietà dello spazio di Hilbert considerato. Le rappresentazioni proiettive irriducibili di  $SO(3)$  corrispondono alle rappresentazioni ordinarie di  $SU(2)$ , in quanto questo secondo gruppo è il **doppio ricoprimento** del primo. Cerchiamo di capire il significato di tale espressione, partendo dai rapporti che legano  $SO(3)$  e  $SU(2)$ .

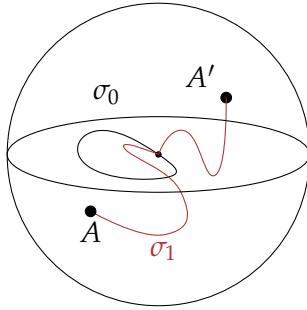
**I gruppi  $SO(3)$  ed  $SU(2)$  sono topologicamente equivalenti a livello locale**, in prossimità dell'identità, in quanto le algebre di Lie sono identiche

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k \quad \implies \quad \mathfrak{so}(3) \sim \mathfrak{su}(2)$$

tuttavia l'**equivalenza non è globale**.

In particolare,  $SO(3)$  non è semplicemente connesso: lo *spazio dei parametri* (reali) è connesso per archi, ma non è vero che tutti i cammini chiusi possono essere deformati in un punto, per cui la connessione non è semplice. Cercheremo adesso di dimostrare questa affermazione.

Possiamo rappresentare gli elementi di  $SO(3)$  con i 3 angoli di Eulero, o equivalentemente utilizzare un versore  $\bar{\mathbf{n}} \in S^2$  (2 parametri) e un angolo di



**Figura 8.1:** Queste due curve chiuse nello spazio dei parametri di  $SO(3)$  valicano il bordo rispettivamente zero ed una volta.

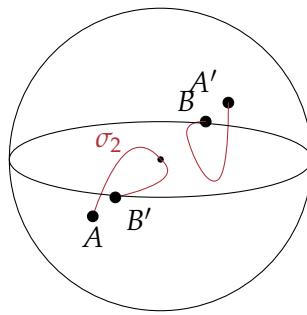
rotazione attorno a questo, che chiamiamo  $\theta$  (1 parametro), con  $\theta \in [0, 2\pi]$ . Non è difficile vedere che, in questo modo, possiamo attribuire ad ogni singola rotazione due diverse parametrizzazioni ridondanti: infatti è chiaro che le due seguenti rotazioni sono la stessa rotazione

$$R(\theta, \bar{\mathbf{n}}) = R(2\pi - \theta, -\bar{\mathbf{n}})$$

per cui la nostra parametrizzazione non è iniettiva. Per eliminare questa duplicità, consideriamo allora  $\theta \in [0, \pi]$ . Costruiamo in questo modo uno spazio dei parametri un po' difficile da visualizzare, ma che possiamo provare ad illustrare goffamente, proiettandolo nel nostro mondo tridimensionale. Immaginiamo dunque una sfera di raggio  $\pi$ , all'interno della quale tutti gli elementi di  $SO(3)$  sono mappati: il versore (che corrisponde a 2 coordinate angolari) individua ancora la direzione di rotazione, mentre adesso la distanza dal centro parametrizza l'angolo di rotazione  $\theta$ . Pur avendo rimosso la ridondanza, rimane sempre vero che, per ogni versore  $\bar{\mathbf{n}}$ ,

$$R(\pi, \bar{\mathbf{n}}) = R(\pi, -\bar{\mathbf{n}})$$

In altri termini, lo spazio dei parametri non è la solita sfera solida, bensì una sfera dotata di *effetto Pac-Man*: ogni punto che giace sulla superficie della sfera corrisponde anche al proprio *punto antipodale*. Immaginiamo per un attimo di trovarci all'interno di questo spazio. Procedendo sicuri in una direzione, riusciamo ad attraversarlo e lambire infine i suoi bordi, ma a quel punto ci ritroviamo sorprendentemente al suo interno. Da dove siamo appena rientrati possiamo vedere, adesso lontano davanti a noi, il varco da cui ci pareva di essere usciti. Ciò che rende questa immagine difficile da concepire è il bisogno di una dimensione ulteriore, in cui la sfera possa essere ripiegata. In due dimensioni, simili fenomeni non ci meravigliano affatto: il già citato Pac-Man, essere bidimensionale, procederà in linea retta e sarà meravigliato nel trovarsi sullo stesso punto da cui era partito qualche attimo prima. Noi, al contrario, possiamo prendere agevolmente lo spazio in cui abita e piegarlo, grazie al fatto che abbiamo una dimensione di vantaggio rispetto a lui. Capiamo in questo modo che l'esserino dimora su una superficie curva, di cui però vediamo, sullo schermo di gioco, una *proiezione*<sup>7</sup>. Se tracciamo un cammino chiuso  $\sigma_0$  interno alla sfera, in modo che non tocchi mai la sua



**Figura 8.2:** Qui invece illustriamo la curva chiusa  $\sigma_2$ , che passa per due volte attraverso il bordo.

superficie, ci accorgiamo che esso può essere deformato con continuità fino a tornare nell'origine. In tal caso, possiamo scrivere

$$[\sigma_0] = [e]$$

cioè  $\sigma_0$  appartiene alla medesima *classe di equivalenza* dell'origine  $e$ , ovvero  $\mathbb{1}$ : l'identità.

Disegnando invece il cammino chiuso  $\sigma_1$ , che è chiuso grazie alle proprietà dello spazio con cui stiamo lavorando, è immediato vedere che **non è possibile deformarlo con continuità fino a farlo collassare nell'origine o in altro singolo punto**. Volendo, possiamo spostare anche  $A$  e  $A'$  in  $B$  e  $B'$  in modo continuo: in tal caso dovremo stare attenti a spostarli insieme, in modo che  $B$  e  $B'$  siano ancora antipodali (e quindi sostanzialmente lo stesso punto); in ogni caso, abbiamo dimostrato che questo spazio **non è semplicemente connesso**. La classe di equivalenza di  $\sigma_1$  è dunque diversa da quella di  $\sigma_0$ :

$$[\sigma_1] = [g]$$

Anche se abbiamo dimostrato ciò che ci interessava, ormai ci stiamo divertendo troppo, e quindi perché non disegnare un percorso  $\sigma_2$ , tale che parta dall'origine  $\mathbb{1}$ , entri in un punto del bordo  $A$  uscendo dal punto antipodale  $A'$ , poi tocchi di nuovo il bordo in  $B$ , esca dal suo antipodale  $B'$  e torni infine all'origine? Deformando il cammino  $\sigma_2$  con continuità, possiamo avvicinare  $A$  a  $B'$  e  $A'$  a  $B$ . Quando le due coppie saranno fatte degenerare nello stesso punto e nel suo antipodale, situati sul bordo, ci troveremo con una curva topologicamente equivalente a  $\sigma_0$ :

$$[\sigma_2] = [\sigma_0] = [e]$$

Possiamo continuare a disegnare cammini  $\sigma_n$ , che oltrepassano il bordo  $n$  volte, per scoprire che

$$[\sigma_n] = \begin{cases} [e] & \text{per } n \text{ pari} \\ [g] & \text{per } n \text{ dispari} \end{cases}$$

Le due classi di equivalenza sono state chiamate in questo modo perché è lecito farle corrispondere ai due elementi del gruppo finito  $\mathbb{Z}_2$

$$\mathbb{Z}_2 = \{e, g\} \quad gg = ee = e, \quad eg = ge = g$$

Infatti, considerando due curve chiuse  $\sigma_n^{(1)}$  e  $\sigma_m^{(2)}$ , dato che entrambe iniziano e terminano nell'origine, è sempre possibile concatenarle con continuità e costruire, partendo dai due cammini, un unico percorso chiuso  $\sigma_{m+n}^{(3)}$ , topologicamente equivalente a  $\mathbb{1}$  se  $m + n$  è pari, a  $\sigma_1$  se  $m + n$  è dispari. Troviamo pertanto che le classi di equivalenza e la concatenazione si comportano esattamente come gli elementi e la composizione gruppale di  $\mathbb{Z}_2$ , detto per questo *primo gruppo di homotopia* o *gruppo fondamentale* di  $SO(3)$ . Per questa ragione, lo spazio dei parametri di  $SO(3)$  **non è la 3-sfera  $S^3$** , che vedremo essere semplicemente connessa, bensì  $S^3/\mathbb{Z}_2$ , che è una **varietà connessa in modo non semplice**.

Di contro, il gruppo  $SU(2)$  è semplicemente connesso: i suoi elementi possono essere rappresentati come

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$$

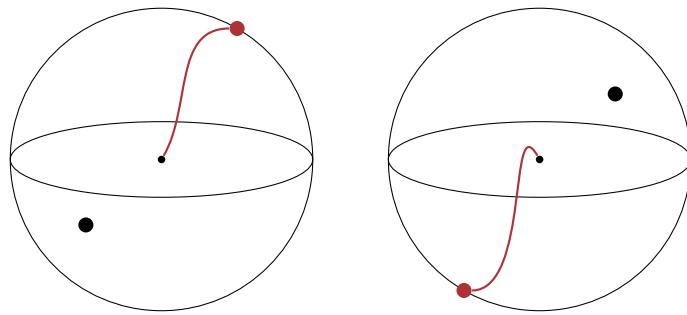
dove  $a, b \in \mathbb{C}$ , ovvero  $a = a_1 + ia_2$  e  $b = b_1 + ib_2$  con  $a_1, a_2, b_1, b_2 \in \mathbb{R}$ . Affinché il gruppo sia **speciale**, i.e. nella rappresentazione matriciale contenga matrici a determinante unitario, deve valere la condizione

$$a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 = 1$$

quindi lo spazio dei parametri (reali) di  $SU(2)$  è lo spazio tridimensionale  $S^3$ , ossia la (iper)superficie a tre dimensioni di una sfera a quattro dimensioni. Questa ipersuperficie è semplicemente connessa: ciò significa che ogni percorso chiuso nello spazio dei parametri può essere deformato con continuità in un punto.<sup>8</sup>  $S^3$  è ancora più complicato da visualizzare nel nostro mondo tridimensionale, ma vediamo come è possibile porre rimedio. In modo analogo, per Pac-Man, essere bidimensionale, sarebbe impossibile immaginare l'ordinaria superficie sferica  $S^2$ . Per fargli un favore, potremmo tagliare tale superficie in due parti, lungo la linea equatoriale, mappare ciascun emisfero su un *disco* e infine mostrargli entrambi i dischi, con la prescrizione che ciascun punto sulla frontiera di uno dei dischi è connesso al punto antipodale dell'altro. Con un po' di fatica, Pac-Man potrebbe apprezzare, ad esempio, la forma del nostro pianeta. Nel nostro caso, invece, possiamo guardare a  $S^3$  come a due *sfere piene*, che poniamo una accanto all'altra, con l'indicazione di far corrispondere ogni punto della superficie di una con il punto antipodale situato sulla superficie dell'altra, come riportiamo in Figura 8.3. Chiaramente, se il centro della prima sfera corrisponde a  $\mathbb{1}$ , il centro dell'altra sfera corrisponde a  $-\mathbb{1}$ . Per disegnare un *loop*, cioè un cammino chiuso, che parta e termini in  $\mathbb{1}$ , è necessario attraversare sempre un numero pari (o nullo, nel caso triviale) di punti antipodali, pertanto è facile vedere che, per qualunque loop  $\sigma$ :

$$[\sigma] = [e]$$

variando i cammini con continuità, con le accortezze viste precedentemente. Da questo segue che il gruppo fondamentale di  $SU(2)$  è quello banale, e tutti i cammini sono topologicamente equivalenti a quello triviale.



**Figura 8.3:** In questo modo possiamo visualizzare  $S^3$ , cioè lo spazio dei parametri di  $SU(2)$ . Il cammino disegnato è la trasposizione di quello che sopra, nello spazio dei parametri di  $SO(3)$ , abbiamo chiamato  $\sigma_1$ . Come possiamo vedere, non corrisponde ad un percorso chiuso, bensì parte da  $\mathbb{1}$  e termina in  $-\mathbb{1}$ .

In ogni caso, pur non essendo topologicamente equivalenti a livello globale, i due gruppi  $SO(3)$  e  $SU(2)$  rimangono intimamente collegati. Si può mostrare infatti che  $SU(2)$  è un **doppio ricoprimento** di  $SO(3)$ , e ciò è anche intuitivo dal fatto che, come abbiamo visto, ad ogni elemento di  $SO(3)$  corrispondono due elementi di  $SU(2)$ . Li collega una mappa uno a due, ed è come se il secondo gruppo avesse un vocabolario doppiamente ricco rispetto al primo, risultando di conseguenza *più espressivo*. Ad esempio, riportiamo un paio di corrispondenze tra  $SU(2)$ , a sinistra, e  $SO(3)$ , a destra:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

L'equazione per trovare le due matrici  $2 \times 2$   $U \in SU(2)$  corrispondenti a  $R(\theta, \bar{\mathbf{n}}) \in SO(3)$  altro non è che l'identità (8.9):

$$U = e^{-i\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}} = \mathbb{1} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{n}})$$

e la sua opposta  $-U$ .

Nella Teoria delle Rappresentazioni di  $SU(2)$ , si dimostra che esiste una ed una sola rappresentazione irriducibile di  $SU(2)$  per ciascuna dimensione finita  $N = 2s + 1$ , dove  $s$  è quello che noi chiamiamo *spin*. Quando  $N$  è dispari – quindi  $s$  intero – la rappresentazione del gruppo coincide con una *rappresentazione ordinaria* di  $SO(3)$ , mentre nel caso di  $N$  pari – dunque  $s$  frazionario – la rappresentazione **non può coincidere con una rappresentazione ordinaria** di  $SO(3)$ , ma coincide con una sua *rappresentazione proiettiva*, anche chiamata *rappresentazione spinoriale*.

### 8.3 ROTAZIONI DI ANGOLO $2\pi$ : FERMIONI E BOSONI

Abbiamo visto come sulle particelle di spin  $1/2$  la trasformazione  $\hat{R}_{2\pi}$  agisca come  $-\mathbb{1}$ . Questo è un fatto sicuramente sorprendente, ma non deve confondere: non significa che eseguire una misura su un elettrone ruotato di angolo  $2\pi$  dia risultati diversi da una misura su un elettrone non ruotato, solo che esiste una trasformazione che agisce come una fase  $e^{i\pi}$  sullo stato dell'elettrone. D'altra parte, se così fosse, in che modo potremmo stabilire "quanto è stato ruotato l'elettrone"? Non esiste un sistema di riferimento assoluto rispetto a cui abbia senso porsi questa domanda. Dobbiamo toglierci il cappello da matematici e indossare le pantofole da fisici: la teoria necessita di alcuni vincoli.

In queste sezioni ci occupiamo di aggiungere delle condizioni alla teoria che stiamo sviluppando in modo da includere l'inevitabile evidenza fisica che gli esiti delle misure sono indipendenti da rotazioni di angolo  $2\pi$  attorno a qualsiasi asse. Questo avrà due effetti: otterremo una restrizione sul concetto di *osservabile*, e a partire da questa deriveremo un fatto generale che scinde fisicamente lo spazio a spin intero da quello a spin semintero.

Iniziamo dai fondamenti: dobbiamo dimostrare che  $\hat{R}_{2\pi} = \mathbb{1}$  su tutti gli autostati di  $\hat{\mathbf{J}}^2$  con  $j$  intero, e  $\hat{R}_{2\pi} = -\mathbb{1}$  sugli autostati di  $\hat{\mathbf{J}}^2$  con  $j$  frazionario.

*Dimostrazione.* Sia  $\hat{R}(\bar{\mathbf{n}}, 2\pi)$  una rotazione di angolo  $2\pi$  attorno al generico asse  $\bar{\mathbf{n}}$ :

$$\hat{R}(\bar{\mathbf{n}}, 2\pi) = e^{-i2\pi\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}}$$

Senza perdita di generalità, supponiamo  $\bar{\mathbf{n}} = \bar{\mathbf{z}}$

$$\hat{R}_{2\pi} \equiv \hat{R}(\bar{\mathbf{z}}, 2\pi) = e^{-i2\pi\hat{J}_z}$$

Lavoriamo con la base degli autostati del momento angolare  $\{|jm\rangle\}$ : questa è completa e ortonormale, per cui descrive tutto lo spazio di Hilbert e quindi l'azione di  $\hat{R}_{2\pi}$  su  $\mathcal{H}$  è completamente specificata dalla sua azione su questa base. Deduciamo che la rotazione applicata a questi stati può essere scritta come

$$\hat{R}_{2\pi} |jm\rangle = e^{-i2\pi\hat{J}_z} |jm\rangle = e^{-i2\pi m} |jm\rangle$$

Ora, poiché  $m$  varia tra  $-j$  e  $+j$  con passi di 1, è vero che

$$j \text{ intero} \implies m \text{ intero} \quad j \text{ semintero} \implies m \text{ semintero}$$

per cui

$$\hat{R}_{2\pi} |jm\rangle = (-1)^{2j} |jm\rangle \tag{8.11}$$

che è la tesi.  $\square$

Abbiamo scoperto che l'operatore  $\hat{R}_{2\pi}$  agisce in modo non banale sul nostro spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ , e lo decomponiamo completamente in due sottospazi:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_B \oplus \mathcal{H}_F$$

dove  $B$  indica lo spazio "bosonico" e  $F$  quello "fermionico":

$$\forall |B\rangle \in \mathcal{H}_B : \hat{R}_{2\pi} |B\rangle = |B\rangle \quad \forall |F\rangle \in \mathcal{H}_F : \hat{R}_{2\pi} |F\rangle = -|F\rangle$$

In virtù della completezza e l'ortogonalità<sup>9</sup> del set  $\{|jm\rangle\}$ , possiamo dire che gli autostati del momento angolare a  $j$  intero sono autostati di  $\hat{R}_{2\pi}$  relativi all'autospazio  $\mathcal{H}_B$  con autovalore +1, quelli con  $j$  semintero all'autospazio  $\mathcal{H}_F$  con autovalore -1.

### 8.3.1 Una condizione sulle osservabili

Dal momento che la Fisica osservata è necessariamente invariante sotto rotazioni di angolo  $2\pi$ , dobbiamo imporre che ogni distribuzione statistica associata a un qualsiasi osservabile  $\hat{O}$  debba, in ciascuno dei suoi momenti, essere invariante sotto applicazione della trasformazione  $\hat{R}_{2\pi}$ . In formule, questo si traduce in:

$$\langle \phi' | \hat{O}^k | \phi' \rangle = \langle \phi | \hat{O}^k | \phi \rangle \quad (8.12)$$

dove

$$|\phi'\rangle = \hat{R}_{2\pi} |\phi\rangle$$

e  $\langle \phi | \hat{O}^k | \phi \rangle$  è il momento  $k$ -esimo della distribuzione di probabilità. Questa affermazione fisica è equivalente alla seguente affermazione algebrica:  $\hat{R}_{2\pi}$  commuta con qualsiasi operatore associato a una buona osservabile.

*Dimostrazione.* Dimostriamo inizialmente che, se vale l'Eq. (8.12), allora necessariamente  $[\hat{R}_{2\pi}, \hat{O}] = 0$ . Per ipotesi vale

$$\langle \phi' | \hat{O}^k | \phi' \rangle = \langle \phi | \hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O}^k \hat{R}_{2\pi} | \phi \rangle$$

Da qui segue che

$$\langle \phi | (\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O}^k \hat{R}_{2\pi} - \hat{O}^k) | \phi \rangle = 0$$

Siccome questo deve valere in generale per ogni stato  $|\phi\rangle$ , l'operatore differenza deve essere l'operatore nullo:

$$\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O}^k \hat{R}_{2\pi} - \hat{O}^k = 0$$

cioé, banalmente componendo a sinistra con  $\hat{R}_{2\pi}$ , vale

$$[\hat{O}^k, \hat{R}_{2\pi}] = 0 \quad (8.13)$$

per qualsiasi scelta di  $k$ , da cui la tesi.

Dimostriamo che l'assunzione inversa implica l'Eq. (8.12). Se  $[\hat{R}_{2\pi}, \hat{O}] = 0$ , allora (ricordando che  $\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{R}_{2\pi} = \mathbb{1}$ ):

$$\begin{aligned} \langle \phi' | \hat{O}^k | \phi' \rangle &= \langle \phi | \hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O}^k \hat{R}_{2\pi} | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \underbrace{(\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O} \hat{R}_{2\pi})(\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O} \hat{R}_{2\pi}) \cdots (\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O} \hat{R}_{2\pi})}_{k \text{ termini}} | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{O}^k | \phi \rangle \end{aligned}$$

come atteso. □

Possiamo quindi concludere che le due condizioni (8.12) e (8.13) sono equivalenti. Ci soffermiamo su questo punto per chiarire la logica della derivazione: siamo tenuti, da fisici, a compiere affermazioni fisiche, riferite a quantità che siamo capaci di misurare. I postulati devono avere il supporto di solide prove sperimentali. Al contrario, un'affermazione puramente algebrica sulla

teoria può avere solo sostegno a posteriori. Questa dimostrazione serve a collegare l'enunciato (fisico) "nel nostro mondo tridimensionale misuriamo solo quantità che non variano se eseguiamo una rotazione di angolo  $2\pi$ ", che vediamo verificato e imponiamo come postulato nella teoria, con l'enunciato (algebrico) "le buone osservabili sono operatori autoaggiunti che commutano con la trasformazione  $\hat{R}_{2\pi}$ ". Siccome le due affermazioni si implicano a vicenda, possiamo usare quella algebrica – operativamente molto più comoda – con la stessa forza argomentativa di quella fisica.

Vediamo la prima conseguenza di quanto abbiamo raggiunto: se le osservabili sono operatori autoaggiunti che commutano con  $\hat{R}_{2\pi}$ , allora qualsiasi fase relativa in una sovrapposizione di stati fermionici e bosonici non è misurabile.

*Dimostrazione.* Sia  $|\psi\rangle$  lo stato

$$|\psi\rangle = |B\rangle + e^{i\phi} |F\rangle$$

e sia  $O$  una buona osservabile, quindi esista il relativo operatore autoaggiunto  $\hat{O}$  che realizzzi  $[\hat{R}_{2\pi}, \hat{O}] = 0$ , calcolandone il valore atteso sullo stato

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle B | \hat{O} | B \rangle + e^{i\phi} \langle B | \hat{O} | F \rangle + e^{-i\phi} \langle F | \hat{O} | B \rangle + \langle F | \hat{O} | F \rangle$$

È pur vero che  $\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O} \hat{R}_{2\pi} = \hat{O}$ : questo implica che

$$\langle B | \hat{O} | F \rangle = \langle B | \hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O} \hat{R}_{2\pi} | F \rangle = -\langle B | \hat{O} | F \rangle \implies \langle B | \hat{O} | F \rangle = 0$$

Ogni buona osservabile ha elementi di matrice nulli tra uno stato bosonico e uno stato fermionario, quindi

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle B | \hat{O} | B \rangle + \langle F | \hat{O} | F \rangle$$

cioé tutta l'informazione sulla fase relativa è sparita!  $\square$

Possiamo dire che a tutti gli effetti l'operatore  $\hat{R}_{2\pi}$  realizza una scissione internamente a  $\mathcal{H}$  tra gli stati di tipo  $|B\rangle$  e gli stati di tipo  $|F\rangle$ . Questa scissione è tale per cui, dal punto di vista di qualsiasi buona osservabile fisica:

- sono equivalenti e (fisicamente) indistinguibili gli stati:

$$\forall \phi \in \mathbb{R} : |B\rangle + e^{i\phi} |F\rangle \stackrel{\hat{O}}{\sim} |B\rangle + |F\rangle \quad (8.14)$$

pur essendo (matematicamente) stati diversi (non differiscono per una pura fase globale!);

- le distribuzioni statistiche associate a stati del tipo  $|B\rangle + |F\rangle$  si sommano **incoerentemente** sui due spazi, cioé sono nulli tutti i possibili effetti di interferenza:

$$\langle O \rangle_{|B\rangle+|F\rangle} = \langle O \rangle_{|B\rangle} + \langle O \rangle_{|F\rangle}$$

La prossima sezione è un approfondimento (può essere saltata senza perdita di continuità) contenente una dimostrazione del fatto che uno stato puro della forma (8.14) è *irrealizzabile*, con un significato ben preciso del termine.

### 8.3.2 \* Regole di superselezione

Nella costruzione della nostra Teoria non possiamo prescindere da alcune imposizioni di ragionevolezza e coerenza, che dobbiamo applicare in forma di postulato all'impalcatura teorica. Una di queste è la seguente

**Asserzione.** *La Fisica osservata deve essere indipendente da rotazioni di angolo  $2\pi$  del sistema o dell'apparato di misura.*

Questo produce una cascata di implicazioni: abbiamo visto che l'operatore  $\hat{R}_{2\pi}$  non è banalmente l'identità su tutto lo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ ; piuttosto, esistono due spazi – che come sopra indichiamo con  $\mathcal{H}_F$  e  $\mathcal{H}_B$  – rispettivamente fermionico e bosonico, sui quali l'operatore agisce in modo diverso

$$|F\rangle \in \mathcal{H}_F \implies \hat{R}_{2\pi} |F\rangle = -|F\rangle \quad , \quad |B\rangle \in \mathcal{H}_B \implies \hat{R}_{2\pi} |B\rangle = |B\rangle$$

Tuttavia, sorge un dubbio: chi garantisce che l'imposizione fatta nella sezione precedente sulle distribuzioni (e quindi su chi siano le osservabili) sia la più generale e coerente imposizione che possiamo fare sulla Teoria? Non è altrettanto generale lavorare invece che sugli operatori direttamente sugli stati, imponendo che accettiamo come stati fisici solo quelli su cui  $\hat{R}_{2\pi}$  si comporta come un multiplo dell'identità? Questa sezione è dedicata a sviscerare la questione e mostrare che in effetti la condizione ricavata precedentemente non pecca di generalità.

È necessario sottolineare che noi lavoriamo con uno spazio di Hilbert proiettivo, cioè consideriamo tutti gli stati come definiti a meno di una fase. Formalmente, oggetti di questo tipo si chiamano *raggi*. La rotazione  $\hat{R}_{2\pi}$  è un operatore che non varia il raggio quando lavora dentro  $\mathcal{H}_F$  o  $\mathcal{H}_B$ , perché sia  $|F\rangle$  che  $|B\rangle$  vengono solamente moltiplicati per una fase globale, del tutto irrilevante. Tuttavia, sul raggio  $|\psi\rangle = |B\rangle + |F\rangle$  l'operatore si comporta diversamente

$$\hat{R}_{2\pi} (|B\rangle + |F\rangle) = |B\rangle - |F\rangle \not\propto |\psi\rangle$$

Come vedremo fra poco, imponendo la nostra Asserzione arriviamo a concludere che questo stato è *irrealizzabile*, con un significato preciso del termine.

**STATI REALIZZABILI E COMPLETEZZA DELLE OSSERVABILI** Per capire a fondo la prossima derivazione, è necessario effettuare una premessa. A tal proposito ci rifacciamo alla discussione di [3]:

**Definizione.** *Definiamo realizzabili, o preparabili, tutti quegli stati dello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  che sono autostati simultanei di un qualche set completo di operatori autoaggiuntivi compatibili, interamente costituito di osservabili fisiche.*

L'affermazione che stiamo facendo è precisa: quando eseguiamo un certo numero di misure compatibili su un sistema, lo stato in cui viene a trovarsi è un autostato comune a tutte le osservabili compatibili: per chiarire questo punto, che qui riportiamo pur non essendo oggetto del corso, immaginiamo di eseguire delle misure di energia, momento angolare e spin su un atomo di idrogeno. Lo stato in cui si trova l'atomo alla fine delle misure è un autostato

simultaneo degli operatori  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{\mathbf{S}}^2$  e  $\hat{S}_z$ , perché *gli esiti di ciascuna misura sono univoci*. Certamente non misuriamo due diverse energie sullo stesso atomo! La natura statistica della teoria insorge su misure ripetute su *ensembles* di sistemi quantistici, non certo su una singola misura.

Diciamo che la base  $|nlms\sigma\rangle$  è completa perché risolve completamente lo spazio di Hilbert: posta la dinamica del sistema, a ogni set fissato di numeri quantici  $nlms\sigma$  corrisponde uno e un solo stato (raggio) di  $\mathcal{H}$ . In questo senso il set di operatori costituisce un set completo di osservabili compatibili: esiste una sola possibile diagonalizzazione simultanea, che identifica in modo univoco autospazi unidimensionali comuni. Per qualsiasi altro operatore compatibile col set, dovendo con ciascuno di essi condividere una base di autostati, gli stati  $|nlms\sigma\rangle$  sono autostati – e.g. sono autostati della parità.

La nozione di *set* completo di operatori autoaggiunti  $\{O_i\}$  che utilizziamo qui è quella illustrata in Sez. 2.3. Un'unica differenza sta nel fatto che qui non tutti gli operatori autoaggiunti sono associati ad osservabili fisiche: sono associati ad un'osservabile solo quegli operatori che commutano con  $R_{2\pi}$ .

La condizione di “completezza”, cioè il fatto che i numeri quantici determinino univocamente uno stato, può essere equivalentemente espressa nel modo equivalente: dato uno stato  $|\varphi\rangle$  non nullo tale che

$$\forall i : \hat{O}_i |\varphi\rangle = \omega_i |\varphi\rangle \implies |\varphi\rangle \propto |\omega_1 \dots \omega_n\rangle$$

Le nozioni di completezza di un set di operatori autoaggiunti e di realizzabilità degli stati, insieme alla richiesta di invarianza della statistica osservativa sotto rotazioni di angolo  $2\pi$ , sono tutto quello che ci serve. Ricaviamone quindi le conseguenze.

**LA RELAZIONE TRA  $\mathcal{H}_F$  E  $\mathcal{H}_B$**  La prima domanda che ci poniamo è: in che relazione sono i due spazi  $\mathcal{H}_F$ ,  $\mathcal{H}_B$ ? Per rispondere, dobbiamo fare un passo indietro e domandarci *chi siano* questi due sottospazi. Sono entrambi spazi di Hilbert correttamente definiti, perché sono spazi vettoriali (infinito-dimensional) dotati di una nozione di prodotto interno  $\langle \cdot | \cdot \rangle$  che induce una distanza  $d$  rispetto alla quale gli spazi metrici  $(\mathcal{H}_j, d)$  sono completi. L'esistenza di questi due spazi nasce dalla seguente catena di fatti:

1. il generatore del gruppo delle rotazioni tridimensionali  $\hat{\mathbf{J}}$  è un operatore hermitiano;
2. ogni base di autostati di  $\hat{\mathbf{J}}$  decomponе lo spazio di Hilbert globale  $\mathcal{H}$  in somma diretta di autospazi ortogonali; è anche possibile trovare una base ortonormale di autostati;
3. tramite argomenti di compatibilità tra  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e una qualsiasi proiezione  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}$ , si deduce che l'operatore di Casimir  $\hat{\mathbf{j}}^2$  è universalmente quantizzato e ammette come autovalori i numeri  $j(j+1)$ , con  $j$  intero o semintero.

Questo basta a concludere che, *a priori*, nello spazio di Hilbert globale  $\mathcal{H}$  vivono sia stati con  $j$  intero che con  $j$  semintero: a livello algebrico questi stati esistono tutti, sono indipendenti e, se riorganizzati come base di  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}$ ,

producono una torre di stati in cui l'autovalore di proiezione varia con passo unitario tra  $-j$  e  $+j$ . Per adesso quindi facciamo la seguente affermazione:

**Asserzione.** *Nello spazio di Hilbert globale esistono sia stati fermionici che bosonici. È matematicamente coerente scrivere uno stato del tipo  $|B\rangle + |F\rangle$ .*

Come mai lo specifichiamo? Fino ad ora abbiamo incontrato solamente sistemi in cui il momento angolare ha una natura ben precisa: ad esempio, nel caso dell'atomo di idrogeno lo spazio di Hilbert di riferimento è  $\mathcal{H}_B$  perché  $l$  assume solo valori interi per l'imposizione di monodromia sulle funzioni d'onda; lo spin di un elettrone è  $1/2$ , e in tal caso lo spazio in cui viviamo è  $\mathcal{H}_F$ . Effettivamente, potrebbe apparire insensato o incoerente scrivere una sovrapposizione tra uno spin intero e uno semintero, i.e. uno stato che mischi  $\mathcal{H}_B$  e  $\mathcal{H}_F$ . Ma come mai?

Tutta la prossima discussione è dedicata a chiarire come, nonostante uno stato del tipo  $|B\rangle + |F\rangle$  sia matematicamente sensato (i.e. nonostante abbia senso l'operazione di somma, in senso di sovrapposizione, tra stati fermionici e bosonici), lo stesso stato non sia *realizzabile*, e quindi necessiti di un'analisi ulteriore.

Dato lo spazio globale  $\mathcal{H}$ , su cui è definito l'operatore autoaggiunto  $\hat{\mathbf{j}}^2$ , la base dei suoi autostati è completa. Questo significa che, usando il teorema spettrale,  $\mathcal{H}$  viene completamente decomposto in autospazi ortogonali di  $\hat{\mathbf{j}}^2$ . Siccome possiamo organizzarli nelle macrocategorie di stati fermionici e stati bosonici, è vero che:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_B \oplus \mathcal{H}_F$$

In altri termini, il più generale stato in  $\mathcal{H}$  sarà sempre scrivibile come somma di una “parte fermionica” e di una “parte bosonica”, tra loro ortogonali. L'ortogonalità può essere vista anche in altro modo: notando che

$$\hat{R}_{2\pi}^\dagger = \hat{R}_{2\pi}^{-1} = \hat{R}_{2\pi}$$

dove nella prima uguaglianza usiamo l'unitarietà della trasformazione e nella seconda l'indipendenza della rotazione di angolo  $2\pi$  dal senso orario o antiorario, si ha

$$\langle F|B\rangle = \langle F|\hat{R}_{2\pi}|B\rangle = -\langle F|B\rangle$$

quindi  $|F\rangle \perp |B\rangle$ .

**OSSERVABILITÀ E REALIZZABILITÀ** Dimentichiamoci per un attimo di cosa abbiamo detto nella scorsa sezione: restauriamo la potenziale osservabilità di qualsiasi operatore autoaggiunto; lo facciamo per poterla derivare come conseguenza dell'assunzione della condizione 2. Adesso è il momento di fare un'imposizione sulla teoria: noi vogliamo che la trasformazione  $\hat{R}_{2\pi}$ :

1. non vari la statistica osservativa di alcuna osservabile; nella sezione precedente abbiamo dimostrato che questa richiesta è equivalente a richiedere che per ogni osservabile fisica valga  $\hat{R}_{2\pi}\hat{O}\hat{R}_{2\pi}^\dagger = \hat{O}$ ;
2. agisca su qualsiasi *raggio realizzabile* al massimo come una fase moltiplicativa. Infatti la trasformazione è *fisicamente* l'identità, per cui non può certo variare il raggio di un sistema quantistico.

In particolare la condizione 2 implica che i raggi realizzabili sono solo quelli che rimangono invariati sotto l'azione di  $\hat{R}_{2\pi}$ . A priori dovremmo rendere la nostra teoria coerente con entrambe queste richieste, che potrebbero essere tra loro indipendenti. Ma se esse risultassero connesse, andrebbe fatta una sola imposizione. Una regola generale per fare buona fisica è mantenere le ipotesi minimali, per cui andiamo in quella direzione: dimostriamo che le due condizioni sono equivalenti, e quindi che basti imporne una soltanto<sup>10</sup>.

*Dimostrazione.* Imponiamo inizialmente che gli operatori autoaggiunti che accettiamo come osservabili fisiche sono tutti e soli quelli che realizzano

$$\hat{R}_{2\pi}\hat{O}\hat{R}_{2\pi}^\dagger = \hat{O}$$

Allora, dato un set completo di osservabili compatibili  $\hat{O}_1, \dots, \hat{O}_n$ , i cui autostati sono quindi stati fisici realizzabili, necessariamente tale set risulta compatibile con  $\hat{R}_{2\pi}$ . Siccome il set è completo esiste uno e un solo auto-stato simultaneo di tutte le osservabile relativo agli autovalori  $\omega_1, \dots, \omega_n$ ; equivalentemente, tutti gli autospazi trovati in fondo al processo di simultanea diagonalizzazione sono unidimensionali (in altri termini, è risolta la degenerazione). Allora, dovendo tali stati essere sottospazi invarianti di  $\hat{R}_{2\pi}$  per la relazione di commutatività, essendo unidimensionali deve valere

$$\hat{R}_{2\pi}|\omega_1 \cdots \omega_n\rangle = r|\omega_1 \cdots \omega_n\rangle \quad \text{con } r \in \mathbb{C}$$

che è la condizione 2.

Partiamo invece assumendo che i raggi fisici siano quelli che restano invariati sotto l'azione di  $\hat{R}_{2\pi}$ . Siccome per stati realizzabili intendiamo gli autostati simultanei di un qualche set di operatori autoaggiunti compatibili  $\{\hat{O}_1, \dots, \hat{O}_n\}$ , affermare la condizione 2 significa che ogni stato realizzabile  $|\omega_1 \cdots \omega_n\rangle$  è dotato di un ben definito numero quantico  $r$ . Ma allora

$$\hat{R}_{2\pi}\hat{O}_i|\omega_1 \cdots \omega_n\rangle = \omega_i r |\omega_1 \cdots \omega_n\rangle = \hat{O}_i\hat{R}_{2\pi}|\omega_1 \cdots \omega_n\rangle \quad \forall i$$

D'altro canto, al variare dei numeri quantici  $\{\omega_1, \dots, \omega_n\}$  la base simultanea è una base completa dello spazio di Hilbert, pertanto poiché  $\hat{R}_{2\pi}\hat{O}_i$  e  $\hat{O}_i\hat{R}_{2\pi}$  agiscono identicamente su una base dello spazio di Hilbert, sono lo stesso operatore:

$$[\hat{O}_i, \hat{R}_{2\pi}] = 0 \quad \forall i$$

□

Concludiamo allora che le due affermazioni sono la stessa affermazione: unendo questo risultato con quello della sezione precedente, dal momento che in ogni caso ricaviamo che stati del tipo (8.14) sono irrealizzabili possiamo fare la seguente

**Asserzione.** *La richiesta che rotazioni di angolo  $2\pi$  non varino la statistica delle misure fisiche implica che la sovrapposizione tra stati fermionici e stati bosonici sia irrealizzabile.*

Dobbiamo intendere correttamente la nozione di irrealizzabilità non come impossibilità matematica, ma come impossibilità fisica.

**TRANSIZIONI TRA  $\mathcal{H}_B$  E  $\mathcal{H}_F$**  Le condizioni che abbiamo derivato sono sufficienti a restringere (e di parecchio) la nostra nozione di osservabili fisiche. Affermiamo in generale che un operatore autoaggiunto corrisponde a un'osservabile fisica se commuta con  $\hat{R}_{2\pi}$ , per cui detta  $\hat{O}$  una buona osservabile vale

$$\langle F|\hat{O}|B\rangle = \langle F|\hat{R}_{2\pi}\hat{O}\hat{R}_{2\pi}^\dagger|B\rangle = -\langle F|\hat{O}|B\rangle$$

e quindi in generale *nessuna osservabile fisica ha elementi di matrice non nulli tra  $\mathcal{H}_F$  e  $\mathcal{H}_B$* . In altri termini, la Fisica non ammette transizioni tra i due spazi. Questo ha una ripercussione diretta su come interpretiamo stati del tipo  $|\psi\rangle \equiv c_F|F\rangle + c_B|B\rangle$ : infatti, come già visto, su di essi vale

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle &= |c_F|^2\langle F|\hat{O}|F\rangle + c_F^*c_F\langle B|\hat{O}|F\rangle + c_F^*c_B\langle F|\hat{O}|B\rangle + |c_B|^2\langle B|\hat{O}|B\rangle \\ &= |c_F|^2\langle F|\hat{O}|F\rangle + |c_B|^2\langle B|\hat{O}|B\rangle\end{aligned}$$

Tutti gli effetti di interferenza spariscono, e lo stato (puro)  $|\psi\rangle$  si comporta come uno stato misto

$$\rho = |c_B|^2|B\rangle\langle B| + |c_F|^2|F\rangle\langle F|$$

essendo la sua statistica osservativa dominata da somme incoerenti.

## NOTE

1. Utilizzeremo questa convenzione:  $\Psi(\mathbf{x})$  è lo spinore, e quindi un vettore di funzioni d'onda. Nella scrittura  $\Psi(\mathbf{x})$ , abbiamo le coordinate orbitali  $\mathbf{x}$  e le coordinate dello spazio  $V$  libere di variare. Al contrario, indicheremo con  $\psi_\sigma(\mathbf{x})$  la singola componente dello spinore, i.e.  $\langle \mathbf{x}, \sigma | \Psi \rangle$  con  $\sigma$  fissato e  $\mathbf{x}$  variabile. In Fisica spesso si scrive, per sineddoche, la singola componente per intendere il vettore complessivo, ma il punto importante è tenere a mente che i due oggetti sono distinti.
2. In realtà, questa scrittura costituisce un leggero abuso di notazione: gli operatori  $\hat{\mathbf{L}}$  e  $\hat{\mathbf{S}}$ , per come li abbiamo definiti, operano su spazi diversi, quindi non possono essere semplicemente sommati. Questa espressione è un modo breve per scrivere

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} \otimes \mathbb{1}_{\text{spin}} + \mathbb{1}_{\text{orb}} \otimes \hat{\mathbf{S}}$$

3. Mentre ricordiamo, anche a costo di ripetere l'ovvio, che se due operatori commutano **non è** in generale vero che gli autovettori di uno sono anche autovettori dell'altro operatore.
4. Riconoscendo in  $\hat{\mathbf{J}}^2$  l'analogo di un modulo quadro, possiamo in parole povere riassumere la questione con una frase: *le rotazioni non cambiano il modulo dei vettori*.
5. Tecnicamente, di elementi del gruppo  $SU(2)$  che descrive anche le rotazioni nel nostro spazio tridimensionale.
6. Questo appare manifesto se guardiamo le rappresentazioni esponenziali. L'inversione determina un segno – all'esponente per il cambiamento di segno dei parametri, mentre il  $\dagger$  determina un altro segno –, che cancella il primo, grazie al coniugio dei coefficienti complessi e all'hermitianità dei generatori. Ad esempio

$$\hat{D}_{R^{-1}}(\theta, \bar{\mathbf{n}}) = \hat{D}_R(-\theta, \bar{\mathbf{n}})$$

quindi

$$\hat{D}_{R^{-1}}(\theta, \bar{\mathbf{n}})^\dagger = [\exp(i\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}})]^\dagger = [\mathbb{1} + i\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \mathcal{O}(\theta^2)]^\dagger = \hat{D}_R(\theta, \bar{\mathbf{n}})$$

- 7.** Per la precisione, Pac-Man vive sulla superficie di un *toro*. Possiamo fare una considerazione simile pensando alle carte geografiche del globo terrestre, benché la Terra sia una *sfera*, e questo la renda più difficile da mappare rispetto al toro. Se un temerario viaggiatore, tempo fa, avesse preso per buona la mappa di Cosma Indicopleuste – che riteneva la Terra piatta, situata sul fondo di un tabernacolo – e avesse provato a raggiungere i confini del mondo, per toccare le pareti del divino contenitore, ammettendo che fosse stato capace di non deviare la rotta avrebbe terminato il viaggio con un inatteso ritorno a casa. Si sarebbe così convinto (speriamo!) della sfericità del pianeta e della follia di Cosma.

Vogliamo far notare che sono proprio la proiezione e la mappatura nel nostro mondo tridimensionale a far sì che i punti collocati al bordo risultino "sdoppiati". Possiamo porre questo fatto in analogia a quanto accade con la *proiezione di Mercatore*, che idealmente manda i due poli geografici nelle intere linee superiore e inferiore della mappa, anche se a  $y = \pm\infty$ , e fa corrispondere i luoghi della linea destra a quelli della linea sinistra, per la finitezza della nostra parete, o ancora alla *proiezione stereografica*, che mappa la sommità della sfera proiettiva infinitamente lontano in ogni direzione.

- 8.** Per visualizzare la questione in modo immediato, può essere utile immaginare di tracciare un percorso sulla superficie bidimensionale di una ordinaria sfera tridimensionale: questo è un modo complicato per dire di fare un giro in auto sulla superficie della Terra.
- 9.** La completezza garantisce la decomposizione in somma di sottospazi, l'ortogonalità garantisce che la somma sia diretta.
- 10.** Diversi testi impongono l'una o l'altra condizione: ad esempio, [1] impone la condizione 1, mentre [5] la condizione 2. Qui specifichiamo come, essendo a prima vista condizioni indipendenti e entrambe ragionevoli, si implichino a vicenda.

## IN BREVE...

- ◊ Il **momento angolare totale** non è esaurito dalla sua componente orbitale, i cui autovalori possono essere soltanto interi. Alla nostra descrizione manca il **momento angolare intrinseco o spin**, i cui autovalori possono essere sia interi sia semi-interi.
- ◊ In generale, oltre ai gradi di libertà orbitali, un sistema può possedere dei **gradi di libertà intrinseci discreti**, e questo rende impossibile dare una descrizione del sistema con una singola funzione d'onda: serve un oggetto più aricolato, detto **spinore**.

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \psi_N(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

In altri termini, stiamo eseguendo un prodotto tensore tra uno spazio di Hilbert orbitale  $\mathcal{H}_{\text{orb}}$ , che è infinito-dimensionale, e uno spazio di Hilbert  $N$ -dimensionale, chiamato spazio dello **stato di spin**  $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ .

- ◊ Studiamo la rotazione di spinori: tale rotazione ha effetto non soltanto sullo stato orbitale, ma anche sullo stato di spin. Bisogna quindi tradurre questa trasformazione, che ha luogo nel nostro mondo tridimensionale  $\mathbb{R}^3$ , nel linguaggio dello spazio di Hilbert dello stato spin,  $N$  dimensionale e definito su campo complesso. Qui entra in gioco la **Teoria delle rappresentazioni** dei gruppi.
- ◊ L'operatore di spin  $\hat{\mathbf{S}}$  è il generatore della rotazione su  $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ :

$$\hat{D}(\bar{\mathbf{n}}, \theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}}$$

Valgono le relazioni di commutazione  $[\hat{L}_i, \hat{S}_j] = 0$  e per questo l'operatore di rotazione nello spazio prodotto, corrispondente a una rotazione di angolo  $\theta$  attorno a  $\bar{\mathbf{n}}$ , è

$$\hat{U}_R(\bar{\mathbf{n}}, \theta) = \exp(-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}})$$

ove  $\hat{\mathbf{J}}$  è il **momento angolare totale**

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$$

- ◊ Le componenti del momento angolare totale soddisfano le relazioni di commutazione

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{j}_k$$

e regole analoghe legano le componenti dell'operatore di spin.

- ◊ In generale, l'invarianza per rotazioni significa che  $\hat{\mathbf{J}}$  è conservato, **non** che siano separatamente conservati  $\hat{\mathbf{L}}$  o  $\hat{\mathbf{S}}$ .
- ◊ Nel caso di spin 1/2, l'operatore di spin è

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}$$

dove indichiamo con  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  il vettore delle **Matrici di Pauli**:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Per le varie ed utili proprietà di tali matrici rimandiamo direttamente alla sezione dedicata. Considerando quindi uno spin 1/2, l'operatore di rotazione generico sullo spazio complessivo  $\mathcal{H}$  si scrive come

$$\hat{U}_R(\bar{\mathbf{n}}, \theta) = e^{-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}} / \hbar} e^{-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} / (2\hbar)}$$

- ◊ Per uno spin 1, l'operatore di spin  $\hat{\mathbf{S}}$  ha invece componenti

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \quad S_z = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

- ◊ Gli elementi di matrice degli operatori di rotazione nello spazio  $\mathcal{H}_{\text{spin}}$  sono dette **matrici di Wigner**, e si indicano con  $D^{(j)}$ , dove  $j$  è lo spin a cui fanno riferimento.  $D^{(j)}$  è una matrice quadrata  $(2j+1) \times (2j+1)$ , in quanto lo spazio di stato di spin  $j$  è  $2j+1$  dimensionale.
- ◊ Siccome consideriamo spazi di Hilbert proiettivi, in cui gli stati sono definiti a meno di una fase, ci interessa avere delle rappresentazioni irriducibili che siano **proiettive, non necessariamente ordinarie**, di  $SO(3)$ . Le rappresentazioni proiettive di  $SO(3)$  corrispondono a quelle ordinarie di  $SU(2)$ , in virtù del legame che unisce intimamente questi due gruppi. Ad esempio, le matrici di Wigner relative alla rotazione di spin 1/2 costituiscono una rappresentazione bidimensionale, irriducibile e ordinaria di  $SU(2)$ , ma proiettiva per  $SO(3)$ , e peraltro non esistono rappresentazioni ordinarie e irriducibili di  $SO(3)$  in due dimensioni (in nessun numero pari di dimensioni, quindi per tutti gli spin semi-interi).
- ◊ Si chiamano **fermioni** i sistemi con spin complessivo semi-intero, **bosoni** quelli con spin complessivo intero.
- ◊ La rotazione spaziale di angolo  $2\pi$ , rappresentata sullo spazio di Hilbert dello stato di spin di un fermione, corrisponde a  $-1$ . Questo fatto, a prima vista sorprendente, non deve indurre a pensare che la rotazione di  $2\pi$  stia *davvero* cambiando lo stato di spin del fermione, in quanto ricordiamo che gli stati quantistici sono definiti **a meno di una fase**:

$$R_{2\pi} |- \rangle = - |- \rangle \quad \text{ma in ogni caso} \quad - |- \rangle \sim |- \rangle$$

- ◊ Il principio di sovrapposizione, che sta alla base della struttura matematica e concettuale della Meccanica Quantistica, ammette delle eccezioni, date dalle **Regole di superselezione**. Ciò significa che, considerati  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$  rispettivamente uno stato bosonico e uno stato fermionico, tali per cui

$$R_{2\pi} |+\rangle = |+\rangle \quad R_{2\pi} |- \rangle = - |- \rangle$$

la sovrapposizione  $|\psi_\omega\rangle$

$$|\psi_\omega\rangle = |+\rangle + e^{i\omega} |- \rangle$$

è in realtà una scrittura poco sensata, esclusa dalle regole di superselezione (calco dall'Inglese, ove chiaramente *superselection* sta per *superposition selection*). Lo stato che vorremmo scrivere con  $|\psi_\omega\rangle$  trova la sua corretta espressione in termini di uno **stato misto**  $\rho$  tale che

$$\rho = \frac{1}{2} |+\rangle\langle +| + \frac{1}{2} |- \rangle\langle -|$$



# 9

## LA COMPOSIZIONE DEI MOMENTI ANGOLARI

*In questo capitolo discuteremo il modo in cui si compongono i momenti angolari. Questa procedura è necessaria per una vasta gamma di applicazioni, come per esempio la corretta trattazione di sistemi in cui oltre al momento angolare orbitale si consideri lo spin delle particelle, ma ha validità ancor più generale. Discuteremo i coefficienti di Clebsh-Gordan, necessari per descrivere il momento angolare di un sistema composto partendo da basi dei momenti angolari delle sue parti. Torneremo poi sulla composizione delle matrici di Wigner, problema lasciato in sospeso, e faremo un piccolo approfondimento sulla simmetria per scambio dei coefficienti di Clebsh-Gordan.*

È di interesse generale determinare le regole generali di composizione dei momenti angolari: prendiamo, e.g., un sistema composto da due parti che sia invariante per rotazioni. In questo caso è conservato il momento angolare totale  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$  e non necessariamente quelli “parziali”  $\hat{\mathbf{j}}_1$  e  $\hat{\mathbf{j}}_2$ . Tipicamente, questo è il caso in cui i due sottosistemi sono in interazione.

Un discorso analogo si può fare per un sistema con momento angolare di spin non zero: la conservazione di  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$  non ci dice nulla sulla conservazione separata di  $\hat{\mathbf{L}}$  e  $\hat{\mathbf{S}}$ .

Risulta quindi fondamentale rispondere alla domanda: noti i valori possibili di  $j_1, j_2$ , quali sono i possibili valori di  $j$ ?

### 9.1 LA BASE DEL MOMENTO ANGOLARE TOTALE

Consideriamo un sistema composto da due sottosistemi, ciascuno descritto dalla rispettiva base completa

$$\mathcal{B}_1 = \{|j_1, m_1\rangle\} \quad \mathcal{B}_2 = \{|j_2, m_2\rangle\}$$

Come al solito, una buona base per lo spazio  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  è data da  $\mathcal{B} = \mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_2$ . Il numero di elementi di questa base si trova banalmente:

$$\#\mathcal{B} = (2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$$

Su tale base, l’azione degli operatori relativi ai singoli spazi<sup>1</sup> sarà data da

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{j}}_1^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= j_1(j_1 + 1) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ \hat{\mathbf{j}}_2^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= j_2(j_2 + 1) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ \hat{\mathbf{j}}_{1z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= m_1 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ \hat{\mathbf{j}}_{2z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= m_2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\end{aligned}$$

Il nostro obiettivo è trovare una trasformazione che connetta la base degli autostati di  $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z}$  con quella degli autostati di  $\hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2, \hat{j}_z$ . In presenza di **invarianza globale per rotazioni**, infatti, è decisamente più comodo lavorare con una base che includa gli autostati del momento angolare totale:

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \quad \rightarrow \quad |j_1, j_2, j, m\rangle$$

La scelta delle grandezze da includere nella base finale non è casuale: stiamo infatti cercando una nuova **base simultanea**, per cui è necessario cercare operatori commutanti per assicurarci che condividano una base di autostati. D'altronde, è abbastanza intuitivo che l'“informazione” persa passando da  $\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z}$  alla loro somma sia recuperata integrando nel nostro set di grandezze  $\hat{J}^2$ , che ovviamente non è accessibile conoscendo solamente  $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2$ .

Abbiamo quindi scelto  $\hat{J}^2$ , che commuta con  $\hat{J}_1^2$ :

$$\begin{aligned} [\hat{J}_1^2, \hat{J}^2] &= [\hat{J}_1^2, \hat{J}_1^2] + [\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2] + [\hat{J}_1^2, \hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2] + [\hat{J}_1^2, \hat{J}_2 \cdot \hat{J}_1] \\ &= 2[\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1x}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1y}\hat{J}_{2y} + \hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z}] \\ &= 2[\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1x}]\hat{J}_{2x} + 2[\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1y}]\hat{J}_{2y} + 2[\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}]\hat{J}_{2z} = 0 \end{aligned}$$

dove abbiamo usato la definizione di  $\hat{J}^2$

$$\hat{J}^2 = (\hat{J}_1 + \hat{J}_2)^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2 + \hat{J}_2 \cdot \hat{J}_1$$

la commutatività tra  $\hat{J}_1, \hat{J}_2$  e tutte le loro componenti, vera perché i due operatori agiscono in sottospazi differenti, e la condizione valida in ciascuno spazio  $[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0$ .<sup>2</sup> Ovviamente, con la stessa derivazione si mostra che  $[\hat{J}_2^2, \hat{J}^2] = 0$ .

D'altronde, la stessa condizione implica che  $[\hat{J}^2, \hat{j}_z] = 0$ , e naturalmente (ma questo lo sapevamo sin dall'inizio)  $[\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2] = 0$ . In conclusione, è possibile cercare una base che sia simultaneamente diagonalizzante per ciascuno di questi operatori.

La legge di composizione delle proiezioni del momento angolare segue direttamente dalla definizione: essendo

$$\hat{j}_z \equiv \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$$

si ha immediatamente che è possibile definire il numero quantico  $m$  come, banalmente,  $m = m_1 + m_2$ :

$$\hat{j}_z |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = (\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = (m_1 + m_2) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Più complicato è il caso della composizione dei quadrati dei momenti angolari. Per cominciare, ci chiediamo quanti siano i valori che può assumere la coppia  $j, m$  a fissati valori di  $j_1, j_2$ : poiché stiamo semplicemente cambiando base, deve ancora essere

$$N = (2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$$

Consigliamo di seguire questo cambio di base avendo sott'occhio le Figure 9.1 e 9.2, che permettono di visualizzare quanto stia accadendo.

Vogliamo innanzitutto determinare valori minimi e massimi possibili per  $j$ , il **momento angolare totale**. Per il massimo, il ragionamento è semplice:

dal momento che  $m_1$  e  $m_2$  sono superiormente limitati, rispettivamente, da  $j_1$  e  $j_2$ , dovrà essere

$$j \leq j_1 + j_2$$

Il minimo può essere affrontato nel seguente modo: cominciamo saturando lo stato con massimi valori possibili di  $m$  e  $j$ , i.e. iniziamo guardando lo stato (usiamo i suffissi “old” e “new” riferendoci alle basi di partenza e di arrivo per chiarezza)

$$|\vec{\alpha}, j_{\max}, m_{\max}\rangle_{\text{new}} \equiv |\vec{\alpha}, j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle_{\text{new}}$$

dove, per non appesantire eccessivamente la notazione, abbiamo incluso all'interno di  $\vec{\alpha}$  la dipendenza da  $j_1, j_2$  – che di qui in avanti non giocherà alcun ruolo e può essere sottintesa in favore delle altre quantità.

Quanti sono i possibili autostati della base di partenza tali che  $m_1 + m_2 = m_{\max}$ ? Uno solo:

$$|\vec{\alpha}, m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle_{\text{old}} \quad \rightarrow \quad |\vec{\alpha}, j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle_{\text{new}}$$

Infatti, la condizione  $m = m_{\max}$  può realizzarsi unicamente nel caso in cui il limite superiore a  $m$  stesso sia il massimo possibile, i.e.  $j = j_{\max}$ . D'ora in avanti sottintenderemo le uguaglianze interne agli stati ricordando che la terza e la quarta posizione degli stati “old” sono occupate da  $m_1$  e  $m_2$ , mentre negli stati “new” da  $j$  e  $m$  rispettivamente.

Scendiamo di un'unità in  $m$ , ossia: ci chiediamo **in quanti possibili stati della nuova base** possa comparire  $m = m_{\max} - 1$ . Ci sono due possibilità: che il relativo  $j$  sia saturato (i.e.  $j = j_{\max}$ ), e quindi che stiamo trattando lo stato con  $m$  non saturato, o che  $j$  sia non saturato e che invece lo sia  $m$ .

D'altronde, è anche vero che

$$m_1 + m_2 = j_1 + j_2 - 1 \iff \begin{cases} m_1 = j_1 - 1 & m_2 = j_2, \text{ oppure} \\ m_1 = j_1 & m_2 = j_2 - 1 \end{cases}$$

Non sono possibili altre combinazioni: deve essere  $m_1 \leq j_1$ ,  $m_2 \leq j_2$ . Concludiamo che

$$\left\{ \begin{array}{l} |\vec{\alpha}, j_1 - 1, j_2\rangle_{\text{old}} \\ |\vec{\alpha}, j_1, j_2 - 1\rangle_{\text{old}} \end{array} \right\} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} |\vec{\alpha}, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle_{\text{new}} \\ |\vec{\alpha}, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle_{\text{new}} \end{array} \right\}$$

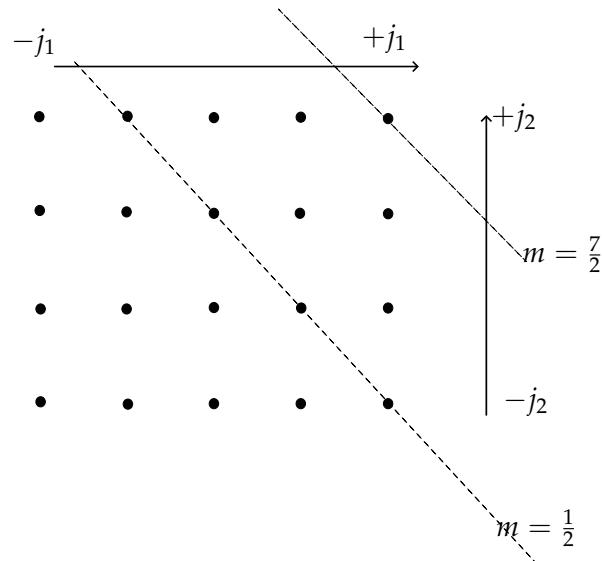
Come anticipato, il secondo degli stati della nuova base satura  $j$ , ma non  $m$ , dato che il  $j$  a cui fa riferimento è  $j_{\max} = j_1 + j_2$ . Il terzo invece satura  $m$ , ma non  $j$ : possiede infatti un valore di  $m$  che corrisponde al massimo possibile per  $j = j_1 + j_2 - 1$ . Questo stato diventa il precursore di una torre di stati con momento angolare  $j = j_1 + j_2 - 1$ .

Ragionando nello stesso modo, si trova che

$$m_1 + m_2 = j_1 + j_2 - 2 \iff \begin{cases} m_1 = j_1 - 2 & m_2 = j_2 \\ m_1 = j_1 - 1 & m_2 = j_2 - 1 \\ m_1 = j_1 & m_2 = j_2 - 2 \end{cases}$$

il che implica

$$\left\{ \begin{array}{l} |\vec{\alpha}, j_1 - 2, j_2\rangle_{\text{old}} \\ |\vec{\alpha}, j_1 - 1, j_2 - 1\rangle_{\text{old}} \\ |\vec{\alpha}, j_1, j_2 - 2\rangle_{\text{old}} \end{array} \right\} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} |\vec{\alpha}, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle_{\text{new}} \\ |\vec{\alpha}, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle_{\text{new}} \\ |\vec{\alpha}, j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2\rangle_{\text{new}} \end{array} \right\}$$



**Figura 9.1:** Una utile visualizzazione delle possibili coppie  $(m_1, m_2)$  nel caso in cui abbiamo  $j_1 = 2, j_2 = 3/2$ . Procedendo lungo una riga da sinistra verso destra, aumenta  $m_1$ , mentre  $m_2$  cresce, sempre in passi unitari, avanzando dal basso verso l'alto a colonna fissata. Gli stati del sistema si dispongono a formare un rettangolo di dimensioni  $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ . Le rette tratteggiate in diagonale, tra le quali abbiamo voluto evidenziare le due più rilevanti, uniscono gli stati a cui corrispondono valori di  $m$  costanti.

Qui il primo degli stati della nuova base appartiene alla linea di stati per cui  $j = j_{\max}$ , il secondo alla linea  $j = j_{\max} - 1$  e il terzo è il capostipite di una nuova linea  $j = j_{\max} - 2$ .

Le linee, è ovvio, non sono infinite: il minimo tra  $j_1$  e  $j_2$  limita questa proliferazione di nuove torri di stati, e quindi di nuovi valori di  $j$ . Dopo aver eseguito un numero di passi pari a  $2 \min\{j_1, j_2\} + 1$ , compreso quello di partenza, non possiamo più generare una nuova linea e troviamo il minimo valore di  $j$ , ovvero  $j_{\min} = j_{\max} - \min\{j_1, j_2\}$ , che equivale a scrivere

$$j_{\min} = |j_2 - j_1|$$

*Dimostrazione.* Un modo semplice di dimostrare che  $j_{\min}$  è esattamente  $|j_1 - j_2|$  è contare gli stati. Abbiamo a disposizione le seguenti informazioni:

- esiste lo stato  $|\vec{\alpha}, j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle$ ;
- essendo  $\hat{\mathbf{j}}$  lineare in entrambi  $\hat{\mathbf{j}}_1$  e  $\hat{\mathbf{j}}_2$ , esiste l'operatore di discesa  $\hat{j}_-$ . Questo implica che esista l'intera torre di  $2j + 1$  stati associati al momento angolare  $j$ ;
- dovendo  $j$  variare con passo unitario, devono esistere tutti i possibili  $j$  compresi tra  $j_{\max}$  e  $j_{\min}$ .

Allora mettendo insieme queste informazioni, possiamo impostare la seguente equazione: per chiarezza chiamiamo  $b \equiv j_{\max} = j_1 + j_2$  e  $a \equiv j_{\min}$ , e scriviamo

$$\sum_{k=a}^b \underbrace{(2k+1)}_{k\text{-esima torre}} = t \quad \text{dove} \quad t = \underbrace{(2j_1+1)(2j_2+1)}_{\dim \mathcal{B}} = 4j_1j_2 + 2b + 1$$

Questa equazione può essere sviluppata come segue:

$$\begin{aligned} 4j_1j_2 + 2b + 1 &= 2 \sum_{k=a}^b k + \sum_a^b 1 \\ &= 2 \sum_{k=0}^{b-a} (a+k) + (b-a+1) \\ &= 2a(b-a+1) + 2 \frac{(b-a)(b-a+1)}{2} + (b-a+1) \\ &= (b-a+1)(b+a+1) \\ &= (b+1)^2 - a^2 = b^2 + 2b + 1 - a^2 \end{aligned}$$

da cui segue immediatamente che:

$$a^2 = b^2 - 4j_1j_2 = (j_1 + j_2)^2 - 4j_1j_2 = (j_1 - j_2)^2$$

e quindi la tesi:

$$j_{\min} = a = |j_1 - j_2|$$

essendo ovviamente  $j_{\min} \geq 0$ . □

Abbiamo quindi scoperto che

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

Nel formalismo della Teoria delle Rappresentazioni si raggiunge una notazione molto comoda per denotare la composizione dei momenti angolari, che qui non spiegheremo nei dettagli:

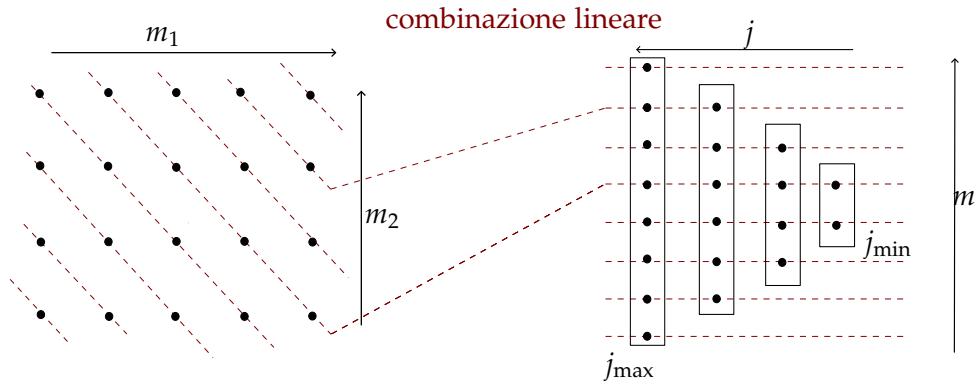
$$j_1 \otimes j_2 = |j_1 - j_2| \oplus |j_1 - j_2| + 1 \oplus \cdots \oplus j_1 + j_2 - 1 \oplus j_1 + j_2$$

la quale sintetizza sostanzialmente quanto abbiamo derivato: la rappresentazione data dal prodotto tensore di due diverse rappresentazioni del momento angolare è data dalla somma diretta delle rappresentazioni da  $|j_1 - j_2|$  a  $j_1 + j_2$ , cioè ogni stato generato dal prodotto tensore dei due momenti angolari “vive” in una delle rappresentazioni presenti in tale somma.

## 9.2 I COEFFICIENTI DI CLEBSCH-GORDAN

Nelle sezioni precedente abbiamo dimostrato che è possibile eseguire un cambio di base

$$\mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_2 \equiv \{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\} \quad \leftrightarrow \quad \mathcal{B} \equiv \{|j_1, j_2, j, m\rangle\}$$



**Figura 9.2:** Cambiare base nel modo che abbiamo appena esposto equivale a eseguire delle *combinazioni lineari opportune* fra stati accomunati dallo stesso  $m$  e riorganizzare gli stati risultanti come mostrato sul lato destro, dove li raggruppiamo in famiglie. Ognuna di queste raccoglie  $2j + 1$  stati corrispondenti a un comune valore di  $j$ , che si differenziano tra loro per il numero quantico  $m$ . Se prima la catalogazione degli stati della base era effettuata utilizzando a  $m_1, m_2$ , ora li stiamo disponendo per mezzo di  $j, m$ . Le diagonali tracciate a sinistra riuniscono stati con lo stesso  $m$ , che in questa nuova disposizione si allineano orizzontalmente. Le combinazioni lineari opportune citate sopra sono relative ai **Coefficienti di Clebsch-Gordan**. Notiamo infine che il singoletto  $j = 0, m = 0$  è uno stato accessibile solo se sommiamo momenti angolari identici, cioè nel caso  $j_1 = j_2$ .

Le due basi sono legate da una relazione di completezza:

$$\begin{aligned} |j_1, j_2, j, m\rangle &= \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2|j_1, j_2, j, m\rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} C_{m|m_1 m_2}^{j|j_1 j_2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \sum_{j, m} |j_1, j_2, j, m\rangle \langle j_1, j_2, j, m|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ &= \sum_{j, m} C_{m_1 m_2 | m}^{j_1 j_2 | j} |j_1, j_2, j, m\rangle \end{aligned}$$

I coefficienti introdotti  $C_{m|m_1 m_2}^{j|j_1 j_2}$  sono detti **Coefficienti di Clebsch-Gordan** (CG per gli amici) e si può mostrare che sono reali, il che motiva entrambe le sommatorie appena riportate. Tra questi coefficienti, alcuni sono nulli: basta pensare a tutti quelli tali che  $j \geq j_1 + j_2$  oppure  $j \leq |j_1 - j_2|$ . Sono nulli anche tutti i coefficienti tali che  $m \neq m_1 + m_2$ . Tali **regole di selezione** sui Clebsch-Gordan saranno molto utili più avanti, quando utilizzeremo il Teorema di Wigner-Eckart.

Questi coefficienti collegano le due basi  $\mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_2$  e  $\mathcal{B}$ , entrambe complete e ortogonali; inoltre, soddisfano la relazione

$$\sum_{j, m} C_{m|m'_1 m'_2}^{j|j_1 j_2} C_{m|m_1 m_2}^{j|j_1 j_2} = \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2}$$

che può essere banalmente dimostrata per sostituzione:

$$\begin{aligned} \sum_{j,m} C_{m|m'_1 m'_2}^{j|j_1 j_2} C_{m|m_1 m_2}^{j|j_1 j_2} &= \sum_{j,m} \langle j_1, j_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, j, m \rangle \langle j_1, j_2, j, m | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle \\ &= \langle j_1, j_2, m'_1, m'_2 | \mathbb{1} | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle = \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2} \end{aligned}$$

Analogamente si mostra che deve essere soddisfatta anche la relazione

$$\sum_{m'_1, m'_2} C_{m'|m'_1 m'_2}^{j'|j_1 j_2} C_{m|m_1 m_2}^{j|j_1 j_2} = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

Riportiamo alcune tavole di coefficienti di Clebsch-Gordan nella Figura ??, presente nell'Appendice.

### 9.2.1 Un esempio: composizione di due spin 1/2

A titolo di esempio, proviamo ad applicare ciò al caso di due sistemi di spin 1/2; si potrebbe pensare all'accoppiamento degli spin di elettrone e protone nell'atomo di idrogeno, nel suo stato fondamentale. Difatti, in tale stato elettrone e protone non posseggono momento angolare orbitale, per cui la composizione dei momenti angolari si riduce a

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2 = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$$

I due sistemi in questione fissano dunque

$$j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$$

per cui, saranno ammessi i valori di spin

$$\sigma_1 = \pm \frac{1}{2} \quad \sigma_2 = \pm \frac{1}{2}$$

dove chiamiamo  $\sigma_1$  ed  $\sigma_2$  gli autovalori degli operatori  $\hat{j}_{z,1}$  e  $\hat{j}_{z,2}$ , indicati fin ora con  $m_1$  e  $m_2$ . Analogamente, scriviamo qui  $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2$  al posto di  $m = m_1 + m_2$ . Data dunque la relazione

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m \right\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} C_{\sigma|\sigma_1 \sigma_2}^{j|\frac{1}{2} \frac{1}{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \sigma_1, \sigma_2 \right\rangle$$

vogliamo estrarre i coefficienti  $C_{\sigma|\sigma_1 \sigma_2}^{j|\frac{1}{2} \frac{1}{2}}$ . In particolare ricordiamo che, doven-  
do valere le seguenti due relazioni per il momento angolare totale

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad \sigma \in (-j, j), \forall j$$

in questo caso andremo a determinare i quattro – come atteso – elementi di base

$$\begin{array}{ll} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle & \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1 \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0 \right\rangle & \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, -1 \right\rangle \end{array} \quad \text{della forma } |j_1, j_2, j, \sigma\rangle$$

in relazione agli elementi di base di partenza

$$\begin{array}{ll} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{array} \quad \text{della forma } |j_1, j_2, \sigma_1, \sigma_2\rangle$$

Partiamo dai più semplici tra questi, notando che per avere  $\sigma = \pm 1$  nella nuova base, le uniche possibilità sono date da  $\sigma_1 = \sigma_2 = \pm 1/2$ . Per cui, assumendo normalizzate le basi di partenza e quelle di arrivo, devono valere le due corrispondenze biunivoche

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1 \right\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, -1 \right\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

Per ricavare le altre due relazioni, iniziamo col considerare l'operatore di discesa  $\hat{J}_-$  del momento angolare **totale**, che in questo caso agirà sul generico elemento di base prodotto nel seguente modo

$$\hat{J}_- |j_1, j_2, j, \sigma\rangle = |j_1, j_2\rangle \otimes \left( \sqrt{(j-\sigma+1)(j+\sigma)} |j, \sigma-1\rangle \right)$$

agendo come identità sul ket  $|j_1, j_2\rangle$ .

D'altronde ricordiamo la definizione di questo operatore

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$$

da cui possiamo ottenere immediatamente che

$$\hat{J}_- = \hat{J}_{1,-} + \hat{J}_{2,-}$$

osservando in particolare che gli operatori  $\hat{J}_{1,-}$  e  $\hat{J}_{2,-}$  agiranno come identità sul pezzo di autostato  $|j, \sigma\rangle$ .

Usiamo questi due risultati per sviluppare l'equazione

$$\hat{J}_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1 \right\rangle = (\hat{J}_{1,-} + \hat{J}_{2,-}) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

dove il membro sinistro si riduce quindi a

$$\hat{J}_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1 \right\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \sqrt{2} |1, 0\rangle = \sqrt{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0 \right\rangle$$

e riconosciamo nel risultato uno tra gli elementi di base cercati. Non ci resta che sviluppare il membro destro, ottenendo

$$\begin{aligned} (\hat{J}_{1,-} + \hat{J}_{2,-}) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hat{J}_{1,-} \left| j_1 = \frac{1}{2}, \sigma_1 = \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| j_2 = \frac{1}{2}, \sigma_2 = \frac{1}{2} \right\rangle \\ &\quad + \left| j_1 = \frac{1}{2}, \sigma_1 = \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \hat{J}_{2,-} \left| j_2 = \frac{1}{2}, \sigma_2 = \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo volutamente esplicitato il significato di ciascun  $1/2$ , onde evitare fraintendimenti nel calcolo. Otteniamo infine, reinserendo tutto nell'equazione di partenza

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

Resta ora da ricavare l'ultimo elemento di base rimasto, in funzione di quelli di partenza, vale a dire

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = a \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + b \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

dove fissiamo la dipendenza dai soli stati con spin antiparallelo, che garantiscono  $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 = 1$ .

Dato che sia la base di partenza che quella di arrivo sono ortonormali, otteniamo agevolmente

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \middle| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = a^2 + b^2 = 1$$

D'altronde, notiamo che lo stato con  $j = 1, \sigma = 0$  calcolato sopra, dipende dagli stessi elementi di base di  $j = 0, \sigma = 0$ , per cui abbiamo, sempre per l'ortonormalità

$$0 = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0 \middle| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + b)$$

Notiamo quindi che sono possibili

$$\begin{aligned} a &= \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \\ b &= \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

esiste un convenzione, nota come *convenzione della fase*, che risolve tale ambiguità tramite la relazione

$$\langle j_1, j_2, j_1, j - j_1 | j_1, j_2, j, j \rangle > 0$$

per cui fissiamo  $b > 0$ , nel nostro caso. Quindi otteniamo infine

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( - \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

Possiamo sintetizzare quanto ottenuto in una forma matriciale, che rende più elegante l'elenco dei – in realtà – **sedici** coefficienti ottenuti

$$\begin{bmatrix} |0,0\rangle \\ |1,1\rangle \\ |1,0\rangle \\ |1,-1\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{bmatrix}$$

dove abbiamo evitato di riportare i ridondanti  $j_1 = 1/2$  e  $j_2 = 1/2$ , all'interno dei ket di partenza e di arrivo. Osserviamo – come atteso – che questa matrice  $C$  così ottenuta è unitaria; si può verificare facilmente che vale la relazione  $CC^\dagger = \mathbb{1}$ .

### 9.2.2 ≈ Un modo per calcolare le matrici di Wigner

Nello scorso capitolo, avevamo promesso di mostrare come ottenere la matrice di Wigner  $d^{(1)}$  a partire da  $d^{(1/2)}$ . Avevamo rimandato questo argomento, in quanto per trattarlo sono necessari i coefficienti di Clebsch-Gordan. Ricordiamo che

$$d^{(1/2)}(\beta) = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{bmatrix}$$

Da qui, eseguiamo il prodotto tensore, anche chiamato *prodotto cartesiano*, tra due matrici  $d^{(1/2)}$ :

$$d^{(1/2)} \otimes d^{(1/2)}$$

Se definiamo per semplicità  $a \equiv \cos\left(\frac{\beta}{2}\right)$ ,  $b \equiv \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)$ , abbiamo

$$d^{(1/2)} \otimes d^{(1/2)} = \begin{bmatrix} a^2 & -ab & -ab & b^2 \\ ab & a^2 & -b^2 & -ab \\ ab & -b^2 & a^2 & -ab \\ b^2 & ab & ab & a^2 \end{bmatrix}$$

Evidentemente, questa scrittura è legata alla rotazione di una composizione di due spin 1/2. Guardando la Figura 9.2, relativa a degli stati, capiamo facilmente che stiamo passando da una base del tipo *prodotto cartesiano* tra due momenti angolari ad una legata al momento angolare totale. Qui dovrà accadere il medesimo cambiamento, che ormai sappiamo essere regolato dai coefficienti di Clebsch-Gordan. In altri termini, così come i CG permettono la composizione

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = \mathbf{0} \oplus \mathbf{1}$$

intuiamo che permettano anche la traduzione

$$d^{(1/2)} \otimes d^{(1/2)} \longrightarrow d^{(0)} \oplus d^{(1)}$$

Ora, essendo però  $d^{(1/2)} \otimes d^{(1/2)}$  una matrice, dobbiamo moltiplicarla *a destra* e *a sinistra* per una matrice  $B$  di cambiamento di base, contenente i CG. Per il caso  $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2}$ , visto nella sezione appena precedente, la matrice è

$$B = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & & \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & & \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

dove abbiamo deciso di scrivere prima i coefficienti relativi al singoletto, poi quelli del tripletto. La matrice  $B$  permette di passare dalla base del momento angolare totale a quella dei due momenti angolari separati, quindi  $B^{-1}$ , che codifica il passaggio inverso, è la matrice trovata alla fine dell'esempio precedente. Troviamo così

$$\begin{aligned} d^{(0)} \oplus d^{(1)} &= B^{-1} (d^{(1/2)} \otimes d^{(1/2)}) B \\ &= \begin{bmatrix} a^2 + b^2 & & \\ & a^2 & 2ab & b^2 \\ & -ab & a^2 - b^2 & ab \\ & b^2 & -2ab & a^2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Sostituendo per i valori attribuiti ad  $a, b$  otteniamo una matrice diagonale a blocchi, in cui il blocco  $d^{(0)}$  in alto a sinistra è 1, corrispondente alla rappresentazione triviale della rotazione, di dimensione 1, mentre il blocco  $3 \times 3$  corrisponde a  $d^{(1)}$  ed è quindi legata alla rappresentazione irriducibile di dimensione 3. Usando alcune formule trigonometriche, non è difficile giungere al risultato finale

$$d^{(1)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{bmatrix}$$

In modo del tutto analogo possiamo trovare ogni altra matrice  $d^{(j)}$ , componendo e utilizzando i Clebsch-Gordan, tuttavia vogliamo aggiungere che questo metodo, benché forse istruttivo, non è l'unico modo per trovare le matrici di Wigner, né tantomeno è il più rapido. Per la risoluzione dei problemi, consigliamo di leggere i loro elementi sulle opportune tabelle, oppure utilizzare un motore di ricerca.

Notiamo esplicitamente che, per  $\beta = 2\pi$ , vale  $d^{(1)}(2\pi) = \mathbb{1}_{3 \times 3}$ . Questo, naturalmente, non è un caso: alla fine del precedente capitolo abbiamo discusso come l'operatore  $\hat{R}(\bar{\mathbf{n}}, 2\pi)$  agisca come  $\mathbb{1}$  sulle rappresentazioni di  $j$  intero e  $-1$  su  $j$  semintero. Qui ritroviamo un altro modo di esprimere lo stesso concetto: partiamo notando che

$$d^{(k/2)} \text{ è generata da } \bigotimes^k d^{(1/2)} = \underbrace{d^{(1/2)} \otimes \cdots \otimes d^{(1/2)}}_{k \text{ termini}}$$

e in particolare  $d^{(k/2)}$  è il blocco diagonale più grande della matrice risultante dal prodotto tensore, essendo la rappresentazione di spin  $k/2$  la più grande generabile da  $k$  composizioni di rappresentazioni  $1/2$ . Allora, essendo  $d^{(1/2)}(2\pi) = -\mathbb{1}_{2 \times 2}$ , segue che

$$\begin{aligned} d^{(k/2)}(2\pi) &= \left[ (-\mathbb{1}_{2 \times 2}) \otimes \cdots \otimes (-\mathbb{1}_{2 \times 2}) \right]_{(k+1) \times (k+1)} \\ &= (-1)^k \mathbb{1}_{(k+1) \times (k+1)} \end{aligned}$$

dove il pedice indica che ci restringiamo al blocco diagonale più grande generato dal prodotto tensore di matrici, che per una rappresentazione di spin  $j$  è grande  $2j + 1$ . Si vede chiaramente che

- se  $k$  è dispari, allora sotto rotazioni di angolo  $2\pi$  la relativa matrice di Wigner si comporta come  $-\mathbb{1}$ ;
- se  $k$  è pari, allora si comporta come  $\mathbb{1}$ .

Questo conferma ancora una volta quello che avevamo dimostrato per via ben più semplice nel capitolo precedente: rotazioni di angolo  $2\pi$  lasciano invariati gli stati bosonici, cioè relativi a rappresentazioni di spin intero, e cambiano il segno davanti a stati fermionici, cioè relativi a rappresentazioni di spin semintero.

### 9.2.3 \* Simmetria per scambio dei coefficienti di CG

Esponiamo adesso una proprietà dei coefficienti di Clebsch-Gordan: se consideriamo il coefficiente

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle = C_{M|m_1 m_2}^{J|j_1 j_2}$$

e operiamo su di esso uno scambio

$$(j_1, m_1) \leftrightarrow (j_2, m_2)$$

allora vale

$$C_{M|m_1 m_2}^{J|j_1 j_2} = (-1)^{j_1 + j_2 - J} C_{M|m_2 m_1}^{J|j_2 j_1}$$

*Dimostrazione.* La nostra dimostrazione fa uso di una rappresentazione dei coefficienti di Clebsch-Gordan, detta **simbolo 3j di Wigner**, che ha la seguente forma

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle = (-1)^{-j_1 + j_2 - M} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix}$$

e che soddisfa la seguente proprietà:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + J} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & J \\ m_2 & m_1 & -M \end{pmatrix}$$

Di questo non daremo una dimostrazione, né spiegheremo esattamente il funzionamento di questa rappresentazione: gli unici fatti che qui ci interessano sono l'esistenza e questa specifica proprietà sotto scambio delle prime due colonne<sup>3</sup>. Da queste segue che

$$\begin{aligned} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle &= (-1)^{-j_1 + j_2 - M} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{-j_1 + j_2 - M} (-1)^{j_1 + j_2 + J} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & J \\ m_2 & m_1 & -M \end{pmatrix} \\ &\stackrel{*}{=} (-1)^{j_1 + j_2 - J} (-1)^{-j_2 + j_1 - M} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & J \\ m_2 & m_1 & -M \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_2 m_2 j_1 m_1 | j_1 j_2 JM \rangle \end{aligned}$$

dove il passaggio segnato con  $\stackrel{*}{=}$  è garantito dal seguente fatto:

$$\begin{aligned} (-1)^{-j_1 + j_2 - M} (-1)^{j_1 + j_2 + J} &= (-1)^{j_1 - 2j_1 - j_2 + 2j_2 - M} (-1)^{j_1 + j_2 - J + 2J} \\ &= (-1)^{j_1 + j_2 - J} (-1)^{-j_2 + j_1 - M} \underbrace{(-1)^{2(-j_1 + j_2 + J)}}_{=1} \end{aligned}$$

Infatti, se chiamiamo  $\kappa = -j_1 + j_2 + J$  questo numero è sicuramente un intero:  $J$  può assumere valori, con spaziatura unitaria, nel range

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$$

per cui risulta chiaro che se e.g. nel caso  $J = j_1 + j_2$  si ha  $\kappa$  intero, allora sarà intero indipendentemente da  $J$ . Ma questo è sicuramente verificato, dal momento che  $j_1, j_2, J$  possono essere solo interi o seminteri:

il che conclude la dimostrazione.  $\square$

$j_1$	$j_2$	$J$	$\kappa$
semintero	semintero	$\Rightarrow$	intero
semintero	intero	$\Rightarrow$	semintero
intero	semintero	$\Rightarrow$	semintero
intero	intero	$\Rightarrow$	intero

Da questa proprietà dei coefficienti discende una particolarità degli stati a momento angolare composto: è possibile ottenere informazioni sulle loro proprietà di simmetria o antisimmetria per scambio. Anticipiamo i tempi, e introduciamo un operatore che analizzeremo in dettaglio nel Cap. 13 dedicato alle simmetrie discrete: l'**operatore di scambio**  $\hat{\Pi}$ . Non scendiamo nei dettagli, semplicemente in questa sede consideriamolo come l'operatore che realizza la trasformazione

$$\hat{\Pi} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |j_2 m_2 j_1 m_1\rangle$$

e che ha autostati simmetrici (che vanno in se stessi) e antisimmetrici (che vanno in  $-$  se stessi). Naturalmente ci sono dei vincoli su questa trasformazione: se stiamo componendo il momento angolare orbitale e lo spin di un elettrone, scambiare i momenti orbitale e di spin non è un'operazione concessa né fisicamente sensata. Supponiamo che in questo caso lo sia: fra un attimo specificheremo ancora di più le condizioni di applicabilità di questa derivazione. Con questa ipotesi segue che:

$$\begin{aligned} \hat{\Pi} |j_1 j_2 JM\rangle &= \hat{\Pi} \sum_{m_1, m_2} C_{M|m_1 m_2}^{J|j_1 j_2} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} C_{M|m_1 m_2}^{J|j_1 j_2} \Pi |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} C_{M|m_1 m_2}^{J|j_1 j_2} |j_2 m_2 j_1 m_1\rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} (-1)^{j_1 + j_2 - J} C_{M|m_2 m_1}^{J|j_2 j_1} |j_2 m_2 j_1 m_1\rangle \\ &= (-1)^{j_1 + j_2 - J} \sum_{m_1, m_2} C_{M|m_2 m_1}^{J|j_2 j_1} |j_2 m_2 j_1 m_1\rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} |j_2 j_1 JM\rangle \end{aligned}$$

dove gli ultimi passaggi sono garantiti dalla proprietà appena dimostrata. Come promesso, adesso introduciamo un nuovo vincolo: come vedremo nel Cap. 13 l'operatore di scambio impone sul sottosistema 1 lo stato del sottosistema 2 e viceversa, per cui in generale dovremo richiedere  $j_1 = j_2$  per poter determinare se lo specifico autostato del momento angolare totale in questione è simmetrico o antisimmetrico sotto scambio. Questo risultato può anche essere usato al contrario: rimandando al Cap. 13 per la definizione dei concetti che adesso useremo, se per esempio lavoriamo con particelle fermioniche – che possono occupare solamente **stati completamente antisimmetrici** – ad esempio due elettroni indistinguibili, con questa proprietà possiamo determinare a priori la simmetria dello stato di spin a spin totale fissato e concludere quali stati di parte orbitale siano occupabili dal sistema, e (eventualmente) viceversa. In queste ipotesi siamo quindi riusciti a derivare delle proprietà di simmetria o antisimmetria sotto scambio per stati a

momento angolare composto.

Se, per esempio, consideriamo

$$j_1 = j_2 = \frac{1}{2} \implies J = 0, 1$$

allora lo stato di singoletto  $J = 0$  è antisimmetrico ( $j_1 + j_2 - J = 1$ ) e quelli di tripletto sono simmetrici ( $j_1 + j_2 - J = 0$ ). Nell'ipotesi di indistinguibilità possiamo concludere che lo stato di singoletto deve accoppiarsi a uno stato simmetrico della parte orbitale e quelli di tripletto a uno antisimmetrico.

## NOTE

1. Come sempre, vanno intesi come  $\hat{\mathbf{J}}_1 = \hat{\mathbf{j}}_1 \otimes \mathbb{1}_2$ , e analogamente  $\hat{\mathbf{J}}_2 = \mathbb{1}_1 \otimes \hat{\mathbf{j}}_2$ .
2. Questo non deve creare confusione: quest'ultima uguaglianza è vera, e indica che il quadrato del momento angolare commuta con ciascuna sua componente; il punto è che ciò **non avviene simultaneamente**, cioè non è possibile trovare una base di autostati comuni a  $\hat{\mathbf{j}}^2$  e **tutte** le sue componenti.
3. Per maggiori informazioni rimandiamo alla pagina

<https://mathworld.wolfram.com/Wigner3j-Symbol.html>

Questa rappresentazione è relativamente poco usata in letteratura, motivo per cui non la approfondiremo; l'abbiamo introdotta in questa sede solamente per dimostrare la proprietà esposta.

## IN BREVE...

- ◊ In molti problemi sarà utile o necessario **comporre due momenti angolari**, in quanto in generale, se un sistema composto gode di invarianza per rotazioni, è il momento angolare complessivo  $\hat{\mathbf{J}}$  ad essere conservato, mentre in generale non lo sono i momenti angolari  $\hat{\mathbf{j}}_1, \hat{\mathbf{j}}_2$ .

- ◊ Dalla base completa dei due momenti separati

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

che diagonalizza simultaneamente gli operatori  $\{\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{\mathbf{j}}_2^2, \hat{j}_{1z}, \hat{j}_{2z}\}$ , passiamo alla base completa

$$|j_1, j_2, j, m\rangle$$

che diagonalizza  $\{\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{\mathbf{j}}_2^2, \hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_z\}$ , dove

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = (\hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2)^2 \quad \hat{j}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$$

- ◊ I coefficienti che realizzano questo cambiamento di base sono chiamati **Coefficienti di Clebsch-Gordan**, indicati come

$$C_{M|m_1 m_2}^{J|j_1 j_2}$$

I più frequentemente utilizzati si trovano tabulati in Appendice.

- ◊ I coefficienti di Clebsch-Gordan godono di due **regole di selezione**: hanno un valore potenzialmente non nullo soltanto i coefficienti tali che

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \quad M = m_1 + m_2$$

- ◊ Conoscendo  $d^{(1/2)}$  ed i coefficienti di Clebsch-Gordan, possiamo armarci di molta pazienza o di un calcolatore, e trovare tutte le matrici  $d^{(j)}$  di Wigner.
- ◊ I coefficienti di Clebsch-Gordan godono della proprietà

$$C_{M|m_1 m_2}^{J|j_1 j_2} = (-1)^{j_1 + j_2 - J} C_{M|m_2 m_1}^{J|j_2 j_1}$$



# 10

## OPERATORI TENSORIALI E ROTAZIONI

In questo capitolo introduciamo il concetto di operatore tensoriale, con particolare riferimento ai cosiddetti tensori sferici irriducibili, di cui è discusso il legame con l'operatore momento angolare. Enunciamo poi il teorema di Wigner-Eckart sugli elementi di matrice dei tensori sferici, e le importanti regole di selezione che ne seguono. Infine, includiamo come approfondimento un'applicazione all'oscillatore armonico tridimensionale.

### 10.1 OPERATORI TENSORIALI E ROTAZIONI

In questa sezione approfondiremo la classificazione degli operatori finora incontrati, in analogia con ciò che concerne le quantità fisiche associate ad essi. Abbiamo introdotto operatori e vettori di operatori, senza tuttavia citare esplicitamente come questi trasformino sotto le rotazioni, che se vogliamo rappresentano delle ottime *trasformazioni test*, utili ad indagare una buona parte dei sistemi fisici tridimensionali di nostro interesse.

D'ora in avanti diremo che un generico operatore può essere classificato come scalare, vettore o tensore di rango superiore, a seconda di come esso trasformi sotto **rotazioni**. Questa può essere una definizione comoda per la maggior parte dei nostri scopi, ma precisiamo che non si tratta di una definizione universale: basti pensare, ad esempio, che una grandezza fisica – i.e. un operatore in meccanica quantistica – si definisce **scalare rispetto ad una specifica trasformazione**.

Recuperiamo quanto visto nei capitoli precedenti: un operatore  $\hat{\mathbf{O}}$  (semplice, vettoriale o matriciale che sia) trasforma, sotto una rotazione infinitesima di angolo  $\delta\theta$  attorno ad un asse  $\hat{\mathbf{n}}$ , secondo la relazione

$$\hat{\mathbf{O}}' = \hat{\mathbf{O}} + \frac{i}{\hbar} \delta\theta [\hat{\mathbf{O}}, \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}]$$

dove  $\hat{\mathbf{J}}$  è l'operatore vettoriale momento angolare, che genera la trasformazione in questione.

*Dimostrazione.* Ricordando che gli operatori trasformano sotto una rotazione (unitaria)  $\hat{U}_R$  come  $\hat{\mathbf{O}}' = \hat{U}_R \hat{\mathbf{O}} \hat{U}_R^\dagger$ , e che una rotazione infinitesima di angolo  $\varepsilon$  si scrive  $\hat{U}_R = \mathbb{1} - i\varepsilon \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}$ , al primo ordine

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{O}}' &= (\mathbb{1} - i\varepsilon \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) \hat{\mathbf{O}} (\mathbb{1} + i\varepsilon \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) \\ &\simeq \hat{\mathbf{O}} + i\varepsilon \hat{\mathbf{O}} \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}} - i\varepsilon \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}} \hat{\mathbf{O}} \\ &= \hat{\mathbf{O}} + i\varepsilon [\hat{\mathbf{O}}, \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}] \end{aligned}$$

si ha la tesi usando  $\varepsilon = \delta\theta$  e reintroducendo  $\hbar$ . □

Diciamo che  $\hat{\mathbf{O}}$  è un operatore **scalare** se è invariante per rotazioni, ovvero se si ha

$$[\hat{\mathbf{O}}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{j}}] = 0 \quad \forall \bar{\mathbf{n}}$$

dunque se

$$\hat{\mathbf{O}}' = \hat{\mathbf{O}}$$

Diciamo invece che  $\hat{\mathbf{O}}$  è un operatore **vettoriale** se i suoi operatori componenti trasformano – sempre per rotazioni infinitesime – come le componenti di un vettore in  $\mathbb{R}^3$ , ovvero se

$$[\hat{\mathbf{O}}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{j}}] = i\hbar \bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{O}}$$

dunque se

$$\hat{\mathbf{O}}' = \hat{\mathbf{O}} - \delta\theta \bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{O}}$$

Per questa ultima tipologia, possiamo definire le **componenti sferiche** dell'operatore vettoriale, a partire dalle componenti cartesiane  $x, y, z$

$$\hat{O}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{O}_x \pm i\hat{O}_y) \quad \hat{O}_0 = \hat{O}_z \quad (10.1)$$

Come per scalari e vettori associati alle grandezze fisiche, diciamo che gli operatori scalari e vettoriali sono più in generale operatori **tensoriali**, rispettivamente di rango  $k = 0$  e  $k = 1$ . Non solo, dei discorsi analoghi si possono avere in dimensioni diverse da 3. Più in generale, un operatore tensoriale di rango  $k$  in uno spazio di dimensione  $N$ , avrà  $N^k$  componenti. Quanto segue riguardo ai tensori, verrà quindi esteso agli operatori.

#### 10.1.1 Tensori irriducibili

Si può dimostrare che un tensore cartesiano (dunque  $N = 3$ ) di rango  $k$  è sempre decomponibile in una certa combinazione di tensori di rango inferiore; così facendo, si possono sempre individuare  $2k + 1$  componenti associabili ad un tensore di rango  $k$ , che dunque satura il proprio rango a quello del tensore *madre*. Il tensore in questione viene detto *irriducibile*, ed è di nostro interesse in ciò che seguirà.

A titolo d'esempio, consideriamo un tensore cartesiano di rango  $k = 2$ , che sappiamo essere rappresentabile da una matrice. Esso può essere sempre scritto nel seguente modo

$$\hat{T} = \frac{1}{3} \text{Tr}(\hat{T}) + \hat{T}_A + \left( \hat{T}_S - \frac{1}{3} \text{Tr}(\hat{T}) \right)$$

ovvero in una somma di tensori di rango 0, 1 e 2. Infatti il termine  $\frac{1}{3} \text{Tr}(\hat{T})$  è una quantità scalare, ossia invariante sotto rotazioni. Per notazione, indichiamo questo termine con

$$\hat{T}^{(0)} = \frac{1}{3} \text{Tr}(\hat{T})$$

dove 0 indica quindi il rango effettivo di questo tensore. Il secondo termine si esprime come

$$\hat{T}_A = \frac{1}{2} (\hat{T} - \hat{T}^t)$$

ovvero – in prima battuta – un tensore anti-simmetrico di rango 2, ma che in realtà ha solo tre componenti indipendenti tra di loro. Queste tre componenti trasformano come un vettore una volta fissata una base per questa matrice. Per cui fissiamo una nomenclatura anche per questo termine

$$\hat{T}^{(1)} = \frac{1}{2} (\hat{T} - \hat{T}^t)$$

dove, come prima, l'apice indica il rango al quale è stato **ridotto** questo pezzo del tensore di partenza. Non ci resta che considerare l'ultimo termine; sarà chiaro ora che con  $\hat{T}_S$  indichiamo la parte simmetrica

$$\hat{T}_S = \frac{1}{2} (\hat{T} + \hat{T}^t)$$

L'ultimo termine viene quindi indicato come

$$\hat{T}^{(2)} = \left( \hat{T}_S - \frac{1}{3} \text{Tr}(\hat{T}) \right)$$

dal momento che l'oggetto in questione è un tensore di rango 2, il cui rango non è riducibile, dato che questo possiede cinque gradi di libertà; si tratta infatti di una matrice simmetrica a traccia nulla, che abbassa quindi il numero di gradi di libertà tipico delle matrici simmetriche  $3 \times 3$  da 6 a 5. Questo ultimo termine è proprio il *tensore irriducibile di rango k* avente  $2k+1$  componenti indipendenti, menzionato all'inizio di questa sezione. Chiaramente possiamo dire che sono irriducibili – ulteriormente – anche i tensori  $\hat{T}^{(0)}$  e  $\hat{T}^{(1)}$ . Riscriviamo il tensore di partenza nella nuova notazione

$$\hat{T} = \hat{T}^{(0)} + \hat{T}^{(1)} + \hat{T}^{(2)}$$

come somma di tensori irriducibili. Questi vengono anche detti **tensori sferici irriducibili**.

Se consideriamo ora un operatore tensoriale di rango  $k=1$ , ci accorgiamo che le coordinate sferiche definite in equazione (10.1)

$$\hat{T}_{\pm 1} = \mp (\hat{T}_x \pm i \hat{T}_y) \quad \hat{T}_0 = \hat{T}_z$$

possono essere intese come componenti di un tensore irriducibile di componenti

$$\hat{T}_q = \hat{T}_q^{(1)} \quad \text{con } q \in [-1, 1]$$

Focalizziamo ora la nostra attenzione sul tensore che satura il rango di quello di partenza, vale a dire quello con  $2k+1$  componenti. Tornando – per naturale estensione – allo spazio degli operatori, introduciamo l'**operatore tensoriale sferico irriducibile** di rango  $k$ , avente  $2k+1$  componenti

$$\hat{T}_q^{(k)} \quad \text{con } q \in [-k, k]$$

come quel tensore per il quale valga la seguente legge di trasformazione

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) \hat{T}_q^{(k)} \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)^t = \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} D_{q'q}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (10.2)$$

dove

$$D_{q'q}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle k, q' | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | k, q \rangle$$

Questa legge di trasformazione può essere dimostrata a partire dalle regole di commutazione tra questi tensori e il momento angolare  $\hat{\mathbf{J}}$ , che riportiamo per completezza e in riferimento a quanto introdotto all'inizio di questo paragrafo

$$[\hat{T}_q^{(k)}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}] = - \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}} | k, q \rangle \quad (10.3)$$

Osservando l'equazione (10.2), notiamo che ci è familiare; abbiamo incontrato questa espressione in una forma meno involuta, nello studio delle rotazioni applicate agli autostati del momento angolare. Valeva infatti la relazione

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) |j, m\rangle = \sum_{m'=-j}^j D_{m'm}^{(j)} |j, m'\rangle \quad (10.4)$$

dove osserviamo che questa vale per ogni valore di  $j$  fissato. In questo senso, la rotazione  $\hat{R}$  non è in grado di esplorare valori di  $j$  diversi da quello fissato; ciò è consistente con il fatto che una rotazione non è classicamente in grado di cambiare il modulo di un vettore.

### 10.1.2 Teorema di Wigner-Eckart

Il teorema di Wigner-Eckart – che non dimostreremo – stabilisce che le componenti di un operatore tensoriale sferico rispetto alla base degli autostati del momento angolare sono date dalla relazione

$$\langle j'm' | \hat{T}_q^{(k)} | jm \rangle = C_{m'mq}^{j'jk} \langle j' | \hat{T}^{(k)} | j \rangle \quad (10.5)$$

In questa equazione, il Coefficiente di Clebsch-Gordan  $C_{m'mq}^{j'jk}$  che contiene le informazioni sulla geometria/orientazione del sistema, mentre  $\langle j' | \hat{T}^{(k)} | j \rangle$  è detto *elemento di matrice ridotto* dell'operatore tensoriale  $\hat{T}^{(k)}$  e non dipende dall'orientazione spaziale, dunque dai numeri quantici  $m, m', q$ : possiamo dire che esso contiene la sola informazione sulla dinamica del sistema.

Proviamo ad applicare il teorema ad un operatore scalare sferico  $\hat{T}^{(0)}$ ; abbiamo  $k = 0$  e banalmente soltanto  $q = 0$  (ricordiamo che  $q$  varia tra  $-k$  e  $+k$ ) per cui:

$$\begin{aligned} \langle j'm' | \hat{T}^{(0)} | jm \rangle &= C_{m'm0}^{j'j0} \langle j' | \hat{T}^{(0)} | j \rangle \\ &= \langle j' | \hat{T}^{(0)} | j \rangle \delta_{j'j} \delta_{m'm} \end{aligned}$$

dovendo essere

$$|j - k| \leq j' \leq j + k \quad m' = m + q$$

Come avevamo anticipato, dalle proprietà dei CG seguono importanti **regole di selezione** sugli elementi di matrice di operatori tensoriali sferici, in questo caso di  $\hat{T}^{(0)}$ : per operatori scalari sferici, gli elementi di matrice tra diversi  $j$  e  $m$  sono nulli.

Si deriva in modo analogo un'altra regola di selezione, sugli operatori vettoriali, ossia di rango  $k = 1$ :

$$\langle j' m' | \hat{T}^{(1)} | jm \rangle = C_{m'|m\{0,\pm 1\}}^{j'|j} \langle j' | \hat{T}^{(1)} | j \rangle$$

per cui gli unici elementi di matrice ammessi sono quelli tali che

$$|j' - j| = 0, \pm 1$$

tranne il caso  $j' = j = 0$ , in quanto se  $j = 0$  allora  $j' \geq |0 - 1| = 1$ . Di queste, sono non nulli i soli elementi di matrice con  $m' = m + q$ .

### 10.1.3 ※ Tensori sferici vettoriali su stati invarianti per rotazione

A titolo di esempio, e per illustrare un'altra proprietà dei tensori sferici vettoriali, cioè con  $k = 1$ , consideriamo un sistema in uno stato  $|\psi_0\rangle$  con momento angolare  $j = 0$ . Un buon esempio può essere uno stato orbitale che, in rappresentazione delle coordinate, ha una funzione d'onda dipendente solo dalla coordinata radiale  $r$ .

Vogliamo mostrare che, agendo con un tensore sferico  $\hat{T}_q^{(1)}$  sullo stato  $|\psi_0\rangle$ , si ottiene uno stato con momento angolare  $j = 1$  e  $m = q$ .

Consideriamo infatti un operatore di rotazione  $\hat{R}$ : poiché lo stato possiede  $j = 0$ , allora

$$\hat{R} |\psi_0\rangle = e^{-i\theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}/\hbar} |\psi_0\rangle = e^0 |\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle$$

cioè lo stato  $|\psi_0\rangle$  è invariante sotto qualunque rotazione. Consideriamo adesso lo stato ottenuto applicando a  $\hat{T}_q^{(1)} |\psi_0\rangle$  una rotazione:

$$\begin{aligned} \hat{R} \hat{T}_q^{(1)} |\psi_0\rangle &= \hat{R} \hat{T}_q^{(1)} \hat{R}^{-1} \hat{R} |\psi_0\rangle \\ &= \hat{R} \hat{T}_q^{(1)} \hat{R}^{-1} |\psi_0\rangle \\ &= \sum_{q'} D_{q'q}^{(1)} T_{q'}^{(1)} |\psi_0\rangle \end{aligned}$$

dove  $D^{(1)}$  rappresenta la matrice di rotazione per  $j = 1$  nella base comune a  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e  $\hat{J}_z$ , e abbiamo utilizzato la legge di trasformazione in (10.2). Ma se chiamiamo  $|\psi_{1q}\rangle \equiv \hat{T}_q^{(1)} |\psi_0\rangle$  la relazione appena trovata è

$$\hat{R} |\psi_{1q}\rangle = \sum_{q'} D_{q'q}^{(1)} |\psi_{1q'}\rangle$$

che è proprio la legge di trasformazione in equazione (10.4) per autostati del momento angolare. Concludiamo che lo stato trovato applicando un tensore sferico di rango 1 ad uno scalare è uno stato (non necessariamente normalizzato) con  $j = 1$  e  $m = q$ . Rinominando i ket con la convenzione  $|jm\rangle$ , questo è il risultato:

$$\hat{T}_q^{(1)} |00\rangle \propto |1q\rangle \tag{10.6}$$

### 10.1.4 ※ Generalizzazione: applicazione di tensori sferici

Vogliamo adesso generalizzare quanto abbiamo visto nella sezione appena precedente: la derivazione che faremo sarà analoga, e porterà conseguenze

generali. Sia  $|jm\rangle$  un generico stato di momento angolare  $j$  e proiezione  $m$  definiti. Sia dato un tensore sferico  $\hat{T}_q^{(k)}$  di rango  $k$  (intero o semintero), dunque  $2k+1$  componenti: allora lo stato

$$\left| \phi_{qm}^{kj} \right\rangle \equiv \hat{T}_q^{(k)} |jm\rangle$$

trasforma come un oggetto di momento angolare  $J$  dato dalla composizione dei momenti angolari  $k, j$ . Nella notazione propria della Teoria delle Rappresentazioni, questo si esprime come

$$\mathbf{k} \otimes \mathbf{j} = |\mathbf{k} - \mathbf{j}| \oplus \cdots \oplus \mathbf{k} + \mathbf{j}$$

*Dimostrazione.* Ricordiamo che, per un generico stato  $|jm\rangle$ , la legge di trasformazione sotto rotazioni è data da

$$\hat{R} |jm\rangle = \sum_{m'=-j}^j D_{m'm}^{(j)} |jm'\rangle$$

Definiamo lo stato  $|\zeta\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ , quindi costruendolo a partire da sue spazi di Hilbert separati  $\mathcal{H}_j$ . Come sappiamo, una rotazione nello spazio di Hilbert globale  $\mathcal{H}$  agisce separatamente sui due sottospazi  $\mathcal{H}_j$ , perché il generatore del gruppo delle rotazioni è  $\hat{\mathbf{J}}_1 \otimes \mathbb{1}_2 + \mathbb{1}_1 \otimes \hat{\mathbf{J}}_2$  (col pedice indichiamo il sottospazio di riferimento), e quindi

$$\hat{R} = \hat{R}_1 \otimes \hat{R}_2$$

Segue che  $|\zeta\rangle$  trasforma come

$$\begin{aligned} \hat{R} |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle &= \hat{R}_1 |j_1 m_1\rangle \otimes \hat{R}_2 |j_2 m_2\rangle \\ &= \sum_{m'_1=-j_1}^{j_1} D_{m'_1 m_1}^{(j_1)} |j_1 m'_1\rangle \otimes \sum_{m'_2=-j_2}^{j_2} D_{m'_2 m_2}^{(j_2)} |j_2 m'_2\rangle \\ &= \left[ \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} D_{m'_1 m_1}^{(j_1)} D_{m'_2 m_2}^{(j_2)} \right] |j_1 m'_1\rangle \otimes |j_2 m'_2\rangle \end{aligned}$$

e, dalla composizione dei momenti angolari, sappiamo che è possibile cambiare la base dello spazio generato da tutte le possibili coppie  $(m_1, m_2)$  e descriverlo in termini di rappresentazioni del momento angolare totale  $J$  con  $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$ .

Torniamo a parlare del nostro stato generato dall'applicazione di un tensore sferico. Sapendo che per definizione la legge di trasformazione dei tensori sferici di rango  $k$  è data dall'Eq. (10.2), si ha che – similmente alla sezione precedente:

$$\begin{aligned} \hat{R} \left| \phi_{qm}^{kj} \right\rangle &= \hat{R} \hat{T}_q^{(k)} |jm\rangle \\ &= \hat{R} \hat{T}_q^{(k)} \hat{R}^{-1} \hat{R} |jm\rangle \\ &= \sum_{q'} D_{q'q}^{(k)} T_{q'}^{(k)} \sum_{m'} D_{m'm}^{(j)} |jm'\rangle = \left[ \sum_{q'} \sum_{m'} D_{q'q}^{(k)} D_{m'm}^{(j)} \right] \left| \phi_{q'm'}^{kj} \right\rangle \end{aligned}$$

e quindi la legge di rotazione di questo stato è formalmente equivalente a quella di uno stato che è il prodotto tensore di uno stato a momento angolare  $k$  e uno a momento angolare  $j$ , come si vede banalmente confrontando le due leggi appena trovate. Per metterla in termini meno informali, la rappresentazione di spin dello stato dato dall'applicazione di un tensore sferico di rango  $k$  su uno stato appartenente a una ben definita rappresentazione di spin  $j$  è data dal prodotto tensore della rappresentazione di spin  $j$  e della rappresentazione di spin  $k$ . Se vogliamo, possiamo renderlo evidente scrivendo

$$\begin{aligned}\hat{R} |\phi_{qm}^{kj}\rangle &= \hat{R} |kjqm\rangle \\ &= \sum_J \sum_M C_{M|qm}^{J|kj} \hat{R} |kjJM\rangle \\ &= \sum_{J=|k-j|}^{k+j} \sum_M \sum_{M'} C_{M|qm}^{J|kj} D_{M'M}^{(J)} |kjJM'\rangle\end{aligned}$$

□

Quindi concludiamo che per i tensori sferici vale la seguente affermazione: applicando un tensore sferico a uno stato a momento angolare definito, lo stato risultante ha momento angolare compreso in una dei possibili valori di  $J$  dati dalla composizione del momento angolare “vero”  $j$  e da quello “tensoriale”  $k$ .

#### 10.1.5 \* Regole di selezione: come usare il Teorema di Wigner-Eckart

*Constatata la difficoltà dell'applicazione diretta del Teorema di Wigner-Eckart sulla propria pelle, gli autori hanno optato per riassumere in una sezione dedicata le regole di selezione che il teorema fornisce.*

Qui faremo uso della nomenclatura di operatori “scalari” e “vettoriali”, in quanto sono quelli che più facilmente si incontrano nei calcoli. È importante ripetere cosa intendiamo quando diamo questi nomi: un operatore  $\hat{\mathbf{O}}$  è

- **scalare** se vale

$$[\hat{\mathbf{O}}, \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{j}}] = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{n}}$$

cioé se commuta con tutte le proiezioni del momento angolare;

- **vettoriale** se invece

$$[\hat{\mathbf{O}}, \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{j}}] = i\hbar \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{O}}$$

quindi se trasforma come un vettore sotto rotazioni (infinitesime).

Non è un caso se abbiamo indicato il momento angolare con  $\hat{\mathbf{j}}$ : bisogna infatti sempre chiedersi *rispetto a quale* momento angolare l'operatore in questione è scalare o vettoriale. Per esempio, un operatore del tipo  $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{x}}$  che agisce e.g. su un elettrone è un operatore scalare rispetto al momento angolare totale ( $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ ) ma *non* rispetto al momento angolare orbitale ( $\hat{\mathbf{L}}$ ). Rimandiamo alla Sez. 4.4, Parte II, per un esercizio che sviluppa proprio questo esempio.

A questo punto deriviamo delle potenti regole di selezione sugli elementi di matrice per operatori di questo tipo. Supponiamo di avere una base  $|*jm\rangle$  che diagonalizza l'operatore di Casimir  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e la sua proiezione  $\hat{J}_z$ ; con  $*$  indicheremo ovunque tutti gli altri numeri quantici a cui non siamo interessati. Inoltre, scrivendo “scalare” o “vettoriale”, intenderemo “rispetto a  $\hat{\mathbf{J}}$ ”. Si ha dunque che:

- se l'operatore  $\hat{O}$  è scalare, allora

$$\langle *j'm'|\hat{O}|*jm\rangle \propto \delta_{j'j}\delta_{m'm}$$

cioé **un operatore scalare non connette stati con  $j$  e/o  $m$  diverse**; questo perché un operatore scalare è un tensore sferico di rango 0, e quindi ha un contributo banale nella composizione dei momenti angolari;

- se l'operatore  $\hat{O}$  è vettoriale, allora

$$\langle *j'*|\hat{\mathbf{O}}|*j*\rangle = 0 \quad \text{se } j' \notin \{j-1, j, j+1\}$$

In altri termini **un operatore vettoriale connette stati con  $j$  che differiscono al massimo per un'unità**. Questo deriva dal fatto che tutti gli operatori vettoriali tridimensionali si possono mappare in operatori tensoriali sferici di rango 1;

- sempre per operatori  $\hat{\mathbf{O}}$  vettoriali, supponendo di mapparli nelle componenti sferiche

$$\hat{O}_{\pm 1} \quad \hat{O}_0$$

come esposto precedentemente in questo capitolo, vale che

$$\langle **m'|\hat{O}_q|**m\rangle = 0 \quad \text{se } m' \neq q + m$$

Questo funziona, ovviamente, soltanto quando l'operatore è ridotto alle sue componenti sferiche.

L'ultima regola è particolarmente comoda: ad esempio, se trattiamo il modello dell'atomo di idrogeno con la consueta base  $|nlm\rangle$  e vogliamo calcolare gli elementi di matrice dell'operatore  $\hat{z}$ , possiamo usare sicuramente il fatto che esso coincide con la “componente sferica 0” dell'operatore Posizione  $\hat{\mathbf{Q}}$ . Spesso capiterà di dover calcolare elementi di matrice di questo tipo, specialmente nella Teoria delle Perturbazioni, che è argomento del prossimo capitolo.

## 10.2 ⋆ OSCILLATORE ARMONICO 3D E MOMENTO ANGOLARE

Nella trattazione svolta nel Cap. 7 riguardo all'oscillatore armonico tridimensionale isotropo, ci siamo limitati a derivare la forma dello spettro e la degenerazione dei livelli energetici, senza preoccuparci di una fondamentale caratteristica di questo sistema: l'**invarianza per rotazioni**, ovvero la **simmetria sferica**. Questa è ben visibile dalla forma dell'hamiltoniana

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{\mathbf{x}}^2}{2}$$

essendo gli operatori che vi compaiono tutti scalari<sup>1</sup>.

Ricapitoliamo quanto trovato: lo spettro di  $\hat{H}$  è della forma

$$E_n = \hbar\omega \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \quad \text{con } n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N} \quad n \equiv n_x + n_y + n_z$$

per cui, detto  $\mathcal{H}_n \subset \mathcal{H}$  l'autospazio dell'hamiltoniana relativo alla  $n$ -esima energia, ossia

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}_n \quad \hat{H}|\psi\rangle = E_n|\psi\rangle$$

si ha che

$$\text{Deg}(n) = \dim \mathcal{H}_n = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

La prima domanda che ci poniamo è: come sono organizzati gli autostati dell'hamiltoniana rispetto al momento angolare?

#### 10.2.1 ※ Prima formulazione euristica

Partiamo dal seguente fatto: gli autospazi di  $\hat{H}$  sono sottospazi invarianti di ogni operatore che con essa commuta: se  $\{|n_i\rangle\}$  è una generica base di autostati  $\hat{H}$  (con  $\hat{H}|n_i\rangle = E_n|n_i\rangle$ ) e  $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ , allora vale

$$E_m \langle m_j | \hat{A} | n_i \rangle = \langle m_j | \hat{H} \hat{A} | n_i \rangle = \langle m_j | \hat{A} \hat{H} | n_i \rangle = E_n \langle m_j | \hat{A} | n_i \rangle$$

per cui

$$E_n \neq E_m \implies \langle n | \hat{A} | m \rangle = 0$$

Fin qui niente di nuovo: stiamo semplicemente affermando che una qualsiasi base di autostati di  $\hat{H}$ , comprese tutte quelle che non diagonalizzano  $\hat{A}$ , separano lo spazio di Hilbert in una somma diretta di autospazi di  $\hat{H}$  che sono anche sottospazi invarianti di  $\hat{A}$ , perché gli elementi di matrice di  $\hat{A}$  fra tali sottospazi sono tutti nulli.

Il nostro problema è invariante sotto rotazioni: scegliamo il set di operatori  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{L}_z$ , che commutano tutti tra loro; quindi ciascun autospazio dell'hamiltoniana è per  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{L}_z$  un sottospazio invariante. Ogni autospazio è per definizione un sottospazio invariante: proviamo allora a fare la seguente

**Asserzione.** *Ogni autospazio di  $\hat{H}$  si decompone in autospazi di  $\hat{\mathbf{L}}^2$  relativi ai rispettivi momenti angolari  $l$  "completi", cioè dotati (ciascuno) di  $2l+1$  stati indipendenti<sup>2</sup> che possono essere mappati in autostati di  $\hat{L}_z$ .*

Iniziamo a testare quest'asserzione sui vari autospazi dell'hamiltoniana. Il livello fondamentale, non degenere, è relativo allo stato  $|000\rangle$ . Il fatto che sia non degenere in presenza di completa simmetria rotazionale implica che sia uno stato scalare. Lo si può vedere in due modi diversi:

- $\dim \mathcal{H}_0 = 1$ , quindi  $\mathcal{H}_0$  può contenere al massimo un solo sottospazio invariante di  $\hat{\mathbf{L}}^2$  di dimensione 1, quindi un suo autospazio unidimensionale. Poiché ogni autospazio di tale operatore ha dimensione  $2l+1$ , l'unica possibilità è che sia  $l=0$ . Questa, in effetti, è esattamente

la definizione di stato scalare: data una qualsiasi rotazione  $\hat{R}(\bar{\mathbf{n}}, \theta)$  di angolo  $\theta$  attorno a un asse  $\bar{\mathbf{n}}$ , poiché

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}] = 0$$

possiamo scegliere di diagonalizzare simultaneamente proprio  $\hat{\mathbf{L}}^2$  e la componente di  $\hat{\mathbf{L}}$  proiettata lungo  $\bar{\mathbf{n}}$ , trovando che deve essere<sup>3</sup>

$$\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}} |000\rangle = 0$$

il che implica che per una rotazione infinitesima si abbia

$$\lim_{\delta\theta \rightarrow 0} e^{-i\delta\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}} |000\rangle \simeq (\mathbb{1} - i\delta\theta\bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}) |000\rangle = |000\rangle$$

indipendentemente dal versore  $\bar{\mathbf{n}}$  che scegliamo, i.e.  $|000\rangle$  è uno stato scalare.

- Poniamo che  $|000\rangle$  non sia scalare, i.e. che esista almeno una rotazione  $\hat{R}(\bar{\mathbf{n}}, \theta)$  tale che valga

$$\hat{R}(\bar{\mathbf{n}}, \theta) |000\rangle \not\propto |000\rangle$$

Siccome il sistema è invariante per rotazioni vale  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] = 0 \implies [\hat{H}, \hat{R}] = 0$ , per cui

$$\hat{H}\hat{R}|000\rangle = \hat{R}\hat{H}|000\rangle = E_0\hat{R}|000\rangle$$

e allora  $\hat{R}|000\rangle$  è autostato di  $\hat{H}$  per l'autovalore  $E_0$ : siccome per ipotesi deve essere  $\hat{R}|000\rangle \not\propto |000\rangle$  segue che  $\dim \mathcal{H}_0 > 1$ , cioè deve esserci una degenerazione sul livello fondamentale. Assurdo, quindi  $|000\rangle$  è uno stato scalare.

Oltre a questi metodi algebrici, si può passare per la rappresentazione delle coordinate: rimandiamo a tal proposito alla Sez. 5.2, Parte II, dove viene discusso esattamente questo problema. Concludiamo quindi che  $\mathcal{H}_0$  è saturato dall'autospazio  $l = 0$  di  $\hat{\mathbf{L}}^2$ .

Passiamo ai primi livelli eccitati: stavolta abbiamo

$$\dim \mathcal{H}_1 = 3 \quad \mathcal{H}_1 = \text{Span} \{ |100\rangle, |010\rangle, |001\rangle \}$$

e la questione è leggermente più complessa. Siccome la degenerazione è tripla e  $l$  è intero, possiamo immaginarcì che lo spazio ospiti una rappresentazione  $l = 1$  del momento angolare, i.e.

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \quad \hat{\mathbf{L}}^2 |\psi\rangle = 1(1+1) |\psi\rangle = 2 |\psi\rangle$$

Stavolta dobbiamo passare dalla rappresentazione delle coordinate: rimandiamo anche qui alla Sez. 5.2, Parte II, dove questo calcolo viene svolto esattamente. L'obiettivo è generare una funzione d'onda che si fattorizzi in una parte radiale e una parte puramente angolare che sia un'armonica sferica: senza perderci qui nei dettagli dei calcoli, diamo direttamente il risultato: nella Tab. 1 indichiamo gli autovalori di ciascuno degli stati indicati rispetto

stato	$\hat{L}^2$	$\hat{L}_z$
$\frac{ 100\rangle + i 010\rangle}{\sqrt{2}}$	1	+1
$ 001\rangle$	1	0
$\frac{ 100\rangle - i 010\rangle}{\sqrt{2}}$	1	-1

**Tabella 1:** Stati a momento angolare definito per primo livello eccitato.

al rispettivo operatore. Vediamo come effettivamente il nuovo set di stati costituisca una nuova base ortonormale per l'autospazio  $n = 1$ , e rappresenti completamente la famiglia  $l = 1$  del momento angolare.

Al livello  $n = 2$  il discorso è analogo. Stavolta non ci prendiamo neanche la briga di fare i conti, affidandoci completamente alla saggezza di [5]: compaiono i sei stati

$$|200\rangle \quad |110\rangle \quad |020\rangle \quad |011\rangle \quad |002\rangle \quad |101\rangle$$

che potrebbero corrispondere a diverse combinazioni di stati con  $l = 0$ ,  $l = 1$ ,  $l = 2$ . Si scopre che questi stati si ricombinano in una famiglia con  $l = 2$  e nello stato invariante per rotazioni con  $l = 0$  come riportato in Tab. 2. L'assenza di  $l = 1$  non è un caso: vedremo nella prossima sezione come mai non compare.

stato	$\hat{L}^2$	$\hat{L}_z$
$\frac{ 200\rangle +  020\rangle +  002\rangle}{\sqrt{3}}$	0	0
$\frac{ 200\rangle -  020\rangle + i 110\rangle}{2\sqrt{2}}$	2	-2
$\frac{ 101\rangle + i 011\rangle}{\sqrt{2}}$	2	-1
$\frac{- 200\rangle -  020\rangle + 2 002\rangle}{\sqrt{6}}$	2	0
$\frac{- 101\rangle + i 011\rangle}{\sqrt{2}}$	2	+1
$\frac{ 200\rangle -  020\rangle - i 110\rangle}{2\sqrt{2}}$	2	+2

**Tabella 2:** Stati a momento angolare definito per secondo livello eccitato.

Potremmo continuare per ciascun possibile  $n$ , ma non lo faremo per evidenti limiti di tempo e spazio e, in maniera non meno importante, per una discreta inabilità degli autori nei calcoli. Piuttosto dedichiamo la prossima

sezione a trattare la questione da un punto di vista algebrico che spieghi la presenza di questo comportamento del sistema.

### 10.2.2 \* Una risposta algebrica: la composizione “tensoriale”

Per spiegare la degenerazione in  $l$  che insorge all'interno di ciascun auto-spazio, iniziamo notando che ogni stato dell'oscillatore armonico tridimensionale può essere costruito generalizzando in più dimensioni l'espressione (4.10)

$$|n_1 n_2 n_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! n_3!}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{n_2} \left(\hat{a}_3^\dagger\right)^{n_3} |000\rangle$$

dove siamo passati per comodità dalla notazione  $xyz$  alla 123 e, come al solito, abbiamo definito l'operatore di creazione come

$$\hat{a}_j^\dagger = \frac{\hat{q}_j - i\hat{p}_j}{\sqrt{2}}$$

Gli operatori  $\hat{q}_j$  e  $\hat{p}_j$  sono adimensionali, cioè ottenuti dividendo gli operatori impulso e posizione per le rispettive scale di grandezza. I vari  $\hat{a}_j^\dagger$  operano su spazi diversi, quindi commutano tra loro. Da qui segue che il loro ordine di applicazione è irrilevante, fintantoché ne applichiamo  $n_1$  del tipo  $\hat{a}_1^\dagger$ ,  $n_2$  del tipo  $\hat{a}_2^\dagger$  e  $n_3$  del tipo  $\hat{a}_3^\dagger$ .

Ciascun operatore di salita può essere reinquadrato come elemento di un tensore tridimensionale di rango 1

$$\hat{a}_j^\dagger : \hat{\mathbf{a}}^\dagger \equiv \begin{bmatrix} \hat{a}_1^\dagger \\ \hat{a}_2^\dagger \\ \hat{a}_3^\dagger \end{bmatrix} = \frac{\hat{\mathbf{q}} - i\hat{\mathbf{p}}}{\sqrt{2}}$$

L'operatore  $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$  è un operatore vettoriale (in tre dimensioni): infatti, siccome  $\hat{\mathbf{q}}$  e  $\hat{\mathbf{p}}$  trasformano come vettori sotto rotazioni tridimensionali

$$[\hat{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}] = i\hbar \bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{q}} \quad [\hat{\mathbf{p}}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}] = i\hbar \bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

segue chiaramente che

$$[\hat{\mathbf{a}}^\dagger, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}] = \frac{[\hat{\mathbf{q}}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}] - i[\hat{\mathbf{p}}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}]}{\sqrt{2}} = i\hbar \bar{\mathbf{n}} \times \frac{\hat{\mathbf{q}} - i\hat{\mathbf{p}}}{\sqrt{2}} = i\hbar \bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{a}}^\dagger$$

cioè  $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$  trasforma come un vettore. Nella Sez. 10.1 avevamo visto che ciascun tensore tridimensionale di rango 1, i.e. ciascun operatore vettoriale di questo tipo, può essere rimappato in tre componenti sferiche:

$$\hat{A}_{\pm 1} \equiv \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1^\dagger \pm i\hat{a}_2^\dagger) \quad \hat{A}_0 \equiv \hat{a}_3^\dagger$$

dove come al solito diagonalizziamo simultaneamente  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$  e  $\hat{L}_3$  tramite la base  $|nlm\rangle$  (sottintendiamo nel seguito il numero quantico  $n$ ), motivo per cui diamo ai tensori sferici proprio questa forma: infatti i pedici non sono casuali, bensì indicano il numero quantico  $m$  di  $\hat{L}_3$  per il quale vale la relazione

$$[\hat{L}_3, \hat{A}_m] = \sum_{m'=-1}^{+1} \langle 1m' | \hat{L}_3 | 1m \rangle \hat{A}_{m'} = m \hat{A}_m$$

che di fatto ne definisce la sfericità, seguendo l'espressione (10.3).

Ora: dalla Sez. 10.1.4 sappiamo che quando un tensore sferico di rango  $k$  agisce su un autostato  $|lm\rangle$ , lo stato risultante ha momento angolare  $l'$  in una delle rappresentazioni  $|k-l| \leq l' \leq k+l$ ; nella notazione introdotta poco sopra

$$l' = \mathbf{k} \otimes \mathbf{l} = |\mathbf{k} - \mathbf{l}| \oplus \cdots \oplus \mathbf{k} + \mathbf{l}$$

il che implica che uno stato del tipo

$$\hat{A}_m |000\rangle$$

essendo lo stato  $|000\rangle$  invariante per rotazioni, dunque con momento angolare  $l = 0$ , avrà momento angolare  $l'$  in una delle rappresentazioni

$$l' = \mathbf{0} \otimes \mathbf{1} = \mathbf{1}$$

D'altra parte, applicando ad esso un altro tensore sferico, lo stato

$$\hat{A}_n \hat{A}_m |000\rangle$$

avrà momento angolare dato da

$$l'' = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} = \mathbf{0} \oplus \mathbf{1} \oplus \mathbf{2}$$

quindi gli stati generati da questa applicazione potranno generare, a meno di altri vincoli, le tre possibili rappresentazioni  $l'' = 0, l'' = 1$  e  $l'' = 2$ .

Potremmo continuare, ma è giunto il momento di svelare il **barbatrucco**: in effetti sappiamo scrivere esattamente ciascun operatore di salita in termini di operatori sferici di rango unitario

$$\hat{a}_1^\dagger = \frac{\hat{A}_{-1} - \hat{A}_{+1}}{\sqrt{2}} \quad \hat{a}_2^\dagger = i \frac{\hat{A}_{-1} + \hat{A}_{+1}}{\sqrt{2}} \quad \hat{a}_3^\dagger = \hat{A}_0$$

e conseguentemente quando applichiamo un qualsiasi operatore di salita a un generico autostato  $|\psi_l\rangle$  di  $\hat{\mathbf{L}}^2$  per l'autovalore  $l(l+1)$  otteniamo

$$\hat{a}_j^\dagger |\psi_l\rangle = \sum_{m=-1}^{+1} c_m^{(j)} \underbrace{\hat{A}_m}_{\mathbf{1} \otimes \mathbf{l}} |\psi_l\rangle$$

dove  $c_m^{(j)}$  sono i coefficienti che permettono di scrivere le  $\hat{a}_j^\dagger$  in termini delle  $\hat{A}_m$ . Allora lo stato risultante ha momento angolare in una combinazione delle rappresentazioni  $|l-1, l, l+1\rangle$ . Risulta chiaro che

- il ground state, come già sappiamo, è invariante per rotazioni: coincide con l'autospazio  $l = 0$ ;
- il primo livello eccitato è raggiunto applicando un qualsiasi operatore di salita:

$$\hat{a}_j^\dagger |000\rangle = \begin{cases} |100\rangle & \text{se } j = 1 \\ |010\rangle & \text{se } j = 2 \\ |001\rangle & \text{se } j = 3 \end{cases}$$

e per esso l'unica possibile rappresentazione è quella per  $l = 1$ . Come ormai sappiamo bene, questi stati sono autostati di  $\hat{\mathbf{L}}^2$  per l'autovalore  $1(1+1) = 2$ . Possiamo scrivere esattamente gli autostati di  $\hat{L}_3$ , sfruttando il fatto che

$$[\hat{L}_3, \hat{A}_m] = m\hat{A}_m$$

per trovare

$$\hat{L}_3 \hat{A}_m |000\rangle = \hat{A}_m \hat{L}_3 |000\rangle + m\hat{A}_m |000\rangle = m\hat{A}_m |000\rangle$$

essendo il ground-state invariante per rotazioni. Da qui si trova, esplicitando ciascuna  $\hat{A}_m$  in termini delle  $\hat{a}_j^\dagger$ , che

$$\begin{aligned} n = 2 & \quad l = 1 & m = -1 & \quad \hat{A}_{-1} |000\rangle = \frac{|100\rangle - i|010\rangle}{\sqrt{2}} \\ & \quad m = 0 & \quad \hat{A}_0 |000\rangle = |001\rangle \\ & \quad m = +1 & \quad \hat{A}_{+1} |000\rangle = -\frac{|100\rangle + i|010\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

come avevamo visto nella sezione precedente.

- il secondo livello eccitato si raggiunge con due applicazioni degli operatori di salita:

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger |000\rangle = \begin{cases} |200\rangle & \text{se } (i,j) = (1,1) \\ |110\rangle & \text{se } (i,j) = (1,2) \\ |020\rangle & \text{se } (i,j) = (2,2) \\ |011\rangle & \text{se } (i,j) = (2,3) \\ |002\rangle & \text{se } (i,j) = (3,3) \\ |101\rangle & \text{se } (i,j) = (3,1) \end{cases}$$

e le rappresentazioni che questo autospazio può ospitare sono date da  $\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{0} = \mathbf{0} \oplus \mathbf{1} \oplus \mathbf{2}$ . In effetti sappiamo che ricombinando opportunamente le autofunzioni, queste generano i due spazi  $l = 0$  (dimensione 1) e  $l = 2$  (dimensione 5).

Fermiamoci un attimo: come mai non compare la rappresentazione  $l = 1$  nel secondo livello eccitato? Un motivo algebrico è la **parità**: infatti l'autospazio  $l$ -esimo di  $\hat{\mathbf{L}}^2$ , di parità  $(-1)^l$ , deve essere contenuto nell'autospazio  $n$ -esimo di  $\hat{H}$ , che ha parità  $(-1)^n$ <sup>4</sup>. Ne deriviamo una generale **regola di selezione**:

gli autospazi  $n$ -esimi di  $\hat{H}$  per  $n$  pari potranno contenere solo autospazi di  $\hat{\mathbf{L}}^2$  per  $l$  pari, quelli per  $n$  dispari solo quelli per  $l$  dispari.

Alla luce di questo fatto possiamo predire che il livello  $n$ -esimo, che possiamo ottenere eccitando  $n$  volte l'oscillatore<sup>5</sup> conterrà, al più, le rappresentazioni

$$n : \mathbf{0} \otimes \underbrace{\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}_{n \text{ volte}} / \mathcal{P} = n \oplus (n-2) \oplus (n-4) \oplus \cdots$$

dove “ $/\mathcal{P}$ ” è da intendersi come un “a meno di una parità”, e rappresenta la regola di selezione appena esposta, e la somma di rappresentazioni termina non appena viene raggiunto  $l = 1$  ( $n$  dispari) o  $l = 0$  ( $n$  dispari).

La questione può essere vista sotto un’altra prospettiva algebrica: invece che applicare  $N$  volte tensori di rango 1, potremmo pensare di applicare una volta un tensore di rango  $N$ : infatti, possiamo definire il tensore

$$\hat{\mathcal{A}}_{i_1 i_2 \dots i_N}^{(N)} \equiv \hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2}^\dagger \cdots \hat{a}_{i_N}^\dagger \quad \text{con } \forall k : i_k = 1, 2, 3$$

il quale, al variare dei suoi indici, genera tutti i possibili stati prodotto dell’ $N$ -esimo livello energetico quando applicato a  $|000\rangle$ . Di questo tensore non specificheremo le proprietà generali, piuttosto ci concentreremo su un’analisi interessante nel caso  $N = 2$ . In questo caso il tensore è rappresentato da una matrice di operatori

$$\hat{\mathcal{A}}_{ij}^{(2)} : \hat{\mathcal{A}}^{(2)} = \begin{bmatrix} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger & \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger & \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3^\dagger \\ \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger & \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger & \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3^\dagger \\ \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1^\dagger & \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2^\dagger & \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3^\dagger \end{bmatrix}$$

Se adesso ci ricordiamo quanto detto nella Sez. 10.1.1 di questo capitolo, sappiamo che un tensore di rango 2 (sottintendiamo l’apice (2)) può essere decomposto in una somma di tre termini

$$\hat{\mathcal{A}} = \underbrace{\frac{1}{3} \text{Tr}(\hat{\mathcal{A}})}_{\text{rango 0}} + \underbrace{\hat{\mathcal{A}}_A}_{\text{rango 1}} + \underbrace{\left( \hat{\mathcal{A}}_S - \frac{1}{3} \text{Tr}(\hat{\mathcal{A}}) \right)}_{\text{rango 2}}$$

dove

$$\hat{\mathcal{A}}_A \equiv \frac{1}{2} (\hat{\mathcal{A}} - \hat{\mathcal{A}}^t) \quad \hat{\mathcal{A}}_S \equiv \frac{1}{2} (\hat{\mathcal{A}} + \hat{\mathcal{A}}^t)$$

e questa decomposizione è unica.

Notiamo che il termine antisimmetrico è nullo: infatti, siccome tutti gli  $\hat{a}_j^\dagger$  commutano tra loro, vale

$$\hat{\mathcal{A}}_{ij} = \hat{\mathcal{A}}_{ji}$$

Possiamo quindi giustificare ulteriormente l’assenza di un autospazio  $l = 1$  nel secondo livello eccitato: per essere presente, dovrebbe essere possibile applicare sullo stato fondamentale un tensore di rango 1, che qui è assente! Non è casuale che il tensore di rango nullo sia la traccia della nostra “matrice di operatori”. Infatti, abbiamo visto che lo stato invariante per rotazioni in questo spazio è dato da (a meno di una normalizzazione)

$$|\psi\rangle \equiv |200\rangle + |020\rangle + |002\rangle$$

il quale risulta uguale, a meno di una costante  $c \in \mathbb{R}$ , a

$$|\psi\rangle = c \left( \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3^\dagger \right) |000\rangle \propto \text{Tr}(\hat{\mathcal{A}}) |000\rangle$$

dove naturalmente la traccia di  $\hat{\mathcal{A}}$  è un operatore e l’operazione va intesa come

$$\text{Tr}(\hat{\mathcal{A}}) = \sum_{i=1}^3 \hat{\mathcal{A}}_{ii}$$

Useremo adesso tutta una serie di termini impropri. Il fatto che sia la “traccia di una matrice” a generare lo stato invariante non dovrebbe sorprendere: dall’Algebra Lineare è ben noto che la traccia di una matrice numerica è invariante sotto similitudine:

$$\begin{aligned} M \rightarrow LML^{-1} \quad \implies \quad \text{Tr}(LML^{-1}) &= \text{Tr } L \text{Tr } M \text{Tr } L^{-1} \\ &= \text{Tr}(LL^{-1}) \text{Tr } M = \text{Tr } M \end{aligned}$$

con ovvio significato dei simboli. Ruotare una matrice numerica *significa esattamente* applicarle una trasformazione di similitudine: con un po’ di immaginazione possiamo pensare che la stessa cosa valga, in qualche modo, per matrici di operatori, come in questo caso.

### 10.2.3 \* Il gruppo di simmetria $U(N)$ dell’oscillatore

Il fatto che insorga una degenerazione in una specifica quantità fisica è spesso indizio della presenza di una simmetria nascosta. In questo caso vedremo come il gruppo di simmetria dell’oscillatore armonico 3-dimensionale non sia  $SU(2)$  né  $SO(3)$  (rotazioni) ma un gruppo ben più largo:  $U(3)$ , di cui  $SO(3)$  è un sottogruppo. Dimostreremo la generalizzazione in dimensione arbitraria di questa affermazione: **l’oscillatore armonico  $N$ -dimensionale ha un gruppo di simmetria  $U(N)$ .**

Cominciamo ricordando cosa intendiamo per simmetria di un sistema: definiamo simmetria dell’hamiltoniana una trasformazione unitaria  $\hat{S}$  tale che

$$\hat{S}\hat{H}\hat{S}^\dagger = \hat{H}$$

Prendiamo dunque un oscillatore  $N$ -dimensionale isotropo<sup>6</sup>, la cui hamiltoniana sarà della forma

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{p}_i^2 + \hat{q}_i^2) \quad \text{con} \quad \hat{p}_i = \sqrt{\frac{1}{\hbar m\omega}} \hat{P}_i \quad \hat{q}_i = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{Q}_i$$

che, usando gli operatori di salita e di discesa come definiti nella sezione precedente, possiamo rimappare in (usiamo da qui in poi la convenzione di Einstein sugli indici ripetuti)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hbar\omega \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right) \equiv \hbar\omega \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{N}{2} \right)$$

Si vede a vista che il “prodotto hermitiano”  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  è invariante sotto la trasformazione

$$\begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \vdots \\ \hat{a}_N \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \hat{a}'_1 \\ \vdots \\ \hat{a}'_N \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \vdots \\ \hat{a}_N \end{pmatrix} \quad M \in U(N)$$

cioè per componenti

$$\hat{a}_i \rightarrow \hat{a}'_i = M_{ij} \hat{a}_j$$

con  $M$  una generica matrice unitaria  $N \times N$ . Infatti

$$\hat{a}'_i^\dagger \hat{a}'_i = (M_{ij} \hat{a}_j)^\dagger (M_{ik} \hat{a}_k) = M_{ij}^* M_{ik} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k = (M^\dagger M)_{jk} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k = \delta_{jk} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$$

Possiamo dunque affermare che una generica trasformazione di  $U(N)$  lascia l'hamiltoniana invariata? La domanda, in questi termini, è mal definita: dobbiamo controllare l'azione della trasformazione sull'**operatore hamiltoniano**.

**Proposizione.** *Per ogni matrice  $M \in U(N)$  esiste un operatore unitario nello spazio di Hilbert  $U: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  che agisce sugli operatori di distruzione  $\hat{a}_i$  con  $i = 1, \dots, N$  come*

$$\hat{U}\hat{a}_i\hat{U}^\dagger = M_{ij}\hat{a}_j$$

Prima ancora di dimostrarla, convinciamoci del fatto che se questa proposizione è vera, allora permette di concludere che l'oscillatore  $N$ -dimensionale possiede un gruppo di simmetria  $U(N)$ . Stiamo dicendo che per ogni matrice  $M$  unitaria  $N \times N$  è possibile definire un diverso operatore  $\hat{U}$  su  $\mathcal{H}$  che lascia l'hamiltoniana invariata:

$$\begin{aligned} \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger &= \sum_{i=1}^N \left( \hat{U}\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i\hat{U}^\dagger + \hat{U}\frac{\mathbb{1}}{2}\hat{U}^\dagger \right) \\ &= \sum_{i=1}^N \left( \hat{U}\hat{a}_i^\dagger\hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{a}_i\hat{U}^\dagger + \frac{\mathbb{1}}{2} \right) \\ &= \sum_{i=1}^N \left[ (\hat{U}\hat{a}_i\hat{U}^\dagger)^\dagger (\hat{U}\hat{a}_i\hat{U}^\dagger) + \frac{\mathbb{1}}{2} \right] \\ &= \sum_{i,j,k} \left[ (M_{ij}\hat{a}_j)^\dagger (M_{ik}\hat{a}_k) + \frac{\mathbb{1}}{2} \right] = \sum_{i=1}^N \left( \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i + \frac{\mathbb{1}}{2} \right) = \hat{H} \end{aligned}$$

La mappa  $M \mapsto \hat{U}$  è pertanto un omomorfismo tra  $U(N)$  e un gruppo di trasformazioni di simmetria per il sistema. Per questo diciamo che sistema possiede un gruppo di simmetria  $U(N)$ .

*Dimostrazione.* Poiché la matrice  $M$  è unitaria, le relazioni di commutazione

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$$

sono verificate anche dagli operatori  $\hat{a}'_i = M_{ij}\hat{a}_j$ ,  $\hat{a}'_i^\dagger = M_{ij}^*\hat{a}_j^\dagger$ . Allora gli operatori possono essere usati per costruire un set completo di stati

$$|n_1, \dots, n_N\rangle' = \frac{1}{\sqrt{n_1! \cdots n_N!}} (\hat{a}'_1)^{n_1} \cdots (\hat{a}'_N)^{n_N} |0 \cdots 0\rangle$$

Dimostriamo adesso che l'operatore  $\hat{U}$  che stiamo cercando è proprio quello che realizza il cambio di base, cioè quello così definito:

$$|n_1, \dots, n_N\rangle' = \hat{U} |n_1, \dots, n_N\rangle$$

Infatti da un lato

$$\begin{aligned} \hat{U}\hat{a}_i\hat{U}^\dagger |n_1, \dots, n_N\rangle' &= \hat{U}\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_N\rangle \\ &= \sqrt{n_i} \hat{U} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_N\rangle \\ &= \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_N\rangle' \end{aligned}$$

dall'altro

$$\hat{a}'_i |n_1, \dots, n_N\rangle' = \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_N\rangle'$$

Poiché  $\hat{U}\hat{a}_i\hat{U}^\dagger$  e  $\hat{a}'_i$  agiscono nello stesso modo su una base completa dello spazio di Hilbert, allora sono lo stesso operatore:  $\hat{U}\hat{a}_i\hat{U}^\dagger = \hat{a}'_i = M_{ij}\hat{a}_j$ .  $\square$

Citiamo adesso per completezza un fatto interessante: il fatto che la trasformazione citata,  $\hat{a}_i \rightarrow M_{ij}\hat{a}_j$ , preservi le relazioni di commutazione canoniche (in questo caso scritte in termini di  $\hat{a}_i$ ,  $\hat{a}_i^\dagger$ ) è condizione **necessaria e sufficiente** a far sì che esista un operatore  $\hat{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  che la implementi, cioè è condizione necessaria e sufficiente affinché la proposizione sia vera. Questa è una conseguenza del **Teorema di Stone-Von Neumann** che afferma che tutte le rappresentazioni sullo spazio di Hilbert delle relazioni di commutazione canoniche sono unitariamente equivalenti.

#### 10.2.4 \* Il significato degli operatori di salita e di discesa

Concludiamo questa sezione dedicata all'oscillatore tridimensionale commentando rapidamente la natura degli operatori di salita e di discesa in questo contesto. Qui li chiameremo **operatori di creazione e di distruzione**, perché interpreteremo il ruolo di ciascuno di essi come segue:

- |                     |   |
|---------------------|---|
| $\hat{a}_j^\dagger$ | aggiunge un quanto di eccitazione nella direzione $j$ |
| $\hat{a}_j$         | rimuove un quanto di eccitazione dalla direzione $j$  |

Consideriamo il primo livello eccitato. Con riferimento alla notazione delle sezioni precedenti, abbiamo visto che gli operatori  $\hat{A}_q$ , quando applicati sul ground-state  $|000\rangle$ , generano autostati di  $\hat{L}_3$  con autovalore  $q$ . Come mai sono fatti *proprio* in questo modo?

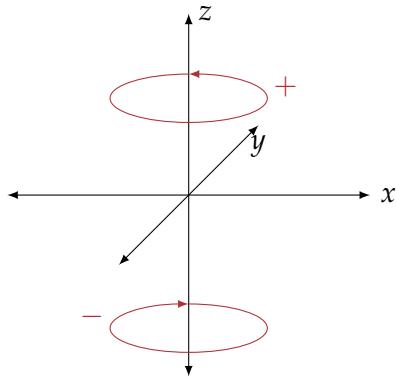
Guardiamo ad esempio l'operatore  $\hat{A}_{+1}$ : questo genera l'autostato

$$\hat{A}_{+1}|000\rangle = -\frac{\hat{a}_1^\dagger + i\hat{a}_2^\dagger}{\sqrt{2}}|000\rangle = -\frac{|100\rangle + i|010\rangle}{\sqrt{2}}$$

cioè, nell'interpretazione appena citata, aggiunge un quanto di eccitazione nella direzione 1, e un altro *sfasato di  $i$*  nella direzione 2. Stabiliamo un parallelo potente: nel formalismo complesso, un'onda elettromagnetica con polarizzazione circolare (sul piano  $xy$ ) si scrive come

$$\mathbf{E}(t) = E_0 \frac{\bar{\mathbf{x}}e^{i\omega t} + \bar{\mathbf{y}}e^{i(\omega t + \frac{\pi}{2})}}{\sqrt{2}} = E_0 e^{i\omega t} \frac{\bar{\mathbf{x}} + i\bar{\mathbf{y}}}{\sqrt{2}}$$

La somiglianza con la forma dell'operatore  $\hat{A}_{+1}$  non sarà sfuggita. In modo forse un po' improprio ma che finalmente dà un senso intuitivo a questi tensori sferici, possiamo affermare che l'applicazione dell'operatore  $\hat{A}_{+1}$  corrisponde all'aggiunta di un quanto di eccitazione "che oscilla ruotando in senso orario". Questa frase non va presa alla lettera, stiamo solo facendo un'analogia!



**Figura 10.1:** Illustrazione schematica delle tre possibili eccitazioni tramite gli operatori  $\hat{A}_q$ : in modo un po' creativo si può immaginare che  $\hat{A}_0$  aggiunge un quanto di oscillazione lungo la direzione  $\bar{z}$ ,  $\hat{A}_{\pm 1}$  aggiungono un quanto di oscillazione "lungo le orbite"  $\pm$ . Le virgolette vanno prese sul serio: non c'è veramente una particella che gira su queste orbite!

In Fig. 10.1 rappresentiamo l'azione di questi operatori di creazione: l'idea sostanziale è che uno stato del tipo  $|100\rangle + i|010\rangle$  evolva tramite l'evolutore  $\hat{U} = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$  come

$$\begin{aligned}\hat{U}(|100\rangle + i|010\rangle) &= e^{-iE_1 t/\hbar} (|100\rangle + i|010\rangle) \\ &= e^{-i\omega_1 t} |100\rangle + e^{-i(\omega_1 t - \pi/2)} |010\rangle\end{aligned}$$

dove abbiamo definito:

$$\hbar\omega_1 \equiv E_1 = \hbar\omega \left(1 + \frac{3}{2}\right)$$

per cui, essendo uno stato di questo tipo (a meno di costanti di moltiplicativa) generato da  $\hat{A}_{+1}$ , si può intuire che questo operatore costruisca stati nel primo autospazio eccitato che rispetto alle rotazioni attorno all'asse  $\bar{z}$  hanno la componente  $x$  è "in ritardo" rispetto alla  $y$ . Non approfondiamo oltre: quanto detto in questa sede è già abbastanza improprio e rischieremmo solo di dare idee sbagliate. Quello che deve rimanere è che la costruzione di tensori sferici non è casuale ed è possibile trovare una qualche rappresentazione intuitiva che renda conto della sfericità, cioè che abbia qualche relazione con le rotazioni. Ovviamente, non è solo matematica!

## NOTE

1. Questo, ricordiamo, non si significa che l'analogo classico sia uno scalare, bensì che l'operatore commuti con il momento angolare: infatti, mentre e.g.  $\hat{x}^2$  è un operatore scalare nel senso operatoriale del termine, un operatore del tipo  $\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{x}}$ , con  $\mathbf{A}$  un generico vettore esterno al sistema (ad esempio un campo elettrico esterno a un atomo di idrogeno) **non** è un operatore scalare perché trasformando la quantità sotto rotazioni questa trasforma vettorialmente: una rotazione del sistema non modifica ciò che è esterno al sistema.
2. La derivazione riportata nel Cap. 6 è sempre valida: utilizzando gli operatori di salita e di discesa, a partire da un qualsiasi autostato per l'autovalore  $l(l+1)$  è implicata l'esistenza dell'intera famiglia di  $2l+1$  stati; in altri termini, **una rappresentazione del momento angolare non può mai presentarsi "parzialmente"**.

3. Qui l'idea sostanziale è che è possibile trovare una base  $|nlm\rangle$ : per il momento abbiamo  $n$  e  $l$ , mentre non abbiamo ancora introdotto la componente del momento angolare che determinerà l'esistenza di  $m$ . Siccome (ovviamente) se  $l = 0$  sarà sempre e solo  $m = 0$  indipendentemente da quale componente sceglieremo, possiamo eseguire la successiva derivazione.
4. Questo fatto può essere visto semplicemente attraverso una proprietà dei Polinomi di Hermite:

$$H_n(-s) = (-1)^n H_n(s)$$

e quindi, essendo

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{q}) = \langle \mathbf{q} | n_1 n_2 n_3 \rangle \propto H_{n_1}(x) H_{n_2}(y) H_{n_3}(z) f(|\mathbf{q}|)$$

segue che

$$\hat{\mathcal{P}} \psi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{q}) = (-1)^{n_1 + n_2 + n_3} \psi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{q})$$

5. In una descrizione equivalente, eccitare  $n$  volte l'oscillatore equivale a "popolarlo" con  $n$  quanti di eccitazione.
6. Possiamo pensare in modo analogo a  $N$  oscillatori unidimensionali.

## IN BREVE...

- ◊ Un operatore  $\hat{O}$  trasforma sotto rotazioni infinitesime (angolo  $d\theta$ , asse  $\hat{\mathbf{n}}$ ) secondo la seguente espressione

$$\hat{O}' = \hat{O} + \frac{i}{\hbar} \delta\theta [\hat{O}, \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}]$$

Due importanti classi di operatori sono quelli **scalari** e quelli **vettoriali**, per cui rispettivamente

$$\begin{aligned} [\hat{O}, \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}] &= 0 \implies \hat{O}' = \hat{O} \\ [\hat{\mathbf{O}}, \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}] &= i\hbar \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{O}} \implies \hat{\mathbf{O}}' = \hat{\mathbf{O}} - \delta\theta \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{O}} \end{aligned}$$

- ◊ Un **operatore tensoriale sferico** di rango  $k$ , è un operatore le cui  $2k+1$  componenti ( $q = -k, \dots, k$ ) trasformano sotto rotazioni in modo simile ad un autostato  $|k, q\rangle$  del momento angolare:

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) \hat{T}_q^{(k)} \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)^\dagger = \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} D_{q'q}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma)$$

dove le  $D^{(k)}$  sono le matrici  $D$  di Wigner.

- ◊ Il caso  $k=0$  è quello degli operatori **scalari** descritti sopra, che sono invarianti sotto rotazione.
- ◊ Il caso  $k=1$  è quello dei tensori sferici vettoriali. Ad ogni operatore vettoriale cartesiano  $\hat{\mathbf{O}} = (\hat{O}_x, \hat{O}_y, \hat{O}_z)$  è associato un tensore sferico vettoriale:

$$T_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{O}_x \pm i\hat{O}_y) \quad T_0^{(1)} = \hat{O}_z$$

- ◊ Il **teorema di Wigner-Eckart** è una relazione tra elementi di matrice di operatori tensoriali sferici tra autostati del momento angolare:

$$\langle j'm' | \hat{T}_q^{(k)} | jm \rangle = C_{m'mq}^{j'jk} \langle j' | \hat{T}^{(k)} | j \rangle$$

Esso dice che la dipendenza dall'orientazione spaziale (cioè da  $m$  e  $m'$ ) si fattorizza in un coefficiente di Clebsch-Gordan.

- ◊ Dal teorema di Wigner-Eckart seguono importanti regole di selezione:

Scalari ( $k=0$ )	Vettoriali ( $k=1$ )
$j' = j$	$j' = \{j-1, j, j+1\}$
$m' = m$	$m' = m + q$
$\langle 00   \hat{T}_q^{(1)}   00 \rangle = 0$	

tutti gli altri elementi di matrice sono sempre nulli. Gli operatori sferici scalari connettono solo stati con uguale  $j$  e  $m$ , quelli vettoriali connettono solo stati con  $j$  distanti al massimo 1, e non connettono stati con  $j = j' = 0$ .

- ◊ Quando i tensori sferici agiscono su stati  $|jm\rangle$ , lo stato risultante vive nella composizione dei momenti angolari  $k \otimes j$ :

$$\hat{T}_q^{(k)} |jm\rangle \longleftrightarrow k \otimes j = |k-j| \oplus \dots \oplus k+j$$

Per esempio agendo con un tensore sferico vettoriale  $T_q^{(1)}$  su uno stato a simmetria sferica  $|00\rangle$ , si ottiene uno stato a momento angolare  $j'=1, m'=q$ .

- ◊ La base più naturale di autostati di  $\hat{H}$  per un oscillatore armonico isotropo tridimensionale è quella degli stati prodotto  $|n_x n_y n_z\rangle$  ottenuti dalla separazione delle tre variabili spaziali.
- ◊ L'oscillatore isotropo ha un'hamiltoniana invariante per rotazioni. Pertanto si possono scegliere autostati di  $\hat{H}$  con momento angolare definito. Essi si ottengono in ogni autospazio  $\mathcal{H}_n$  con energia  $E_n$ ,  $n = n_x + n_y + n_z$ , tramite combinazioni lineari dei  $|n_x n_y n_z\rangle$ .
- ◊ L' $n$ -esimo autospazio  $\mathcal{H}_n$  può essere generato da stati con momento angolare definito e pari a

$$\mathcal{H}_n = n \oplus n - 2 \oplus \cdots \oplus 1 \text{ oppure } 0$$

Per esempio il primo eccitato ( $n = 1$ ) contiene stati con  $l = 1$ ; il secondo eccitato ( $n = 2$ ) invece ospita stati con  $l = 2$  e  $l = 0$ ; il terzo ( $n = 3$ ) ospita  $l = 3$  e  $l = 1$ , e così via.

# 11

## TEORIA DELLE PERTURBAZIONI

In questo capitolo studieremo la teoria delle perturbazioni, uno dei principali metodi di soluzione approssimata di problemi di Meccanica Quantistica. Esso permette di ricondurre alcuni problemi alle soluzioni note di problemi più semplici, supponendo che le perturbazioni energetiche indotte sul sistema siano piccole rispetto alla scala di energia.

### 11.1 PERTURBAZIONI INDEPENDENTI DAL TEMPO

Studiamo un sistema quantistico descritto dall'hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \quad (11.1)$$

dove

- $\lambda$  è un parametro reale *piccolo*, con un significato che sarà precisato nel seguito;
- $\hat{H}_0$  è l'Hamiltoniana *imperturbata*, di cui si conosce la soluzione nel senso che è completamente noto lo spettro

$$\hat{H}_0 |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle$$

con gli  $|n\rangle$  (supposti per semplicità discreti) che formano una base completa per lo spazio di Hilbert degli stati. Supponiamo inoltre che lo spettro di  $\hat{H}_0$  sia **non degenero**, ossia che se  $m \neq n$ , allora  $\epsilon_m \neq \epsilon_n$ . Considereremo il caso con degenerazioni in seguito (Sez. 11.2).

Vogliamo determinare in modo approssimato lo spettro di  $H$ , cioè trovare un set completo del tipo

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (11.2)$$

L'idea della soluzione è supporre che le energie e gli autostati siano analitici nella variabile  $\lambda$ , in modo cioè che essi possano essere scritti come **serie perturbativa** del parametro  $\lambda$ ,

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots$$

In alcuni casi il problema sotto esame è il caso  $\lambda = 1$ , condizione che può essere imposta alla fine del calcolo. Questo dà luogo a problemi matematici legati ad esempio alla convergenza delle serie appena citate. Noi assumiamo che lo sviluppo sia valido e ignoriamo il problema.

Sostituendo questo *Ansatz* nell'equazione agli autovalori si ottiene

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) \left( \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \lambda \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \dots \right) &= \\ &= \left( E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots \right) \left( \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \lambda \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \dots \right) \end{aligned}$$

Eguagliando i coefficienti di ogni potenza di  $\lambda$  troviamo, per gli ordini 0 ed 1:

$$\hat{H}_0 \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad (11.3)$$

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}_1) \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad (11.4)$$

mentre per un generico ordine  $r$  abbiamo

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) \left| \psi_n^{(r)} \right\rangle &= (E_n^{(1)} - \hat{H}_1) \left| \psi_n^{(r-1)} \right\rangle + \dots + E_n^{(r)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \\ &= \sum_{j=1}^r [E_n^{(j)} - H_j \delta_{1j}] \left| \psi_n^{(r-j)} \right\rangle \end{aligned} \quad (11.5)$$

Procediamo per ordini successivi, facendo notare che nella pratica si considera spesso soltanto il primo ordine e più raramente i successivi. All'ordine zero, la soluzione è

$$E_n^{(0)} = \epsilon_n \quad \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = |n\rangle$$

e corrisponde al caso banale di mettere  $\lambda = 0$  nell'hamiltoniano.

Cerchiamo la base incognita  $\{\left| \psi_n \right\rangle\}$  in modo che essa verifichi la seguente condizione di normalizzazione:

$$\left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \psi_n \right\rangle = 1, \quad \text{o ossia} \quad \langle n | \psi_n \rangle = 1$$

Non è detto che questa corrisponda alla corretta normalizzazione di uno stato fisico, tuttavia possiamo occuparci del problema alla fine, una volta determinati  $\left| \psi_n \right\rangle$  riscalandoli in modo che siano di norma unitaria. L'equazione agli autostati è infatti omogenea: se uno stato la risolve, allora lo stesso vale per tutti i suoi riscalamenti.

La scelta della normalizzazione che può sembrare ingiustificata è in realtà utile in quanto essa implica che le correzioni  $\left| \psi_n^{(r)} \right\rangle$  con  $r \geq 1$  sono vettori ortogonali a  $\left| \psi_n^{(0)} \right\rangle$ :

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \left( \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \lambda \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \lambda^2 \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \dots \right) \right\rangle &\stackrel{!}{=} 1 \\ \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \left( \lambda \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \lambda^2 \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \dots \right) \right\rangle &= 1 \\ \implies \lambda \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \lambda^2 \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \dots &= 0 \end{aligned}$$

pertanto si deve avere, per l'unicità della scrittura in serie,

$$\langle n | \psi_n^{(r)} \rangle = 0 \quad \forall r \geq 1$$

cioé, in altri termini, tutte le correzioni perturbative allo stato imperturbato devono appartenere al sottospazio ad esso ortogonale.

Usando la completezza della base  $\{|n\rangle\}$ , si potrà sicuramente espandere il ket  $|\psi_n^{(1)}\rangle$  nella base dell'hamiltoniano imperturbato:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{n' \neq n} c_{n'} |n'\rangle$$

dove l'ortogonalità appena descritta giustifica la condizione  $n' \neq n$ . Sostituendo questa scrittura nell'equazione (11.4) e moltiplicando a sinistra per il bra  $\langle m|$  si ottiene

$$\begin{aligned} \sum_{n' \neq n} \langle m | \hat{H}_0 - E_n^{(0)} | n' \rangle \langle n' | \psi_n^{(1)} \rangle &= \langle m | E_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle - \langle m | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle \\ &\equiv \langle m | E_n^{(1)} | n \rangle - \langle m | \hat{H}_1 | n \rangle \\ &= E_n^{(1)} \delta_{nm} - \langle m | \hat{H}_1 | n \rangle \end{aligned} \quad (11.6)$$

D'altronde il termine dentro la sommatoria si riscrive nel modo seguente:

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{H}_0 - E_n^{(0)} | n' \rangle \langle n' | \psi_n^{(1)} \rangle &= \langle m | \hat{H}_0 - E_n^{(0)} | n' \rangle c_{n'} \\ &= (\epsilon_m - \epsilon_n) \langle m | n' \rangle c_{n'} \\ &= (\epsilon_m - \epsilon_n) \delta_{mn} c_{n'} \end{aligned}$$

dove abbiamo applicato l'operatore  $\hat{H}_0$  al bra e usato la formula di ordine 0 per  $E_n^{(0)}$ . L'equazione (11.6) diventa allora

$$(\epsilon_m - \epsilon_n) c_m = E_n^{(1)} \delta_{nm} - \langle m | \hat{H}_1 | n \rangle$$

A questo punto abbiamo finito. Guardando infatti il caso particolare  $n = m$  si deduce il valore del termine di ordine 1 dell'energia

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle \quad (11.7)$$

ne concludiamo che la prima correzione all'energia è l'elemento di matrice diagonale dell'hamiltoniana "perturbante". Guardando invece il caso  $m \neq n$  si ottiene il valore del coefficiente  $c_m$ :

$$c_m = \frac{\langle m | \hat{H}_1 | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m}$$

pertanto la scrittura della correzione di ordine 1 all'autostato in termini della base imperturbata è

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | \hat{H}_1 | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} |m\rangle \quad (11.8)$$

Qualche commento:

- L'ipotesi di non degenerazione dei livelli di  $\hat{H}_0$  è evidentemente necessaria perché garantisce che la scrittura precedente non diverga;

- La richiesta che l'autostato di  $H$  approssimato al primo ordine

$$|\psi_n\rangle \simeq |n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle$$

sia “una piccola correzione” dell’autostato imperturbato  $|n\rangle$  si può scrivere guardando ai coefficienti dello sviluppo in (11.8) e richiedendo che

$$|\langle m|\lambda\hat{H}_1|n\rangle| \ll |\epsilon_n - \epsilon_m|$$

Questa fornisce una condizione necessaria affinché il procedimento adottato sia giustificato: gli elementi di matrice dell’hamiltoniana “perturbante” devono essere molto più piccoli della separazione in energia tra i livelli energetici del problema imperturbato.

**ORDINE 2** Deduciamo adesso la correzione di ordine 2 all’energia: se alla (11.5) applichiamo un *bra* a sinistra, poiché tutti i termini  $|\psi_n^{(k)}\rangle$  con  $k = 1, \dots, r$  sono ortogonali a  $|n\rangle$ , si cancellano quasi tutti i termini:

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{H}_0 - E_n^{(0)}|\psi_n^{(r)}\rangle &= \langle n|E_n^{(1)} - \hat{H}_1|\psi_n^{(r-1)}\rangle + \dots + \langle n|E_n^{(r)}|\psi_n^{(0)}\rangle \\ 0 &= -\langle n|\hat{H}_1|\psi_n^{(r-1)}\rangle + E_n^{(r)}\langle n|n\rangle \end{aligned}$$

dove si è usato il fatto che  $\hat{H}_0|n\rangle = E_n^{(0)}|n\rangle$ . Si deduce che

$$E_n^{(r)} = \langle n|\hat{H}_1|\psi_n^{(r-1)}\rangle$$

In particolare da quest’ultima relazione, nel caso  $r = 2$  si ottiene

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle n|\hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle \\ &= \langle n|\hat{H}_1 \sum_{m \neq n} \frac{\langle m|\hat{H}_1|n\rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m}|m\rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle m|\hat{H}_1|n\rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} \langle n|\hat{H}_1|m\rangle \end{aligned}$$

La correzione di ordine 2 all’energia è quindi

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|\hat{H}_1|n\rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m} \quad (11.9)$$

**NORMALIZZAZIONE** Sistemiamo la sopra citata condizione di normalizzazione per lo stato  $|\psi_n\rangle$ . Al primo ordine in  $\lambda$  si ha

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

pertanto

$$\begin{aligned} \langle \psi_n|\psi_n \rangle &= \left( \langle n| + \lambda \langle \psi_n^{(1)} \rangle \right) \left( |n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle \right) \\ &= 1 + \lambda [\langle n|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle \psi_n^{(1)}|n\rangle] + \mathcal{O}(\lambda^2) = 1 + \mathcal{O}(\lambda^2) \end{aligned}$$

Ci accorgiamo dunque che non c’è nulla da sistemare, perché al primo ordine l’autostato di  $\hat{H}$  risulta correttamente normalizzato.

### 11.1.1 Esempio: Sistema a due livelli

Il primo esempio applicativo che presentiamo è lo studio di un sistema a due livelli, facilmente trattabile e decisamente istruttivo. Supponiamo dunque di perturbare con un termine  $\lambda \hat{H}_1$  l'hamiltoniano di tale sistema:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$$

Supponiamo di aver diagonalizzato  $\hat{H}_0$ , e supponiamo anche che il termine perturbativo abbia forma antidiagonale:

$$H = \underbrace{\begin{bmatrix} E_1^{(0)} & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} \end{bmatrix}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & \lambda V \\ \lambda V & 0 \end{bmatrix}}_{\lambda \hat{H}_1} = \begin{bmatrix} E_1^{(0)} & \lambda V \\ \lambda V & E_2^{(0)} \end{bmatrix}$$

con  $V \in \mathbb{R}$ . Consideriamo adesso soltanto il caso in cui lo spettro di  $\hat{H}_0$  non presenti degenerazioni, quindi  $E_1^{(0)} \neq E_2^{(0)}$ . Vogliamo studiare la perturbazione prodotta sui livelli energetici, sia tramite calcolo esatto che tramite la tecnica descritta nella sezione precedente.

**CALCOLO ESATTO** L'hamiltoniano di un sistema a due livelli è, in forma matriciale, una qualsiasi matrice  $2 \times 2$  hermitiana, scrivibile in termini delle matrici di Pauli (si veda a tal proposito Parte II, Cap. 1):

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

In termini della base  $\{\mathbb{1}, \sigma_i\}$  l'hamiltoniano si scrive come:

$$H = a_0 \mathbb{1} + a_1 \sigma_1 + a_3 \sigma_3$$

dove i coefficienti sono:

$$a_0 = \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \quad a_1 = \lambda V \in \mathbb{R} \quad a_3 = \frac{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}{2}$$

L'hamiltoniano si può dunque scrivere come:

$$H = \begin{bmatrix} a_0 + a_3 & a_1 \\ a_1 & a_0 - a_3 \end{bmatrix}$$

e i livelli energetici saranno gli autovalori di questa matrice:

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} a_0 + a_3 - \eta & a_1 \\ a_1 & a_0 - a_3 - \eta \end{vmatrix} &= (a_0 + a_3)(a_0 - a_3) - 2\eta a_0 + \eta^2 - a_1^2 = 0 \\ \eta_{1,2} &= \frac{2a_0 \pm \sqrt{4a_0^2 - 4(a_0^2 - a_3^2 - a_1^2)}}{2} \\ E_{\pm} &\equiv \eta_{1,2} = a_0 \pm \sqrt{a_3^2 + a_1^2} \end{aligned}$$

Esplcitando questa scrittura, si ha:

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}{2}\right)^2 + \lambda^2 V^2} \\ E_+ &= E_1^{(0)} + \frac{\lambda^2 V^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^4) \\ E_- &= E_2^{(0)} - \frac{\lambda^2 V^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^4) \end{aligned}$$

dove nelle ultime scritture è sottinteso uno sviluppo in serie di Taylor al secondo ordine in  $\lambda$ .

**METODO PERTURBATIVO** Vogliamo adesso confrontare il risultato ottenuto con quello ottenibile tramite teoria delle perturbazioni. Applicando le formule descritte nella Sez. 11.1, si ha immediatamente:

$$E_1^{(1)} = \langle 1 | \hat{H}_1 | 1 \rangle = 0 \quad E_2^{(1)} = \langle 2 | \hat{H}_1 | 2 \rangle = 0$$

in quanto la perturbazione ha forma matriciale antidiagonale. Il primo ordine non nullo nella correzione perturbativa è almeno il secondo. Questo si calcola come:

$$\begin{aligned} E_1^{(2)} &= \frac{\langle 2 | \hat{H}_1 | 1 \rangle \langle 1 | \hat{H}_1 | 2 \rangle}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{\lambda^2 V^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \\ E_2^{(2)} &= \frac{\langle 1 | \hat{H}_1 | 2 \rangle \langle 2 | \hat{H}_1 | 1 \rangle}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = -\frac{\lambda^2 V^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \end{aligned}$$

e dunque si ottiene la stessa soluzione trovata tramite calcolo esatto.

### 11.1.2 Esempio: Oscillatore armonico unidimensionale

Vogliamo studiare l'effetto di una perturbazione lineare nella posizione su un oscillatore armonico unidimensionale. Dal Cap. 4 sappiamo che l'hamiltoniana imperturbata è data da:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \quad \epsilon_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

dove  $\epsilon_n$  sono le energie imperturbate. Sommiamo a questa hamiltoniana una perturbazione  $\hat{H}_1$ :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} + b\hat{x}$$

Vogliamo diagonalizzare l'hamiltoniana perturbata: anche stavolta seguiranno due metodi.

**CALCOLO ESATTO** Stiamo cercando gli stati  $|N\rangle$  che realizzino  $\hat{H}|N\rangle = E_N|N\rangle$ . Se svolgiamo il conto esplicito, compaiono due termini nella posizione: uno lineare e uno quadratico; possiamo quindi completare il quadrato:

$$\begin{aligned}\hat{H}|N\rangle &= \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} + b\hat{x} \right) |N\rangle \\ &= \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} + b\hat{x} + \frac{b^2}{2m\omega^2}\mathbb{1} - \frac{b^2}{2m\omega^2}\mathbb{1} \right) |N\rangle \\ &= \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \left( \hat{x} + \frac{b}{m\omega^2}\mathbb{1} \right)^2 - \frac{b^2}{2m\omega^2}\mathbb{1} \right] |N\rangle\end{aligned}$$

Sia adesso  $\hat{y}$  l'operatore definito come:

$$\hat{y} = \hat{x} + \frac{b^2}{m\omega^2}\mathbb{1}$$

La soluzione algebrica al problema agli autovalori per l'oscillatore armonico unidimensionale è trattata nel Cap. 4: in particolare, si dimostra che a partire dalle relazioni di commutazione tra impulso e posizione si può risalire ai livelli energetici quantizzati. Ora: dal momento che

$$[\hat{y}, \hat{p}] = [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{b}{m\omega^2}[\mathbb{1}, \hat{p}] = [\hat{x}, \hat{p}]$$

si deve necessariamente avere

$$\begin{aligned}\hat{H}|N\rangle &= \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{y}^2}{2} \right) |N\rangle - \frac{b^2}{2m\omega^2} |N\rangle \\ &= \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) |N\rangle - \frac{b^2}{2m\omega^2} |N\rangle \\ &= \left( \epsilon_N - \frac{b^2}{2m\omega^2} \right) |N\rangle = E_N |N\rangle\end{aligned}$$

Concludiamo che l'effetto di una perturbazione lineare  $b\hat{x}$  su questo sistema è uno *shift* di tutti i livelli energetici di un fattore  $-b^2/(2m\omega^2)$ .

**METODO PERTURBATIVO** Procediamo alternativamente tramite la teoria delle perturbazioni. Il primo termine correttivo in  $b$  alle energie è nullo per parità:

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle = b \langle n | \hat{x} | n \rangle = b \langle \hat{x} \rangle = 0$$

dunque si deve procedere almeno al second'ordine.

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | b\hat{x} | n \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{x} | n \rangle|^2}{\hbar\omega(n-m)} b^2$$

Il calcolo si svolge ricordando la relazione tra l'operatore posizione e gli operatori di salita e di discesa  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$ :

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad \text{con} \quad \begin{cases} \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \end{cases}$$

Ne segue che:

$$\begin{aligned}\langle m | \hat{x} | n \rangle &\propto \langle m | \hat{a} | n \rangle + \langle m | \hat{a}^\dagger | n \rangle \\ &= \alpha \langle m | n - 1 \rangle + \beta \langle m | n + 1 \rangle = \alpha \delta_{m,n-1} + \beta \delta_{m,n+1} \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}\end{aligned}$$

per cui nella sommatoria sopravvivono solamente i termini con indici contigui a  $n$ , cioè con  $m = n \pm 1$ :

$$\begin{aligned}E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{x} | n \rangle|^2}{\hbar \omega(n-m)} b^2 \\ &= \frac{|\langle n-1 | \hat{x} | n \rangle|^2}{\hbar \omega(n-(n-1))} b^2 + \frac{|\langle n+1 | \hat{x} | n \rangle|^2}{\hbar \omega(n-(n+1))} b^2 \\ &= \frac{b^2}{\hbar \omega} \frac{\hbar}{2m\omega} \left[ |\langle n-1 | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n \rangle|^2 - |\langle n+1 | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n \rangle|^2 \right] \\ &= \frac{b^2}{2m\omega^2} (n-n-1) = -\frac{b^2}{2m\omega^2}\end{aligned}$$

Concludiamo, coerentemente con quanto derivato per via diretta, che i livelli energetici subiscono uno *shift* negativo:

$$E_n = \epsilon_n - \frac{b^2}{2m\omega^2} \quad n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$$

**NOTA** Questa derivazione **non** funziona nel caso dell'oscillatore armonico tridimensionale: il motivo è che lo spettro, in tal caso, è degenere - come derivato nel Cap. 7. Nelle prossime sezioni è trattata l'estensione della Teoria delle perturbazioni al caso degenere.

## 11.2 DEGENERAZIONE NEL CASO TIME-INDEPENDENT

Nel formalismo introdotto in questo capitolo, supponiamo di avere una degenerazione dello spettro imperturbato su  $R = R(n)$  stati, tutti corrispondenti all'autovalore  $E_n^{(0)} = \epsilon_n$ , che generano l'autospazio  $n$ :

$$\exists \{|n_1\rangle, \dots, |n_R\rangle\} \quad \text{t.c.} \quad \hat{H}_0 |n_1\rangle = \epsilon_n |n_1\rangle \quad \dots \quad \hat{H}_0 |n_R\rangle = \epsilon_n |n_R\rangle$$

In questa situazione, le espressioni (11.8) e (11.9) sono in generale mal definite. Per vederlo bene, consideriamo ad esempio come sarebbe la (11.8) nel caso di spettro degenere, per un generico  $|n_r\rangle$ :

$$\left| \psi_{n_r}^{(1)} \right\rangle = \sum_{m \neq n_r} |m\rangle \frac{\langle m | \hat{H}_1 | n_r \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m}$$

Siccome lo spettro presenta una degenerazione, quando nella somma dobbiamo considerare i termini con  $m = n_s$  - dove  $s \neq r$  e  $|n_s\rangle$  è uno degli altri vettori di base del sottospazio degenere - abbiamo una divergenza, poiché il denominatore si annulla, ma non è affatto assicurato il contestuale annullamento del numeratore  $\langle n_s | \hat{H}_1 | n_r \rangle$ .

Se fosse vero quest'ultimo fatto, o in altri termini se la base che stiamo usando fosse tale da diagonalizzare nell'autospazio  $n$  l'hamiltoniano di perturbazione  $\hat{H}_1$ , allora l'espressione (11.8) sarebbe perfettamente utilizzabile.

In generale, la base in cui risolviamo  $\hat{H}_0$  non gode di questa proprietà, quindi dovremo cambiare la base in cui abbiamo scritto  $\hat{H}_1$ , almeno limitatamente agli autospazi degeneri.

Se consideriamo l'equazione (11.2), l'espressione all'ordine zero

$$\left( \hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right) \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = 0$$

dove  $E_n^{(0)} = \epsilon_n$ , non ci permette di identificare gli  $R$  stati  $\left| \psi_{n_r}^{(0)} \right\rangle$ <sup>1</sup>. Questo accade poiché tale espressione è soddisfatta da qualsiasi combinazione lineare degli autostati  $|n_r\rangle$  di  $\hat{H}_0$ , relativi alla degenerazione energetica:

$$\left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = c_1 |n_1\rangle + \cdots + c_R |n_R\rangle \quad c_i \in \mathbb{C}$$

In questo marasma di combinazioni lineari, stiamo cercando soltanto quelle che permettono di soddisfare l'equazione (11.2). Chiaramente, il loro numero è  $R$ , ed avranno tutte la forma

$$\left| \psi_{n_r}^{(0)} \right\rangle = \sum_{j=1}^R c_{rj} |n_j\rangle \quad (11.10)$$

dove usiamo come indice  $r = 1, \dots, R$ .

Per caratterizzarle, dobbiamo salire all'ordine successivo. Consideriamo l'equazione

$$\left( \hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right) \left| \psi_{n_r}^{(1)} \right\rangle = \left( E_n^{(1)} - \hat{H}_1 \right) \left| \psi_{n_r}^{(0)} \right\rangle$$

e applichiamo a entrambi i lati il *bra*  $\langle n_s |$ , dove  $H_0 |n_s\rangle = E_n^{(0)} |n_s\rangle$ :

$$0 = \langle n_s | \left( \hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right) \left| \psi_{n_r}^{(1)} \right\rangle = \langle n_s | \left( E_n^{(1)} - \hat{H}_1 \right) \left| \psi_{n_r}^{(0)} \right\rangle$$

dove l'annullamento del membro di sinistra si vede banalmente applicando sul *bra* l'hamiltoniana imperturbata. Esplicitando la combinazione lineare:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle n_s | \left( E_n^{(1)} - \hat{H}_1 \right) \sum_{j=1}^R c_{rj} |n_r\rangle \\ &= \sum_{j=1}^R E_n^{(1)} \langle n_s | n_j \rangle c_{rj} - \sum_{j=1}^R \langle n_s | \hat{H}_1 | n_j \rangle c_{rj} \end{aligned}$$

Sfruttando l'ortonormalità della base completa di autostati dell'hamiltoniana:

$$\sum_{j=1}^R \langle n_s | \hat{H}_1 | n_j \rangle c_{rj} = E_n^{(1)} c_{rs} \quad (11.11)$$

Se guardiamo il vettore dei coefficienti  $\mathbf{c}_r$ , questa è un'equazione agli autovectori ristretta al sottospazio  $n$  di autostati degeneri relativi all'energia imperturbata  $\epsilon_n$ :

$$A_{sr'} \mathbf{c}_{r'}^{(r)} = E_n^{(1)} \mathbf{c}_{r'}^{(r)}$$

dove  $A$  è la matrice di  $\hat{H}_1$  ristretta al sottospazio  $n$ .

Quindi gli autovettori di ordine zero  $\left| \psi_{n_r}^{(0)} \right\rangle$  diagonalizzano la matrice  $\langle n_s | \hat{H}_1 | n_j \rangle$  nell'autospazio imperturbato di indice  $n$ , e dobbiamo utilizzare

questi per riscrivere la matrice di  $\hat{H}_1$ . Ciò significa usare come base gli autovettori di ordine zero riportati in equazione (11.10) con i coefficienti determinati tramite la condizione (11.11). Così facendo, le espressioni (11.8) e (11.9) non sono più critiche, dal momento che la diagonalizzazione, assicurata dalla (11.11), garantisce  $\langle m|\hat{H}_1|n\rangle = 0$  ogni volta che  $(\epsilon_n - \epsilon_m) = 0$ .

### 11.2.1 Un esercizio esemplificativo

Consideriamo di aver già diagonalizzato l'operatore  $\hat{H}_0$ , la cui matrice è

$$H_0 = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \eta \end{pmatrix}$$

con base di autovettori

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Aggiungiamo una perturbazione  $\lambda\hat{H}_1$  con matrice

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & v & u \\ v & 0 & y \\ u & y & z \end{pmatrix} \quad \text{dove } u, v, y, z \in \mathbb{R}$$

Calcoliamo  $E_n^{(1)}$ ,  $|\psi_n^{(0)}\rangle$  e  $|\psi_n^{(1)}\rangle$ .

L'autospazio generato da  $|1\rangle$  e da  $|2\rangle$  è degenere nell'energia imperturbata  $\epsilon$ , quindi non usiamo la base  $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ , ma diagonalizziamo  $\hat{H}_1$  nell'autospazio degenere. Se ci restringiamo in tale sottospazio,  $H_1$  ha la forma

$$H_1|_{|1\rangle, |2\rangle} = \begin{pmatrix} 0 & v \\ v & 0 \end{pmatrix}$$

Questa matrice ha come autovettori

$$|\psi_1^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \quad |\psi_2^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)$$

relativi rispettivamente agli autovalori  $+v$  e  $-v$ . Siccome l'autospazio generato da  $|3\rangle$  è non degenere, possiamo tenere

$$|\psi_3^{(0)}\rangle = |3\rangle$$

Utilizzando questa nuova base

$$|\psi_i^{(0)}\rangle \quad \text{con } i = 1, 2, 3$$

riscriviamo la matrice dell'hamiltoniano di perturbazione  $\hat{H}_1$  come

$$H'_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2}v & 0 & u+y \\ 0 & -\sqrt{2}v & u-y \\ u+y & u-y & \sqrt{2}z \end{pmatrix}$$

e notiamo che, finalmente, questa è diagonale nell'autospazio degenero.

Utilizzando le formule (11.7) e (11.8), troviamo per  $E_n^{(1)}$

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \langle \psi_1^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_1^{(0)} \rangle = v \\ E_2^{(1)} &= \langle \psi_2^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_2^{(0)} \rangle = -v \\ E_3^{(1)} &= \langle \psi_3^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_3^{(0)} \rangle = z \end{aligned}$$

e per le correzioni al prim'ordine degli autovettori  $|\psi_n^{(1)}\rangle$  si ha

$$\begin{aligned} |\psi_1^{(1)}\rangle &= |3\rangle \frac{\langle 3 | \hat{H}_1 | \psi_1^{(0)} \rangle}{\epsilon - \eta} = \frac{u+y}{\sqrt{2}} \frac{1}{\epsilon - \eta} |3\rangle \\ |\psi_2^{(1)}\rangle &= |3\rangle \frac{\langle 3 | \hat{H}_1 | \psi_2^{(0)} \rangle}{\epsilon - \eta} = \frac{u-y}{\sqrt{2}} \frac{1}{\epsilon - \eta} |3\rangle \\ |\psi_3^{(1)}\rangle &= |\psi_1^{(0)}\rangle \frac{\langle \psi_1^{(0)} | \hat{H}_1 | 3 \rangle}{\eta - \epsilon} + |\psi_2^{(0)}\rangle \frac{\langle \psi_2^{(0)} | \hat{H}_1 | 3 \rangle}{\eta - \epsilon} \\ &= |\psi_1^{(0)}\rangle \frac{u+y}{\sqrt{2}} \frac{1}{\eta - \epsilon} + |\psi_2^{(0)}\rangle \frac{u-y}{\sqrt{2}} \frac{1}{\eta - \epsilon} \\ &= |1\rangle \frac{u}{\eta - \epsilon} + |2\rangle \frac{y}{\eta - \epsilon} \end{aligned}$$

Notiamo che, per calcolare la correzione al primo ordine  $|\psi_3^{(1)}\rangle$ , avremmo potuto utilizzare direttamente l'equazione (11.8) avvalendoci dei vettori di base originali  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  e  $|3\rangle$ , scrivendo

$$|\psi_3^{(1)}\rangle = |1\rangle \frac{\langle 1 | \hat{H}_1 | 3 \rangle}{\eta - \epsilon} + |2\rangle \frac{\langle 2 | \hat{H}_1 | 3 \rangle}{\eta - \epsilon}$$

Questo è dovuto al fatto che l'autostato  $|3\rangle$  non è interessato dalla degenerazione energetica, cioè si trova al di fuori dell'autospazio bidimensionale con autovalore  $\epsilon$ , ed il problema della divergenza al denominatore non si pone: in altri termini la diagonalizzazione di  $\hat{H}_1$  nel sottospazio degenero è importante solo per i vettori appartenenti a tale sottospazio.

**RISOLUZIONE DELLA DEGENERAZIONE:** Nell'esercizio appena esposto, abbiamo un esempio lampante di come una perturbazione possa *risolvere* una degenerazione. Inizialmente, gli stati  $|1\rangle$  e  $|2\rangle$  erano energeticamente degeneri, cioè condividevano il medesimo valore dell'energia. La struttura all'ordine zero dei livelli energetici vedeva due stati con autovalore  $\epsilon$  ed uno solo con autovalore  $\eta$ . Le correzioni al primo ordine  $E_i^{(1)}$  possono in generale *shiftare* i livelli energetici relativi a stati differenti di quantità diverse. Se questo avviene, come accade nell'esempio, gli stati di base non sono più degeneri: se ne è evidenziata la *struttura fine*, non visibile all'ordine zero.

### 11.3 PRIMA CORREZIONE RELATIVISTICA PER L'ATOMO DI IDROGENO

Come già anticipato in Parte II, Sez. 3.1, possiamo estendere la trattazione quanto-meccanica dell'atomo di idrogeno al caso in cui l'elettrone sia dotato di spin.

In tale trattazione abbiamo tuttavia tralasciato gli aspetti riguardanti l'energia, senza modificare l'hamiltoniano del sistema. Ciò implica una degenerazione doppia per ogni valore del numero quantico principale  $n$ : lo spin introduce un grado di libertà che si aggiunge a quelli spaziali, cioè ai tre numeri quantici  $n, l, m$ , e risulta indipendente da essi, rendendo immediata la scrittura degli autostati dell'hamiltoniano nella forma di prodotto tensore tra lo *stato orbitale* e lo *stato di spin*:

$$\begin{aligned} |nlm\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ |nlm\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

Una descrizione di questo tipo è tuttavia insufficiente, se non poco consistente. Lo spin di una particella è una proprietà che emerge da una trattazione relativistica della Meccanica Quantistica, e che sin ora non abbiamo considerato.

Possiamo tuttavia impiegare le nozioni di Relatività Ristretta note fino a questo punto per stimare quali possano essere – ai primi ordini – le correzioni necessarie, facendo riferimento anche agli strumenti della teoria delle perturbazioni sviluppati in questo capitolo.

Per la teoria dell'atomo di idrogeno siamo partiti dall'hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{k}{\hat{r}} \quad (11.12)$$

dove  $k = e^2 / (4\pi\epsilon_0)$ . Questo hamiltoniano è inadatto a descrivere un sistema relativistico, per i due seguenti motivi

- il termine cinetico  $\hat{\mathbf{p}}^2 / (2m)$ ; la cinematica relativistica mostra che questo termine è in realtà una versione approssimata dell'energia cinetica nel limite  $v \ll c$  (o equivalentemente  $p \ll mc$ )

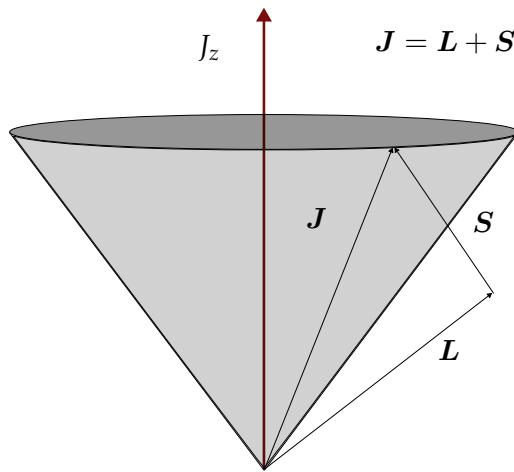
$$T = E - mc^2 = mc^2 \left[ \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2c^2}} - 1 \right]$$

Se sviluppiamo  $T$  in serie di Taylor attorno al valore  $\frac{p}{mc} = 0$ , giungiamo a

$$T \simeq \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \mathcal{O}\left(\frac{p^6}{m^6c^4}\right) \quad (11.13)$$

dove possiamo riconoscere il primo ordine di approssimazione.

- il termine di potenziale  $k/\hat{r}$  è formalmente inappropriato; esso è associato ad una interazione a distanza *istantanea*, sicuramente in disaccordo con il limite relativistico di propagazione dei segnali, sancito dalla velocità della luce. Si tratta di un potenziale statico coulombiano, e trascura di certo gli effetti legati ai potenziali ritardati.



**Figura 11.1:** Il momento angolare intrinseco  $\mathbf{S}$  è un termine che contribuisce al momento angolare totale  $\mathbf{J}$  ed entra nell'Hamiltoniana di perturbazione  $\hat{H}_1^{LS}$ , che tiene conto dell'accoppiamento con il momento angolare spaziale  $\mathbf{L}$ .

Possiamo curare queste due criticità con correzioni relativistiche al modello. In particolare, per quanto riguarda la seconda correzione, non tratteremo i potenziali ritardati, ma faremo uso di un risultato che si ottiene dall'equazione di Dirac nel limite non relativistico; in tale limite, nello sviluppo dell'hamiltoniano sopravvive il curioso termine

$$\hat{H}_1^{LS} = \frac{k}{2m_e^2 c^2 r^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (11.14)$$

che è testimone dell'effetto noto come **interazione spin-orbita**.

Questo effetto può essere giustificato (o quantomeno stimato) in modo semi-quantitativo con strumenti in nostro possesso nel seguente modo: per un sistema fisico dotato di momento magnetico  $\mu$  ed immerso in un campo magnetico esterno  $\mathbf{B}$  l'hamiltoniano presenta il termine di interazione

$$\hat{H}_1^{\mu B} = -\mu \cdot \mathbf{B}$$

Ragionando in termini semi-classici – assumendo che persino nei livelli energetici con  $l = 0$  si possa modellizzare l'elettrone come in una orbita – nel sistema di riferimento dell'elettrone è presente un campo magnetico  $\mathbf{B}'$  non nullo, indotto da quelle componenti del campo elettrico generato dal nucleo che sono ortogonali alla velocità dell'elettrone stesso; ciò segue dalle trasformazioni relativistiche per i campi magnetici

$$\mathbf{B}' = \gamma \left( \mathbf{B} - \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \right) \equiv -\gamma \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E}$$

dove possiamo assumere  $\gamma \approx 1$  nel limite non-relativistico.

Dalla teoria di Dirac emerge che l'elettrone, in quanto dotato di spin, debba possedere un **momento magnetico** intrinseco antiparallelo ad  $\mathbf{S}$ , che al primo ordine dominante si riduce a

$$\mu_e \simeq -\frac{e}{m_e c} \mathbf{S}$$

ed in questo contesto deve interagire con il campo magnetico visto nel sistema di quiete dell'elettrone.

Quidi il termine di interazione tra **momento magnetico** e **campo magnetico**

$$\hat{H}_1^{\mu_e B'} = -\mu_e \cdot \mathbf{B}'$$

si può riscrivere come un termine di accoppiamento tra **spin** e **momento angolare orbitale** dell'elettrone, come segue

$$\hat{H}_1^{LS} = \frac{k}{m_e^2 c^2 r^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

passando per la definizione di momento angolare orbitale  $\mathbf{L} = m_e \mathbf{r} \times \mathbf{v}$  e considerando (approssimativamente) un campo elettrico che sia sempre ortogonale alla velocità dell'elettrone in orbita qualsiasi, della forma

$$\mathbf{E} = \frac{k}{r^3} \mathbf{r}$$

L'espressione appena trovata differisce da quella in Eq. (11.14) per un fattore 2 al denominatore. Questo fattore risulta dal fatto che la trasformazione per il campo magnetico  $\mathbf{B}$  non è propriamente effettuata tra due sistemi di riferimento inerziali. Si può dimostrare che la formula corretta è proprio quella in Eq. (11.14), adoperando la trasformazione corretta.

Notiamo quindi che abbiamo a che fare con due fonti di perturbazione possibili per il nostro sistema. La teoria delle perturbazioni assicura che i primi ordini di due perturbazioni indipendenti seguono un principio di sovrapposizione lineare, e possono essere quindi trattate separatamente<sup>2</sup>. Sceglieremo di partire dalla prima sorgente di perturbazione, ovvero la correzione alla cinematica non-relativistica. Questa perturbazione non chiama in causa lo spin dell'elettrone, a differenza della correzione dovuta all'interazione spin-orbita, e per questo nella sua trattazione potremo fare riferimento al solo stato orbitale.

In entrambi i casi, il nostro obiettivo sarà quello di indagare gli effetti che queste correzioni hanno sulla degenerazione dei livelli energetici nell'atomo di idrogeno. Per quanto sappiamo sino ad ora, ad un dato valore del numero quantico principale  $n$  corrisponde una degenerazione di autostati dell'hamiltoniano, ciascuno caratterizzato dal numero quantico orbitale  $l$

$$l = 0, 1, \dots, n - 1$$

ed aventi tutti la stessa energia

$$E_n^{(0)} = -\frac{1}{n^2} \frac{m}{2} \alpha^2 c^2$$

dove la notazione al membro sinistro è voluta dall'approccio perturbativo che seguirà.

Classicamente parlando, ci aspettiamo che un momento angolare orbitale – riconducibile al numero quantico  $l$  – fornisca un contributo in termini di energia. Ad esempio, per il guscio  $n = 2$  sembra ragionevole che l'energia possa essere diversa tra i casi  $l = 0$  ed  $l = 1$ . Tenteremo quindi di risolvere questa **struttura fine** per l'atomo di idrogeno. Siamo pronti ad applicare le tecniche sviluppate in questo capitolo: procediamo con i due casi.

**CORREZIONE CINEMATICA** Iniziamo con la correzione relativistica di carattere puramente cinematico. Non consideriamo dunque lo spin in modo esplicito, restando ancora a cavallo tra il modello precedente e la prima correzione relativistica completa. Possiamo considerare questa perturbazione come intermedia, e indipendente da quella che seguirà.

Scriviamo l'Hamiltoniano

$$\hat{H} \simeq \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{k}{\hat{r}} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1^K \quad (11.15)$$

L'operatore  $\hat{H}_1^K$  è *scalare*: infatti, sappiamo per definizione (si veda a tal proposito Cap. 8) che gli operatori scalari sono quelli che commutano col **momento angolare totale**, in questa sede rappresentato proprio da  $\hat{\mathbf{L}}$ : questo si dimostra rapidamente ricordando le regole di commutazione tra impulso e momento angolare

$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{p}_k$$

*Dimostrazione.* Se  $\hat{\mathbf{p}}^2$  commuta con  $\hat{L}_i$ , abbiamo finito: per due generici operatori  $\hat{A}, \hat{B}$  troviamo che

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}^2] &= \hat{A}\hat{B}\hat{B} - \hat{B}\hat{B}\hat{A} \\ &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}] = \{[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}\} \end{aligned}$$

dove abbiamo utilizzato le proprietà dei commutatori e la definizione di anticommutatore. Appare quindi evidente che

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \implies [\hat{A}, \hat{B}^2] = 0$$

In questo caso vale:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{p}_j\hat{p}_j] &= \hat{p}_j[\hat{L}_i, \hat{p}_j] + [\hat{L}_i, \hat{p}_j]\hat{p}_j \\ &= i\hbar\epsilon_{ijk}(\hat{p}_j\hat{p}_k + \hat{p}_k\hat{p}_j) \\ &= 2i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{p}_k = 0 \end{aligned}$$

che risulta uguale a 0 perché

$$\epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{p}_k = -\epsilon_{ikj}\hat{p}_j\hat{p}_k = -\epsilon_{ijk}\hat{p}_k\hat{p}_j = -\epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{p}_k$$

dove gli indici  $j$  e  $k$  sono sommati, nella seconda uguaglianza utilizziamo la mutezza degli indici su cui corre la somma e nell'ultimo la commutatività delle componenti dell'impulso  $\hat{p}_i$ .  $\square$

Segue la tesi: l'operatore  $\hat{\mathbf{p}}^4$  è *scalare*, cioè commuta con ciascuna componente del **momento angolare totale** e quindi valgono:

$$[\hat{L}_z, \hat{H}_1^K] = 0 \quad [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{H}_1^K] = 0$$

per cui, se ci restringiamo al sottospazio  $n$ -esimo nello spazio di Hilbert considerato, possiamo dire che in tale sottospazio la base  $|lm\rangle$  diagonalizza simultaneamente la perturbazione  $\hat{H}_1^K$  e gli operatori  $\hat{L}_z$  ed  $\hat{\mathbf{L}}^2$ .

Ma tutto ciò è indipendente dal sottospazio  $n$  considerato, per cui abbiamo infine che  $\hat{H}_1^K$  è diagonale nella base  $|nlm\rangle$ , e si ha

$$\hat{H}_1^K |nlm\rangle = E_{nl}^{(K)} |nlm\rangle$$

per cui la correzione allo spettro energetico si ha quasi immediatamente, una volta calcolato

$$E_{nl}^{(K)} = \langle nlm | \hat{H}_1^K | nlm \rangle$$

Notando che

$$\hat{\mathbf{p}}^4 = 4m^2 \left( \hat{H}_0 + \frac{k}{\hat{r}} \right)^2$$

si può mostrare come ne derivi

$$E_{nl}^{(K)} = -\frac{\alpha^2 |E_n^{(0)}|}{4n^2} \left( \frac{8n}{2l+1} - 3 \right)$$

dove  $\alpha$  è la costante di struttura fine

$$\alpha = \frac{ke^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

Per cui, a questo stadio, abbiamo (ricordiamo che  $E_n^{(0)} < 0$ )

$$E_{n,l} \simeq E_n^{(0)} + E_{nl}^{(K)} = E_n^{(0)} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{4n^2} \left( \frac{8n}{2l+1} - 3 \right) \right]$$

Abbiamo trovato esattamente quanto cercato: l'energia dell'elettrone in un dato stato non dipende più solamente dal numero quantico principale  $n$ , ma anche dal numero quantico orbitale  $l$ .

Non solo, notiamo anche che l'energia cresce con  $l$ , consistentemente con quanto accade nei moti orbitali classici. Ciò sembra giustificare qualitativamente la regola dell'*Aufbau* per l'ordinamento delle energie negli orbitali atomici. Come anticipato, questa correzione non tiene affatto conto dello **spin** dell'elettrone, al quale riserviamo il paragrafo successivo.

**CORREZIONE DOVUTA ALLO SPIN** Aggiungiamo ora il grado di libertà aggiuntivo: lo spin. Come già visto, questo ci obbliga ad eseguire un prodotto tensoriale tra lo spazio di Hilbert su cui opera  $\hat{H}_0$  – con base  $\{|nlm\rangle\}_{nlm}$  – e lo spazio degli spinori a due componenti – che ha elementi di base  $|ss_z\rangle$  – in modo da poter controllare tutte le combinazioni possibili tra stato di orbitale e stato di spin.

Siamo nelle ipotesi di perturbazioni indipendenti, dunque ora l'hamiltoniano *imperturbato* sarà per noi

$$\hat{H}'_0 \equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_1^K$$

ovvero quello totale del paragrafo precedente, perturbato dall'operatore

$$\hat{H}_1^{LS} = \frac{ke}{2m_e^2 c^2 \hat{r}^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

dove con un leggero abuso di notazione e ovvio significato dei simboli abbiamo posto al denominatore l'operatore  $\hat{r}$ .

Questo ci autorizza a correggere ulteriormente lo spettro energetico tramite una perturbazione al *primo ordine*, per cui la correzione sarà stimabile diagonalizzando il tensore di componenti

$$\langle n'l'm'ss'_z | \hat{H}_1^{LS} | nlms s_z \rangle$$

ovvero l'operatore  $\hat{H}_1^{LS}$  scritto nella base prodotto dello spazio di Hilbert in esame; qui  $s \equiv 1/2$  e lasciamo  $n$  libero, restringendoci ad un sottospazio  $n$ -esimo qualsiasi, alla ricerca della diagonalizzabilità simultanea del paragrafo precedente, questa volta tra gli operatori  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{S}_z$ ,  $\hat{\mathbf{S}}^2$  e  $\hat{H}_1^{LS}$ .

Scopriamo ben presto che la nostra base non può funzionare: benché  $\hat{H}_1^{LS}$  commuti separatamente sia con  $\hat{\mathbf{L}}^2$  e  $\hat{\mathbf{S}}^2$ , come si dimostra rapidamente, non commuta con le proiezioni  $\hat{L}_z$  e  $\hat{S}_z$ :

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{L}_z] &= i\hbar (\hat{L}_x \hat{S}_y - \hat{L}_y \hat{S}_x) \neq 0 \\ [\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{S}_z] &= i\hbar (\hat{L}_y \hat{S}_x - \hat{L}_x \hat{S}_y) \neq 0 \end{aligned}$$

ma commuta con la loro somma  $\hat{L}_z + \hat{S}_z$  (ricordiamo che per ogni componente  $i, j$  vale  $[\hat{L}_i, \hat{S}_j] = 0$ ); questo ha perfettamente senso, a ben pensarci, perché **il sistema è globalmente invariante sotto rotazioni** e quindi il momento angolare “di riferimento” è

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$$

In effetti, rispetto a  $\hat{\mathbf{J}}$  si hanno le proprietà di commutazione desiderate: il termine di interazione è un operatore *scalare*, cioè commuta con ciascuna proiezione del momento angolare: assumendo senza perdita di generalità  $\hat{n}$  una delle direzioni cartesiane, si ha

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}] &= [\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{L}_i + \hat{S}_i] \\ &= [\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{L}_i] + [\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{S}_i] = 0 \end{aligned}$$

dimostrabile come sopra. Da questo segue automaticamente che

$$[H_1^{LS}, \hat{j}_z] = 0 \quad [H_1^{LS}, \hat{\mathbf{J}}^2] = 0$$

La prima delle due uguaglianze può anche essere inquadrata nella seguente prospettiva più fisica e meno algebrica: se il sistema è globalmente invariante sotto rotazioni, lo è anche (ovviamente) sotto rotazioni attorno all'asse  $z$ ; essendo  $\hat{j}_z$  il generatore del gruppo delle rotazioni attorno a tale asse, deve valere (ricordiamo quanto esposto al Cap. 3)

$$0 = [\hat{H}, \hat{j}_z] = \underbrace{[\hat{H}_0, \hat{j}_z]}_{=0} + [\hat{H}_1^{LS}, \hat{j}_z]$$

dal momento che il sistema imperturbato descritto da  $\hat{H}_0$  è anch'esso globalmente invariante sotto rotazioni.

Questi risultati ci suggeriscono molto chiaramente che continuare a usare questa base è un'inutile complicazione: del resto, il sistema è invariante sotto rotazioni globali, quindi perché non sfruttare la simmetria? Conviene dunque cambiare base; l'alternativa sarebbe lanciarsi nella diagonalizzazione di una matrice nemmeno ben definita.

Procediamo allora con il cambiamento di base

$$|n l m s s_z\rangle \longrightarrow |n l s J M\rangle$$

ricordando che in questo caso  $s \equiv \frac{1}{2}$  e quindi

$$J = l \pm \frac{1}{2} \quad M = m + s_z$$

secondo quanto ricavato in Sez. 3.1.

Verifichiamo che  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$  è diagonale in questa nuova base, cioè verifichiamo che questa è una base di autostati; questo operatore scalare può essere riscritto nel seguente modo

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2]$$

dal momento che  $[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}] = 0$ : ricordiamo ancora una volta che agiscono su spazi separati. Applicandolo all'elemento di base trasformato otteniamo

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} |nlJM\rangle &= \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2] |nlJM\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)] |nlJM\rangle\end{aligned}$$

Quindi possiamo confermare che l'operatore scalare  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$  è diagonale in questa nuova base. Ora: l'hamiltoniana completa si scrive come

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1^K + \hat{H}_1^{LS}$$

e, per quanto appena visto, nella nuova base gli autovalori avranno un'esplicita dipendenza da  $l$  introdotta dall'interazione spin-orbita. Per questo motivo possiamo considerare risolta la degenerazione dello spettro **limitatamente a  $l$** , e quindi calcolare su questa base la perturbazione dei livelli energetici. La correzione dello spettro al primo ordine sarà semplicemente (notando che  $s = 1/2$ , quindi  $s(s+1) = 3/4$ )

$$\begin{aligned}E_{nl}^{(LS)} &= \left\langle nl \frac{1}{2} JM \middle| \hat{H}_1^{LS} \middle| nl \frac{1}{2} JM \right\rangle \\ &= \left\langle nl \frac{1}{2} JM \middle| \frac{ke}{2m_e^2 c^2 \hat{r}^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \middle| nl \frac{1}{2} JM \right\rangle \\ &= \frac{ke\hbar^2}{4m_e^2 c^2} \left[ J(J+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \left\langle nl \frac{1}{2} JM \middle| \frac{1}{\hat{r}^3} \middle| nl \frac{1}{2} JM \right\rangle\end{aligned}$$

Resterebbe da calcolare il termine

$$\begin{aligned}\left\langle nl \frac{1}{2} JM \middle| \frac{1}{\hat{r}^3} \middle| nl \frac{1}{2} JM \right\rangle &\equiv \langle nl | \frac{1}{\hat{r}^3} | nl \rangle \left\langle \frac{1}{2}, J, M \middle| \frac{1}{\hat{r}^3}, J, M \right\rangle \\ &= \langle n, l | \frac{1}{\hat{r}^3} | n, l \rangle = \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl}\end{aligned}$$

dove si è usata la normalizzazione degli autostati presi singolarmente, ed il fatto che l'operatore associato alla distanza nucleo-elettrone non ha motivo di dipendere dai numeri quantici  $s, J, M$ . Il calcolo di questo valor medio si esegue passando in rappresentazione delle coordinate ricordando che nelle funzioni d'onda dell'atomo di idrogeno la dipendenza radiale è raccolta interamente in  $R_{nl}$ :

$$\left\langle \frac{1}{r^k} \right\rangle_{nl} = \int_0^{+\infty} r^2 dr \frac{1}{r^k} R_{nl}^2(r)$$

che nel caso  $k = 3$  si dimostra essere

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{2}{n^3 l(l+1)(2l+1)r_B^3}$$

con  $r_B$  raggio di Bohr. Abbiamo quindi

$$E_{nl}^{(LS)} = \frac{2}{n^3 l(l+1)(2l+1)r_B^3} \frac{ke\hbar^2}{4m_e^2 c^2} \left[ J(J+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right]$$

e ricordando che  $E_n^{(0)} = -\frac{m}{2n^2} \alpha^2 c^2$ , si ricava la forma finale per la correzione allo spettro dovuta all'accoppiamento spin-orbita

$$E_{nl}^{(LS)} = -\frac{E_n^{(0)} \alpha^2}{n} \left[ \frac{J(J+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1)(2l+1)} \right]$$

dove osserviamo nuovamente una dipendenza sia da  $n$  che da  $l$  (esplicitamente e attraverso  $J$ ) dell'energia.

Unendo a questo anche il risultato della sezione precedente, otteniamo lo spettro corretto ai primi ordini dalla *struttura fine* dell'atomo di idrogeno

$$\begin{aligned} E_{n,l} &\simeq E_n^{(0)} + E_{n,l}^{(K)} + E_{n,l}^{(LS)} \\ &= E_n^{(0)} \left[ 1 + \underbrace{\frac{\alpha^2}{4n^2} \left( \frac{8n}{2l+1} - 3 \right)}_{\text{correzione relativistica}} - \underbrace{\frac{\alpha^2}{n} \frac{J(J+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1)(2l+1)}}_{\text{interazione spin-orbita}} \right] \end{aligned}$$

Per concludere, osserviamo che le correzioni allo spettro energetico sono indipendenti dal numero quantico  $M$ . Ciò è consistente con l'aver considerato un sistema fisico invariante sotto rotazioni globali, come visto nella procedura di correzione dovuta allo spin. Infatti, il sistema era già invariante sotto rotazioni prima che si considerasse lo spin dell'elettone – e questo si rispecchiava nella degenerazione del numero quantico magnetico  $m$ . Le perturbazioni introdotte in questa sezione sono inoltre *scalari* nel senso delle rotazioni globali, dunque non intaccano tale simmetria.

## 11.4 PERTURBAZIONI DIPENDENTI DAL TEMPO

L'approccio perturbativo può essere esteso al caso di termini perturbativi con esplicite dipendenze temporali. In questa sezione ci occuperemo di determinare l'effetto di un'hamiltoniana di perturbazione  $H_1(t)$ , esplicitamente dipendente dal tempo, su un'hamiltoniana imperturbata  $H_0$  (indipendente dal tempo) di cui supponiamo di conoscere la base di autostati  $\mathcal{B} = \{|n\rangle\}$  e lo spettro  $\{\epsilon_n\}$ . Al solito, il parametro  $\lambda$  è quello che scegliamo per parametrizzare la perturbazione e più avanti sarà il parametro di espansione della serie perturbativa. Tratteremo per semplicità il caso di **spettro discreto non degenere**.

Prendiamo dunque un'hamiltoniana della forma

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1(t)$$

Essendo questa esplicitamente dipendente dal tempo, la soluzione all'equazione di Schrödinger (2.4) non può essere quella proposta in (2.5), derivata nel caso di hamiltoniana indipendente dal tempo; una base di autostati per l'hamiltoniana non può essere estratta da queste equazioni.

Di conseguenza, una scelta naturale – soprattutto avendo coscienza del fatto che in teoria perturbativa le perturbazioni all'hamiltoniana imperturbata sono *piccole* – è usare come base dello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  la base degli autostati di  $\hat{H}_0$ . Essa sarà completa e ortonormale a ogni tempo, quindi per ogni stato  $|\psi\rangle$  esisterà un'espansione in termini della base scelta della forma

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} |n\rangle$$

(lavoriamo in unità  $\hbar = 1$ ) dove nel secondo passaggio abbiamo banalmente ridefinito tutti i coefficienti in modo da far comparire un termine di fase che risulterà comodo più avanti.

Ora: differentemente dal caso statico, in cui la probabilità di misurare un autostato  $\epsilon_k$  dell'energia è indipendente dal tempo, qui naturalmente si ha

$$\mathcal{P}_{\epsilon_k}(t) = |c_k(t)|^2$$

per cui possiamo sin da subito dire che quando un sistema viene sottoposto a una perturbazione *time-dependent*, l'evoluzione temporale di uno stato modifica la statistica osservativa della variabile dinamica "energia".

Quello che ci proponiamo di derivare è una forma esplicita per gli  $a_n(t)$ . Inizieremo studiando l'Equazione di Schrödinger per poi derivarne un'equazione ricorsiva su tali coefficienti introducendo l'effettiva approssimazione perturbativa.

**STUDIO DELL'EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER** L'Equazione di Schrödinger ha la forma

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

con condizione al contorno  $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_0\rangle$ . Esplicitando  $\hat{H}$  e applicandola a destra, riscriviamo la stessa equazione come

$$\begin{aligned} i\partial_t \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} |n\rangle &= [\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1(t)] \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} |n\rangle \\ i \sum_n \left[ \dot{a}_n(t) e^{-i\epsilon_n t} - i\epsilon_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} \right] |n\rangle &= \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} \epsilon_n |n\rangle \\ &\quad + \lambda \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} \hat{H}_1(t) |n\rangle \end{aligned}$$

Eliminiamo a destra e sinistra i termini identici, e applichiamo a sinistra di entrambi i membri il *bra*  $\langle m|$  (con  $|m\rangle \in \mathcal{B}$ ). Rimaniamo con l'equazione

$$\langle m| i \sum_n \dot{a}_n(t) e^{-i\epsilon_n t} |n\rangle = \lambda \langle m| \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} \hat{H}_1(t) |n\rangle$$

da cui, definendo la quantità  $\omega_{mn} = (\epsilon_m - \epsilon_n)/\hbar$  e sfruttando l'ortonormalità di  $\mathcal{B}$  (che può essere usata solo nel membro di sinistra, naturalmente), si trova in ultima analisi

$$\dot{a}_m(t) = -\lambda \frac{i}{\hbar} \sum_n \langle m| \hat{H}_1(t) |n\rangle e^{i\omega_{mn} t} a_n(t) \quad (11.16)$$

dove si è reintrodotta  $\hbar$ . Notiamo che fino ad ora non abbiamo introdotto alcuna approssimazione: questa equazione è esatta.

**ESPANSIONE PERTURBATIVA E RELAZIONE RICORSIVA** L'espansione in serie di potenze che eseguiamo adesso non è sullo spettro o sugli autostati, come nel caso della Sez. 11.1: piuttosto siamo interessati ad approssimare i coefficienti  $a_n(t)$ , in quanto la conoscenza di questi permette di estrarre l'informazione fisica sull'evoluzione della statistica associata alle misure di energia. Scriviamo dunque una serie di potenze della forma

$$a_n(t) = a_n^{(0)}(t) + \lambda a_n^{(1)}(t) + \lambda^2 a_n^{(2)}(t) + \dots$$

Se inseriamo questa espansione nell'Eq. (11.16) e confrontiamo i due lati dell'espressione ordine per ordine, è facile convincersi che vale la formula ricorsiva ( $\hbar = 1$ ):

$$\dot{a}_m^{(r)}(t) = -i \sum_n \langle m | \hat{H}_1(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn} t} a_n^{(r-1)}(t) \quad (11.17)$$

dal momento che il lato di destra di (11.16) ha già un ordine 1 in  $\lambda$  nell'elemento di matrice di  $\hat{H}_1(t)$ . Conviene notare il caso più semplice, quello dell'ordine zero: la formula (11.17) ci dice che per  $r = 0$

$$\partial_t a_n^{(0)}(t) = 0$$

cioé l'ordine più basso dell'espansione è indipendente dal tempo. Questo è senz'altro vero, e possiamo giustificarlo semplicemente: sappiamo che se poniamo  $\lambda = 0$  la soluzione all'Equazione di Schrödinger deve ridursi a quella indipendente dal tempo; la scrittura dello stato quantistico  $|\psi\rangle$  in termini della base di autostati stazionari dell'hamiltoniana, in tal caso, dà luogo a una combinazione lineare di tali autostati tramite coefficienti  $a_n(t) = a_n(0)$ , a meno di una fase. Questo implica allora che per

$$a_n(0) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} [a_n^{(0)}(t) + \lambda a_n^{(1)}(t) + \lambda^2 a_n^{(2)}(t) + \dots] = a_n^{(0)}(t)$$

cioé, in sostanza, l'ordine zero dell'espansione perturbativa è composto di costanti fissate dalle condizioni iniziali.

Giunti a questo punto il più è fatto: a partire da una perturbazione generica sappiamo calcolare ricorsivamente tutti i termini  $a_n^{(r)}$ . Nella prossima sezione ci proponiamo di applicare quanto appena trovato nel caso più semplice: quello dell'evoluzione di uno stato quantistico sottoposto a una perturbazione *time-dependent* per un tempo finito.

#### 11.4.1 Evoluzione di uno stato eccitato per un tempo finito

Supponiamo di aver preparato il sistema quantistico in un autostato  $|i\rangle$  di  $\hat{H}_0$ ; inseriamo poi una perturbazione del tipo

$$f(t)\hat{H}_1(t) = \begin{cases} \hat{H}_1(t) & \text{se } 0 \leq t \leq T \\ 0 & \text{se } t < 0 \vee t > T \end{cases}$$

quindi, per  $t < 0$ , si ha banalmente che

$$a_i = 1 \quad a_{n \neq i} = 0$$

Poiché l'hamiltoniana ha una dipendenza temporale solo per  $t \in [0, T]$ , fuori da quest'intervallo la probabilità di trovare il sistema con un'energia  $\epsilon_k$  deve essere stazionaria: in formule

$$\begin{array}{lll} \forall \epsilon_k \text{ autovalore di } \hat{H}_0 & \forall t_1, t_2 < 0 & \mathcal{P}_{\epsilon_k}(t_1) = \mathcal{P}_{\epsilon_k}(t_2) \\ & \forall t_3, t_4 > T & \mathcal{P}_{\epsilon_k}(t_3) = \mathcal{P}_{\epsilon_k}(t_4) \end{array}$$

che in generale saranno diverse. Tutta l'evoluzione statistica del sistema deve avvenire nell'intervallo  $[0, T]$ :<sup>3</sup> in particolare, data una qualsiasi energia  $\epsilon_k$ , sarà

$$\mathcal{P}_{\epsilon_k}(t > T) = |a_k(T)|^2$$

Supponiamo adesso di voler misurare la probabilità che alla fine dell'interazione misurando l'energia del sistema si ottenga  $\epsilon_f \neq \epsilon_i$  (il che non coincide con la probabilità che il sistema sia nello stato  $|f\rangle$ ). Guardando l'espansione perturbativa del coefficiente

$$a_f(t) = \underbrace{a_f^{(0)}(t)}_{a_j(0)=\delta_{ij}} + \lambda a_f^{(1)}(t) + \lambda^2 a_f^{(2)}(t) + \dots$$

si vede subito che, per  $f \neq i$ , il primo ordine non nullo è il primo, dal momento che lo stato di partenza è  $|i\rangle$ . Segue che, in prima approssimazione

$$\mathcal{P}_{\epsilon_f}(t > T) = |a_f(t > T)|^2 = \left| \lambda a_f^{(1)}(T) \right|^2 + \mathcal{O}(\lambda^4)$$

Vogliamo quindi scrivere  $a_f^{(1)}(T)$ : l'espressione si trova immediatamente dall'Eq. (11.17)

$$\dot{a}_f^{(1)}(t) = -i \sum_n \langle f | \hat{H}_1(t) | n \rangle e^{i\omega_{fn}t} \underbrace{a_n^{(0)}(t)}_{=\delta_{ni}} = -i \langle f | \hat{H}_1(t) | i \rangle e^{i\omega_{fi}t}$$

valida per  $t \in [0, T]$ . Concludiamo che

$$a_f(T) \simeq \lambda a_f^{(1)}(T) = -i\lambda \int_0^T \langle f | \hat{H}_1(t') | i \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt'$$

il che permette di ricavare  $\mathcal{P}_{\epsilon_f}(t > T)$  all'ordine più basso in  $\lambda$ .

Siamo pronti ad applicare questo risultato ad un sistema fisico: nella prossima sezione ci avvarremo di questi risultati nello studio di una perturbazione "elettromagnetica" su un sistema in un autostato dell'hamiltoniana imperturbata, il che fornirà il primo semplice modello al fenomeno della resonanza di un'onda e.m. su un sistema atomico con conseguente eccitazione e salto energetico.

#### 11.4.2 Perturbazione elettromagnetica

Nella sezione precedente abbiamo visto come calcolare, all'ordine più basso, la probabilità che su un sistema che parte da un autostato dell'hamiltoniana si misuri, dopo una perturbazione di durata temporale finita, un'energia diversa da quella relativa allo stato di partenza. Supponiamo di avere un'hamiltoniana di perturbazione periodica, cioè della forma

$$\hat{H}_1(t) = \hat{A} e^{-i\omega t} + \hat{A}^\dagger e^{i\omega t}$$

con  $\hat{A}$  indipendente dal tempo. Naturalmente, la forma scelta non è casuale: a ogni variabile dinamica è associato un operatore hermitiano. Analogamente alla Sez. 11.4.1, poniamo che la perturbazione sia “attiva” per  $t \in [0, T]$ .

Partiamo dallo stato  $|i\rangle$  – ad esempio, potrebbe essere lo stato fondamentale di un atomo isolato. La probabilità che la perturbazione introdotta comporti una misura di energia  $\epsilon_f$ , come già visto, è data da

$$\begin{aligned} a_f(T) &\simeq -i\lambda \left[ \langle f|\hat{A}|i\rangle \int_0^T e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} dt + \langle f|\hat{A}^\dagger|i\rangle \int_0^T e^{i(\omega_{fi}+\omega)t} dt \right] \\ &= \lambda \langle f|\hat{A}|i\rangle \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)T}}{\omega_{fi} - \omega} + \lambda \langle f|\hat{A}^\dagger|i\rangle \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)T}}{\omega_{fi} + \omega} \\ &= -i\lambda e^{i\Omega_- T} \langle f|\hat{A}|i\rangle \frac{\sin(\Omega_- T)}{\Omega_-} - i\lambda e^{i\Omega_+ T} \langle f|\hat{A}^\dagger|i\rangle \frac{\sin(\Omega_+ T)}{\Omega_+} \end{aligned}$$

dove  $\Omega_\pm = (\omega_{fi} \pm \omega)/2$ . La probabilità di transizione allo stato  $|f\rangle$  è  $|a_f(T)|^2$ : tenendo conto di  $\hbar$  abbiamo

$$\begin{aligned} |a_f(T)|^2 &= \frac{1}{\hbar^2} \left[ |A_{fi}|^2 D((T, \Omega_-)) + |F_{fi}|^2 D(T, \Omega_+) + \right. \\ &\quad \left. + 2 \operatorname{Re} [F_{if} F_{fi} e^{-i\omega T}] \sqrt{D(T, \Omega_-) D(T, \Omega_+)} \right] \end{aligned}$$

dove per brevità, in questa formula, abbiamo chiamato il seno cardinale come  $D$ , in questo modo

$$D(T, \Omega) \equiv \left( \frac{\sin(\Omega T)}{\Omega} \right)^2$$

Dal momento che

$$\lim_{\Omega_\pm \rightarrow 0} \frac{\sin(\Omega_\pm T)}{\Omega_\pm} = T$$

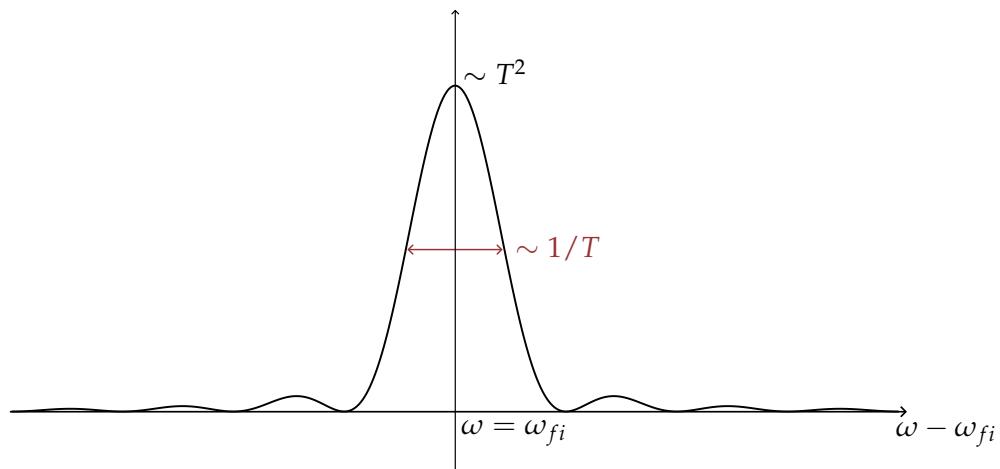
si ha che nei limiti  $\omega \rightarrow \pm\omega_{fi}$ , legati rispettivamente all’assorbimento e all’emissione stimolata di energia, nessuno dei due termini diverge, piuttosto uno dei due domina sull’altro, nel senso che, calcolando la probabilità, potremo trascurare sia il modulo quadro dell’altro termine, sia il termine misto, legato a effetti di interferenza. Per  $\omega$  in un intorno di  $\omega_{fi}$ , il termine dominante è il primo, quindi troviamo, reintroducendo  $\hbar$

$$\mathcal{P}_{\epsilon_f}(t > T) \simeq \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |\langle f|\hat{A}|i\rangle|^2 \left( \frac{\sin(\Omega_- T)}{\Omega_-} \right)^2$$

Se ora consideriamo il limite  $\omega \rightarrow \omega_{fi}$ , si ottiene

$$|a_f(T)|^2 \xrightarrow{\omega \rightarrow \omega_{fi}} \left| \frac{\lambda}{\hbar} \langle f|\hat{A}|i\rangle T \right|^2 \ll 1$$

Dobbiamo prestare molta attenzione a questo risultato: la probabilità non può divergere con  $T$ , anzi deve sempre assumere un valore al più unitario,



**Figura 11.2:** Distribuzione di probabilità di transizione da un'energia  $\epsilon_i$  a  $\epsilon_f$  per un sistema sottoposto a una perturbazione “elettromagnetica”.

e questo implica che, in zona di risonanza, la teoria perturbativa al primo ordine è valida solamente per tempi  $T$  tali che

$$T \ll \frac{\hbar}{|\lambda \langle f | \hat{A} | i \rangle|}$$

Per tempi lunghi, dovremo invece ricorrere a risultati non perturbativi.

In Fig. 11.2 riportiamo il plot di  $\mathcal{P}_{\epsilon_k}$  in funzione di  $\omega$ . Gli andamenti dei parametri descrittivi di questa distribuzione di probabilità (nella variabile della frequenza dell'onda incidente) sono

$$\max \mathcal{P}_{\epsilon_k} \propto T^2 \quad \text{FWHM} \propto \frac{1}{T}$$

il che ci fornisce un'informazione importante a livello interpretativo del fenomeno: se inviamo un'onda elettromagnetica contro un atomo, la probabilità di misurare la sua energia dopo l'interazione a un livello eccitato ( $\epsilon_f$ ) è significativamente diversa da zero solamente per energie del fotone incidente ( $E_{\text{ph}} = \hbar\omega$ ) vicine al *gap* tra i due livelli energetici ( $E_{\text{gap},fi} = \hbar\omega_{fi}$ ). D'altra parte, per tempi lunghi di esposizione si hanno due effetti:

- la distribuzione si schiaccia attorno al *gap*;
- la probabilità di misurare  $\epsilon_f$  cresce significativamente.

In altri termini, per misurare l'energia di un atomo a un livello eccitato a causa di un irraggiamento elettromagnetico l'onda inviata deve essere “precisa”, il che è coerente con quanto noto nel formalismo delle sezioni d’urto di fotoni su atomi.

#### 11.4.3 La Regola d'oro di Fermi

Con questa teoria perturbativa possiamo approcciare il problema delle transizioni tra spettro discreto e spettro continuo. In questo ambiente,  $|a_f(T)|^2$

deve essere opportunamente reinterpretata come una **densità di probabilità** nello **Spazio delle Fasi**.

Dobbiamo innanzitutto fissare una normalizzazione per lo Spazio delle Fasi; premettiamo che tale argomento è qui introdotto brevemente, mentre sarà trattato più in dettaglio in Sez. 14.5.2.

Se consideriamo il *set* completo di numeri quantici  $\alpha$  e chiamiamo  $|\alpha\rangle$  gli stati corrispondenti, in uno spettro continuo imponiamo una condizione di normalizzazione a *delta* di Dirac, con un eventuale fattore moltiplicativo

$$\langle \alpha' | \alpha \rangle = N(\alpha', \alpha) \delta(\alpha - \alpha') = N(\alpha) \delta(\alpha - \alpha')$$

dove abbiamo utilizzato una delle proprietà della distribuzione *delta*. Il proiettore sugli stati che si trovano nell'intorno di valori  $\alpha$  fissati si scrive come

$$|\alpha\rangle \frac{d\alpha}{N(\alpha)} \langle \alpha| \equiv |\alpha\rangle d\Phi \langle \alpha|$$

Chiamiamo quindi  $d\Phi$  il differenziale dello spazio delle fasi attorno ad  $\alpha$ , trovando che la probabilità di transizione verso stati prossimi a  $|\alpha\rangle$  è

$$dP_\alpha = |\langle \alpha | \psi(T) \rangle|^2 d\Phi$$

Stiamo ora considerando una perturbazione periodica ed armonica, e vogliamo calcolare la probabilità di transizione da  $|i\rangle$  a  $|f\rangle$ . Restringiamoci inoltre alle frequenze risonanti, in modo da poter trascurare i termini di interferenza, e al caso in cui  $E_f > E_i$ , ovvero all'assorbimento di energia. Per questo motivo, scriviamo

$$dP_f = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f | \hat{A} | i \rangle|^2 \left( \frac{\sin(\Omega_- T)}{\Omega_-} \right)^2 d\Phi$$

Eseguiamo il limite per  $T \rightarrow \infty$ : sapendo che, in Teoria delle Distribuzioni, vale

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(\Omega_- T)}{\pi \Omega_-^2 T} \stackrel{d}{=} \delta(\Omega_-)$$

possiamo trovare, dividendo la probabilità per  $T$ , il **rate di transizione**, ovvero il tasso di transizione per unità di tempo

$$dR \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{dP_f}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{A} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d\Phi \quad (11.18)$$

Dove abbiamo utilizzato la definizione di  $\Omega_-$  e l'equazione di Planck  $E_* = \hbar\omega_*$  per le energie dei fotoni. L'equazione (11.18) è la **Regola d'Oro di Fermi** nel caso di transizioni elettromagnetiche **da spettro discreto a spettro continuo**.

La formula non dipende dalla normalizzazione scelta per gli stati dello spettro continuo: il fattore  $N(f)$  al denominatore dello spazio delle fasi si semplifica per la presenza, al numeratore, di  $|f\rangle$  all'interno del modulo quadro. Affinché l'equazione sia valida, è necessario che lo stato  $|i\rangle$ , appartenente allo spettro discreto, sia normalizzato ad 1:

$$\langle i | i \rangle = 1$$

altrimenti è necessario dividere l'intera espressione per  $\langle i|i \rangle$ .

Se avessimo voluto analizzare il caso di emissione stimolata, i.e. le transizioni indotte tra continuo e discreto, in cui  $E_f < E_i$  e quindi  $\omega_{fi} < 0$ , sempre considerando una perturbazione periodica e armonica e restringendoci alle frequenze risonanti, avremmo avuto  $E_f - E_i + \hbar\omega$  come argomento della *delta*.

## 11.5 LA RAPPRESENTAZIONE DELL'INTERAZIONE

Nel Capitolo 2.5.3, trattando hamiltoniane indipendenti dal tempo, abbiamo presentato il formalismo di Heisenberg, avendo cura di evidenziarne la completa equivalenza con quello di Schrödinger, da noi utilizzato molto più di frequente. Ricordiamo che, nella rappresentazione di Heisenberg, gli stati non evolvono nel tempo e sono definiti come

$$|\psi\rangle_H = e^{i\hat{H}t} |\psi\rangle_S$$

mentre l'operatore  $\hat{O}_H(t)$  dipende dal tempo ed è definito, per hamiltoniane non dipendenti da  $t$ , come

$$\hat{O}_H = e^{i\hat{H}t} \hat{O}_S e^{-i\hat{H}t}$$

Inutile aggiungere che poniamo  $\hbar = 1$  e che indichiamo con i pedici  $S, H$  i vari oggetti matematici intesi rispettivamente à la Schrödinger e à la Heisenberg. Il fatto che le descrizioni siano equivalenti appare chiaro verificando che i valori di aspettazione non sono differenti usando le definizioni dell'una o dell'altra rappresentazione.

Supponiamo ancora di avere un hamiltoniano della forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1(t)$$

dove, come nella sezione precedente,  $\hat{H}_0$  è l'hamiltoniano imperturbato, indipendente dal tempo e già da noi risolto, mentre il termine  $\hat{H}_1(t)$  è un termine perturbativo, parametrizzato da  $\lambda$ , che tiene conto della dipendenza temporale. Utilizzeremo adesso una nuova rappresentazione intermedia, chiamata **rappresentazione dell'interazione o di Schrödinger** e contraddistinta dal pedice  $I$ . Come vedremo, questo formalismo raggiunge gli stessi risultati trovati nella sezione precedente, ma in modo diverso. Definiamo  $|\psi(t)\rangle_I$  come

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle_S$$

Prestiamo attenzione al fatto che

$$|\psi(t)\rangle_I \neq |\psi(t)\rangle_H$$

Infatti per costruire il *ket* di Heisenberg dovremmo avere l'intero hamiltoniano  $\hat{H}$ , non il solo  $\hat{H}_0$ , all'esponente. Per lo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ , utiliz-

ziamo ancora come base  $\mathcal{B} = \{|n\rangle\}$ , ovvero quella costituita dagli autostati dell'hamiltoniano imperturbato. In termini degli  $|n\rangle$ , scriviamo

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I &= e^{i\hat{H}_0 t} \sum_n c_n(t) |n\rangle \\ &= \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} e^{i\hat{H}_0 t} |n\rangle \\ &= \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} e^{i\epsilon_n t} |n\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle \end{aligned}$$

dove la ridefinizione  $c_n(t) = a_n(t) \exp(-i\epsilon_n t)$  serve a separare e fattorizzare il termine di evoluzione temporale dovuto ad  $\hat{H}_0$ , corrispondente alle fasi  $\exp(-i\epsilon_n t)$ , e quello determinato da  $\hat{H}_1(t)$ , che si esplicita nei coefficienti dipendenti dal tempo  $a_n(t)$ . Possiamo allora notare che l'introduzione di  $|\psi(t)\rangle_I$  è tale da eliminare l'evoluzione temporale dell'hamiltoniano imperturbato.

Deriviamo  $|\psi(t)\rangle_I$  rispetto al tempo ed usiamo l'Equazione di Schrödinger:

$$\begin{aligned} i\partial_t |\psi(t)\rangle_I &= i^2 \hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle_S + e^{i\hat{H}_0 t} i\partial_t |\psi(t)\rangle_S \\ &= -\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle_S + e^{i\hat{H}_0 t} (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1(t)) |\psi(t)\rangle_S \\ &= e^{i\hat{H}_0 t} \lambda \hat{H}_1(t) |\psi(t)\rangle_S \\ &= e^{i\hat{H}_0 t} \lambda \hat{H}_1(t) e^{-i\hat{H}_0 t} e^{i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle_S \\ &= \lambda \hat{H}_{1I}(t) |\psi(t)\rangle_I \end{aligned}$$

dove, coerentemente con la definizione degli autostati nella rappresentazione di interazione, rappresentiamo l'hamiltoniana di perturbazione come

$$\hat{H}_{1I} \equiv e^{i\hat{H}_0 t} \hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0 t}$$

che, ricordiamo, **non è** la rappresentazione di Heisenberg di  $\hat{H}_1$ .

Troviamo quindi

$$i\partial_t |\psi(t)\rangle_I = \lambda \hat{H}_{1I}(t) |\psi(t)\rangle_I \quad (11.19)$$

cioè un'equazione molto simile a quella di Schrödinger, ma relativa al solo Hamiltoniano di perturbazione scritto in questa nuova rappresentazione. Risolviamo l'equazione (11.19): possiamo introdurre un operatore unitario di evoluzione temporale  $\hat{U}_I(t)$  in modo da scrivere

$$|\psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t) |\psi(t=0)\rangle_I$$

In quest'ultima espressione abbiamo inserito  $|\psi(t=0)\rangle_I$ , eppure dalle definizioni è immediato vedere che

$$|\psi(t=0)\rangle_I = |\psi(t=0)\rangle_S = |\psi(t=0)\rangle$$

Dobbiamo risolvere l'equazione differenziale

$$i\partial_t \hat{U}_I(t) = \lambda \hat{H}_{1I}(t) \hat{U}_I(t) \quad \text{con } \hat{U}_I(0) = \mathbb{1} \quad (11.20)$$

Dal momento che l'Hamiltoniano, valutato in tempi diversi, non commuta con sé stesso in generale

$$[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] \neq 0$$

purtroppo l'evolutore non ha una forma analoga a quella che possedeva nel caso *time-independent*, cioè

$$\hat{U}_I(t) \neq e^{-i\lambda\hat{H}_{II}(t)}$$

ma l'equazione (11.20) si può scrivere come

$$\hat{U}_I(t) = \mathbb{1} - i \int_0^t dt_1 \lambda \hat{H}_{II}(t_1) \hat{U}_I(t_1)$$

che possiamo risolvere iterativamente, partendo dall'ordine zero, per cui  $\hat{U}_{II}^{(0)} = \mathbb{1}$ , trovando come risultato

$$\begin{aligned} \hat{U}_I(t) &= \mathbb{1} - i\lambda \int_0^t dt_1 \hat{H}_{II}(t_1) + (-i)^2 \lambda^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{H}_{II}(t_1) \hat{H}_{II}(t_2) + \dots \\ &= \mathcal{T} \exp \left( -i \int_0^t dt' \lambda \hat{H}_{II}(t') \right) \end{aligned} \quad (11.21)$$

*Dimostrazione.* Deriviamo l'espressione appena trovata

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{U}_I(t) &= \partial_t \left( \mathbb{1} - i\lambda \int_0^t dt_1 \hat{H}_{II}(t_1) \right. \\ &\quad \left. + (-i)^2 \lambda^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{H}_{II}(t_1) \hat{H}_{II}(t_2) + \dots \right) \\ &= -i\lambda \left( \hat{H}_{II}(t) - i\hat{H}_{II}(t)\lambda \int_0^t dt_2 \hat{H}_{II}(t_2) + \dots \right) \\ &= -i\lambda \hat{H}_{II}(t) \hat{U}_I(t) \end{aligned}$$

e ritroviamo quindi l'equazione differenziale cercata.  $\square$

Questa scrittura prende il nome di **prodotto T-ordinato** o, più brevemente, di **T-prodotto**. Il simbolo  $\mathcal{T}$  è importante, in quanto indica che a qualsiasi ordine in  $\lambda$  i prodotti tra operatori hamiltoniani hanno il corretto ordinamento temporale, e la questione è cruciale per oggetti come gli operatori, che in generale non commutano tra loro. Notiamo che la scrittura (11.21) è esatta: ancora non abbiamo svolto alcun tipo di approssimazione.

A questo punto abbiamo finito: ricordando che  $\hat{U}_I$  evolve gli stati in rappresentazione dell'interazione, per ottenere il coefficiente  $a_n(t)$  basta calcolare l'elemento di matrice

$$a_n(t) = \langle n | \hat{U}_I(t) | \psi(t=0) \rangle \quad (11.22)$$

Supponiamo adesso di aver inizialmente preparato il sistema nell'autostato  $|i\rangle$  dell'hamiltoniano imperturbato  $\hat{H}_0$ :  $|\psi(t=0)\rangle = |i\rangle$  e pertanto

$$a_n(0) = \delta_{ni}$$

Adesso scriviamo il coefficiente dipendente dal tempo  $a_n(t)$  come serie

$$a_n(t) = a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)}(t) + \lambda^2 a_n^{(2)}(t) + \dots \quad (11.23)$$

dove evidentemente  $a_n^{(0)}$  non dipende da  $t$  e, sotto l'ipotesi appena riportata,  $a_n^{(0)} = a_n(0) = \delta_{ni}$ , dunque sostituiamo le equazioni (11.23) e (11.21) nella

(11.22), confrontando ordine per ordine a destra e a sinistra del segno di uguaglianza:

$$a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)}(t) + \lambda^2 a_n^{(2)}(t) + \dots = \langle n | \mathcal{T} \exp \left( -i \int_0^t dt' \lambda \hat{H}_{1I}(t') \right) | i \rangle$$

Conviene notare che questa tecnica, al costo di complicare il singolo calcolo, rende possibile calcolare i termini  $r$ -esimi dell'espansione in serie degli  $a_n(t)$  in modo **non ricorsivo**, ma solamente a partire dalla conoscenza della  $\hat{H}_{1I}$ . In altri termini, ordini successivi dell'espansione sono ora accessibili con un minor numero di conti, ognuno dei quali però potenzialmente complicato.

L'approssimazione è chiaramente determinata dal fatto che la serie è troncata ad un certo ordine, tipicamente il primo o il secondo. All'ordine zero vale

$$a_n^{(0)} = \langle n | \mathbb{1} | i \rangle = \delta_{ni}$$

mentre al primo troviamo

$$a_n^{(1)}(T) = -i \int_0^T dt \langle n | \hat{H}_{1I}(t) | i \rangle$$

Ricordando che, per definizione,

$$\hat{H}_{1I}(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{H}_1(t) e^{-i\hat{H}_0 t}$$

allora l'equazione del prim'ordine si riscrive immediatamente come

$$a_n^{(1)}(T) = -i \int_0^T e^{i\omega_{ni} t} \langle n | \hat{H}_1(t) | i \rangle dt$$

e possiamo vedere che questo risultato corrisponde a quanto raggiunto, in modo differente, nelle sezioni appena precedenti.

## 11.6 DINAMICHE ADIABATICHE

Studiamo un operatore hamiltoniano che dipende implicitamente dalla coordinata temporale attraverso un parametro  $\lambda(t)$ , variabile in funzione del tempo:

$$\hat{H} = \hat{H}[\lambda(t)]$$

Un esempio è quello di un oscillatore istantaneamente armonico con una pulsazione che varia da istante a istante, descritto dall' hamiltoniano

$$\hat{H}[\omega(t)] = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2(t) \hat{x}^2$$

L'equazione di Schrödinger, in casi di questo genere, si scrive come

$$i\partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H}[\lambda(t)] |\psi(t)\rangle$$

e non può essere risolta trovando gli autostati di  $\hat{H}$ . Questo hamiltoniano, dipendendo da  $t$ , non ha in generale uno spettro ben definito: in ogni momento può essere *diagonalizzato istantaneamente*, tuttavia nulla garantisce che, se  $|a\rangle$  è un autostato di  $\hat{H}[\lambda(t_1)]$ , sia anche un autostato di  $\hat{H}[\lambda(t_2)]$  quando

$t_1 \neq t_2$ . Risolviamo il problema agli autostati istantaneamente, trovando la base degli stati  $\{|n, \lambda(t)\rangle\}_n$  che soddisfano l'equazione

$$\hat{H}[\lambda(t)]|n, \lambda(t)\rangle = E_n[\lambda(t)]|n, \lambda(t)\rangle \quad (11.24)$$

Supponiamo che lo spettro sia non degenero per qualunque  $\lambda(t)$ , e cioè per ogni  $t$ :

$$E_n[\lambda(t)] \neq E_m[\lambda(t)] \quad \forall n \neq m \quad \text{e} \quad \forall t$$

e aggiungiamo anche l'ipotesi che sia discreto, per semplicità.

Ovviamente, gli stati  $|n, \lambda(t)\rangle$  costituiscono per ogni tempo  $t$  una buona base per lo spazio di Hilbert, ad esempio una scelta possibile è descrivere tutto lo spazio  $\mathcal{H}$  in termini degli autostati di  $\hat{H}[\lambda(0)]$ . Supponiamo inoltre che il sistema, al tempo iniziale  $t_0 = 0$ , sia preparato nello stato  $|i, \lambda(0)\rangle$

$$|\psi(t_0 = 0)\rangle = |i, \lambda(t_0 = 0)\rangle = |i, \lambda(0)\rangle$$

che è un autostato per  $\hat{H}[\lambda(0)]$ . Vogliamo studiare il problema nell'ipotesi che la variazione di  $\lambda$  nel tempo sia lenta, e provvederemo nel seguito a rendere chiaro, in modo quantitativo, quando si possa ritenere tale cambiamento abbastanza lento da poter essere trattato in questi termini. Prima di tutto, esponiamo le nostre ragionevoli attese: ci aspettiamo che nell'evoluzione il sistema vada in  $|i, \lambda(t)\rangle$ , cioè che sia mappato nell'autostato istantaneo  $i$ -esimo relativo al tempo  $t$ , così come riportiamo in Figura 11.3.

Scriviamo lo stato evoluto  $|\psi(t)\rangle$  in termini della base di autovettori istantanei al tempo  $t$  generico:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |n, \lambda(t)\rangle$$

dove definiamo  $\alpha_n(t)$  come *fase dinamica*<sup>4</sup> dello stato

$$\alpha_n(t) = - \int_0^t E_n[\lambda(t')] dt'$$

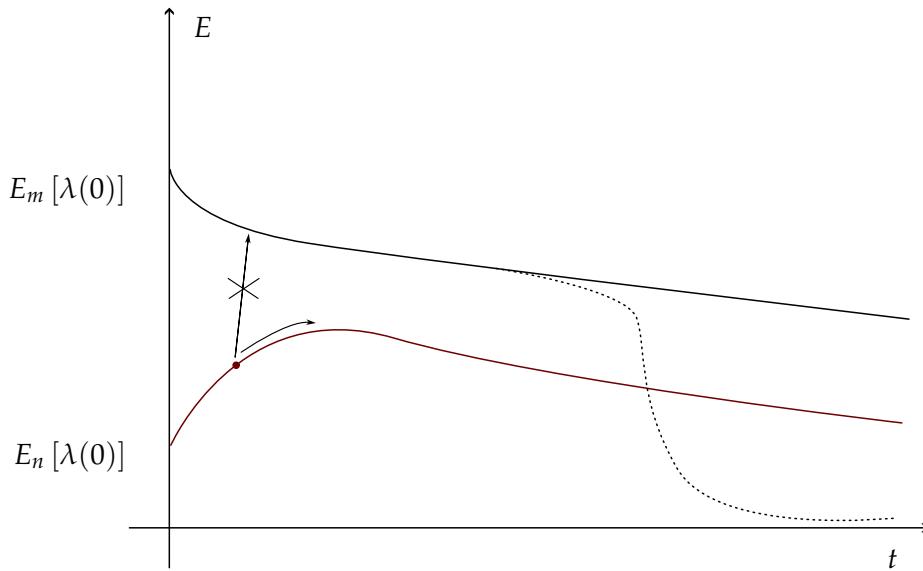
Per effettuare una rapida verifica, ponendo  $\lambda$  costante ritroveremmo la forma caratteristica del caso di hamiltoniano indipendente dal tempo:  $\alpha_n(t) = -E_n t$  con  $E_n$  fissato.

Moltiplichiamo  $|\psi(t)\rangle$  per l'unità immaginaria  $i$  e lo deriviamo:

$$\begin{aligned} i\partial_t |\psi(t)\rangle &= i \sum_n \dot{a}_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |n, \lambda(t)\rangle + i \sum_n a_n(t) (-iE_n[\lambda(t)]) e^{i\alpha_n(t)} |n, \lambda(t)\rangle + \\ &\quad + i \sum_n a_n(t) e^{i\alpha_n(t)} \frac{\partial}{\partial t} |n, \lambda(t)\rangle \\ &= \hat{H}[\lambda(t)] |\psi(t)\rangle \\ &= \hat{H}[\lambda(t)] \sum_n a_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |n, \lambda(t)\rangle \\ &= \sum_n a_n(t) e^{i\alpha_n(t)} E_n[\lambda(t)] |n, \lambda(t)\rangle \end{aligned}$$

dove

$$\frac{\partial}{\partial t} |n, \lambda(t)\rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|n, \lambda(t + \Delta t)\rangle - |n, \lambda(t)\rangle}{\Delta t}$$



**Figura 11.3:** Diagramma dei livelli energetici per i due indici  $n$  ed  $m$ , al variare del tempo. Chiaramente le linee continue si riferiscono rispettivamente agli stati  $|n, \lambda\rangle$  e  $|m, \lambda\rangle$ : queste due scritture indicano un continuo di autostati istantanei, ciascuno con il proprio autovalore dipendente da  $t$ , che è proprio ciò che abbiamo riportato nel grafico. Il sistema si trova inizialmente sulla linea inferiore, e noi ci attendiamo che la sua evoluzione sia adiabatica, ossia che non effettui salti di livello verso lo stato superiore, dotato di una energia differente, bensì percorra la linea continua su cui giace dal tempo iniziale  $t_0$ . Adesso è facile capire per qual motivo abbiamo richiesto la non degenerazione dello spettro: se ad un certo istante  $t$  avesse luogo una degenerazione o *level crossing*, come accadrebbe se la linea superiore seguisse il profilo tratteggiato, ne risulterebbe un'ambiguità nel percorso seguito dal sistema nella sua evoluzione adiabatica.

I termini sottolineati sono uguali a destra e a sinistra del segno di uguaglianza, quindi semplificando e moltiplicando poi per il *bra*  $\langle m, \lambda(t) |$  arriviamo a

$$\langle m, \lambda(t) | \left[ \sum_n \dot{a}_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |n, \lambda(t)\rangle + \sum_n a_n(t) e^{i\alpha_n(t)} \frac{\partial}{\partial t} |n, \lambda(t)\rangle \right] = 0$$

da cui segue, usando l'ortonormalità della base utilizzata, l'equazione differenziale

$$\dot{a}_m(t) = - \sum_n a_n(t) e^{i(\alpha_n(t) - \alpha_m(t))} \langle m, \lambda(t) | \frac{\partial}{\partial t} |n, \lambda(t)\rangle \quad (11.25)$$

Manca soltanto il calcolo dell'elemento di matrice  $\langle m, \lambda(t) | \partial_t |n, \lambda(t)\rangle$ , che ci accingiamo ad eseguire. Deriviamo rispetto al tempo l'equazione (11.24) ed otteniamo

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{H} \right) |n, \lambda\rangle + \hat{H} \frac{\partial}{\partial t} |n, \lambda\rangle = \left( \frac{\partial}{\partial t} E_n(\lambda) \right) |n, \lambda\rangle + E_n(\lambda) \frac{\partial}{\partial t} |n, \lambda\rangle$$

dove per rendere la notazione un poco più esile abbiamo sottinteso la dipendenza di  $\lambda$  dalla coordinata temporale. Moltiplicando a sinistra per  $\langle m, \lambda(t) |$  con  $m \neq n$ , usando l'ortogonalità

$$\langle m, \lambda | \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} |n, \lambda\rangle + E_m(\lambda) \langle m, \lambda | \frac{\partial}{\partial t} |n, \lambda\rangle = E_n(\lambda) \langle m, \lambda | \frac{\partial}{\partial t} |n, \lambda\rangle$$

da cui, grazie all'ipotesi di non degenerazione dello spettro a ogni tempo, concludiamo che per  $m \neq n$  vale

$$\langle m, \lambda | \frac{\partial}{\partial t} |n, \lambda \rangle = \frac{\langle m, \lambda | \partial_t \hat{H} |n, \lambda \rangle}{E_n(\lambda) - E_m(\lambda)} \quad (11.26)$$

Nel caso in cui abbiamo  $m = n$ , dalla usuale condizione di normalizzazione  $\langle n|n \rangle = 1$ , valida ad ogni tempo, segue che

$$(\partial_t \langle n, \lambda |) |n, \lambda \rangle + \langle n, \lambda | (\partial_t |n, \lambda \rangle) = 0$$

I due addendi nel membro di sinistra sono uno il complesso coniugato dell'altro, e ciò implica che

$$\langle n, \lambda | \frac{\partial}{\partial t} |n, \lambda \rangle = i\gamma_n \in i\mathbb{R}$$

cioè questo prodotto scalare "diagonale" è puramente immaginario.

Possiamo quindi scrivere

$$\dot{a}_m(t) = - \sum_{n \neq m} a_n(t) e^{i(\alpha_n(t) - \alpha_m(t))} \frac{\langle m, \lambda | \partial_t \hat{H} |n, \lambda \rangle}{E_n(\lambda) - E_m(\lambda)} - i\gamma_m(t) a_m(t)$$

La nostra congettura è che il sistema permanga nello stato  $i$ -esimo in cui lo abbiamo preparato, e cioè che la probabilità di transire ad altri stati sia nulla, mentre risulti unitaria quella di occupare gli stati  $|i, \lambda(t)\rangle$ . Ci aspettiamo, in altri termini, che

$$|a_m|^2 = 0 \quad \text{con } m \neq i, \text{ mentre} \quad |a_i|^2 = 1$$

Inseriamo tale supposizione nell'equazione (11.25) e troviamo in questo modo una *condizione* affinché l'approssimazione adiabatica possa essere utilizzata: per  $m \neq i$ , poiché abbiamo richiesto  $a_m \simeq 0$  possiamo buttare via il termine con  $\gamma_m$ , e otteniamo

$$\begin{aligned} \dot{a}_m(t) &\simeq e^{i(\alpha_i(t) - \alpha_m(t))} \frac{\langle m, \lambda | \partial_t \hat{H} |i, \lambda \rangle}{E_i(\lambda) - E_m(\lambda)} \\ &= e^{i(\alpha_i(t) - \alpha_m(t))} \dot{\lambda} \frac{\langle m, \lambda | \partial_\lambda \hat{H}(\lambda) |i, \lambda \rangle}{E_i(\lambda) - E_m(\lambda)} \end{aligned}$$

dove il segno  $\simeq$  sta a significare l'uso dell'approssimazione adiabatica, per la quale stiamo cercando le condizioni di validità. Integrando nel tempo l'ultima equazione, si deriva<sup>5</sup> l'approssimazione (in cui includiamo anche  $\hbar$ )

$$a_m(t) \simeq i\hbar \frac{e^{(E_m - E_i)t/\hbar} - 1}{(E_m - E_i)^2} \langle m, \lambda(t) | \partial_\lambda \hat{H}(\lambda) |i, \lambda(t) \rangle \dot{\lambda} \sim \mathcal{O}(\dot{\lambda})$$

Come era ragionevole aspettarsi,  $a_{m \neq i}(t) \sim \mathcal{O}(\dot{\lambda})$ : più la variazione del parametro  $\lambda$  è lenta, meno è probabile una transizione di livello energetico.

Quando è possibile utilizzare questi risultati? Il criterio di applicabilità del *teorema adiabatico* si trova ponendo  $|a_m(t)| \ll 1$ , dunque

$$\left| \langle m, \lambda | \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} |i, \lambda \rangle \right| \ll \frac{(E_m - E_i)^2}{\hbar} \quad \forall m \neq i$$

che corrisponde, come anticipato e promesso, ad una condizione sulla variazione del parametro  $\lambda(t)$ :

$$\left| \frac{d\lambda}{dt} \right| \ll \frac{1}{\hbar} \frac{(E_m - E_i)^2}{|\langle m, \lambda | \partial_\lambda \hat{H} | i, \lambda \rangle|} \quad \forall m \neq i$$

## NOTE

- 1.** Mentre nel caso senza degenerazioni il risultato era

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = |n\rangle$$

nel caso degenere ciò non è più vero. Come vedremo anche applicato nell'esercizio seguente, questo implica che

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle \neq \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle$$

- 2.** Questa affermazione va sempre intesa nel contesto di *piccole perturbazioni*: se il sistema è perturbato da più fonti, ognuna delle quali produce sui livelli energetici una perturbazione che è molto minore del *gap* tra questi, la perturbazione della somma è la somma delle perturbazioni. Gli effetti perturbativi non-lineari, che originano dal fatto che la perturbazione operata dalla seconda sorgente agisce sui livelli perturbati dalla prima e viceversa, sono di ordine superiore al primo e di conseguenza possono essere trascurati.

- 3.** Questa è una conseguenza dell'Equazione di Schrödinger per hamiltoniana indipendente dal tempo: dal momento che

$$|\psi(T)\rangle = \sum_n a_n(T) e^{-i\epsilon_n T} |n\rangle$$

allora segue che

$$|\psi(t > T)\rangle = e^{-i\hat{H}_0(t-T)} |\psi(T)\rangle = \sum_n a_n(T) e^{-i\epsilon_n T} e^{-i\epsilon(t-T)} |n\rangle = \sum_n a_n(T) e^{-i\epsilon_n t} |n\rangle$$

da cui la tesi, dal momento che gli autostati dell'hamiltoniana *time-independent* sono stazionari.

- 4.** Ci si può convincere della correttezza di questa definizione nel seguente modo: se supponiamo che al tempo 0 lo stato sia descritto da

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n a_n(0) |n, \lambda(0)\rangle$$

allora al tempo  $dt$  avremo

$$|\psi(dt)\rangle = \sum_n a_n(dt) e^{iE_n[\lambda(dt)]dt} |n, \lambda(dt)\rangle$$

e dunque al tempo  $2dt$

$$|\psi(2dt)\rangle = \sum_n a_n(2dt) e^{iE_n[\lambda(dt)]dt} e^{iE_n[\lambda(2dt)]dt} |n, \lambda(2dt)\rangle$$

e così via. Quello che compare all'esponente al tempo  $t$  è proprio l'integrale secondo Riemann della quantità  $E_n[\lambda(t)]$ .

- 5.** Per la dimostrazione di questa equazione, che qui non riportiamo, rimandiamo all'ottima pagina

[https://appquantmech.quantumtinkerer.tudelft.nl/adiabatic\\_proof/](https://appquantmech.quantumtinkerer.tudelft.nl/adiabatic_proof/)

## IN BREVE...

- ◊ In un problema perturbativo **indipendente dal tempo**, studiamo un operatore hamiltoniano della forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$$

dove  $\hat{H}_0$  ha uno spettro noto, con energie  $\epsilon_n$  relative agli autostati  $|n\rangle$ , mentre la parte perturbativa ha degli **effetti piccoli** sullo spettro. Questa richiesta, ovviamente, restringe il campo di applicabilità della Teoria delle Perturbazioni. Il punto centrale è che espandiamo in serie sia gli autostati sia gli autovalori di  $\hat{H}$ , utilizzando  $\lambda$  come parametro di espansione:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned}$$

- ◊ Ciò a cui bisogna prestare attenzione è, prima di tutto, la **degenerazione** dello spettro imperturbato. La risoluzione del problema perturbativo con uno spettro che presenta delle degenerazioni differisce infatti da quella in assenza di degenerazione.

- ◊ Nel **caso non degenere**, all'ordine zero abbiamo

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = |n\rangle \quad \epsilon_n = E_n^{(0)}$$

mentre per il primo ordine

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle \quad |\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | \hat{H}_1 | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} |m\rangle$$

Invece per la correzione all'energia di ordine 2 vale

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{H}_1 | n \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m}$$

- ◊ Nel **caso degenere** dobbiamo stare bene attenti al fatto che

$$|\psi_n^{(0)}\rangle \neq |n\rangle$$

e per risolvere il problema dobbiamo utilizzare una base che diagonalizzi  $\hat{H}_1$  simultaneamente a  $\hat{H}_0$  nel sottospazio degenere di quest'ultimo operatore. Gli autostati di  $\hat{H}$  approssimati all'ordine zero si possono decomporre in termini della base  $\{|n\rangle\}$  come

$$|\psi_{n_r}^{(0)}\rangle = \sum_{j=1}^R c_{rj} |n_j\rangle$$

dove  $R$  è il grado di degenerazione del livello energetico, e  $r$  è l'indice che corre da 1 ad  $R$  all'interno di questo autospazio. Serve utilizzare la base di autovettori di  $\hat{H}_0$  tale per cui

$$\sum_{j=1}^R \langle n_s | \hat{H}_1 | n_j \rangle c_{rj} = E_n^{(1)} c_{rs}$$

infatti, considerando questa, è possibile risolvere il problema avvalendoci delle equazioni relative al caso degenere, appena riportate.

- ◊ Se vogliamo aggiungere lo spin alla descrizione dell'atomo di idrogeno, ci accorgiamo che l'hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{k}{\hat{r}}$$

non può descrivere accuratamente questo sistema: lo spin emerge dalla Mecanica Quantistica Relativistica, mentre sia il termine cinetico che quello potenziale dell'hamiltoniano appena scritto sono legati ad una descrizione non relativistica. Possiamo sanare questo difetto con delle correzioni, avvalendoci della Teoria Perturbativa. Ci attende la **struttura fine** dell'atomo di idrogeno, che risolve parzialmente la degenerazione energetica dei livelli:

$$E_{n,l} \simeq E_n^{(0)} \left[ 1 + \underbrace{\frac{\alpha^2}{4n^2} \left( \frac{8n}{2l+1} - 3 \right)}_{\text{correzione relativistica}} - \underbrace{\frac{\alpha^2 J(J+1) - l(l+1) - 3/4}{n l(l+1)(2l+1)}}_{\text{interazione spin-orbita}} \right]$$

- ◊ Possiamo utilizzare una Teoria Perturbativa anche in caso di **perturbazioni dipendenti dal tempo**  $\hat{H}_1(t)$ . In questo caso, non espanderemo in serie di potenze gli autostati dell'hamiltoniano complessivo: essendo esplicitamente dipendente da  $t$ , non ha più neppure senso, per questo operatore, parlare di una base di autostati. Al più, possiamo trovarne un **spettro istantaneo**. Chiamando sempre  $\{|n\rangle\}$  la base di autostati dell'hamiltoniano imperturbato, scriviamo uno stato come

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} |n\rangle$$

ed espandiamo in serie perturbativa i coefficienti  $a_n(t)$ :

$$a_n(t) = a_n^{(0)}(t) + \lambda a_n^{(1)}(t) + \lambda^2 a_n^{(2)}(t) + \dots$$

Il modulo quadro di ciascuno di essi costituisce la **probabilità di transizione** dallo stato iniziale a quello  $n$ -esimo, o più precisamente la probabilità di misurare l'energia  $\epsilon_n$ .

- ◊ Partendo dall'Equazione di Schrödinger e da questa espansione, definendo  $\omega_{mn} = (\epsilon_m - \epsilon_n)/\hbar$ , troviamo la **formula ricorsiva**

$$\dot{a}_m^{(r)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n \langle m | \hat{H}_1(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn} t} a_n^{(r-1)}(t)$$

dove abbiamo posto  $\hbar = 1$ . Se consideriamo di preparare inizialmente il sistema nell'autostato  $|i\rangle$  di  $\hat{H}_0$ , troviamo che, al primo ordine,

$$a_f^{(1)}(T) = -i \int_0^T \langle f | \hat{H}_1(t') | i \rangle e^{i\omega_{fi} t'} dt'$$

- ◊ Avvalendoci di una rappresentazione *intermedia* tra quella di Schrödinger e quella di Heisenberg, detta **rappresentazione dell'interazione**, e il prodotto t-ordinato, troviamo un modo diverso per raggiungere il medesimo risultato. In tal caso, la formula per trovare i vari ordini del coefficiente  $a_f(t)$  non è ricorsiva, eppure i singoli calcoli sono più complicati al crescere dell'ordine.



# 12

## INTERAZIONI ELETTRONICHE

In questo capitolo consideriamo le interazioni di particelle quantistiche con il campo elettromagnetico classico, a partire dall'analogia formale con la descrizione hamiltoniana classica. Sono poi trattate alcune applicazioni: il moto di un elettrone in campo magnetico uniforme, l'Effetto Zeeman, la perturbazione di un'onda elettromagnetica su un atomo di idrogeno e l'Effetto Aharonov-Bohm.

### 12.1 PARTICELLA IN CAMPO ELETTRONICO

Consideriamo il moto di una particella di massa  $m$  e carica  $q$  immersa in un campo elettrico  $\mathbf{E}$  e magnetico  $\mathbf{B}$ . L'equazione del moto è data classicamente dalla forza di Lorentz, che in unità cgs si scrive

$$m\mathbf{a} = q \left( \mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) \quad (12.1)$$

D'altro canto dalle equazioni di Maxwell è possibile dedurre che i campi elettrico e magnetico ammettono una formulazione potenziale, in termini del potenziale scalare  $\phi(\mathbf{x}, t)$  e vettore  $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ , legati ai campi dalle relazioni

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

e ricordiamo anche che la scelta dei potenziali non è univoca, ma al contrario i campi restano invariati se i potenziali sono soggetti ad una *trasformazione di gauge*:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi$$

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}$$

per una arbitraria funzione scalare  $\chi(\mathbf{x}, t)$ . In questa formulazione ciò segue dal fatto che il rotore di un gradiente è nullo e dalla commutatività delle derivate seconde.

Per arrivare ad estendere la descrizione del moto di una particella in campo elettromagnetico anche al caso quantistico, è opportuno partire dalla descrizione hamiltoniana classica del moto di una particella in un campo elettromagnetico. Facendo uso delle equazioni di Eulero-Lagrange (oltre che delle relazioni tra campi e potenziali scritte sopra), si può verificare che l'equazione del moto (12.1) è ben riprodotta dalla seguente Lagrangiana:

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - q\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{q}{c} \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$$

*Dimostrazione.* Partiamo dalle Equazioni di Eulero-Lagrange:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}$$

Adottiamo la convenzione sugli indici ripetuti, che ci permette di scrivere la lagrangiana come

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \dot{x}_i \dot{x}_i - q\phi + \frac{q}{c} \dot{x}_i A_i$$

(dove le dipendenze sono implicite per alleggerire la notazione) e calcoliamo direttamente i due lati dell'equazione: quello di sinistra è dato da

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = -q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{q}{c} \dot{x}_j \frac{\partial A_j}{\partial x_i}$$

mentre quello di destra

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} &= m\dot{x}_i + \frac{q}{c} A_i \\ \implies \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} &= m\ddot{x}_i + \frac{q}{c} \left[ \frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \dot{x}_j \right] \end{aligned}$$

dove abbiamo scritto la derivata totale di  $A_i$  come  $d/dt = \partial_t + \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla$ . Egualando queste espressioni si ottiene la tesi

$$m\ddot{x}_i = q \underbrace{\left( -\partial_i \phi - \frac{1}{c} \partial_t A_i \right)}_{=E_i} + \frac{q}{c} \dot{x}_j \underbrace{\left( \partial_i A_j - \partial_j A_i \right)}_{=\epsilon_{ijk} B_k} = q \left( E_i + \frac{1}{c} \epsilon_{ijk} \dot{x}_j B_k \right)$$

dove abbiamo riconosciuto nel penultimo passaggio le componenti spaziali del tensore di campo elettromagnetico con un indice in alto ed uno in basso,  $F_\mu^\nu$ , che sono legate al campo magnetico come scritto, cosa che si può verificare esplicitamente:

$$\begin{aligned} \partial_i A_j - \partial_j A_i &= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \partial_l A_m \\ &= \epsilon_{kij} \epsilon_{klm} \partial_l A_m \\ &= \epsilon_{kij} (\nabla \times \mathbf{A})_k = \epsilon_{ijk} B_k \end{aligned}$$

dove abbiamo usato una formula nota per la moltiplicazione di due tensori di Levi-Civita.  $\square$

Abbiamo verificato che la lagrangiana che stiamo usando è quella giusta. L'hamiltoniana classica  $\mathcal{H}$  è allora la trasformata di Legendre della lagrangiana

$$\mathcal{H} = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - \mathcal{L}$$

dove  $\mathbf{p}$  è il momento coniugato alla variabile spaziale  $\mathbf{x}$ , ossia la sua componente  $i$ -esima vale

$$p_i \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + \frac{q}{c} A_i(\mathbf{x}, t)$$

dunque:

$$\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{x}} + \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \quad (12.2)$$

Allora la trasformata di Legendre di  $\mathcal{L}$  si scrive

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \left( m\dot{\mathbf{x}} + \frac{q}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \dot{\mathbf{x}} - \frac{m}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 + q\phi - \frac{q}{c}\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A} \\ &= \frac{m}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 + q\phi\end{aligned}$$

Ma ricordiamo che i gradi di libertà di  $\mathcal{H}$ , nella formulazione hamiltoniana della Meccanica, non sono  $\mathbf{x}$  e  $\dot{\mathbf{x}}$  ma bensì  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{p}$ , pertanto nel risultato appena trovato occorre riesprimere  $\dot{\mathbf{x}}$  in funzione di  $\mathbf{p}$ . In definitiva l'hamiltoniana per particella in campo elettromagnetico vale

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 + q\phi$$

Consideriamo adesso il caso di una **particella quantistica** in campo elettromagnetico. La scelta più naturale per l'operatore hamiltoniano si ottiene allora scrivendo in completa analogia al caso classico

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) \right)^2 + q\phi(\hat{\mathbf{x}}, t) \quad (12.3)$$

Facciamo notare che si tratta di una scelta che possiamo giustificare a posteriori, guardando alle conseguenze di questa scelta in termini di autovalori ed autostati, e confrontando i risultati degli esperimenti con le predizioni (per esempio la quantizzazione dei livelli energetici per una particella in campo magnetico, che descriveremo a breve) che da questa scelta possono essere dedotte.

Nel seguito assumeremo per semplicità di avere a che fare con campi (quindi con potenziali) statici, in modo tale che  $\hat{H}$  non dipenda dal tempo.

Notiamo, innanzitutto, che così come nel caso classico il momento  $\mathbf{p}$  non corrisponde alla quantità di moto  $m\mathbf{v}$ , anche nel caso quantistico occorre fare una netta distinzione tra l'operatore velocità e l'operatore impulso. L'operatore impulso  $\hat{\mathbf{p}}$  è quello che entra esplicitamente nell'hamiltoniano e che soddisfa le relazioni di commutazione canoniche

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

mentre in Sez. 2.5.5 abbiamo caratterizzato l'operatore  $\hat{\mathbf{v}}$ , derivata di  $\hat{\mathbf{x}}$ , con la relazione

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{x}}]$$

A questo punto basta esplicitare il commutatore per convincersi che l'operatore velocità è ben diverso

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{v}} &= \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}) \right)^2 + q\phi(\hat{\mathbf{x}}), \hat{\mathbf{x}} \right] \\ &= \frac{i}{2m\hbar} \left[ \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}) \right)^2, \hat{\mathbf{x}} \right] \\ &= \frac{i}{2m\hbar} \left[ \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{q}{c} (\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}) + \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}})\hat{\mathbf{p}}) + \frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2(\hat{\mathbf{x}}), \hat{\mathbf{x}} \right]\end{aligned}$$

Usando ora alcune proprietà dei commutatori (tra cui quella per cui in generale  $[f(\hat{x}), \hat{x}] = 0$ ), ed usando la convenzione di Einstein per gli indici ripetuti

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{x}_i] &= [\hat{p}_j \hat{p}_j, \hat{x}_i] = \hat{p}_j [\hat{p}_j, \hat{x}_i] + [\hat{p}_j, \hat{x}_i] \hat{p}_j = -2i\hbar \delta_{ij} \hat{p}_j = -2i\hbar \hat{p}_i \\ [\hat{p}_k \hat{A}_k, \hat{x}_i] &= \hat{p}_k [\hat{A}_k, \hat{x}_i] + [\hat{p}_k, \hat{x}_i] \hat{A}_k = -i\hbar \delta_{ik} \hat{A}_k = -i\hbar \hat{A}_i \\ [\hat{A}_k \hat{p}_k, \hat{x}_i] &= \hat{A}_k [\hat{p}_k, \hat{x}_i] + [\hat{A}_k, \hat{x}_i] \hat{p}_k = -i\hbar \delta_{ik} \hat{A}_k = -i\hbar \hat{A}_i \\ [\mathbf{A}^2, \hat{x}_i] &= 0 \end{aligned}$$

si ottiene

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{2m\hbar} \left( -2i\hbar \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} 2i\hbar \mathbf{A} \right) = \frac{1}{m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \quad (12.4)$$

Calcoliamo anche altri commutatori

$$[\hat{x}_i, \hat{v}_j] = \frac{1}{m} [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = \frac{i\hbar}{m} \delta_{ij}$$

e quello tra le varie componenti della velocità

$$\begin{aligned} [\hat{v}_i, \hat{v}_j] &= \frac{1}{m^2} \left[ \left( \hat{p}_i - \frac{q}{c} A_i \right), \left( \hat{p}_j - \frac{q}{c} A_j \right) \right] \\ &= \frac{1}{m^2} \left\{ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] - \frac{q}{c} [\hat{p}_i, A_j] - \frac{q}{c} [A_i, \hat{p}_j] + \frac{q^2}{c^2} [A_i, A_j] \right\} \\ &= -\frac{q}{m^2 c} \left\{ -i\hbar \frac{\partial A_j}{\partial \hat{x}_i} + i\hbar \frac{\partial A_i}{\partial \hat{x}_j} \right\} \\ &= \frac{i\hbar q}{m^2 c} \{ \partial_i A_j - \partial_j A_i \} \\ &= \frac{i\hbar q}{m^2 c} F_i^j = \frac{i\hbar q}{m^2 c} \epsilon_{ijk} B_k \end{aligned} \quad (12.5)$$

dove abbiamo usato la proprietà del commutatore di  $\hat{\mathbf{p}}$  con una funzione di  $\hat{\mathbf{x}}$ , cioè  $[\hat{p}_i, f(\hat{\mathbf{x}})] = -i\hbar \partial_i f(\hat{\mathbf{x}})$ , e di nuovo abbiamo riconosciuto le componenti puramente spaziali del tensore dei campi.

### 12.1.1 Invarianza di gauge

Passiamo alla riscrittura quantistica dell'**invarianza di gauge**. Le relazioni scritte nel caso classico vanno corredate con un'opportuna trasformazione della funzione d'onda:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \\ \psi &\rightarrow \psi' = \psi \exp \left( \frac{i}{\hbar c} \chi \right) \end{aligned}$$

dove tutte le funzioni sottintendono una dipendenza dalle coordinate spaziali e dal tempo, compresa la funzione d'onda  $\psi(\mathbf{x}, t)$ , la quale deve pertanto essere moltiplicata per un termine di fase in generale diverso punto per punto, poiché tale termine stesso dipende da  $\mathbf{x}$  e  $t$ .

Pertanto, se si eseguono simultaneamente le suddette trasformazioni ai potenziali ed alla funzione d'onda con una  $\chi(\mathbf{x}, t)$  arbitraria, i campi elettrico e magnetico rimangono invariati; ed inoltre la dinamica rimane invariata, nel senso che la funzione d'onda trasformata soddisfa l'equazione di Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi'(\mathbf{x}, t) = \hat{H}'\psi'(\mathbf{x}, t)$$

dove  $\hat{H}'$  è l'hamiltoniana della particella in campo e.m. scritta in funzione dei nuovi potenziali.

Adesso possiamo sottolineare un'altra importante differenza tra l'operatore velocità e l'impulso. Infatti si può dimostrare che il valore atteso della velocità su uno stato  $|\psi\rangle$  è invariante di gauge:

$$\langle\psi'|\hat{\mathbf{v}}'|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{\mathbf{v}}|\psi\rangle$$

e ciò è quanto ci si aspetta da una variabile dinamica come la velocità, che vorremmo avesse un valor medio ben definito fissati i campi, indipendentemente dalla gauge utilizzata. Viceversa, poiché

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)$$

essendo  $\mathbf{A} \neq \mathbf{A}'$  allora il valor medio di  $\hat{\mathbf{p}}$  non risulta invariante di gauge. Pertanto intuiamo che la velocità abbia in questo contesto un significato fisico più chiaro dell'impulso.

### 12.1.2 Conservazione della probabilità

In Sez. 4.2 abbiamo ricavato, nella rappresentazione delle coordinate, un'equazione di continuità, che esprime l'*unitarietà* dell'evoluzione temporale, ossia la conservazione della probabilità:

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

dove la corrente si scrive

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

per cui nel caso che avevamo considerato in cui  $\hat{\mathbf{p}} = m\hat{\mathbf{v}}$  si poteva scrivere  $\hat{\mathbf{v}} = -i\hbar\nabla/m$  e dunque

$$\mathbf{J} = \operatorname{Re}\{\psi^* \hat{\mathbf{v}} \psi\} \tag{12.6}$$

Ci chiediamo adesso come si scrive  $\mathbf{J}$  nel nostro caso in cui impulso e velocità non sono proporzionali: non è immediato in linea di principio capire se la scrittura precedente è corretta oppure se vada scritta sostituendo alla velocità  $\hat{\mathbf{p}}/m$ . Si può dimostrare che in questo caso la scrittura (12.6) è quella corretta. Questo conferma quanto asserito poc'anzi, ossia che è la velocità (e non l'impulso) l'osservabile dinamica legata in modo più diretto alla propagazione dell'informazione a livello di funzione d'onda.

## 12.2 MOTO IN CAMPO MAGNETICO UNIFORME

Consideriamo una particella immersa in un campo magnetico statico, uniforme e diretto lungo l'asse  $\bar{z}$ :

$$\mathbf{B} = (0, 0, B) \quad \mathbf{E} = \mathbf{0}$$

Vogliamo trovare i valori ammessi per le energie; una possibile scelta di gauge per il potenziale vettore è

$$\mathbf{A} = (-By, 0, 0) \quad \phi = 0$$

Dunque l'hamiltoniana si scrive (indichiamo con 1, 2 e 3 le tre direzioni spaziali)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_1 - \frac{q}{c} A_1 \right)^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2 \right]$$

Guardando la forma che abbiamo trovato per la velocità in Eq. (12.4), l'hamiltoniana si può riscrivere come

$$\hat{H} = \frac{m}{2} (\hat{v}_1^2 + \hat{v}_2^2) + \frac{m}{2} \hat{v}_3^2 \equiv \hat{H}_{12} + \hat{H}_3$$

cioè

$$\hat{H}_{12} = \frac{m}{2} (\hat{v}_1^2 + \hat{v}_2^2) \quad \hat{H}_3 = \frac{m}{2} \hat{v}_3^2$$

Scriviamo adesso il commutatore tra le varie componenti della velocità, come trovato in (12.5):

$$[\hat{v}_1, \hat{v}_3] = 0 \quad [\hat{v}_2, \hat{v}_3] = 0 \quad [\hat{v}_1, \hat{v}_2] = \frac{i\hbar q}{m^2 c} B$$

dalle prime due relazioni si deduce che

$$[\hat{H}_{12}, \hat{H}_3] = 0$$

perciò le due hamiltoniane che abbiamo separato sono simultaneamente diagonalizzabili. Questo semplifica enormemente il problema: se è possibile cercare autostati di  $\hat{H}$  comuni alle due hamiltoniane, è chiaro che sarà possibile trovare gli autovalori di  $\hat{H}$  come somma di un autovalore di  $\hat{H}_{12}$  e uno di  $\hat{H}_3$ .

Il problema di  $\hat{H}_3$  è immediato: si tratta di un problema di particella libera, per cui le energie formano uno spettro continuo

$$E_k = \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m}$$

Anche  $\hat{H}_{12}$  si diagonalizza immediatamente, definendo gli operatori  $\hat{Q}$  e  $\hat{P}$  nel seguente modo:

$$\hat{v}_1 = \gamma \hat{Q} \quad \hat{v}_2 = \gamma \hat{P} \quad \text{con} \quad \gamma = \left( \frac{\hbar |q| B}{m^2 c} \right)^{1/2}$$

pertanto

$$\hat{H}_{12} = \frac{1}{2} m \gamma^2 (\hat{Q}^2 + \hat{P}^2)$$

Inoltre le nuove variabili soddisfano le “giuste” relazioni di commutazione

$$\frac{i\hbar q}{m^2 c} B = [\hat{v}_1, \hat{v}_2] = \gamma^2 [\hat{Q}, \hat{P}] \implies [\hat{Q}, \hat{P}] = i$$

quindi la soluzione non può che essere quella per un oscillatore armonico unidimensionale di frequenza  $\omega_c$  tale che

$$\hbar\omega_c = m\gamma^2 \implies \omega_c = \frac{|q|B}{mc}$$

che corrisponde alla **frequenza di ciclotrone**, caratteristica anche del moto in campo magnetico classico. È importante notare che questo risultato è stato ottenuto proprio grazie al fatto che l’operatore velocità, che è la nostra osservabile fisica, sul piano ortogonale alla direzione del campo magnetico ha una forma non triviale e le sue relazioni di commutazione non sono nulle fra tutte le componenti.

Abbiamo allora dedotto gli autovalori di  $\hat{H}$ :

$$E_n(k_3) = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m}$$

e questa derivazione è stata svolta in una specifica gauge. Tuttavia il risultato fisico deve essere invariante di gauge: in effetti è così, anche se il calcolo diventa rapidamente molto complicato anche per scelte ragionevoli. Rimandiamo ad esempio a [3] per una trattazione dello stesso problema con stesso risultato nella gauge simmetrica.

Resta da chiarire in che termini il moto sul piano  $xy$  può essere mappato in un oscillatore unidimensionale, dato che nel caso classico si ha un moto circolare uniforme di frequenza angolare  $\omega_c$  se proiettato sul piano  $xy$ , essendo la forza di Lorentz ortogonale alla velocità. Il risultato per l’asse parallelo al campo magnetico è invece del tutto analogo a quello classico: la particella compie in quella direzione un moto rettilineo uniforme.

Giunti a questo punto, si apre un dilemma interpretativo non banale: un problema originariamente bidimensionale, il moto sul piano  $xy$ , è stato mappato in uno unidimensionale – il moto di un oscillatore armonico 1D. Come vedremo, dare un’interpretazione fisica intuitiva a questo fatto è tutt’altro che semplice, e un indizio in questa direzione viene sicuramente fornito dalla soluzione analitica all’Equazione di Schrödinger; quello su cui vogliamo concentrarci, intanto, sono le autofunzioni dell’hamiltoniana.

### 12.2.1 Le autofunzioni del problema

Passiamo in rappresentazione delle coordinate; l’hamiltoniana si riscrive come:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) \right)^2 \Rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right)^2$$

A questo punto vogliamo esplicitare questa scrittura: ricordiamo la scelta di gauge operata nella precedente sezione  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ , la quale ci porta a

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( -i\partial_x + \frac{qBy}{\hbar c} \right)^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2 \right] \quad (12.7)$$

Questa scelta, come vedremo, ha un'implicazione importante: il problema ha originariamente una simmetria per rotazioni sul piano  $xy$ , essendo il campo magnetico uniforme lungo  $\bar{z}$ . Questa scelta del potenziale vettore rompe la simmetria, perché a priori anche altri potenziali vettori avrebbero reso lo stesso campo magnetico:

$$\nabla \times (0, Bx, 0) = B\bar{z} \quad \nabla \times \frac{1}{2}(-By, Bx, 0) = B\bar{z} \quad \dots$$

e quindi le soluzioni che troveremo **non presenteranno simmetria per rotazioni sul piano  $xy$** .

La forma dell'hamiltoniana in Eq. (12.7), separabile in somma di derivate indipendenti, suggerisce una soluzione a variabili separate:

$$\psi(x, y, z) = e^{ik_1 x + ik_3 z} \phi(y)$$

Inseriamola in (12.7):

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x, y, z) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\partial_x^2 - 2i\frac{qBy}{\hbar c} \partial_x + \left( \frac{qBy}{\hbar c} \right)^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2 \right] e^{ik_1 x + ik_3 z} \phi(y) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[ k_1^2 - 2i\frac{qBy}{\hbar c} (ik_1) + \left( \frac{qBy}{\hbar c} \right)^2 - \partial_y^2 + k_3^2 \right] e^{ik_1 x + ik_3 z} \phi(y) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[ k_3^2 - \partial_y^2 + \left( y + \frac{\hbar c}{qB} k_1 \right)^2 \left( \frac{qB}{\hbar c} \right)^2 \right] e^{ik_1 x + ik_3 z} \phi(y) \end{aligned}$$

Stiamo cercando le autofunzioni, i.e. vogliamo risolvere  $\hat{H}\psi = E\psi$ : allora si ha

$$\begin{aligned} \left( E - \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} \right) e^{ik_1 x + ik_3 z} \phi(y) \\ = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 + \frac{m}{2} \left( \frac{qB}{mc} \right)^2 \left( y + \frac{\hbar c}{qB} k_1 \right)^2 \right] e^{ik_1 x + ik_3 z} \phi(y) \end{aligned}$$

che, definendo le quantità

$$E' \equiv E - \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} \quad \omega_c \equiv \frac{|q|B}{mc} \quad y_0 \equiv -\hbar \frac{k_1 c}{qB}$$

e semplificando gli esponenziali, possiamo ridurre alla ben nota forma

$$E' \phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_y^2 \phi + \frac{m\omega_c^2}{2} (y - y_0)^2 \phi$$

che è proprio l'equazione alle autofunzioni dell'oscillatore armonico quantistico unidimensionale, come ci aspettavamo. Come visto anche nella sezione precedente, lo spettro è dato da

$$E'_n = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

che risulta completamente indipendente da  $k_3$ . Questo ha senso: il moto sul piano  $xy$  è disaccoppiato dal moto di particella libera lungo l'asse  $\hat{z}$ .

Naturalmente nell'energia  $E_n$  si ha una dipendenza diretta da  $k_3$ , ma in questo contesto stiamo osservando nuovamente il fatto che i due contributi all'energia sono indipendenti da loro e **non si influenzano**.

Per determinare la forma di  $\phi(y)$  ci rifacciamo al risultato analitico ottenuto nell'analisi dell'oscillatore armonico unidimensionale (Parte I, Cap. 4): a meno di una costante di normalizzazione  $C_n$  (che al solito si ottiene banalmente per integrazione su  $\mathbb{R}$ ), le  $\phi_n$  hanno la forma

$$\phi_n(y) = C_n H_n \left( \frac{y - y_0}{l_m} \right) \exp \left( -\frac{(y - y_0)^2}{2l_m^2} \right)$$

dove gli  $H_n$  sono i **polinomi di Hermite** e  $l_m$  è la **lunghezza magnetica**, la scala di lunghezze del problema definita come

$$l_m \equiv \left( \frac{\hbar}{m\omega_c} \right)^{1/2}$$

per cui in generale abbiamo una forma chiusa per le autofunzioni dell'hamiltoniana globale

$$\psi_{n,k_3}(x, y, z) = \underbrace{\exp(ik_3 z)}_{\text{asse } z} \cdot \underbrace{C_n H_n \left( \frac{(y - y_0)^2}{2l_m^2} \right) \exp \left( ik_1 x - \frac{(y - y_0)^2}{2l_m^2} \right)}_{\text{piano } xy} \quad (12.8)$$

Questa autofunzione è quantomeno strana: rappresenta un moto libero su  $\bar{z}$ , su cui siamo d'accordo, accoppiato con una sorta di moto libero lungo  $\bar{x}$  e oscillatorio lungo  $\bar{y}$  attorno a un centro  $y_0$  che è funzione dell'impulso  $k_1$ ; per la verità ha anche poco senso parlare di traiettoria nell'interpretazione di una funzione d'onda che, al più, ha un significato statistico; tuttavia la differenza col risultato classico è sconcertante. Per quanto riguarda l'interpretazione di questo criptico risultato, crediamo che la risposta non possa essere meglio riassunta che così:

*I refuse to answer that question on the grounds that I don't know the answer.*

Douglas Adams

che a dirla tutta è l'interpretazione della Meccanica Quantistica ad oggi più condivisa dalla Comunità Scientifica.

### 12.2.2 Degenerazione dello spettro: i livelli di Landau

Passiamo a trattare in dettaglio la degenerazione dello spettro. Il moto libero lungo  $\bar{z}$  raddoppia la degenerazione, perché nell'energia compare  $k_3^2$  e quindi (come è ovvio) una particella che si muove "in su" ha la stessa energia di una che si muove "in giù".

Ciò che realmente fa la differenza è la degenerazione infinita dovuta al moto lungo il piano  $xy$ : infatti l'energia non dipende da  $k_1$  che è un **parametro continuo**, e di conseguenza a un'infinità di impulsi è associata la stessa energia. Concludiamo, in prima battuta, che

$$\text{Deg} = \infty$$

Siamo ora interessati ad eseguire un calcolo più raffinato: vogliamo quantificare la rapidità con cui la degenerazione dello spettro tende a  $\infty$  al variare dello spazio disponibile al moto. Trascurando l'asse  $\bar{z}$ , supponiamo che la particella sia confinata sul piano  $xy$  in una scatola di lati

$$L_x, L_y \gg l_m$$

Questo ha due implicazioni importanti: le pareti sono delle barriere di potenziale infinite, il che implica che la funzione d'onda debba annullarsi in  $x = 0, x = L_x$ : viene allora quantizzato l'impulso lungo  $\bar{x}$

$$k_1 = \frac{2\pi n_x}{L_x} \quad n_x \in \mathbb{Z}$$

D'altra parte, l'oscillatore armonico lungo  $\bar{y}$  deve oscillare *nella* scatola, i.e. il centro dell'oscillazione deve soddisfare il vincolo

$$l_m < y_0 < L_y - l_m$$

che, ricordando che  $L_y \gg l_m$ , possiamo approssimare col vincolo

$$0 < y_0 < L_y$$

Mettendo insieme questi due risultati si ha

$$0 < -\frac{\hbar c}{qB} \frac{2\pi n_x}{L_x} < L_y \quad \Rightarrow \quad 0 > n_x > -\frac{L_x L_y}{2\pi} \frac{qB}{mc} \frac{\hbar}{m}$$

e quindi  $|n_x|$  può assumere tutti i valori interi tra 0 e un massimo. Quantifichiamo la degenerazione dello spettro come

$$\text{Deg} = \left\lfloor \frac{l_x l_y}{2\pi} \right\rfloor \quad \text{dove} \quad l_j = \frac{L_j}{l_m}$$

Questi livelli energetici prendono il nome di **livelli di Landau**. Notiamo un fatto interessante: si ha una dipendenza identica, in questa formula, sugli assi  $\bar{x}$  e  $\bar{y}$  – il che è perfettamente sensato se consideriamo il fatto che il problema è originariamente **invariante per rotazioni sul piano  $xy$** . Immaginiamo di ruotare gli assi  $\bar{x}$  e  $\bar{y}$  di  $\pi/2$  rad: siccome

$$\bar{x} \rightarrow -\bar{y} \quad \bar{y} \rightarrow \bar{x}$$

eseguendo la stessa derivazione delle sezioni precedenti coi ruoli scambiati, troviamo un risultato finale uguale a quello già derivato. In qualche modo la simmetria che abbiamo rotto scegliendo la gauge si ripresenta nel momento in cui reintroduciamo la possibilità di una simmetria per scambio. Una scatola con “grande”  $L_x$  e “piccolo”  $L_y$  è equivalente a una con “piccolo”  $L_x$  e “grande”  $L_y$ , perché

- nel primo caso sono accessibili grandi lunghezze d'onda, ma la funzione d'onda è “stretta” lateralmente;
- nel secondo caso le lunghezze d'onda accessibili sono minori ma la funzione d'onda può spaziare molto di più sull'altro asse.

Conviene infine notare che possiamo mappare questo problema in quello originale mandando a  $\infty$  la distanza tra le pareti: la degenerazione scala proporzionalmente all'area.

### 12.3 EFFETTO ZEEMAN

Passiamo adesso ad occuparci di un altro effetto interessante: la perturbazione applicata da un campo magnetico su un atomo di idrogeno. Nelle sezioni precedenti abbiamo visto nel dettaglio l'effetto di un campo magnetico su una carica libera nello spazio tridimensionale: consideriamo adesso un elettrone legato a una carica nucleare, cioè il nostro solito modello di atomo di idrogeno descritto dall'hamiltoniana imperturbata

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{k}{r}$$

già rappresentata in coordinate, e applichiamo una perturbazione magnetica. Non è a priori chiaro quale termine sommare ad  $\hat{H}_0$ , quindi procediamo a ritroso: per una particella con carica  $q = -e$  in moto in un campo elettromagnetico, il cui potenziale elettrico  $\phi$  è dato dalla sola azione del nucleo atomico, sappiamo scrivere l'hamiltoniana:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m_e} \left( -i\hbar \nabla + \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 - \frac{k}{r} \\ &= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{k}{r}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\frac{1}{2m} \left[ -\frac{ie\hbar}{c} (\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) + \left( \frac{eA}{c} \right)^2 \right]}_{\hat{H}_1} \end{aligned}$$

Conviene precisare, a costo di essere ridondanti, che il termine  $\nabla \cdot \mathbf{A}$  che compare qui non è la divergenza di  $\mathbf{A}$ , ma la divergenza di  $\mathbf{A}\psi$ . L'hamiltoniana è un operatore, e tutti gli operatori che vi compaiono vanno immaginati come applicati alla funzione d'onda e a tutto quello che si trova nel mezzo.

Vogliamo trattare perturbativamente al primo ordine il sistema. Consideriamo quindi  $B$  come una perturbazione "piccola" (sottintendiamo il parametro continuo  $\lambda$  in  $B$  stesso). Non abbiamo ancora fissato gli assi cartesiani: sceglieremo un sistema comodo, con  $\mathbf{B}$  lungo l'asse  $\bar{z}$ . Tale campo può essere generato da un qualsiasi potenziale vettore della forma

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\alpha + \beta} (-\alpha By, \beta Bx, \gamma) \quad \text{con } \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}$$

come si verifica immediatamente computandone il rotore. Poniamo  $\alpha, \beta = 1$ ,  $\gamma = 0$  e troviamo un'espressione che sarà utile nel seguito

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} (-By, Bx, 0) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{x}$$

Questa scelta, detta **gauge simmetrica**, ci garantisce automaticamente che  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  (stavolta stiamo proprio parlando della divergenza di  $\mathbf{A}$ ): guardando la componente  $i$ -esima

$$\partial_i A_i = \partial_i \epsilon_{ijk} B_j x_k = \epsilon_{ijk} B_j \delta_{ik} = 0$$

poiché il tensore di Levi-Civita è non nullo solo per tre indici diversi tra loro, e il campo non dipende dalla posizione. Possiamo allora calcolare esplicitamente il termine

$$(\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) \psi = \nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) + \mathbf{A} \cdot (\nabla\psi) = 2\mathbf{A} \cdot (\nabla\psi)$$

	$m = +2$	$\xrightarrow{\text{-----}}$	$\underline{\text{Deg} = 1}$
	$m = +1$	$\xrightarrow{\text{-----}}$	$\underline{\text{Deg} = 2}$
$\underline{m = 0}$	$\underline{m = 0}$	$\xrightarrow{\text{-----}}$	$\underline{\text{Deg} = 3}$
	$m = -1$	$\xrightarrow{\text{-----}}$	$\underline{\text{Deg} = 2}$
	$m = -2$	$\xrightarrow{\text{-----}}$	$\underline{\text{Deg} = 1}$
$\underline{l = 0}$	$\underline{l = 1}$	$\underline{l = 2}$	

**Figura 12.1:** Parziale soluzione alla degenerazione dei livelli energetici per effetto Zeeman: tutti i livelli a sinistra sono relativi alle perturbazioni Zeeman dello stesso livello energetico imperturbato. In questo caso, per esempio, stiamo guardando il caso  $n = 3, l = 2$ . Come è evidente la soluzione alla degenerazione è solo parziale: i livelli di destra hanno una degenerazione direttamente dipendente da  $l, m$ .

D'altra parte possiamo ignorare il termine quadratrico in  $\mathbf{A}$  che compare nell'hamiltoniana: il potenziale vettore è lineare nel campo, che rappresenta proprio il parametro perturbativo, e noi vogliamo una trattazione al primo ordine. In definitiva, in questa gauge l'hamiltoniana perturbativa si scrive come

$$\hat{H}_1 = \frac{e}{m_e c} \mathbf{A} \cdot (-i\hbar \nabla) + \mathcal{O}(B^2)$$

Questa forma è particolarmente comoda: ricordando quanto visto nel Cap. 6 e sfruttando la ciclicità del prodotto misto si trova

$$\frac{1}{2} (\mathbf{B} \times \mathbf{x}) \cdot (-i\hbar \nabla) = \underbrace{(-i\hbar \mathbf{x} \times \nabla)}_{=\hat{\mathbf{L}}} \cdot \frac{\mathbf{B}}{2}$$

che permette di scrivere  $\hat{H}_1$  come

$$\hat{H}_1 = \frac{e}{2m_e c} \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \frac{e}{2m_e c} B L_z$$

Questo risultato è notevole: abbiamo fatto comparire nell'hamiltoniana un operatore,  $\hat{L}_z$ , che commuta con l'hamiltoniana imperturbata  $\hat{H}_0$ ; non solo, la base di autostati di  $\hat{H}_0$ , ovvero  $\mathcal{B} = \{|nlm\rangle\}$ , diagonalizza automaticamente la perturbazione. Il calcolo della variazione dei livelli energetici, a questo punto, è immediato:

$$E_n^{(1)}(m) = \langle nlm | \hat{H}_1 | nlm \rangle = \frac{eB}{2m_e c} \langle nlm | \hat{L}_z | nlm \rangle = \frac{eB}{2m_e c} m$$

Ciascun livello energetico  $E_n$  si separa in  $N$  righe spettrali equispaziate con un passo  $eB/(2m_e c)$ .

Possiamo calcolare con esattezza quante sono queste righe spettrali e quanti stati le popolano: sappiamo che, a priori, la degenerazione sullo spettro imperturbato è pari a

$$\text{Deg}_n^{(0)} = n^2$$

a causa della presenza di  $n$  possibili momenti angolari  $l = 0, \dots, n-1$ . La presenza di uno *splitting* dipendente da  $m$ , che può variare tra  $-l$  e  $+l$ , implica che



**Figura 12.2:** Illustrazione schematica dell'eccitazione di un atomo mediante un laser. Questa immagine in realtà ha scopo puramente estetico e non porta alcun contenuto scientifico.

- tutti gli  $n$  stati contribuiranno a  $E_n^{(1)}(0)$  con uno stato, perché per ogni momento angolare  $l$  c'è sempre lo stato  $m = 0$ . Quindi su quest'energia ci sarà una degenerazione pari a  $n$ ;
- la degenerazione su  $E_n^{(1)}(1)$  sarà pari a  $n - 1$ : qui abbiamo uno stato per ogni momento angolare tranne  $l = 0$ . Lo stesso vale per  $E_n^{(1)}(-1)$ ;
- in generale, a ogni energia  $E_n^{(1)}(\pm k)$  sono associati  $n - k$  stati – uno da ciascun momento angolare  $l = k, k + 1, \dots, n - 1$ .

Una rappresentazione grafica di questo ragionamento è riportata in Fig. 12.1. Questo risolve parzialmente la degenerazione: adesso abbiamo tanti livelli, tutti degeneri tranne  $E_n^{(1)}(n - 1)$  e  $E_n^{(1)}(-n + 1)$ , in cui arriva un solo stato dal solo momento angolare  $l_{\max} = n - 1$ . Il numero di questi livelli corrisponde al numero di valori di  $m$  ammessi nel sottospazio con  $n$  fissato, vale a dire

$$N = \max_l (\max_m m - \min_m m) + 1 = (n - 1) - (-n + 1) + 1 = 2n - 1$$

dove il  $+1$  è inserito per tenere conto del caso  $m = 0$ . Equivalentemente

$$N = 2l_{\max} + 1 = 2n - 1$$

## 12.4 ATOMO DI IDROGENO IN CAMPO EM

Cerchiamo ora di rivedere quanto già analizzato in Sez. 11.4.2, per ciò che concerne una perturbazione elettromagnetica che investe un sistema, per mezzo degli strumenti ottenuti in questo capitolo.

Immaginiamo ora che il **sistema quantistico dell'atomo di idrogeno** della sezione precedente sia immerso in un campo elettromagnetico generico. Supponiamo in particolare di disporre di un laser monocromatico come quello illustrato in Figura 12.2, che consenta di bombardare l'atomo tramite fotoni idealmente identici, tutti dotati della stessa energia.

Per quanto l'idea di poter lavorare con fotoni a questo stadio possa sembrare entusiasmante, specifichiamo che in questo contesto sarà sufficiente una **trattazione classica del campo elettromagnetico**; immagineremo infatti che la lunghezza d'onda della radiazione che investe l'atomo sia molto maggiore della scala di lunghezze tipica del bersaglio in esame, i.e.

$$\lambda \gg r_B \simeq 0.53 \cdot 10^{-10} \text{m}$$

D'altro canto, gli effetti di elettrodinamica quantistica possono essere trascurati fintanto che

$$\lambda \gg \lambda_C = \frac{\hbar}{mc}$$

dove  $\lambda_C$  è la lunghezza d'onda Compton del bersaglio di massa  $m$ . Nel nostro caso il bersaglio sarà l'elettrone, in quanto assumeremo – al solito – di trascurare la dinamica del nucleo nel riferimento del laboratorio. Quest'ultima richiesta si traduce in

$$\lambda \gg \lambda_C = \frac{h}{m_e c} \sim \frac{2\pi}{137} r_B < r_B$$

quindi la richiesta di sopra ingloba automaticamente anche questa.

L'obiettivo di questa sezione sarà quello di trattare questo sistema fisico con la teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo; infatti un'onda elettromagnetica che interagisce con un qualsiasi sistema fisico è, per natura, causa di effetti *time-dependent*.

Sappiamo scrivere l'hamiltoniano per una particella carica in campo elettromagnetico, che in questo caso sarà della forma ( $q = -e$ )

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) \right)^2 - e\phi(\hat{\mathbf{x}}, t) - \frac{k}{r}$$

Indicando con  $\hat{H}_0$  il solito hamiltoniano imperturbato per l'atomo di idrogeno

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{k}{r}$$

allora si può mostrare che l'hamiltoniano complessivo è scrivibile nella forma

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

dove la perturbazione

$$\hat{H}_1(t) = -\frac{e}{2mc} \{ \hat{\mathbf{P}}, \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) \} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t)^2 - e\phi(\hat{\mathbf{x}}, t)$$

contiene tutta l'informazione sui potenziali *time-dependent* dell'onda elettromagnetica incidente.

Tutto ciò non ha richiesto approssimazioni, se non quella di star lavorando con un campo elettromagnetico classico. Se ora imponiamo le seguenti richieste per l'onda incidente

- $\lambda \gg r_B$ ;
- regime non relativistico, anche dopo gli effetti della perturbazione, i.e.

$$\mathbf{F}_L = -e \left( \mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) \simeq -e\mathbf{E}$$

dove i campi  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$  sono quelli dell'onda incidente;

allora la forma della perturbazione  $\hat{H}_1$  si semplifica notevolmente. Infatti, nell'ipotesi di campo magnetico trascurabile una buona *gauge* potrebbe essere

$$\mathbf{A} = \mathbf{0} \implies \begin{cases} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = -\nabla\phi(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{B} = \mathbf{0} \end{cases}$$

e non solo, il campo  $\mathbf{E}$  è quindi conservativo, per definizione. Questo si può anche vedere da

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \partial_t \nabla \times \mathbf{A} \equiv \mathbf{0}$$

ricordando che il rotore del gradiente  $\nabla\phi(\mathbf{x})$  è sempre nullo.

L'integrale di linea del campo elettrico risulta nullo su ogni contorno chiuso nello spazio, e quindi possiamo integrare  $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = -\nabla\phi(\mathbf{x}, t)$  su un arbitrario percorso fissati i punti di partenza e di arrivo, ottenendo

$$\phi(\mathbf{x}, t) = - \int_0^{\mathbf{x}} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{x}$$

A questo punto consideriamo la prima richiesta, ovvero  $\lambda \gg r_B$ , dove sappiamo che  $r_B$  è rappresentativo dei valori tipici per  $|\mathbf{x}|$ ; ciò ci permette di sviluppare al primo ordine il campo elettrico

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \simeq \mathbf{E}(\mathbf{0}, t) + \mathcal{O}(\mathbf{x} \cdot \nabla \mathbf{E})$$

approssimando il campo come **uniforme su tutto l'atomo**. Quindi ricaviamo immediatamente  $\phi$ , avendo infine che

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{x}, t) &= -\mathbf{E}(\mathbf{0}, t) \cdot \mathbf{x} \\ \mathbf{A} &= \mathbf{0}\end{aligned}$$

per cui, passando agli operatori, la perturbazione assume la semplice forma

$$\hat{H}_1(t) = e\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{0}, t) = -\hat{\mathbf{p}}_e \cdot \mathbf{E}(t)$$

dove  $\hat{\mathbf{p}}_e = -e\hat{\mathbf{x}}$  è l'operatore di dipolo elettrico del sistema elettrone-nucleo. Il termine di perturbazione trovato è il risultato delle assunzioni di cui sopra, che conducono – al primo ordine – alla cosiddetta **approssimazione di dipolo** per il sistema in esame; benchè l'atomo non sia un dipolo elettrico di per sé, la forma della perturbazione ricorda esattamente quella di un dipolo in campo elettrico, ad ogni istante.

Non ci resta che stabilire una forma appropriata per il vettore campo elettrico  $\mathbf{E}$ . Classicamente questo assumerebbe la forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{0}, t) = \mathbf{E}_0 \left( e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega t} \right) \Big|_{\mathbf{x}=0} = \mathbf{E}_0 \left( e^{-i\omega t} + e^{i\omega t} \right)$$

dove  $\mathbf{E}_0$  è l'ampiezza massima e costante del campo. Da qui abbiamo

$$\hat{H}_1(t) = \hat{A} \left( e^{-i\omega t} + e^{i\omega t} \right)$$

dove  $\hat{A} = -\hat{\mathbf{p}}_e \cdot \mathbf{E}_0 \equiv \hat{A}^\dagger$ , essendo  $\hat{\mathbf{x}}$  hermitiano in ogni sua componente, in perfetta analogia con quanto visto in Sez. 11.4.2.

Fino ad ora non abbiamo scritto esplicitamente gli stati: chiamiamo  $|nlm\rangle$  la base standard di autostati simultanei degli operatori  $\hat{H}_0$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$  e  $\hat{L}_z$  – dove immaginiamo di fissare l'asse  $z$  nella direzione del campo elettrico. Su questa scelta, che si rivelerà utile nel semplificare i prossimi conti, abbiamo totale controllo. Supponiamo ora, ancora una volta, che l'atomo sia soggetto a tale perturbazione per un tempo finito  $T$ , i.e.

$$\hat{H}(t) = \begin{cases} \hat{H}_0 & \text{se } t < 0, t > T \\ \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t) & \text{se } 0 < t < T \end{cases}$$

e supponiamo inoltre che per  $t < 0$ , il sistema si trovi nel suo stato fondamentale

$$|\psi, t < 0\rangle = |1\ 0\ 0\rangle \quad \epsilon_1 = -\frac{m\alpha^2 c^2}{2}$$

Sappiamo che a seguito della rimozione della perturbazione, lo stato del sistema evolverà nel seguente modo

$$|\psi, t > T\rangle = \sum_{nlm \neq 100} a_{nlm}(T) e^{-i\epsilon_n t} |nlm\rangle$$

dove gli autostati  $|nlm\rangle$  di  $\hat{H}_0$  continuano ad evolvere per mezzo della corrispettiva fase, mentre le ampiezze  $a_{nlm}$  conservano di fatto la *storia* del sistema per  $0 < t < T$

$$|\psi, 0 < t < T\rangle = \sum_{nlm} a_{nlm}(t) e^{-i\epsilon_n t} |nlm\rangle$$

Assumiamo di essere certi che l'atomo si trovi nel suo stato fondamentale per  $t < 0$ , i.e. di aver misurato una energia  $\epsilon_i = \epsilon_1 = -\frac{m\alpha^2 c^2}{2}$ . Quantisticamente – e non sperimentalmente – parlando

$$\mathcal{P}(E = \epsilon_1; t < 0) = 1$$

Non ci curiamo di ciò che accade per  $0 < t < T$ , ma siamo interessati a stabilire qual è la probabilità che, misurando l'energia del sistema per  $t > T$ , si ottenga un certo valore  $\epsilon_f \neq \epsilon_i$ , tra i valori noti per lo spettro dell'hamiltoniano imperturbato.

Tuttavia, vista la degenerazione per  $n \geq 2$ , dobbiamo prestare attenzione a quanto segue; fino ad ora la risposta sarebbe stata, al primo ordine non nullo

$$\mathcal{P}(E = \epsilon_f) = |a_{nlm}(T)|^2 \simeq \left| a_{nlm}^{(1)}(T) \right|^2$$

dove, come abbiamo già mostrato in Sez. 11.4.1, tenendo  $\hbar = 1$

$$a_{nlm}^{(1)}(T) = -i \int_0^T \langle nlm | \hat{H}_1(t') | 1\ 0\ 0 \rangle e^{i\omega_{fi} t'} dt'$$

con  $\omega_{fi} = \epsilon_f - \epsilon_i$ .<sup>1</sup>

Ora però, la terna  $f = nlm$  è  $n^2$  volte degenere, per un dato valore di energia  $\epsilon_f$  che immaginiamo di poter misurare, quindi riscriviamo la relazione precedente in quest'altra forma, più generale:

$$\mathcal{P}(E = \epsilon_f) = \sum_{\text{Deg}(n)} |a_{nlm}(T)|^2$$

dove la somma incoerente delle probabilità è una conseguenza dell'ortonormalità tra gli autostati, anche all'interno del medesimo autospazio degenere. Infatti, se consideriamo ad esempio il livello  $n = 2$ , allora l'autospazio in questione ha degenerazione 4, quindi lo stato

$$|\psi_2, T\rangle \propto a_{200}(T) |2\ 0\ 0\rangle + \sum_{m=-1}^1 a_{21m}(T) |2\ 1\ m\rangle$$

è, a meno di una fase  $e^{-i\epsilon_2 t}$  comune ai singoli autostati di  $\hat{H}_0$ , il più generale autostato di  $\hat{H}_0$  avente energia  $E = \epsilon_2$  per  $t > T$ . Prendendone la norma quadra, si ottiene agevolmente

$$\mathcal{P}(E = \epsilon_2) = |a_{200}(T)|^2 + \sum_{m=-1}^1 |a_{21m}(T)|^2$$

Possiamo mantenere comodamente l'approssimazione al primo ordine dei coefficienti

$$|a_{nlm}(T)|^2 \simeq \left| a_{nlm}^{(1)}(T) \right|^2$$

ottenendo

$$\mathcal{P}(E = \epsilon_2) \simeq \left| a_{200}^{(1)}(T) \right|^2 + \sum_{m=-1}^1 \left| a_{21m}^{(1)}(T) \right|^2$$

Focalizziamo ora la nostra attenzione proprio sul primo livello eccitato. Avvalendoci del calcolo svolto in Sez. 11.4.2, otteniamo per ciascuno dei quattro casi:  $l = 0$  e  $l = 1, m = 0, \pm 1$

$$a_{2lm}^{(1)}(T) = -i \langle 2l m | \hat{A} | 100 \rangle \left( e^{i\Omega_- T} \frac{\sin(\Omega_- T)}{\Omega_-} - ie^{i\Omega_+ T} \frac{\sin(\Omega_+ T)}{\Omega_+} \right)$$

dove  $\Omega_{\pm} = (\omega_{fi} \pm \omega)/2$  e ricordando che qui  $\hat{A} \equiv \hat{A}^\dagger$ . Non ci resta che calcolare

$$\langle 2l m | \hat{A} | 100 \rangle$$

unico termine non del tutto esplicito nell'espressione, ma che contiene le informazioni fondamentali sulla dinamica dell'interazione. Rammentando in particolare  $\hat{A} = -\hat{\mathbf{p}}_e \cdot \mathbf{E}_0 \equiv e\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{E}_0$  l'elemento di matrice in questione si scrive come

$$e\mathbf{E}_0 \cdot \langle 2l m | \hat{\mathbf{x}} | 100 \rangle$$

che sarà somma dei tre termini dovuti alle tre componenti di  $\mathbf{E}_0$  e  $\hat{\mathbf{x}}$ . Per cui, sarà sufficiente ricavare

$$\langle 2l m | \hat{\mathbf{x}} | 100 \rangle$$

Il calcolo può essere svolto, al solito, passando per la rappresentazione delle coordinate. Tuttavia vogliamo mostrare ora come sia possibile approcciare questo specifico conto anche attraverso argomenti di simmetria, passando poi per il teorema di **Wigner-Eckart**, utile a calcolare elementi di matrice per operatori tensoriali di rango  $k$ .

In prima istanza, notiamo immediatamente che per la simmetria sotto parità degli autostati con  $l = 0$

$$\langle 200 | \hat{\mathbf{x}} | 100 \rangle = -\langle 200 | \hat{\mathbf{x}} | 100 \rangle = 0$$

e questo riduce il tutto alla sola trattazione del caso  $l = 1$ .

Una conseguenza – nel caso  $k = 1$  – del teorema di Wigner-Eckart è che, dato un operatore vettoriale

$$\hat{\mathbf{T}} = (\hat{T}_x, \hat{T}_y, \hat{T}_z)$$

riscrivibile in **componenti sferiche** della forma  $\hat{V}_q$  come segue

$$\hat{\mathbf{V}} = (\hat{V}_1, \hat{V}_0, \hat{V}_{-1})$$

$$\hat{V}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{T}_x \pm i \hat{T}_y) \quad \hat{V}_0 = \hat{T}_z$$

allora gli elementi di matrice di queste componenti sferiche nella base degli autostati del momento angolare si possono ottenere dalla relazione

$$\langle l'm' | \hat{V}_q | lm \rangle = C_{m'mq}^{l'l1} \langle l' | \hat{V}_q | l \rangle$$

Per un operatore tensoriale di rango  $k$  la relazione più generale sarebbe

$$\langle l'm' | \hat{V}_q^{(k)} | lm \rangle = C_{m'mq}^{l'l1} \langle l' | \hat{V}_q^{(k)} | l \rangle$$

dove  $C_{m'mq}^{l'l1}$  è il sono i coefficienti di Clebsch–Gordan – opportunamente tabulati – mentre  $\langle l' | \hat{V}_q^{(k)} | l \rangle$  è detto *elemento di matrice ridotto*.

L'operatore tensoriale è nel nostro caso proprio l'operatore di posizione  $\hat{\mathbf{x}}$ , che ben si presta alla scrittura in coordinate sferiche – prendendo un opportuno asse  $\hat{\mathbf{z}}$  di riferimento nello spazio

$$\hat{x}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} \pm i \hat{y}) \quad \hat{x}_0 = \hat{z}$$

Fortunatamente, da qui in avanti la questione è relativamente semplice. Ricordiamo infatti che i coefficienti di Clebsch–Gordan sono caratterizzati da **regole di selezione**, che sono utili ad individuare quali tra questi coefficienti sono non nulli. Queste regole si traducono automaticamente in regole di **transizione** per il sistema fisico in esame, che ammetterà quindi soltanto determinati numeri quantici nello stato finale, a partire da certi numeri quantici iniziali.

Riscriviamo la tesi del teorema in linea con ciò che ci interessa, specificando i numeri quantici iniziali e finali

$$\langle l_f m_f | \hat{\chi}_q | l_i m_i \rangle = C_{m_f m_i q}^{l_f l_i 1} \langle l_f | \hat{\chi}_q | l_i \rangle$$

dove ci rendiamo conto del fatto che, avendo fissato  $n = 2$ , risulta superfluo specificarlo: possiamo lavorare nella base degli autostati del momento angolare, come richiesto dal teorema.

Adesso è il momento di ricordarsi come è diretto  $\mathbf{E}$ : abbiamo fissato il nostro asse  $\hat{\mathbf{z}}$  proprio parallelo al campo elettrico. Questo ci permette di semplificare il conto, scrivendo

$$e\mathbf{E}_0 \cdot \langle 21m | \hat{\mathbf{x}} | 100 \rangle \equiv eE_0 \langle 21m | \hat{z} | 100 \rangle$$

che equivale a dover calcolare, nel sottospazio  $n = 2$

$$eE_0 \langle 1m | \hat{z} | 00 \rangle$$

Abbiamo quindi bisogno della sola componente sferica  $\hat{x}_0 = \hat{z}$ ; in definitiva, avendo in partenza ed in arrivo i numeri quantici

$$l_i = 0, m_i = 0 \quad \rightarrow \quad l_f = 1, m_f = 0, \pm 1$$

applicando la tesi del teorema otteniamo

$$\langle 1 m_f | \hat{z} | 0 0 \rangle = C_{m_f | m_i 0}^{1|01} \langle 1 | \hat{z} | 0 \rangle$$

stabiliamo ora quale tra i valori possibili di  $m_f$  fornisce un risultato non nullo; tra le regole di selezione ricordiamo

$$m_f \stackrel{!}{=} m_i + q$$

ma per l'operatore  $\hat{z} = \hat{\chi}_0$  abbiamo  $q = 0$ , per cui  $m_f = m_i$ . L'unico contributo alla probabilità di transizione sarà dunque

$$\mathcal{P}(E = \epsilon_2) = |e E_0 \langle 2 1 0 | \hat{z} | 1 0 0 \rangle|^2$$

che a questo punto, volendo, può anche essere calcolato tramite la procedura standard.

Ricapitolando: il teorema di Wigner-Eckart può essere utile a determinare – ed eventualmente calcolare – le singole ampiezze che contribuiscono alla probabilità totale di transizione tra un livello energetico e un altro, nella base del momento angolare. Nel caso appena analizzato, l'ampiezza di probabilità non nulla era soltanto una tuttavia abbiamo visto come sommare i vari contributi nel caso in cui questo non fosse vero.

## 12.5 EFFETTO AHARONOV-BOHM

Consideriamo adesso un altro esempio di interazione di una particella col campo elettromagnetico, che illustra il ruolo fondamentale svolto dai potenziali elettromagnetici classici nella teoria quantistica non relativistica. L'effetto fu teorizzato da Y. Aharonov e D. Bohm nel 1959 e fu verificato sperimentalmente qualche decennio più tardi.

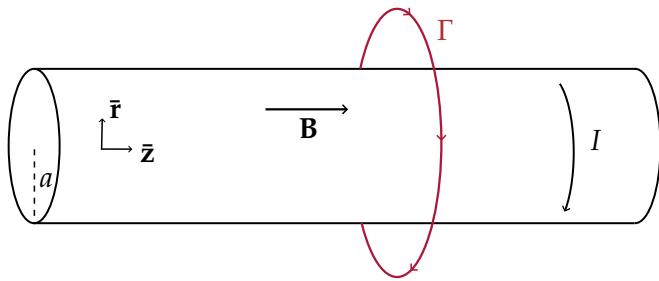
Consideriamo un solenoide infinito di raggio  $a$ , orientato parallelamente all'asse  $\bar{\mathbf{z}}$  e percorso da una corrente costante nel tempo, illustrato in Fig. 12.3. Esso genera un campo magnetico costante ed uniforme all'interno del solenoide e nullo all'esterno:

$$\mathbf{E} = \mathbf{0} \quad \mathbf{B} = \begin{cases} B_0 \bar{\mathbf{z}} & \text{se } r < a \\ \mathbf{0} & \text{se } r > a \end{cases}$$

dove per comodità usiamo coordinate cilindriche  $(r, \varphi, z)$ . Nel caso classico, se una particella si trova nella regione  $r > a$ , poiché i campi sono nulli, la forza di Lorentz (12.1) su di essa è nulla. Pertanto nel caso classico in assenza di campi elettromagnetici una particella non risente di alcun effetto dinamico.

Tutto ciò è indipendente dal fatto che in questa regione sia comunque presente un potenziale vettore. Infatti, il potenziale vettore non può annullarsi per nessuna scelta di gauge, in quanto se  $\Gamma$  è una linea chiusa orientata e fuori dal solenoide, usando il teorema di Stokes si ha

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B} \quad \implies \quad \int_{\Gamma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} \neq 0$$



**Figura 12.3:** Geometria considerata per l'effetto Aharonov-Bohm. La particella è vincolata a muoversi sulla circonferenza  $\Gamma$ , che ha raggio  $r$ .

dove  $S$  è la superficie racchiusa da  $\Gamma$ .

Chiamiamo  $\Phi(\mathbf{B}) = \pi a^2 B_0$  il flusso di  $\mathbf{B}$  attraverso l'intera superficie trasversale del solenoide. D'altronde, per argomenti di simmetria<sup>2</sup> si ha  $\mathbf{A} = A(r)\bar{\varphi}$  (dove  $\bar{\varphi}$  è il versore azimutale in coordinate cilindriche) e scegliendo come  $\Gamma$  una circonferenza di raggio  $r > a$  centrata nell'asse del solenoide, si ha

$$2\pi r A(r) = \Phi(\mathbf{B}) \implies \mathbf{A}(r) = \frac{\Phi(\mathbf{B})}{2\pi r} \bar{\varphi}$$

Nel contesto della Meccanica Quantistica, consideriamo cosa accade ad una particella vincolata a muoversi su tale circonferenza di raggio fissato  $r > a$ .

La cosa più comoda per trovare le energie possibili è lavorare in rappresentazione delle coordinate, e scrivere l'operatore impulso in coordinate cilindriche

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \left( \bar{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \bar{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \bar{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

ma il vincolo che la particella sia su  $\Gamma$ , i.e. a  $r$  e  $z$  costante ci permette di trascurare le derivate rispetto a queste due variabili. Pertanto si ha  $\psi = \psi(\varphi)$  e l'impulso risulta semplicemente

$$\hat{\mathbf{p}} = \bar{\varphi} \frac{-i\hbar}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \implies \hat{\mathbf{p}}^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

e ciò, unito al potenziale vettore trovato poc'anzi, inserito nell'hamiltoniana (12.3) dà luogo a

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2\mu} \left( \bar{\varphi} \frac{-i\hbar}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{q \Phi(\mathbf{B})}{c 2\pi r} \bar{\varphi} \right)^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{i q \Phi(\mathbf{B})}{\hbar c 2\pi} \right)^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} - i\eta \right)^2 \end{aligned}$$

dove abbiamo definito il parametro adimensionale  $\eta = q \Phi(\mathbf{B}) / (2\pi\hbar c)$ . Indichiamo con  $\mu$  la massa della particella e con  $q$  la sua carica. L'equazione agli autovalori di  $\hat{H}$  si scrive allora

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left( \frac{d}{d\varphi} - i\eta \right)^2 \psi(\varphi) = E\psi(\varphi)$$

Le soluzioni di quest'equazione differenziale, che a questo punto è ordinaria dipendendo dalla sola variabile  $\varphi$  (motivo per cui possiamo scambiare derivata totale e parziale), è un esponenziale complesso. Infatti provando l'Ansatz

$$\psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

si ottiene

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left( \frac{d^2}{d\varphi^2} - \eta^2 - 2i\eta \frac{d}{d\varphi} \right) \psi(\varphi) &= -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} [(im)^2 - \eta^2 - 2i\eta(im)] \psi(\varphi) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} [-m^2 - \eta^2 + 2m\eta] \psi(\varphi) \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} (m - \eta)^2 \psi(\varphi) \equiv E\psi(\varphi) \end{aligned}$$

Osserviamo che abbiamo scelto la normalizzazione in modo da avere

$$\int_0^{2\pi} d\varphi |\psi(\varphi)|^2 = 1$$

mentre imponendo la funzione sia ad un solo valore, cioè  $\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$ , si conclude che

$$e^{i2\pi m} = 1 \implies m \in \mathbb{Z}$$

ossia  $m$  deve essere un numero intero. In effetti, il problema considerato è a simmetria cilindrica, pertanto è invariante per rotazioni sul piano  $xy$  e dunque la proiezione lungo  $\bar{z}$  del momento angolare si conserva:  $m$  è infatti proprio il numero quantico relativo a  $\hat{L}_z$ .

Infatti in rappresentazione delle coordinate l'operatore momento angolare si può scrivere

$$\hat{L} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} = r \bar{\mathbf{r}} \times \left( -\frac{i\hbar}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \bar{\varphi} \right) = -i\hbar \frac{d}{d\varphi} \bar{\mathbf{z}}$$

dove ricordiamo che gli operatori sono indicati con il cappuccio, i versori con una barra. Pertanto

$$\hat{L}_z \psi_m(\varphi) = -i\hbar \frac{d}{d\varphi} \psi(\varphi) = -i\hbar(im) \psi(\varphi) = \hbar m \psi(\varphi)$$

quindi  $m$  è (in unità di  $\hbar$ ) proprio la proiezione del momento angolare dello stato lungo  $\bar{z}$ . Pertanto non ci stupisce troppo che debba assumere valori interi.

Concludiamo che gli autostati dell'energia sono

$$\psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad \text{con energie} \quad E_m = \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} (m - \eta)^2 \quad (12.9)$$

che in effetti al variare di  $m \in \mathbb{Z}$  sono un set completo per le funzioni  $L^2(0, 2\pi)$ .

Calcoliamo la corrente di probabilità associata a uno di questi autostati: abbiamo visto in precedenza che essa è legata all'operatore velocità come in Eq. (12.6). Poiché si ha

$$\hat{\mathbf{v}} \psi_m = \frac{1}{\mu} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi_m = \bar{\varphi} \frac{-i\hbar}{\mu r} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} + \eta \right) \psi_m = \bar{\varphi} \frac{\hbar}{\mu r} (m - \eta) \psi_m$$

Allora

$$\mathbf{J} = \operatorname{Re}(\psi_m^* \hat{\mathbf{v}} \psi_m) = \frac{\hbar}{\mu r} (m - \eta) |\psi_m|^2 \bar{\varphi} = \frac{\hbar}{2\pi\mu r} (m - \eta) \bar{\varphi}$$

Osserviamo che nel caso di campo magnetico nullo  $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ ,  $\Phi = 0$ , i livelli energetici di una particella su una circonferenza sono

$$E_n^{(\text{circ})} = \frac{\hbar^2 n^2}{2\mu r^2}$$

Mentre abbiamo visto che l'aggiunta del campo porta un termine aggiuntivo:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mr^2} (n - \eta)^2$$

dipendente dal parametro

$$\eta = \frac{e\Phi}{2\pi\hbar c} \equiv \frac{\Phi}{\Phi_0}$$

dove  $\Phi_0$  può essere interpretato come un'*unità di flusso* del campo magnetico. Se  $\eta$  è intero lo spettro è inalterato dalla presenza del solenoide. Per esempio se  $\eta = 1$ , lo spettro in energia rimane lo stesso che si avrebbe in assenza del solenoide, perché rispetto ad esso ogni autostato viene mappato nel successivo. I livelli rimangono gli stessi complessivamente al variare di  $m \in \mathbb{Z}$ . Viceversa, se  $\Phi$  non è multiplo di  $\Phi_0$  allora la particella subisce uno *shift* misurabile dei livelli energetici.

In definitiva la presenza di un **potenziale elettromagnetico**, anche in **assenza di campi**, produce effetti **misurabili** sulle funzioni d'onda e sulle energie. Difatti, l'effetto è stato verificato sperimentalmente, in un contesto di interferenza da doppia fenditura.

## NOTE

- Specifichiamo inoltre, che in questa sezione stiamo considerando  $\lambda = 1$ , avendo scritto l'hamiltoniano complessivo come

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

anzichè come

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$$

Chiaramente è del tutto equivalente, a meno di individuare – caso  $\lambda = 1$  – nelle quantità fisiche esplicite in  $\hat{H}_1$  le condizioni di *perturbazione debole*.

- Il potenziale vettore dipenderà inizialmente dalle tre coordinate cilindriche:  $\mathbf{A}(r, \varphi, z)$ . Le simmetrie per traslazioni lungo  $z$  e per rotazioni attorno a  $z$  eliminano le dipendenze da  $z$  e da  $\varphi$ :

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}(r)$$

Tuttavia  $\mathbf{A}$  non può essere diretto lungo  $z$ , essendovi diretto il suo rotore (lo si può verificare per calcolo diretto a partire dall'espressione di  $\nabla \times \mathbf{A}$  in coordinate cilindriche). D'altra parte il potenziale vettore non può neanche essere diretto lungo  $r$ : infatti, se supponiamo di avere una componente radiale non nulla in almeno un punto  $r_0$

$$A_r(r_0) \neq 0$$

allora questa sarà positiva (uscente) o negativa (entrante). Se adesso invertiamo il senso della corrente, otteniamo

$$\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A} \quad \Rightarrow \quad A_r(r_0) \rightarrow -A_r(r_0)$$

ma questo non ha senso! Se ruotiamo l'intero solenoide riportando il campo magnetico lungo la direzione iniziale, stavolta con la stessa situazione fisica iniziale abbiamo che un potenziale prima era uscente oppure entrante è adesso rispettivamente entrante oppure uscente. Questo è un controsenso: allora non esiste alcun punto  $r_0$  tale che  $A_r(r_0) \neq 0$ , i.e. il potenziale vettore ha componente radiale ovunque nulla. Mettendo insieme tutto questo si trova che

$$\mathbf{A} = A_\varphi(r)\hat{\varphi}$$

## IN BREVE...

- ◊ In presenza di potenziali elettromagnetici l'hamiltoniana quantistica per una particella si ottiene quantizzando quella classica, i.e. scrivendo

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) \right)^2 + q\phi(\hat{\mathbf{x}}, t)$$

L'operatore velocità ad essa connesso si calcola come

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{x}}] = \frac{1}{m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)$$

- ◊ La richiesta di invarianza di gauge sui campi va estesa anche all'evoluzione temporale e alla statistica delle osservabili: si trova che le corrette trasformazioni di gauge sono

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial\chi}{\partial t} \\ \psi &\rightarrow \psi' = \psi \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \chi\right) \\ \hat{H} &\rightarrow \hat{H}' = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) - \frac{q}{c} \nabla\chi \right)^2 + q\phi(\hat{\mathbf{x}}, t) - \frac{q}{c} \frac{\partial\chi}{\partial t} \end{aligned}$$

Le trasformazioni sull'hamiltoniana e sulla funzione d'onda sono coerenti con l'Eq. di Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi \quad i\hbar\partial_t\psi' = \hat{H}'\psi'$$

- ◊ Per una particella in moto in un campo magnetico uniforme lo spettro è dato da

$$E_n(k_3) = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} \quad \text{con } n \in \mathbb{N}, k_3 \in \mathbb{R}$$

Il fatto che compaia uno spettro discreto di oscillatore armonico unidimensionale è interamente dovuto al fatto che, scelta una gauge, le relazioni di commutazione tra le velocità le direzioni ortogonali al campo sono non banali. Questo spettro ha degenerazione infinita perché non dipende da  $k_1$ .

- ◊ Nello stesso sistema si ricavano le autofunzioni nella rappresentazione delle coordinate:

$$\psi_{n,k_3}(x, y, z) = \underbrace{\exp(ik_3z)}_{\text{asse } z} \cdot \underbrace{C_n H_n\left(\frac{(y-y_0)^2}{2l_m^2}\right)}_{\text{piano } xy} \exp\left(ik_1x - \frac{(y-y_0)^2}{2l_m^2}\right)$$

La forma che assumono è **fortemente dipendente dalla gauge**.

- ◊ Se sottoponiamo una particella carica a un campo magnetico diretto lungo  $z$  confinandola sul piano  $xy$ , i.e. limitandone il moto in

$$0 \leq x \leq L_x \quad 0 \leq y \leq L_y$$

allora gli impulsi sul piano  $xy$  si quantizzano e la degenerazione dello spettro diviene finita

$$\text{Deg} = \left\lfloor \frac{l_x l_y}{2\pi} \right\rfloor \quad \text{dove} \quad l_j = \frac{L_j}{l_m}$$

Questi sono i cosiddetti **Livelli di Landau**.

- ◊ Sottponendo un atomo di idrogeno a un campo magnetico si osserva una parziale risoluzione alla degenerazione dei livelli energetici: su ogni stato si ha una perturbazione dipendente dal numero quantico  $m$

$$|nlm\rangle : E_n \rightarrow E_n + \frac{eB}{2m_e c} m$$

Questo risultato si ottiene lavorando nella **gauge simmetrica** e applicando la Teoria delle Perturbazioni per eliminare un termine di ordine  $\mathcal{O}(B^2)$  e calcolare la correzione perturbativa. Il fenomeno prende il nome di **Effetto Zeeman**.

- ◊ Se colpiamo un atomo di idrogeno con un'onda e.m. nella condizione  $\lambda \gg r_B$  e regime non relativistico, allora possiamo approssimare il campo a ogni istante come uniforme su tutto l'atomo. Allineando l'asse  $z$  con la direzione dell'onda incidente e usando la Teoria delle Perturbazioni *time-dependent* si trova che la probabilità di transizione da uno stato iniziale definito a uno finale su un livello degenere è dato da

$$\mathcal{P}(E = \epsilon_f) \simeq \sum_{\text{Deg}(f)} \left| a_{nlm}^{(1)}(T) \right|^2$$

Nel calcolo dei coefficienti  $a^{(1)}$ , dipendenti dagli elementi di matrice tra stato iniziale e finale, è comodo usare regole di selezione sulla parità e rimappare la perturbazione, qui lineare nell'operatore posizione, in una terna di tensori sferici per poter sfruttare il **Teorema di Wigner-Eckart** e le regole di selezione sui Coefficienti di Clebsch-Gordan per semplificare ulteriormente i calcoli.

- ◊ Data una particella carica che si muove su una circonferenza di raggio  $r$  attorno a un solenoide di raggio  $a < r$  percorso da corrente, le autofunzioni d'onda sono

$$\psi_n(\varphi) = \frac{e^{in\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad \text{con } n \in \mathbb{Z}$$

e lo spettro è dato da

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left( n - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)$$

e quindi lo shift sullo spettro (che prende il nome di **Effetto Aharonov-Bohm**) è misurabile solo se  $\Phi/\Phi_0$  non è intero.



# 13

## SIMMETRIE DISCRETE E PARTICELLE IDENTICHE

In questo capitolo introduciamo formalmente il concetto di **simmetria discreta**, diversa rispetto alle simmetrie continue trattabili nel formalismo dei Gruppi di Lie che abbiamo incontrato fino ad ora. Fanno parte di questa classe di simmetrie la Parità e l'operatore di Time-Reversal, più correttamente definito Inversione del moto. È poi descritto il concetto di **particelle identiche**, legato all'azione del gruppo delle permutazioni sugli stati di molte particelle indistinguibili. Infine, è illustrato un esempio del celebre principio di esclusione.

### 13.1 PARITÀ

L'operatore parità  $\hat{P}$  è stato già definito in Sez. 4.4.1 e trattato a più riprese. L'utilizzo di argomenti legati alla parità degli stati è un esempio lampante di come sia possibile semplificare molto i calcoli sfruttando le simmetrie. Ripetiamo adesso l'azione dell'operatore sulle osservabili posizione, impulso e momento angolare (i primi due sono vettori, il terzo uno pseudo-vettore):

$$\begin{aligned}\hat{P} \hat{x} \hat{P} &= -\hat{x} \\ \hat{P} \hat{p} \hat{P} &= -\hat{p} \\ \hat{P} \hat{j} \hat{P} &= \hat{j}\end{aligned}$$

dove abbiamo usato  $\hat{P}^2 = \mathbb{1}$ , dunque  $\hat{P}^{-1} = \hat{P}^\dagger = \hat{P}$ . Se in un sistema la parità commuta con l'operatore hamiltoniano,

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0$$

allora la parità è conservata, cioè se a  $t = 0$  uno stato è preparato con parità definita, allora mantiene tale parità durante l'evoluzione temporale.

*Dimostrazione.* Sia  $\hat{P} |\psi(t=0)\rangle = \pm |\psi(t=0)\rangle$ . Allora

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

in quanto se  $\hat{P}$  commuta con  $\hat{H}$  allora commuta anche con l'evolutore.  $\square$

#### 13.1.1 Regola di selezione: elementi di matrice fra stati a parità definita

Formalizziamo un ragionamento già fatto molte volte nel corso del testo: è possibile, per un generico operatore hermitiano  $\hat{A}$  che viene trasformato dalla parità come

$$\hat{P} \hat{A} \hat{P} = c \hat{A} \quad \text{con } c = \pm 1$$

Allora è nullo qualsiasi elemento di matrice:

- tra stati a diversa parità, se  $c = +1$ .
- tra stati della stessa parità, se  $c = -1$ ;

In modo pittoresco possiamo ricordare questa proprietà dicendo che **operatori pari sotto parità connettono solo gli stati con stessa parità**, mentre gli **operatori dispari sotto parità connettono solo gli stati con parità opposta**.

*Dimostrazione.* Cominciamo col caso  $c = +1$ . Siano  $|+^{(1)}\rangle$  e  $|-(1)\rangle$  due generici autostati della parità:

$$\hat{P}|+^{(1)}\rangle = |+^{(1)}\rangle \quad \hat{P}|-(1)\rangle = -|-(1)\rangle$$

Allora segue immediatamente che

$$\begin{aligned} \langle +^{(1)}|\hat{A}|-(1)\rangle &= c \langle +^{(1)}|\hat{A}|-(1)\rangle \\ &= \langle +^{(1)}|\hat{P}\hat{A}\hat{P}|-(1)\rangle = -\langle +^{(1)}|\hat{A}|-(1)\rangle \end{aligned}$$

Confrontando il primo e l'ultimo termine della catena concludiamo che deve essere nullo l'elemento di matrice tra qualsiasi coppia di stati a diversa parità.

Poniamo adesso  $c = -1$ ; sia un altro stato della parità

$$\hat{P}|+^{(2)}\rangle = |+^{(2)}\rangle$$

e anticipiamo la dimostrazione funziona nello stesso modo con un autostato dell'autovalore  $-1$ . Segue che

$$\begin{aligned} \langle +^{(1)}|\hat{A}|+^{(2)}\rangle &= -c \langle +^{(1)}|\hat{A}|+^{(2)}\rangle \\ &= -\langle +^{(1)}|\hat{P}\hat{A}\hat{P}|+^{(2)}\rangle = -\langle +^{(1)}|\hat{A}|+^{(2)}\rangle \end{aligned}$$

Di nuovo, confrontando il primo e l'ultimo termine vediamo che ogni elemento di matrice fra stati a uguale parità deve annullarsi.  $\square$

Questa regola può risultare utile in diversi contesti: ad esempio

- nel nostro modello degli atomi idrogenoidi il calcolo della posizione media su qualsiasi autostato  $|nlm\rangle$  conduce sempre a 0, dal momento che ognuno di questi stati è autostato della parità per l'autovalore  $(-1)^l$ ;
- una perturbazione lineare nella coordinata o nell'impulso sull'atomo di idrogeno, come può essere l'Effetto Stark (si veda il Cap. ??) non ha elementi di matrice tra stati a  $l_1, l_2$  entrambi pari o entrambi dispari;

e similmente per altri sistemi. In conclusione, è consigliabile interrogarsi su come si comporti un operatore sotto applicazione della parità se si ha a disposizione una base di autostati a parità definita per semplificarsi la vita.

## 13.2 OPERATORE DI INVERSIONE TEMPORALE

Introduciamo adesso un'altra trasformazione degli stati e degli operatori, associata alla cosiddetta *simmetria per inversione temporale* o *time reversal symmetry*.

In Sez. 3.1 abbiamo enunciato il teorema di Wigner, per cui gli operatori di simmetria nello spazio degli stati possono essere soltanto unitari o anti-unitari. L'operatore di *time reversal*  $\hat{T}$  fa parte della seconda categoria e pertanto presenta degli aspetti diversi dalle usuali simmetrie rappresentate da operatori unitari.

Anche in questo caso la cosa più semplice è definire l'azione dell'operatore sugli operatori  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$ ,  $\hat{J}$ . Vorremmo che l'operatore sia associato in qualche modo all'inversione temporale, o più propriamente all'inversione del moto di una particella. Questo può essere implementato definendo  $\hat{T}$  come

$$\begin{aligned}\hat{T} \hat{x} \hat{T}^{-1} &= \hat{x} \\ \hat{T} \hat{p} \hat{T}^{-1} &= -\hat{p} \\ \hat{T} \hat{J} \hat{T}^{-1} &= -\hat{J}\end{aligned}$$

Scriviamo  $\hat{T}^{-1}$  e non  $\hat{T}^\dagger$  perché l'azione di quest'ultimo non è definita in modo chiaro ed univoco nel formalismo bra-ket, e anzi molte espressioni che usiamo comunemente per operatori lineari diverrebbero ambigue. Pertanto eviteremo nel seguito di far agire l'operatore di inversione temporale sui *bra*. Vale comunque  $\hat{T}^2 = \mathbb{1}$ . Tuttavia la richiesta che un operatore di questo tipo preservi le relazioni di commutazione canoniche,

$$[\hat{T} \hat{x}_i \hat{T}^{-1}, \hat{T} \hat{p}_j \hat{T}^{-1}] = [\hat{x}_i, -\hat{p}_j] = -i\hbar \delta_{ij}$$

espandendo il membro di sinistra

$$\begin{aligned}[\hat{T} \hat{x}_i \hat{T}^{-1}, \hat{T} \hat{p}_j \hat{T}^{-1}] &= \hat{T} \hat{x}_i \hat{T}^{-1} \hat{T} \hat{p}_j \hat{T}^{-1} - \hat{T} \hat{p}_j \hat{T}^{-1} \hat{T} \hat{x}_i \hat{T}^{-1} \\ &= \hat{T} (\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{x}_i) \hat{T}^{-1} \\ &= \hat{T} [\hat{x}_i, \hat{p}_j] \hat{T}^{-1} \\ &= \hat{T} i\hbar \delta_{ij} \hat{T}^{-1}\end{aligned}$$

porta a richiedere

$$\hat{T} i\hbar \delta_{ij} \hat{T}^{-1} = -i\hbar \delta_{ij}$$

ossia  $\hat{T}$  deve essere anti-lineare:

$$\hat{T} c = c^* \hat{T}$$

con  $c \in \mathbb{C}$ . Se vogliamo che  $\hat{T}$  possa rappresentare una simmetria, l'unica possibilità rimasta compatibile col teorema di Wigner è che sia anti-unitario, cioè:

- $\hat{T}$  è anti-lineare,

$$\hat{T}(a |\psi_1\rangle + b |\psi_2\rangle) = a^* \hat{T} |\psi_1\rangle + b^* \hat{T} |\psi_2\rangle \quad \forall a, b \in \mathbb{C}, \forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$$

- $\hat{\mathcal{T}}$  conserva la norma,

$$\| |\psi\rangle \| = \| \hat{\mathcal{T}} |\psi\rangle \| \quad \forall |\psi\rangle$$

- $\hat{\mathcal{T}}$  è invertibile, cioè  $\exists \hat{\mathcal{T}}^{-1}$ .

Osserviamo che, poiché sotto l'azione dell'operatore di inversione si ha  $\hat{\mathbf{p}}^2 \rightarrow \hat{\mathbf{p}}^2$ , l'operatore hamiltoniano di particella libera commuta con  $\hat{\mathcal{T}}$ :

$$\hat{\mathcal{T}} \hat{\mathbf{p}}^2 \hat{\mathcal{T}}^{-1} = \hat{\mathbf{p}}^2 \quad \Rightarrow \quad [\hat{\mathcal{T}}, \hat{\mathbf{p}}^2] = 0 \quad \Rightarrow \quad \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \hat{\mathcal{T}} \right] = 0$$

Per la stessa ragione l'operatore di inversione temporale commuta con un hamiltoniano della forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}) \quad (13.1)$$

ma non con quello di una particella in campo elettromagnetico, in cui sono presenti termini lineari nell'impulso.

Notiamo inoltre che  $\hat{\mathcal{T}}$  **non** inverte il segno della variabile temporale di per sé, in quanto il tempo ha in Meccanica Quantistica un ruolo sostanzialmente diverso da posizione ed impulso, non essendo rappresentato da un operatore hermitiano. Piuttosto il tempo è una variabile continua reale, da cui dipendono le altre quantità fisiche.

Tuttavia, esiste un legame tra l'operatore  $\hat{\mathcal{T}}$  ed un'inversione di  $t$ , nel senso illustrato di seguito. Se  $[\hat{H}, \hat{\mathcal{T}}] = 0$ , allora componendo  $\hat{\mathcal{T}}$  con l'equazione di Schrödinger

$$\hat{\mathcal{T}} \hat{H} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{T}} i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle \quad \Rightarrow \quad \underbrace{\hat{\mathcal{T}} \hat{H} \hat{\mathcal{T}}^{-1}}_{\hat{H}} \hat{\mathcal{T}} |\psi(t)\rangle = -i\hbar \hat{\mathcal{T}} \partial_t |\psi(t)\rangle$$

dunque

$$\hat{H} \hat{\mathcal{T}} |\psi(t)\rangle = -i\hbar \partial_t \hat{\mathcal{T}} |\psi(t)\rangle$$

cioè il *ket*  $\hat{\mathcal{T}} |\psi(t)\rangle$  soddisfa un'equazione simile a quella di Schrödinger ma con un **segno sbagliato**. Per ristabilire la forma usuale dell'equazione di Schrödinger possiamo riparametrizzare l'evoluzione dello stato con un'operazione di inversione temporale,

$$t \rightarrow -t \quad \Rightarrow \quad \partial_{-t} = -\partial_t$$

pertanto

$$\hat{H} \hat{\mathcal{T}} |\psi(-t)\rangle = i\hbar \partial_t \hat{\mathcal{T}} |\psi(-t)\rangle$$

cioè uno stato che evolve secondo l'equazione di Schrödinger è tale che lo stato ottenuto trasformandolo secondo  $\hat{\mathcal{T}}$  e invertendo il tempo evolve anch'esso secondo la stessa equazione di evoluzione temporale.

Vediamo le implicazioni di questa proprietà nella rappresentazione delle coordinate. Prendiamo un operatore hamiltoniano della forma (13.1). Scrivendo l'equazione di Schrödinger e prendendone il complesso coniugato:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\hat{\mathbf{x}}) \right) \psi^*(\mathbf{x}, t) = -i\hbar \partial_t \psi^*(\mathbf{x}, t)$$

si può osservare che mandando  $t \rightarrow -t$ , per la stessa ragione di sopra si ha

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right) \psi^*(\mathbf{x}, -t) = i\hbar \partial_t \psi^*(\mathbf{x}, -t)$$

ossia  $\psi^*(\mathbf{x}, -t)$  soddisfa l'equazione di Schrödinger. Il procedimento qui descritto, che potrebbe sembrare del tutto generale, in realtà è valido proprio soltanto se l'hamiltoniano commuta con  $\hat{T}$ , cosa che ci ha permesso di prendere il coniugato complesso dell'equazione di Schrödinger lasciando l'operatore  $\hat{H}$  inalterato. Nel caso di una particella in campo elettromagnetico, per esempio, prendere il coniugato di Schrödinger avrebbe cambiato anche  $\hat{H}$  nel membro di sinistra dell'equazione, invalidando la conclusione. Riassumendo, si ha che:

$$\text{se } [\hat{H}, \hat{T}] = 0, \begin{cases} |\psi(t)\rangle \text{ risolve (2.4)} & \Rightarrow \hat{T}|\psi(-t)\rangle \text{ risolve (2.4)} \\ \psi(\mathbf{x}, t) \text{ risolve (2.6)} & \Rightarrow \psi^*(\mathbf{x}, -t) \text{ risolve (2.6)} \end{cases} \quad (13.2)$$

### 13.2.1 Operatore di inversione e conservazioni

Una differenza rispetto al caso delle simmetrie rappresentate da operatori unitari sta nel fatto che alla simmetria per inversione temporale non è associata nessuna legge di conservazione. Questo può essere verificato direttamente come segue: essendo  $\hat{T}$  antiunitario, deve conservare la norma e dunque tutti i suoi autovalori  $\lambda$  devono avere modulo unitario

$$|u\rangle = \|\hat{T}|u\rangle\| = |\lambda|\| |u\rangle\|$$

con  $|u\rangle$  autostato. D'altra parte  $\hat{T}^2$  agisce come l'identità su entrambe le basi complete  $|\mathbf{x}\rangle$ ,  $|\mathbf{p}\rangle$  – come si vede dall'azione sugli operatori, ma comunque verificheremo a breve. Deve quindi essere  $\hat{T}^2 = \mathbb{1}$ : i suoi autovalori possono essere solamente  $\pm 1$ . Detto quindi  $|u(0)\rangle$  un autostato di  $\hat{T}$  al tempo iniziale, si ha

$$\hat{T}|u(t)\rangle = \hat{T}e^{-i\hat{H}t}|u(0)\rangle = \pm e^{i\hat{H}t}|u(0)\rangle \neq \pm |u(t)\rangle$$

dove abbiamo supposto hamiltoniana indipendente dal tempo e commutatività tra  $\hat{T}$  e  $\hat{H}$ . Notiamo esplicitamente che, essendo l'operatore in questo contesto **antilineare**, per una generica funzione  $f(\hat{H})$  scrivibile come espansione polinomiale (come sempre, consideriamo solo funzioni di operatori di questo tipo) si ha

$$\hat{T}f(\hat{H}) = \hat{T} \sum_k a_k \hat{H}^k = \sum_k a_k^* \hat{H}^k \hat{T} = f^*(\hat{H}) \hat{T}$$

motivo per cui si ha la disegualanza finale.

### 13.2.2 Azione del *time-reversal* sulle rappresentazioni di impulso e posizione

Verifichiamo, per concludere, alcune proprietà che illustrano l'azione di  $\hat{T}$  in varie rappresentazioni:

- $\hat{T}|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle$ . Infatti espandendo in base delle  $\mathbf{x}$

$$|\psi\rangle = \int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\psi\rangle$$

dunque

$$\hat{T}|\psi\rangle = \int d^3x \hat{T}|\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\psi\rangle = \int d^3x \langle \mathbf{x}|\psi\rangle^* \hat{T}|\mathbf{x}\rangle = \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}) \hat{T}|\mathbf{x}\rangle$$

Ma d'altra parte possiamo sfruttare il fatto che, in questa rappresentazione, l'operatore di *time reversal* può essere interpretato come un operatore di coniugazione complessa. Infatti è immediato verificare che presi  $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  e  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$ , allora l'operatore di coniugazione complessa soddisfa le tre richieste che abbiamo fatto all'inizio di questa sezione per l'operatore di inversione temporale. Tale operatore di coniugazione deve agire in modo antilineare, coniugando ognuna delle proiezioni dello stato  $|\psi\rangle$  sui vettori di base  $|\mathbf{x}\rangle$ , ossia

$$\hat{T}|\psi\rangle = \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle$$

pertanto confrontando le ultime due espressioni concludiamo che  $\hat{T}|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle$ .

- $\hat{T}|\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle$ . Infatti ricordando l'espressione delle autofunzioni dell'impulso in rappresentazione delle  $\mathbf{x}$ , i.e. onde piane

$$|\mathbf{p}\rangle = \int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle = \int d^3x |\mathbf{x}\rangle \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

si ha, sfruttando l'antilinearità:

$$\hat{T}|\mathbf{p}\rangle = \int d^3x \frac{e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \underbrace{\hat{T}|\mathbf{x}\rangle}_{|\mathbf{x}\rangle} = \int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|-\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle$$

Pertanto per uno stato generico l'espansione nello spazio degli impulsi si scrive

$$\hat{T}|\psi\rangle = \int d^3p \hat{T}|\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|\psi\rangle = \int d^3p \langle \mathbf{p}|\psi\rangle^* |-\mathbf{p}\rangle = \int d^3p \tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) |-\mathbf{p}\rangle$$

dove abbiamo usato l'anti-linearità ed il risultato appena dimostrato.

In definitiva l'azione dell'operatore di inversione temporale è diversa nelle diverse rappresentazioni: se nello spazio delle coordinate è equivalente ad una coniugazione complessa, nello spazio degli impulsi è interpretabile come una coniugazione complessa e uno scambio tra la proiezione dello stato  $|\psi\rangle$  sull'autostato  $|\mathbf{p}\rangle$  e la proiezione dello stato  $|\psi\rangle$  sull'autostato con impulso opposto  $|-\mathbf{p}\rangle$ .

### 13.2.3 Inversione del moto e Spin

Nella sezione precedente abbiamo visto che, sulla base delle  $|x\rangle$ , l'operatore di inversione del moto, o di *time reversal*, corrisponde ad una coniugazione complessa dei coefficienti:

$$\hat{\mathcal{T}} = \hat{K}_0$$

dove l'operatore  $\hat{K}_0$  agisce coniugando i coefficienti della combinazione lineare di *ket* a cui è applicato o, nel caso continuo, la funzione d'onda, e vale  $\hat{K}_0 = \hat{K}_0^\dagger$ :

$$\begin{cases} \hat{K}_0^2 = \mathbb{1} \\ \hat{K}_0 \hat{K}_0^\dagger = \mathbb{1} \end{cases} \implies \hat{K}_0 = \hat{K}_0^{-1} = \hat{K}_0^\dagger$$

Adesso vogliamo tenere conto di un eventuale spin. Dalla definizione operativa dell'operatore  $\hat{\mathcal{T}}$ , guardando come esso agisce su  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$ , è evidente notare che, per quanto riguarda il momento angolare orbitale

$$\hat{\mathcal{T}} \hat{\mathbf{L}} \hat{\mathcal{T}}^{-1} = -\hat{\mathbf{L}}$$

quindi, se vogliamo che sia rispettata l'equazione

$$\hat{\mathcal{T}} \hat{\mathbf{j}} \hat{\mathcal{T}}^{-1} = -\hat{\mathbf{j}}$$

per il momento angolare totale, segue che dobbiamo imporre

$$\hat{\mathcal{T}} \hat{\mathbf{s}} \hat{\mathcal{T}}^{-1} \stackrel{!}{=} -\hat{\mathbf{s}}$$

dove indichiamo con  $\hat{\mathbf{s}}$ , come di consueto, l'operatore momento angolare intrinseco, cioè lo spin. Possiamo considerare ad esempio una particella con  $s = 1/2$ , per cui gli operatori di spin sono proporzionali alle matrici di Pauli:

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}$$

Applicando alle matrici di Pauli  $\hat{K}_0$  a destra e a sinistra, vediamo immediatamente che l'operatore di inversione  $\hat{\mathcal{T}}$  necessita di essere corretto<sup>1</sup>:

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 \hat{\sigma}_x \hat{K}_0 &= \hat{\sigma}_x \\ \hat{K}_0 \hat{\sigma}_y \hat{K}_0 &= -\hat{\sigma}_y \\ \hat{K}_0 \hat{\sigma}_z \hat{K}_0 &= \hat{\sigma}_z \end{aligned}$$

Con questa convenzione l'unica componente a rispettare la richiesta è la  $y$ : dobbiamo correggere la definizione dell'operatore. La correzione opportuna è data da

$$\hat{\mathcal{T}} = \hat{Y} \hat{K}_0 \quad \text{dove} \quad \hat{Y} = e^{-i\pi \hat{\mathbf{s}}_y / \hbar} = e^{-i\pi \hat{\sigma}_y / 2} = -i\hat{\sigma}_y$$

*Dimostrazione.* Abbiamo visto in Sez. 8.1.4 che l'esponenziale di una matrice di Pauli si può calcolare usando l'identità (8.9). Infatti nel caso particolare in cui  $\mathbf{n}$  è un asse cartesiano:

$$e^{i\theta \hat{\sigma}_j} = \cos \theta \mathbb{1} + i \sin \theta \hat{\sigma}_j$$

Ne segue che, essendo in questo caso  $\theta = -\pi/2$

$$e^{-i\pi\hat{\sigma}_y/2} = -i\hat{\sigma}_y$$

mentre nel caso

$$\left(e^{-i\pi\hat{\sigma}_y/2}\right)^{-1} = e^{i\pi\hat{\sigma}_y/2} = i\hat{\sigma}_y$$

Da qui si ricava immediatamente:

$$\hat{Y}\hat{\sigma}_x\hat{Y}^{-1} = \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = \hat{\sigma}_y i\hat{\sigma}_z = i^2\hat{\sigma}_x = -\hat{\sigma}_x$$

dove si è usata la formula per il prodotto  $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j$  di matrici di Pauli. Analogamente

$$\hat{Y}\hat{\sigma}_z\hat{Y}^{-1} = \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = \hat{\sigma}_y(-i)\hat{\sigma}_x = (-i)^2\hat{\sigma}_z = -\hat{\sigma}_z$$

il che conclude la dimostrazione, dal momento che il caso  $y$  è banale perché  $\exp(i\theta\hat{\sigma}_y)$  commuta con  $\hat{\sigma}_y$ .  $\square$

Con la ridefinizione

$$\hat{T} = -i\hat{\sigma}_y\hat{K}_0$$

l'operatore  $\hat{T}$  si comporta "bene" sia rispetto a  $\hat{L}$  che a  $\hat{S}$ : possiamo concludere che

$$\hat{T}\hat{J}\hat{T}^{-1} = -\hat{J}$$

come volevamo.

### 13.3 INDISTINGUIBILITÀ QUANTISTICA

Un altro esempio di simmetria discreta per molti sistemi fisici è quella per scambio di particelle; essa si inserisce in un contesto ancora più ampio, legato al concetto di **indistinguibilità** tra particelle dello stesso tipo. Per comprendere appieno l'origine dell'indistinguibilità delle particelle a partire da principi molto generali, è necessario studiare la teoria dei campi quantistici, e ciò oltrepassa le finalità di questo corso. Tuttavia, anche noi partiremo pensando, *a priori*, che le particelle quantistiche possano forse essere "etichettate", tant'è vero che le numereremo, chiamandole 1, 2, ... poi tenteremo di trovare da quali ipotesi segua la conclusione che già conosciamo, cioè il fatto che tali oggetti sono non distinguibili.

Immaginiamo di avere due particelle soggette ad un potenziale armonico unidimensionale: questo sistema è descritto dall'hamiltoniana

$$\hat{H}_2 = \sum_{i=1}^2 \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}_i^2 \right) \quad (13.3)$$

Per un'hamiltoniana di questo tipo si vede in modo immediato che le due parti che la compongono sono distinte solamente dall'indice  $i$ , ma fra di esse non c'è alcuna differenza a livello di forma funzionale: descrivono una stessa dinamica. Parliamo di indistinguibilità in contesti di questo tipo, in cui le proprietà fisiche e dinamiche di un sistema composto da vari sottosistemi

non dipende esplicitamente da *quale* sottosistema occupa *quale* stato.

In generale, dato uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  composto da due sottospazi  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ , possiamo scrivere il generico stato puro come una combinazione lineare a coefficienti in  $\mathbb{C}$  della forma

$$|\psi\rangle = \sum c_{\alpha\beta} |\alpha\rangle^{(1)} \otimes |\beta\rangle^{(2)}$$

dove abbiamo utilizzato come base quella generata moltiplicando tensorialmente le basi di  $\mathcal{H}_1$  e di  $\mathcal{H}_2$ . Nell'equazione precedente abbiamo esplicitato sia il simbolo di prodotto tensore, sia, con un apice tra parentesi, lo spazio di Hilbert a cui il *ket* fa riferimento. Nel seguito, per amor di chiarezza ed economia di caratteri, ometteremo il simbolo  $\otimes$  ed adotteremo la convenzione per cui, giustapponendo due *ket*, il primo sarà associato allo spazio di Hilbert della prima particella, il secondo a quello della seconda e così via. Inoltre accorperemo presto i vari *ket*, relativi agli spazi di Hilbert separati, in un *ket* unico, relativo invece ad  $\mathcal{H}$ , in questo modo:

$$|\alpha\rangle |\beta\rangle \cdots |\omega\rangle = |\alpha\beta\cdots\omega\rangle$$

Il fatto che le particelle risultino **indistinguibili** significa che, anche per  $\alpha \neq \beta$ , nel caso di due particelle soltanto, valga

$$|\alpha\rangle^{(1)} |\beta\rangle^{(2)} = |\beta\rangle^{(1)} |\alpha\rangle^{(2)}$$

Più in generale possiamo affermare che l'indistinguibilità significhi **poter trascurare**, in una scrittura come  $|\alpha\beta\gamma\delta\cdots\omega\rangle$ , **l'ordinamento delle lettere**: il *ket* corrisponderà comunque allo stesso stato quantistico o, in altri termini, sarà impossibile affermare e.g. che una particella sia la 2 e un'altra la 5: avremo

$$|\alpha\beta\gamma\delta\cdots\omega\rangle \stackrel{!}{=} |\beta\alpha\gamma\delta\cdots\omega\rangle \stackrel{!}{=} |\gamma\delta\beta\alpha\cdots\omega\rangle \stackrel{!}{=} \cdots$$

dove  $\stackrel{!}{=}$  indica che questi stati, pur "scrivibili" in modo diverso, da adesso in poi richiediamo che *rappresentino* lo stesso stato. In altri termini in questo contesto non ha più molto senso dire "il sistema 1 è nello stato  $\alpha$ , il 2 nel  $\beta\ldots$ " ma solamente "un sistema è nello stato  $\alpha$ , uno nel  $\beta\ldots$ ".

### Precisazione: la notazione ciclica del gruppo delle permutazioni

Nelle prossime sezioni faremo uso del concetto di **permutazione** di un numero finito di elementi. Per chiarezza, definiamo cosa intendiamo per **permutazione ciclica** (o ciclo) e come la indichiamo.

Dato un *array*  $X$

$$X = [x_1, x_2, \dots, x_n]$$

di  $n$  elementi distinti, che parametrizziamo in base alla posizione

$$X[k] = x_k$$

definiamo il ciclo

$$(a\ b\ c\ \cdots\ z)$$

come la permutazione che realizza  $X \rightarrow X'$ , con  $X'$  un array della forma

$$X' : \begin{cases} X'[b] = X[a] & X'[c] = X[b] & \cdots & X'[a] = X[z] \\ X'[j] = X[j] & \text{se } j \notin \{a, b, c, \dots, z\} \end{cases}$$

o, volendo scrivere in modo compatto

$$x_a \rightarrow x_b \rightarrow x_c \rightarrow \cdots \rightarrow x_z \rightarrow x_a$$

Facciamo un esempio: se abbiamo

$$X = [\alpha, \beta, \gamma, \delta]$$

allora la permutazione  $p$  realizza:

$$p = (3\ 4\ 1) : X \rightarrow [\delta, \beta, \alpha, \gamma]$$

Adotteremo questa notazione, spesso sottintendendola come pedice dell'operatore  $\hat{\Pi}_k$  che introdurremo nella prossima sezione. Si può dimostrare (noi non lo faremo) che ogni possibile permutazione si scrive in modo unico come composizione di permutazioni cicliche indipendenti: per questo useremo questa notazione per indicare una qualsiasi permutazione nel corso del testo.

### 13.3.1 L'operatore di permutazione

Continuiamo per il momento ad analizzare il caso di due sole particelle, che è il più semplice possibile, ed introduciamo un operatore che agisce sullo spazio  $\mathcal{H}$  e rappresenta proprio lo scambio della particella 1 con la particella 2, detto **operatore di permutazione**. Nel caso di due elementi, il gruppo delle permutazioni è piuttosto piccolo: a parte l'identità, conta solo un elemento, corrispondente a  $(1, 2)$ , che chiamiamo  $\hat{\Pi}_{12}$  e definiamo operativamente come

$$\hat{\Pi}_{12} |\alpha\rangle |\beta\rangle = |\beta\rangle |\alpha\rangle$$

quindi sul generico stato  $|\psi\rangle$ , per linearità vale

$$\hat{\Pi}_{12} |\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta} |\beta\rangle |\alpha\rangle$$

In rappresentazione delle coordinate, se

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2) &= (\langle x_1 | \langle x_2 |) |\psi\rangle \\ &= (\langle x_1 | \langle x_2 |) \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta} |\beta\rangle |\alpha\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta} \phi_\alpha(x_1) \phi_\beta(x_2) \end{aligned}$$

dove  $\phi_\alpha(x_1)$  e  $\phi_\beta(x_2)$  sono funzioni d'onda di singola particella, allora vediamo che

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{12} \psi(x_1, x_2) &= (\langle x_1 | \langle x_2 |) \hat{\Pi}_{12} |\psi\rangle \\ &= (\langle x_1 | \langle x_2 |) \hat{\Pi}_{12} \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta} |\alpha\rangle |\beta\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta} \phi_\beta(x_1) \phi_\alpha(x_2) \\ &= \psi(x_2, x_1) \end{aligned}$$

**Nella rappresentazione delle coordinate**, quindi, applicare l'**operatore di permutazione scambia la dipendenza dalle coordinate**, come era prevedibile. Condizione necessaria per avere l'indistinguibilità è, ovviamente, la simmetria sotto scambio, che si scrive come

$$[\hat{H}_2, \hat{\Pi}_{12}] = 0 \quad (13.4)$$

Tale condizione, però, non è affatto sufficiente. Come conto esempio possiamo prendere il positronio, uno stato legato instabile formato da un elettrone ed un positrone che vorticano assieme e si annichilano al contatto: in tal caso l'hamiltoniano gode di simmetria sotto scambio elettrone-positrone, tuttavia le due particelle sono facilmente distinguibili, dato che possiedono carica opposta.

Chiaramente, applicare due volte l'operatore  $\hat{\Pi}_{12}$  equivale a non applicare nulla:

$$\hat{\Pi}_{12}^2 = \mathbb{1}$$

e questo significa che gli unici autovalori di tale trasformazione sono  $\pm 1$ . Se vale (13.4), allora è sempre possibile scegliere una base che diagonalizzi simultaneamente sia l'hamiltoniano sia la permutazione, ovvero una base di autostati di  $\hat{H}_2$  con segno definito rispetto allo scambio di particelle. Questi stati così trovati conserveranno la simmetria o l'antisimmetria nella loro evoluzione temporale.

Considerando e.g. l'hamiltoniana riportata in Eq.(13.3), che ha spettro

$$E_{n_1 n_2} = E_n = \hbar\omega(1 + n_1 + n_2) = \hbar\omega(1 + n) \quad \text{dove } n = n_1 + n_2$$

lo stato fondamentale  $|00\rangle \equiv |0\rangle^{(1)}|0\rangle^{(2)}$ , con energia  $E_{00} = \hbar\omega$ , è non degenere ed è pari sotto scambio  $\hat{\Pi}_{12}$ :

$$\hat{\Pi}_{12}|00\rangle = |00\rangle$$

Se passiamo al primo stato eccitato, questo è caratterizzato da una degenerazione 2: sia  $|0\rangle^{(1)}|1\rangle^{(2)}$  sia  $|1\rangle^{(1)}|0\rangle^{(2)}$  corrispondono infatti all'energia  $2\hbar\omega$ . Questi autostati non hanno un segno definito rispetto alla permutazione  $\hat{\Pi}_{12}$ : dobbiamo diagonalizzare  $\hat{\Pi}_{12}$  in questo autospazio bidimensionale; infatti, se c'è una degenerazione, non tutti gli autostati di  $\hat{H}_2$  diagonalizzano anche  $\hat{\Pi}_{12}$ . Nello specifico, gli autostati che cerchiamo sono

$$|+\rangle = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|-\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

rispettivamente relativi agli autovalori +1 (simmetrico) e -1 (antisimmetrico).

Aspiriamo alla formulazione di una teoria in cui sia possibile tenere conto di  $N$  particelle, con  $N$  arbitrariamente grande. All'aumentare di  $N$ , il numero di permutazioni cresce vertiginosamente, ma non accade solo questo: i gruppi di permutazioni di  $N > 2$  elementi cessano di essere commutativi<sup>2</sup>.

Consideriamo ad esempio il caso appena più complicato rispetto a quello appena trattato, cioè  $N = 3$ . Chiaramente, come base di  $\mathcal{H}$  possiamo adesso assumere il prodotto tensore delle basi di  $\mathcal{H}_1$ ,  $\mathcal{H}_2$  e  $\mathcal{H}_3$ , scrivendo

$$|\alpha\beta\gamma\rangle = |\alpha\rangle^{(1)} |\beta\rangle^{(2)} |\gamma\rangle^{(3)}$$

Qualunque stato puro risulterà esprimibile come

$$|\psi\rangle = \sum c_{\alpha\beta\gamma} |\alpha\beta\gamma\rangle$$

e l'hamiltoniana del problema diventerà la somma di tre hamiltoniane di oscillatori armonici disaccoppiati

$$\hat{H}_3 = \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}_i^2 \right)$$

Vogliamo anticipare che, nonostante stiamo partendo da un problema disaccoppiato, sarà la statistica stessa seguita da bosoni e fermioni ad eseguire, in modo intrinseco, un accoppiamento. I livelli energetici sono in questo caso

$$E_{n_1 n_2 n_3} = E_n = \hbar\omega \left( \frac{3}{2} + n_1 + n_2 + n_3 \right) = \hbar\omega \left( \frac{3}{2} + n \right)$$

dove  $n = n_1 + n_2 + n_3$ . e vale evidentemente

$$[\hat{H}_3, \hat{\Pi}_{\#}] = 0$$

dove indichiamo con  $\hat{\Pi}_{\#}$  una generica permutazione in  $S_3$ . È quindi possibile, per ciascuna permutazione presa singolarmente, diagonalizzarla assieme all'hamiltoniana. Tuttavia, è essenziale notare che

$$[\hat{\Pi}_a, \hat{\Pi}_b] \neq 0$$

per  $a \neq b$ : ad esempio

$$\hat{\Pi}_{12}\hat{\Pi}_{23} \neq \hat{\Pi}_{23}\hat{\Pi}_{12}$$

infatti, dato un vettore  $[x, y, z]$ :

$$\hat{\Pi}_{12}\hat{\Pi}_{23} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z \\ x \\ y \end{bmatrix} \quad \neq \quad \hat{\Pi}_{23}\hat{\Pi}_{12} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ z \\ x \end{bmatrix}$$

e questo implica che **non sia possibile diagonalizzare simultaneamente i vari operatori di permutazione**. In altre parole, non è possibile trovare un set di autovettori di  $\hat{H}_3$  che siano tutti simmetrici o antisimmetrici per qualunque permutazione. Ciò che possiamo invece fare è cercare una **rapresentazione irriducibile del gruppo**, in modo da organizzare gli autostati di  $\hat{H}_3$  in autospazi che siano invarianti sotto l'applicazione di ogni permutazione di  $S_3$ .

Si può mostrare che, combinando opportunamente le 6 permutazioni possibili del ket  $|\alpha\beta\gamma\rangle$  si ottengono quattro sottospazi invarianti, generati dagli stati di base a seguire

$$(1) \quad |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left( |\alpha\beta\gamma\rangle + |\beta\alpha\gamma\rangle + |\alpha\gamma\beta\rangle + |\gamma\beta\alpha\rangle + |\gamma\alpha\beta\rangle + |\beta\gamma\alpha\rangle \right)$$

$$(2) \quad |a\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left( |\alpha\beta\gamma\rangle - |\beta\alpha\gamma\rangle - |\alpha\gamma\beta\rangle - |\gamma\beta\alpha\rangle + |\gamma\alpha\beta\rangle + |\beta\gamma\alpha\rangle \right)$$

$$(3) \quad |as_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} \left( 2|\alpha\beta\gamma\rangle + 2|\beta\alpha\gamma\rangle - |\alpha\gamma\beta\rangle - |\gamma\beta\alpha\rangle + |\gamma\alpha\beta\rangle - |\beta\gamma\alpha\rangle \right)$$

$$|as_2\rangle = \frac{1}{2} \left( -|\alpha\gamma\beta\rangle + |\gamma\beta\alpha\rangle + |\gamma\alpha\beta\rangle - |\beta\gamma\alpha\rangle \right)$$

$$(4) \quad |as_3\rangle = \frac{1}{2} \left( -|\alpha\gamma\beta\rangle + |\gamma\beta\alpha\rangle - |\gamma\alpha\beta\rangle + |\beta\gamma\alpha\rangle \right)$$

$$|as_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} \left( 2|\alpha\beta\gamma\rangle - 2|\beta\alpha\gamma\rangle + |\alpha\gamma\beta\rangle + |\gamma\beta\alpha\rangle - |\gamma\alpha\beta\rangle - |\beta\gamma\alpha\rangle \right)$$

dove lo spazio (1) è invariante sotto l'azione di ogni elemento di  $S_3$ , e lo stesso vale per l'elemento dello spazio (2), a meno di un cambio di segno sotto le permutazioni di due soli indici  $\hat{\Pi}_{ij}$ . Per gli spazi (3) e (4), si ha in generale che ciascuno dei due vettori è mandato in una combinazione dei due elementi stessi, sotto tutte le permutazioni di  $S_3$ ; dunque anche questi due sottospazi sono invarianti.

Una situazione simile emerge nella trattazione dell'atomo di idrogeno, in cui un ruolo analogo a quello delle permutazioni è detenuto dai generatori del gruppo delle rotazioni, dalle proprietà

$$[\hat{L}_a, \hat{L}_b] \neq 0 \quad [\hat{H}, \hat{L}_\#] = 0$$

I generatori sono in quel caso tali che una generica rotazione – caratterizzata dagli angoli di Eulero  $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}$  – opera su un autostato di  $\hat{H}$  nel seguente modo

$$\hat{R}(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}) |nlm\rangle = \sum_{m'} c_{m'} |nlm'\rangle$$

in modo che questo appartenga sempre allo stesso sottospazio invariante – qui sotto rotazioni – individuato dal numero quantico  $l$ . Sono così individuati  $l$  sottospazi  $\hat{R}$ -invarianti, dove  $l = 1, \dots, n-1$ .

### 13.3.2 Definizione operativa di identicità

Abbiamo definito algebricamente cosa cosa intendiamo per sistemi identici, tuttavia questo ci ha portato a concludere che siano identici gli stati

$$|\alpha\beta\gamma\delta\dots\omega\rangle = |\beta\alpha\gamma\delta\dots\omega\rangle = |\gamma\delta\beta\alpha\dots\omega\rangle = \dots$$

che fino ad ora abbiamo considerato come distinguibili in base alla posizione di ciascun numero all'interno del ket. Non possiamo lasciare invariata

l'impalcatura teorica: dobbiamo capire come questa condizione si applichi alla Fisica, e in che modo la teoria che stiamo sviluppando debba includerla.

Consideriamo due particelle **indistinguibili**. Esse saranno tali se, dato un certo apparato sperimentale, la misura associata ad una certa osservabile  $O$  non sarà in grado di distinguere le due particelle. Operativamente, questo equivale a richiedere che il valore di aspettazione della osservabile sullo stato globale non cambi a seguito di una permutazione delle due particelle; quindi se definiamo

$$|\psi'\rangle = \hat{\Pi}_{12} |\psi\rangle$$

allora dobbiamo imporre che

$$\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = \langle\psi'|\hat{O}|\psi'\rangle$$

che per l'unitarietà dell'operatore  $\hat{\Pi}_{12}$  implica – dato che la condizione deve valere  $\forall |\psi\rangle$

$$\hat{\Pi}_{12}^{-1}\hat{O}\hat{\Pi}_{12} = \hat{O} \implies [\hat{\Pi}_{12}, \hat{O}] = 0$$

che formalizza, quando in particolare  $\hat{O} = \hat{H}$ , il fatto che l'invarianza di un sistema di due particelle sotto l'azione dell'operatore  $\hat{\Pi}_{12}$ , si veda *a vista* dalla forma dell'operatore hamiltoniano.

Chiaramente possiamo generalizzare questa relazione al caso di  $N$  particelle, che possono essere – tutte o in parte – indistinguibili secondo l'osservabile  $O$

$$[\hat{\Pi}_k, \hat{O}] = 0$$

con  $k$  che indica i vari elementi del gruppo  $S_N$ , a seconda di quali permutazioni siano irrilevanti per  $\hat{O}$ ; ad esempio, si potrebbe anche avere  $\hat{\Pi}_k = \hat{P}_{321} \in S_3$ . Non abbiamo inserito altre assunzioni sull'operatore  $\hat{O}$ , che però vorremmo associare alle osservabili con le quali studiamo il nostro sistema fisico. Facciamo notare che il principio di indistinguibilità appena introdotto ha portato alla seguente implicazione formale: **tutti gli operatori associati ad osservabili fisiche devono essere invarianti sotto permutazione di particelle identiche**. Questo ha conseguenze rilevanti: per esempio in un sistema di due particelle identiche 1, 2 nello spazio tridimensionale, la variabile dinamica  $\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2$  è una buona osservabile, mentre *non* lo è  $\mathbf{x}_1$ .

Per ciò che seguirà, saranno di nostro interesse in particolare le sole permutazioni di due elementi, della forma

$$\hat{\Pi}_{ij} \in S_N$$

dove  $N$  indica il numero di particelle identiche in esame. Grazie agli strumenti in nostro possesso, saremo in grado di caratterizzare due grandi classi di sistemi presenti in Natura, noti sotto il nome di *bosoni* – aventi spin totale intero – e *fermioni* – a spin totale semintero<sup>3</sup>; l'aggettivo *totale* sta a specificare che, il linea di principio, anche i sistemi composti possono essere suddivisi in queste due categorie. Ad esempio, i barioni saranno descrivibili come fermioni, essendo composti da un numero dispari di quark – aventi spin 1/2. Al contrario, i mesoni – composti di due quark – possono essere descritti

con la stessa statistica dei bosoni.

Dato un sistema di  $N$  bosoni/fermioni indistinguibili, la funzione d'onda globale caratterizza univocamente una delle due classi, secondo il seguente **postulato di simmetrizzazione**, ampiamente supportato dall'evidenza sperimentale:

In Natura, un sistema di particelle identiche è sempre descrivibile in termini di una funzione d'onda a parità definita, sotto permutazione di una coppia qualsiasi dei suoi costituenti; in altri termini un sistema di particelle identiche occupa sempre o uno stato complessivamente simmetrico sotto scambio di qualsiasi coppia di particelle identiche (bosoni) o complessivamente antisimmetrico (fermioni).

Ciò non è, ad oggi, direttamente dimostrabile dalla struttura della Meccanica Quantistica non-relativistica: per un approfondimento sul tema rimandiamo a [1].

### 13.3.3 Regola di superselezione: interferenza fra autostati dell'operatore di permutazione

Mostriamo ora un'altra proprietà interessante. Consideriamo il solito sistema di  $N$  particelle indistinguibili; dati due stati simmetrici ed antisimmetrici sotto una stessa permutazione  $\hat{\Pi}_k$

$$\begin{aligned}\hat{\Pi}_k |s\rangle &= |s\rangle \\ \hat{\Pi}_k |a\rangle &= -|a\rangle\end{aligned}$$

e dato un operatore  $\hat{O}$ ,  $\hat{\Pi}_k$ -invariante, ossia tale che

$$[\hat{\Pi}_k, \hat{O}] = 0$$

allora si ha necessariamente

$$\langle a | \hat{O} | s \rangle = 0 \quad (13.5)$$

*Dimostrazione.* Dalle equazioni agli autovalori per gli stati  $|a\rangle$  e  $|s\rangle$  si ha

$$\langle a | \hat{O} | s \rangle = -\langle a | \hat{\Pi}_k^\dagger \hat{O} \hat{\Pi}_k | s \rangle$$

e, essendo  $\hat{O}$  per ipotesi  $\hat{\Pi}_k$ -invariante e  $\hat{\Pi}_k$  unitario

$$-\langle a | \hat{\Pi}_k^\dagger \hat{O} \hat{\Pi}_k | s \rangle = -\langle a | \hat{O} | s \rangle$$

da cui la tesi.  $\square$

La conseguenza di ciò è che, considerato uno stato della forma

$$|\psi\rangle = |a\rangle + c |s\rangle \quad c \in \mathbb{C}, \quad |c| = 1 \quad (13.6)$$

allora

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle a | \hat{O} | a \rangle + \langle s | \hat{O} | s \rangle$$

Questo significa che, data una sovrapposizione di stati aventi parità diversa sotto permutazioni – tutte, oppure anche un sottoinsieme indicizzato da  $k$  – allora una qualsiasi osservabile  $\hat{O}$  che non distingua due elementi del sistema sotto le stesse permutazioni, non permette di osservare interferenza tra le due specie di stati in questione. Tutto ciò sembra essere banale alla luce del **postulato di simmetrizzazione** di cui sopra: secondo tale postulato, non è possibile trovare in Natura un sistema di particelle identiche descritte da uno stato come quello in Eq. 13.6, dunque sembra ovvio che non si possano osservare fenomeni di interferenza tra le due specie, nel valutare il valore di aspettazione della osservabile sullo stato sovrapposto. Ricordiamo tuttavia che questa affermazione non è ad oggi deducibile dai principi della Meccanica Quantistica; al momento, tale postulato si fonda sulla sola evidenza sperimentale. Questo fornisce a quanto trovato un valore aggiuntivo:  $\langle a|\hat{O}|s\rangle = 0$  non è una banale conseguenza della struttura della Teoria, bensì un indizio a favore di un postulato sperimentale.

#### 13.3.4 Esempio: occupazione dei livelli energetici per due particelle in un potenziale armonico

Vediamo ora alcune conseguenze di quanto visto, considerando due particelle identiche soggette ad un potenziale armonico comune – hamiltoniano in Eq. 13.3. Abbiamo già risolto il sistema nella sezione precedente, senza considerarne la natura bosonica o fermionica. Vogliamo ora tenere conto di questa distinzione.

Chiaramente, quanto ci accingiamo a mostrare può essere esteso al caso di più particelle; è tuttavia interessante analizzare il caso  $N = 2$ , poiché mostra chiaramente la genesi del celeberrimo **Principio di esclusione di Pauli**, valido per i fermioni. Riportiamo per comodità i risultati precedenti

$$\begin{aligned} E_0 &= \hbar\omega & |GS\rangle &= |00\rangle \\ E_1 &= 2\hbar\omega & \left\{ \begin{array}{l} |+\rangle_{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) \\ |-\rangle_{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \end{array} \right. \\ E_2 &= 3\hbar\omega & \left\{ \begin{array}{l} |11\rangle \\ |+\rangle_{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|02\rangle + |20\rangle) \\ |-\rangle_{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|02\rangle - |20\rangle) \end{array} \right. \end{aligned}$$

Inizieremo trascurando – erroneamente – lo spin, in modo da mostrare più chiaramente le conseguenze che questo grado di libertà aggiuntivo ha sull’occupazione dei livelli energetici da parte dei fermioni. Per il momento assumeremo quindi valido il **postulato di simmetrizzazione**, dimenticandoci però del **Teorema di Spin-Statistica**.

Se procediamo in questo modo, ci accorgiamo presto che

- per un sistema di due **bosoni**, dovendo valere una descrizione in termini di autostati **pari** sotto  $\hat{\Pi}_{12}$ , allora saranno accessibili

$$\begin{aligned} E_0 &= \hbar\omega & |00\rangle \\ E_1 &= 2\hbar\omega & |+\rangle_{(1)} \\ E_2 &= 3\hbar\omega & |11\rangle, |+\rangle_{(2)} \end{aligned}$$

la novità qui è che sembrano svanire alcune degenerazioni per scambio negli stati eccitati.

- per un sistema di due **fermioni** invece, essendo questi descrivibili da autostati **dispari** sotto  $\hat{\Pi}_{12}$ , saranno consentiti

$$\begin{aligned} E_1 &= 2\hbar\omega & |- \rangle_{(1)} \\ E_2 &= 3\hbar\omega & |- \rangle_{(2)} \end{aligned}$$

dove notiamo che il *ground state* non sembra più essere  $|00\rangle$ , per due fermioni.

Un corso di Chimica Generale basterebbe a mettere in dubbio questo secondo risultato; infatti un discorso simile si sarebbe potuto fare e.g. per un atomo di elio, che nel suo *ground state* è in grado di ospitare due elettroni. Tuttavia, se ci pensiamo un attimo, anche questo stato fondamentale sembrerebbe essere simmetrico sotto lo scambio dei due elettroni, in prima battuta, esattamente come lo stato  $|00\rangle$  da noi considerato. Il punto è che, come anticipato, stiamo trascurando lo spin.

Tornando al nostro esempio, in particolare inseriamo uno spin  $1/2$  per i due fermioni; se consideriamo per lo stato di ciascuna particella il prodotto tensore con lo stato di spin

$$|n_i\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, s_z^{(i)} \right\rangle \quad i = 1, 2$$

allora per queste due particelle lo stato globale sarà della forma

$$|n_1, n_2\rangle^{(P/D)} \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, s_z^{(1)}, s_z^{(2)} \right\rangle$$

o anche, per alleggerire la notazione

$$|n_1, n_2\rangle^{(P/D)} \otimes \left| s_z^{(1)}, s_z^{(2)} \right\rangle$$

dove l'apice è stato inserito per ricordarci di ridefinire gli autostati di  $\hat{H}$  in modo che abbiano parità definita. Tuttavia, a causa della parte di spin, un autostato di questa forma non ha sempre una parità definita rispetto a  $\hat{\Pi}_{12}$ ; di conseguenza, conviene effettuare anche qui un cambiamento di base, nello spazio di Hilbert interessato. Possiamo farlo componendo gli spin, passando per le regole di composizione ormai note, ottenendo

$$|n_1, n_2\rangle^{(P/D)} \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, J, M \right\rangle$$

o anche, semplificando la notazione

$$|n_1, n_2\rangle^{(P/D)} \otimes |J, M\rangle$$

Abbiamo già visto in Sez. 9.2.1 come ottenere i vari  $|J, M\rangle$  in funzione dei ket di partenza, proprio per questo specifico esempio, trovando come risultato

$$\begin{pmatrix} |0, 0\rangle \\ |1, 1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix}$$

Osserviamo che alcuni tra gli autostati globali di questa forma non sono più fattorizzabili nel prodotto di due stati: siamo passati ad una descrizione in termini di stati *entangled*! E se ci pensiamo un attimo, siamo stati forzati a mescolare gli autostati dal principio di simmetrizzazione, che nega l'esistenza di sistemi di particelle identiche descritti da stati con parità non definita; la comparsa di stati *entangled* era avvenuta anche a seguito del cambiamento di base nello spazio dei ket  $|n_1, n_2\rangle$ , prima di considerare gli spin.

Questo discorso non sembra interessare stati come, ad esempio,

$$\begin{aligned} |n_1, n_2\rangle^{(P/D)} \otimes |J, M\rangle &= |0, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle \\ |n_1, n_2\rangle^{(P/D)} \otimes |J, M\rangle &= |0, 0\rangle \otimes |1, -1\rangle \end{aligned}$$

In ogni caso, vediamo ora cosa accade al sistema di due fermioni, proprio quello che ha sollevato la questione. Per questo sistema risulta ora possibile l'occupazione del *ground state*  $|0, 0\rangle$ , ma a patto di considerare uno stato *entangled* di spin contrapposti. Infatti se esplicitiamo la forma dello stato

$$|n_1, n_2\rangle^{(P/D)} \otimes |J, M\rangle = |0, 0\rangle \otimes |0, 0\rangle$$

otteniamo

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |0, 0\rangle \otimes \left( \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

che è antisimmetrico sotto scambio delle due particelle, dunque accessibile ad un sistema di due fermioni. Specifichiamo che, a differenza del caso appena precedente, qui non abbiamo uno stato definito per lo spin del singolo fermione. Esiste la stessa probabilità di trovare uno dei due nello stato *up* e quindi l'altro nello stato *down*; questa condizione di *entanglement* rende superflua, se non inadatta, l'assegnazione di uno stato di spin ben definito per ciascuno dei due fermioni nel *ground state*:

Non abbiamo *il fermione con spin-up ed il fermione con spin-down*, ma una combinazione di stati accomunati dal fatto che in ciascuno di essi un fermione è *up* e l'altro è *down*.

Questa è l'unica cosa che la nostra teoria, aggiustata per ammettere l'esistenza di particelle identiche e poterle trattare, può dire dello stato in cui il sistema si trova. Non abbiamo accesso ad alcuna altra informazione, perché non c'è altra informazione a cui avere accesso: se accettiamo il postulato di simmetrizzazione, lo stato di spin deve essere entangled!

Notiamo che, almeno per il *ground state*, non sono possibili altre combinazioni con la parte di spin, se non quella appena mostrata. Questo può essere connesso a un fatto esposto nella Sez. 9.2.3, Parte I, per cui l'unico stato antisimmetrico che possiamo generare componendo due spin 1/2 vive nella rappresentazione di spin 0, i.e. è necessariamente il singoletto  $|s = 0, s_z = 0\rangle$ . Troviamo così una formulazione euristica del **Principio di esclusione di Pauli**, che si applica in contesti atomici simili a questo: gli elettroni devono accoppiare spin contrapposti per poter occupare lo stato fondamentale. Questa non è la formulazione generale, ma solamente un indizio nella giusta direzione. Concludiamo specificando che a partire da qui si possono chiaramente ottenere tutte le combinazioni possibili tra stati di spin e livelli energetici successivi.

## NOTE

1. Vogliamo far notare come sia lecito aspettarsi che  $\hat{T}$  lavori in questo modo anche in presenza di uno spin: stiamo infatti sempre lavorando in rappresentazione delle coordinate, e l'aggiunta della struttura spinoriale avviene ortogonalmente rispetto allo spazio delle coordinate. In altri termini, se è vero che

$$\hat{T}\psi(\mathbf{x}) = \hat{K}_0\psi(\mathbf{x})$$

allora e.g. per uno spinore a due componenti deve valere

$$\hat{T} \begin{bmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \hat{K}_0 \begin{bmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}$$

per cui complessivamente sullo spazio di spin l'operatore  $\hat{T}$  deve agire come un coniugio.

2. Volendo essere precisi, il gruppo finito delle permutazioni di  $N$  elementi è detto **Gruppo simmetrico**  $S_N$  ed è non abeliano per  $N > 2$ . Per un numero finito  $N$  di oggetti (è possibile, in linea di principio, immaginare un gruppo di permutazioni su un numero finito di oggetti) il gruppo simmetrico contiene  $N!$  elementi.
3. In Meccanica Statistica, questa distinzione discende dalla tipologia di statistica che caratterizza un campione di bosoni/fermioni, rispettivamente dette di Bose-Einstein e di Fermi-Dirac. Il collegamento tra statistica e spin risiede invece nel **Teorema di Spin-Statistica**, la cui trattazione richiede argomenti di carattere relativistico.

## IN BREVE...

- ◊ La **parità** è un operatore unitario associato ad una simmetria discreta, e verifica

$$\hat{P}^\dagger = \hat{P}^{-1} = \hat{P} \quad \hat{P}^2 = \mathbb{1}$$

Se in un sistema fisico  $\hat{P}$  commuta con  $\hat{H}$ , la parità è una quantità conservata.

- ◊ La parità porta ad una regola di selezione tra i suoi autostati: operatori pari sotto  $\hat{P}$  connettono soltanto stati con uguale parità, operatori dispari sotto  $\hat{P}$  connettono soltanto stati con parità opposta.
- ◊ L'operatore di **inversione temporale** è un operatore anti-unitario associato ad una simmetria discreta, e verifica

$$\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \hat{\mathcal{T}} \quad \hat{\mathcal{T}}^2 = \mathbb{1}$$

L'anti-unitarietà è compatibile col teorema di Wigner e segue dalla richiesta che sotto l'azione di  $\hat{\mathcal{T}}$  si abbia  $\hat{x} \rightarrow \hat{x}$  e  $\hat{p} \rightarrow -\hat{p}$  pur preservando le relazioni di commutazione canoniche.

- ◊ Se in un sistema fisico  $\hat{\mathcal{T}}$  commuta con l'operatore hamiltoniano, allora

$$i\hbar |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \implies i\hbar \hat{\mathcal{T}} |\psi(-t)\rangle = \hat{H} \hat{\mathcal{T}} |\psi(-t)\rangle$$

cioè lo stato ottenuto invertendo  $t$  ed applicando  $\hat{\mathcal{T}}$  allo stato verifica anch'esso l'equazione di Schrödinger.

- ◊ Nello spazio delle coordinate,  $\hat{\mathcal{T}} = \hat{K}_0$ , operatore di coniugazione complessa. Per sistemi con spin 1/2, l'operatore di *time-reversal* necessita di una correzione:

$$\hat{\mathcal{T}} = e^{-i\pi \hat{S}_y/\hbar} \hat{K}_0 = -i\sigma_y \hat{K}_0$$

in modo tale che, sotto l'azione di  $\hat{\mathcal{T}}$ , si abbia  $\hat{\mathbf{S}} \rightarrow -\hat{\mathbf{S}}$  e quindi  $\hat{\mathbf{J}} \rightarrow -\hat{\mathbf{J}}$ .

- ◊ In un sistema a  $N$  particelle, gli operatori di **permutazione**  $\{\Pi_\#\}$  scambiano le particelle tra loro. Si tratta di una rappresentazione del gruppo delle permutazioni  $S_N$ , che è non abeliano per  $N \geq 3$ .
- ◊ Il fatto che in un sistema fisico

$$[\hat{H}, \hat{\Pi}_\#] = 0$$

non implica che le particelle siano identiche: un esempio è il positronio in cui  $\hat{H}$  è invariante per scambio ma  $e^-$  ed  $e^+$  sono distinguibili.

- ◊ Le particelle elementari della Natura sono **identiche**. Richiedere che un sistema di  $N$  particelle sia composto di particelle indistinguibili significa richiedere che uno scambio  $|\psi'\rangle = \hat{\Pi}_\# |\psi\rangle$  non produca effetti misurabili:

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \psi' | \hat{O} | \psi' \rangle \implies \hat{\Pi}_\#^{-1} \hat{O} \hat{\Pi}_\# = \hat{O} \quad \forall \hat{O}$$

Questo porta ad una regola di **superselezione**: autostati di un operatore  $\hat{\Pi}_k$  relativi ad autovalori diversi (per esempio stati simmetrici e antisimmetrici sotto scambio) non possono essere sovrapposti coerentemente.

- ◊ Un assioma della teoria è il **postulato di simmetrizzazione**: in natura gli stati **fermionici** sono antisimmetrici sotto scambio di particelle identiche, quelli **bosonici** sono simmetrici sotto scambio di particelle identiche.
- ◊ Il postulato di simmetrizzazione rimuove delle degenerazioni perché proibisce degli stati. Per esempio due particelle di spin 1/2 in un oscillatore unidimensionale occuperanno un *ground state* totalmente antisimmetrico nella parte di spin:

$$|00\rangle \otimes \frac{| \uparrow \downarrow \rangle - | \downarrow \uparrow \rangle}{\sqrt{2}}$$

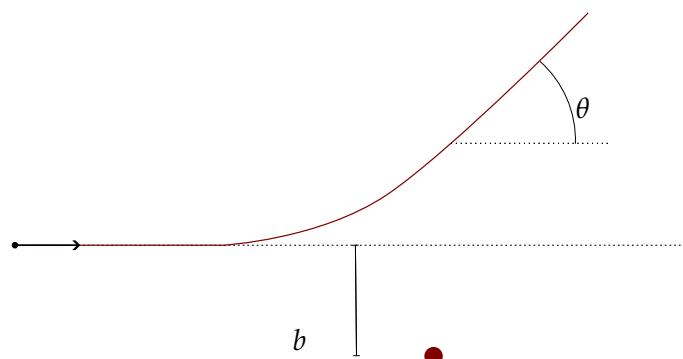
# 14

## INTRODUZIONE ALLO SCATTERING QUANTISTICO

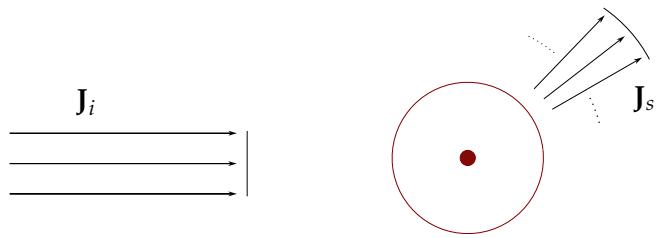
In questo capitolo vogliamo introdurre la teoria dello scattering elastico quantistico, mostrando come descrivere un processo d'urto. È proprio lo studio di questi fenomeni che, a partire dal secolo scorso, ha permesso ai fisici di indagare la natura delle interazioni fondamentali. Nel presente corso rimarremo in ambito non relativistico: useremo l'energia cinetica nella sua versione classica  $p^2/2m$ , utilizzeremo potenziali statici e, soprattutto, faremo riferimento all'equazione di Schrödinger, mentre è bene premettere da subito che una visione dello scattering più generale e profonda richiede di gettare le proprie basi su una teoria relativistica.

### 14.1 AMPIEZZA DI SCATTERING E COMPORTAMENTO ASINTOTICO

Abbiamo ormai appreso, ed è forse inutile ripeterlo, che la Meccanica Classica, in cui vediamo le particelle come "palline da biliardo", cioè corpuscoli che seguono una traiettoria ben determinata, non riesce a spiegare una lunga lista di fenomeni, alcuni davvero eclatanti. Non sorprende, quindi, che immaginare un processo di urto, anche detto di diffusione o di *scattering*, nel modo riportato in Fig. 14.1 corrisponda ad avere una visione molto miope di quanto sta in realtà avendo luogo laggiù in fondo.



**Figura 14.1:** Visione classica dello scattering elastico. Una volta fissata la natura della particella incidente e del centro diffusore, a ciascuna coppia energia-parametro d'impatto  $(E, b)$  corrisponde un preciso *angolo di scattering*  $\theta(E, b)$ . Il processo è immaginato accadere in modo deterministico, ed è risolto trovando la traiettoria della particella incidente. La figura purtroppo è bidimensionale, ma basta poca immaginazione per capire che il processo è caratterizzato in realtà da *due* angoli: oltre al già citato *angolo polare*  $\theta$ , dobbiamo aggiungere l'*angolo azimutale*  $\phi$ , che tuttavia vedremo essere, in molti casi, poco rilevante.



**Figura 14.2:** Illustrazione relativa allo scattering elastico quantistico. Classicamente, avremmo comunque studiato il fenomeno d'urto in termini probabilistici, immaginando che questa necessità fosse da imputare all'incapacità tecnica di indirizzare il proiettile con una coppia ben specifica di valori ( $E, b$ ), e dunque all'invio, da parte dello sperimentatore, di un flusso di particelle-proiettile. Adesso, invece, la descrizione probabilistica è intrinseca alla teoria quantistica stessa.

Ora, invece, stiamo studiando la Meccanica Quantistica, e agli oggetti che trattiamo non piace più seguire una traiettoria; siamo costretti a dare una descrizione del loro stato in termini di funzione d'onda.

Immaginiamo, come illustrato in Fig. 14.2, che il centro diffusore sia investito da un *flusso entrante* di particelle, e che queste, dopo aver interagito, se ne allontanino, costituendo un *flusso uscente*. Possiamo associare a questi flussi delle funzioni d'onda, rispettivamente  $\psi^{(i)}$  e  $\psi^{(s)}$ , ed associare a ciascuna la corrispondente **corrente di probabilità**, che abbiamo definito nel capitolo 4.2:

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} [\psi^*(\mathbf{x}) \nabla \psi(\mathbf{x})] \quad (14.1)$$

In entrambi i casi, cerchiamo una **descrizione asintotica**, ovvero a grande distanza dalla zona di interazione, in modo tale che non possa percepire l'effetto del potenziale del centro diffusore, e corrisponda in questo modo a una soluzione di particella libera. Con  $\psi^{(i)}$  vogliamo rappresentare un flusso di particelle con velocità, e quindi impulso, ben definiti. Da questo segue che  $\psi^{(i)}(\mathbf{x})$  è un'onda piana incidente

$$\psi^{(i)}(\mathbf{x}) = Ae^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$$

relativa all'impulso  $\mathbf{k}$  e alla corrente di probabilità  $\mathbf{J}^{(i)}$

$$\mathbf{J}^{(i)} = |A|^2 \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}$$

Chiaramente, con una semplice ridefinizione degli assi possiamo scrivere

$$\psi^{(i)}(\mathbf{x}) = Ae^{ikz}$$

Per verificare questo punto, basta utilizzare l'equazione (14.1). Un flusso entrante di questo tipo porta con sé un problema: le onde piane, per rispettare il Principio di indeterminazione, devono essere definite nell'intero spazio, e questo non può essere realizzabile praticamente. Per nascondere questo sotto al tappeto, dobbiamo ammettere di ambientare lo scattering in una regione di interazione molto lontana dalla sorgente dell'onda piana, e porre che la scala di lunghezza su cui è definita tale onda incidente sia approssimabile come infinita. Anche il flusso di particelle uscente, diretto verso un

l'angolo solido  $d\Omega$  e di nuovo analizzato a grandi distanze dal centro diffusore, dobbiamo associare una funzione d'onda ed una corrente di probabilità. In tal caso, le funzioni avranno la forma di **onde sferiche uscenti**, poiché quella è la soluzione dell'equazione alle autofunzioni in coordinate sferiche, considerando un potenziale nullo. Per  $U = 0$ , infatti, vale l'equazione alle autofunzioni

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^{(s)}(\mathbf{x}) = E' \psi^{(s)}(\mathbf{x}) \stackrel{!}{=} E \psi^{(s)}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi^{(s)}(\mathbf{x}) \quad (14.2)$$

L'uguaglianza indicata con  $\stackrel{!}{=}$  corrisponde ad imporre lo studio del solo scattering elastico: se definiamo come  $k = |\mathbf{k}|$  e  $k' = |\mathbf{k}'|$  i moduli dei vettori impulso incidente e diffuso rispettivamente, abbiamo **scattering elastico** nel caso

$$k = k' \quad \text{ovvero} \quad E = E'$$

Per chiarezza, riscriviamo l'equazione alle autofunzioni (14.2) come

$$\nabla^2 \psi^{(s)} + k^2 \psi^{(s)} = 0 \quad (14.3)$$

Questa equazione alle derivate parziali è chiamata **Equazione di Helmholtz**. Ovviamente, in questo caso ( $U = 0$ ) c'è invarianza per rotazioni, quindi si conserva il momento angolare e possiamo cercare per la funzione d'onda una soluzione a variabili separate:

$$\psi_{klm}^{(s)} = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

dove la parte angolare è costituita dalle armoniche sferiche, autofunzioni del momento angolare. Come abbiamo visto in sezione 6.3.4, l'equazione sopra riportata diventa, limitatamente alla parte radiale,

$$R''_{kl} + \frac{2}{r} R'_{kl} + \left( k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{kl} = 0$$

dove il segno apicale  $'$  indica la derivata parziale  $\partial_r$ . Asintoticamente, cioè a grande  $r$ , tra le parentesi domina il termine  $k^2$ . Quindi, asintoticamente la soluzione all'equazione radiale perde la dipendenza da  $l$ ; in particolare tutte le soluzioni tendono alla soluzione per  $l = 0$  (detta *di onda s*). Per questo motivo, avendo perso la diretta dipendenza da  $l$ , la soluzione all'equazione differenziale sarà accoppiata a una certa funzione angolare dipendente dal problema, che chiameremo ampiezza di scattering, e non a una specifica armonica sferica. Per il momento continuiamo a indicare il numero quantico  $l$ , e risolviamo:

$$R''_{kl} + \frac{2}{r} R'_{kl} + k^2 R_{kl} = 0$$

La soluzione (asintotica) per l'autofunzione radiale è

$$R_{kl}(r) = \frac{e^{ikr}}{r}$$

La soluzione completa è allora

$$\psi^{(s)} = A \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \phi)$$

La funzione  $f(\theta, \phi)$ , chiamata **ampiezza di scattering**, determina una modulazione angolare e racchiude l'intera informazione dinamica del processo d'urto. Abbiamo così terminato di scrivere il comportamento asintotico della soluzione:

$$\psi_{r \rightarrow \infty} = \psi^{(i)} + \psi^{(s)} = Ae^{ikz} + A\frac{e^{ikr}}{r}f(\theta, \phi)$$

Per particelle che incidono su centri diffusori a simmetria radiale, come nel caso dei potenziali centrali  $U(r)$ , gli unici che vedremo, la dinamica deve avere una simmetria cilindrica rispetto all'asse di incidenza: l'ampiezza di scattering non può dipendere da  $\phi$ , motivo per cui l'effettiva soluzione è data da

$$\psi_{r \rightarrow \infty} = \psi^{(i)} + \psi^{(s)} = Ae^{ikz} + A\frac{e^{ikr}}{r}f(\theta) \quad (14.4)$$

#### 14.1.1 Onde sferiche e onde piane

Nel seguito di questo capitolo consideremo l'onda diffusa sfericamente come stato "di arrivo" del processo: in altri termini, schematizzeremo il processo come

$$e^{ikz} \xrightarrow{\text{dinamica}} f(\theta, \phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

Conviene precisare sin da qui che le onde sferiche diffuse sono asintoticamente "circa delle onde piane". Questa affermazione, che può sembrare autoevidente per intuizione geometrica, può essere mostrata come segue: l'operatore impulso  $\hat{\mathbf{P}}$  è dotato di un set completo di autostati  $|\mathbf{p}\rangle$ , indipendenti e ortogonali. In particolare, vale l'ovvia condizione

$$\hat{\mathbf{P}}|\psi\rangle = \mathbf{p}|\psi\rangle \implies |\psi\rangle = |\mathbf{p}\rangle$$

Consideriamo ora un'onda sferica radiale  $\psi(\mathbf{x}) = e^{ikr}/r$ . In rappresentazione delle coordinate, vale

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}\psi(\mathbf{x}) &= -i\hbar\nabla\frac{e^{ikr}}{r} \\ &= -i\hbar\left(ik\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r^2}\right) \\ &\simeq \hbar k\psi(\mathbf{x}) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) \end{aligned}$$

quindi possiamo dire che un'onda sferica è, nel limite asintotico, approssimativamente un autostato dell'operatore Impulso, per cui è lecito considerare lo stato "di arrivo" simultaneamente un'onda sferica e un'onda piana.

## 14.2 LA SEZIONE D'URTO DIFFERENZIALE

Vogliamo ora definire una grandezza di importanza fondamentale per lo studio di questo processo. Il numero di particelle diffuse per unità di tempo nell'angolo solido  $d\Omega$ , centrato nella direzione i cui angoli, rispetto al

flusso incidente, sono  $\theta$  e  $\phi$ , è proporzionale al modulo della corrente incidente e a  $d\Omega$ . Il fattore di proporzionalità  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi)$  è definito **sezione d'urto differenziale**

$$\frac{dN}{dt} = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) \cdot |\mathbf{J}^{(i)}| d\Omega \quad (14.5)$$

ed è chiaramente funzione degli angoli polare e azimutale. Possiamo aggiungere che, integrando la corrente uscente sulla superficie di una sfera dal raggio  $r$  molto esteso, i.e. sufficientemente lungo da raggiungere le distanze a cui abbiamo definito  $\mathbf{J}^{(s)}$ , dobbiamo trovare lo stesso valore:

$$\frac{dN}{dt} = \int_{\Omega} |\mathbf{J}^{(s)}| r^2 d\Omega \implies \frac{dN}{dt d\Omega} = |\mathbf{J}^{(s)}| r^2 \quad (14.6)$$

Dall'unione delle equazioni (14.5) e (14.6) deriva il risultato

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\mathbf{J}^{(s)}|}{|\mathbf{J}^{(i)}|} r^2 \quad (14.7)$$

Osserviamo dunque che la sezione d'urto differenziale è definita anche grazie al rapporto tra la corrente uscente e la corrente entrante. La corrente di probabilità relativa al flusso uscente asintoticamente, limitatamente alla sua coordinata radiale, è

$$\begin{aligned} J_r^{(s)} &= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[ (\psi^{(s)})^* \frac{\partial}{\partial r} \psi^{(s)} \right] \\ &= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[ \left( A \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \phi) \right)^* A \frac{ikr e^{ikr} - e^{ikr}}{r^2} f(\theta, \phi) \right] \\ &= |A|^2 \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[ \frac{ik}{r^2} - \frac{1}{r^3} \right] |f(\theta, \phi)|^2 = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta, \phi)|^2}{r^2} \end{aligned}$$

Asintoticamente la corrente uscente sarà puramente radiale: possiamo usare questo risultato dentro l'equazione (14.7), ricordando quanto trovato per  $\mathbf{J}^{(i)}$ , per giungere a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (14.8)$$

e trovare il legame tra sezione d'urto differenziale e ampiezza di scattering.

**NOTA** Noi considereremo solamente potenziali sferici, che godono di simmetria assiale e quindi sono indipendenti da rotazioni attorno all'asse di impatto, che nel nostro caso è  $\hat{\mathbf{z}}$ . Pertanto, la sezione d'urto differenziale non dipenderà dalla coordinata sferica  $\phi$ , su cui integriamo, guadagnando un fattore  $2\pi$ . Essendo  $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ , troveremo allora

$$\frac{1}{2\pi \sin \theta} \frac{d\sigma}{d\theta} = |f(\theta)|^2 \quad (14.9)$$

#### 14.2.1 Due importanti precisazioni

Fermiamoci un attimo per sottolineare due punti:

1. Stiamo lavorando con una funzione d'onda della forma

$$\psi(\mathbf{x}) = A \left[ e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

D'altra parte, la sezione d'urto differenziale contiene sia  $\mathbf{J}^{(s)}$ , relativa all'onda sferica, sia  $\mathbf{J}^{(i)}$ , relativa all'onda piana. La corrente di probabilità va però calcolata considerando tutta la funzione d'onda, quindi a priori le due correnti non sono ben definite. Dato lo stato sovrapposto

$$|\psi\rangle = |\psi^{(i)}\rangle + |\psi^{(s)}\rangle$$

non è vero che il flusso della sovrapposizione è la sovrapposizione dei flussi, perché **ci sono effetti di interferenza**. Diamo solamente una soluzione informale al problema, specificando che misuriamo il flusso in uscita a grandi distanze, i.e. a distanze molto maggiori sia del raggio d'azione del potenziale d'interazione sia dell'estensione trasversalmente coerente del fronte d'onda piano incidente, che in situazioni reali è ovviamente finito. In questo modo, lavorando nel limite asintotico, otteniamo la seguente condizione: nella regione di rivelazione la funzione d'onda piana in ingresso è (circa) nulla, così come è (circa) nulla quella sferica alla posizione della sorgente da cui l'onda piana è inviata verso il centro diffusore. Solamente in questa condizione è lecito trascurare gli effetti d'interferenza e quindi distinguere le correnti di probabilità, calcolandole separatamente.

2. Nonostante il riferimento esplicito alla situazione fisica in cui una particella proiettile investe un centro diffusore fisso, la stessa trattazione è utilizzabile nel caso di urto tra due particelle, anche quando queste sono lanciate una contro l'altra: possiamo mappare questo secondo problema in quello, più comodo, di una singola particella immersa in un campo centrale, eseguendo l'opportuna trasformazione canonica.

### 14.3 APPROSSIMAZIONE DI BORN

Consideriamo l'Hamiltoniana

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(r)$$

valida nella regione di interazione, e cerchiamo di risolvere l'equazione alle autofunzioni

$$H\psi = E\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi$$

ove  $k = |\mathbf{k}|$ , con la condizione che le soluzioni abbiano asintoticamente la forma di equazione (14.4):

$$\psi_{r \rightarrow \infty} = \psi^{(i)} + \psi^{(s)} = Ae^{ikz} + A \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \phi)$$

Ciò a cui siamo interessati è trovare  $f(\theta)$ , e da quella  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta)$ .

A questo scopo, dopo aver riscritto l'equazione alle autofunzioni nella versione

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = \frac{2m}{\hbar^2}U\psi \quad (14.10)$$

utilizziamo l'**approssimazione di Born**. Mentre nella teoria delle perturbazioni si è soliti trattare perturbativamente la conseguenza di una interazione rispetto all'effetto di una interazione differente, comparativamente molto più rilevante della prima, adesso invece supponiamo che il potenziale abbia un effetto piccolo *rispetto alla soluzione di particella libera*. Come sempre, alla fine dovremo spiegare in modo quantitativo quando sia possibile considerare tale perturbazione come piccola.

Per chiarificare l'approccio perturbativo, assegnamo temporeaneamente un parametro adimensionale  $\lambda$  al potenziale  $U$ :

$$U \rightarrow \lambda U$$

Questo non aggiunge nulla alla trattazione: si tratta solamente di una riscrittura graficamente più chiara che parametrizza la "grandezza" del potenziale di interazione. Come al solito useremo  $\lambda$  come parametro di espansione analitica. Espandiamo in serie la funzione d'onda

$$\psi = \psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

per cui l'equazione differenziale, in questi termini, si riscrive come

$$[\nabla^2 + k^2] (\psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2)) = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda U (\psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2))$$

Il lato di destra è  $\mathcal{O}(\lambda)$ , all'ordine più basso. Ne segue che  $\psi^{(0)}$  corrisponde alla soluzione di particella libera e risolve l'equazione differenziale omogenea d'ordine zero

$$\nabla^2\psi^{(0)} + k^2\psi^{(0)} = 0$$

ovvero la succitata Equazione di Helmholtz.

La degenerazione è  $\infty$ , poiché c'è una soluzione corrispondente ad ogni direzione possibile; noi però scegliamo saggiamente

$$\psi^{(0)} = e^{ikz}$$

in quanto ci troviamo alla ricerca di una soluzione che risulti aderente alla forma asintotica richiesta: all'ordine zero, in assenza di cioè di potenziale di interazione, la soluzione completa del problema è proprio l'onda piana incidente, mentre non c'è nessuna diffusione, dunque nessuna onda sferica. Utilizzando lo schema perturbativo, troviamo  $\psi^{(1)}$  come soluzione dell'equazione di primo ordine in  $\lambda$ , considerando la soluzione di particella libera come termine di sorgente:

$$\nabla^2\psi^{(1)} + k^2\psi^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2}U\psi^{(0)}$$

Naturalmente potremmo procedere con quest'approccio ricorsivo a ogni ordine, ma per le nostre applicazioni questo non sarà necessario. Dimentichiamoci adesso del parametro  $\lambda$ , riassorbendolo dentro  $U$ , e continuiamo i

calcoli.

Il calcolo prosegue in modo analogo a quello dei potenziali ritardati nella teoria dell'Elettromagnetismo. In particolare, considerando l'operatore differenziale lineare

$$\mathcal{L} \equiv \nabla^2 + k^2$$

e la funzione della posizione

$$F(\mathbf{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{x}) \psi^{(0)}(\mathbf{x})$$

l'equazione si scrive nella forma

$$\mathcal{L} [\psi^{(1)}] = F$$

Ci serve conoscere la Funzione di Green del problema: essa costituisce la risposta del sistema lineare per termini di sorgente "a delta", i.e.

$$\mathcal{L} [\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

e si dimostra essere uguale a

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|}$$

Se avessimo  $k = 0$ , otterremo come funzione di Green la stessa soluzione senza il termine di fase, e in tal caso l'equazione risolta sarebbe quella di Laplace; è possibile dimostrare che per un operatore del tipo  $\nabla^2 + k^2$  la soluzione corretta è effettivamente quella riportata, dove il termine di fase  $e^{ik|\mathbf{x}|}$  è originato dalla presenza di un termine  $k^2$  nella definizione dell'operatore. L'equazione qui risolta prende il nome di **Equazione di Lippman-Schwinger**.

Nota la Funzione di Green, la soluzione generale al problema è data dalla sua convoluzione con il termine di sorgente  $F$ :

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{x}' U(\mathbf{x}') \psi^{(0)}(\mathbf{x}') \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (14.11)$$

Questa è l'equazione cercata, che determina il termine perturbativo di primo ordine nella funzione d'onda del sistema.

#### 14.3.1 Regimi di applicabilità

Vogliamo controllare che la soluzione appena trovata soddisfi l'ipotesi di lavoro

$$|\psi^{(1)}| \ll |\psi^{(0)}|$$

Consideriamo, tra tutti i potenziali di interazione possibili, quelli sferici e **a range di interazione finito**. Questi costituiscono una classe di potenziali

sferici che, per  $r$  superiore ad un certo raggio  $a$ , sono soppressi e tendono a zero in modo rapido:

$$U(r) \simeq 0 \quad \forall r > a$$

Possiamo considerare almeno tutti i potenziali del tipo

$$U_k(r) = \alpha \frac{e^{-r/a}}{r^k} \quad \forall k \in \mathbb{N}$$

tra i quali rientra ad esempio  $U_2(r) = (\alpha e^{-r/a})/r^2$ , mentre un'assenza degna di nota è quella del potenziale di Coulomb, che infatti non siamo capaci di trattare in questo modo. Essendo  $|\psi^{(0)}| = 1$ , allora segue che  $\psi^{(0)} = \mathcal{O}(1)$ .

Trattiamo due casi:

1. Nel caso di **scattering di particelle lente**, cioè nel limite  $ka \ll 1$ , si ha

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \underbrace{\int d^3\mathbf{x}'}_{a^3} \underbrace{U(\mathbf{x}')}_{\sim U} \underbrace{\psi^{(0)}(\mathbf{x}')}_{\mathcal{O}(1)} \underbrace{\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}_{1/a}$$

dove abbiamo indicato che l'integrazione nello spazio porta un contributo di volume  $a^3$ , il denominatore porta un  $1/a$ , poiché  $U(r)$  è significativamente diverso da zero soltanto nella sfera di raggio  $a$ , dove assume il valore tipico  $U$ . In questa regione, per l'ipotesi  $ka \ll 1$ , approssimiamo il termine di fase semplicemente come  $\mathcal{O}(1)$ . Possiamo concludere che l'ordine di grandezza della correzione di primo ordine sia

$$|\psi^{(1)}| \sim \frac{m}{\hbar^2} |U| a^2$$

Affinché la perturbazione sia piccola rispetto al modulo della soluzione imperturbata, e quindi l'approssimazione di Born risulti valida, è necessario che sia soddisfatta la diseguaglianza

$$|\psi^{(1)}| \ll |\psi^{(0)}| \quad \Rightarrow \quad \frac{m}{\hbar^2} |U| a^2 \ll 1 \quad \Rightarrow \quad |U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

2. Nel caso di **scattering di particelle veloci**, i.e.  $ka \gg 1$ , il vincolo è meno stringente. Infatti in tal caso il termine di fase  $e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$  che compare nell'integrale, poiché nella regione di integrazione è di ordine  $e^{ika}$ , è *fortemente oscillante*. Dalla Teoria delle distribuzioni, grazie al Teorema di Riemann-Lebesgue, sappiamo che vale il limite

$$\lim_{\omega \rightarrow \pm\infty} e^{i\omega x} \stackrel{d}{=} 0$$

dove  $\stackrel{d}{=}$  è un'uguaglianza da intendersi nel senso delle distribuzioni, cioè: data una generica funzione test  $f(x)$ , vale il limite (stavolta da intendersi proprio in senso analitico)

$$\lim_{\omega \rightarrow \pm\infty} \int_{\mathbb{R}} dx f(x) e^{i\omega x} = 0$$

In altri termini, le trasformate di Fourier delle funzioni tendono a 0 per frequenze infinite. Ne segue che all'interno del volume finito  $\sim a^3$ ,

dove il potenziale è significativamente non nullo, la forte oscillazione dell'integrale renderà significativi solo alcuni contributi in regioni limitate.

Rimandiamo a [3] per la trattazione completa: l'idea, sostanzialmente, è che in questo caso si possa considerare solamente la diffusione in avanti (angoli di scattering piccoli) e che ciò permetta di scrivere

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) \simeq g(\mathbf{x})e^{ikz}$$

con  $g$  una funzione lentamente variabile. Inserendo quest'informazione nell'equazione differenziale per  $\psi^{(1)}$ , si deriva un'equazione differenziale per  $g$  che conduce all'approssimazione

$$g\Big|_{|\mathbf{x}| \simeq a} \simeq \frac{im|U|a}{k\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad |\psi^{(1)}| \sim \frac{m|U|a}{k\hbar^2}$$

La condizione di applicabilità della Teoria delle perturbazioni, come sopra, è che i termini successivi dello sviluppo siano molto più piccoli del termine dominante: questo porta a

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}ka$$

In effetti, troviamo una condizione molto meno stringente sul potenziale, che in questo limite di alte velocità può anche assumere valori maggiori rispetto al caso di basse velocità. Chiaramente in questo caso dobbiamo sempre ricordarci che la trattazione è qui non relativistica: un altro (ovvio) limite da imporre è

$$p \ll mc \quad \Rightarrow \quad 1 \ll ka \ll \frac{amc}{\hbar}$$

Dedichiamo le prossime sezioni a studiare nel dettaglio la forma della  $\psi^{(1)}$ , sia con una soluzione approssimata che con un calcolo perturbativo.

#### 14.4 UNA PRIMA SOLUZIONE APPROXIMATA

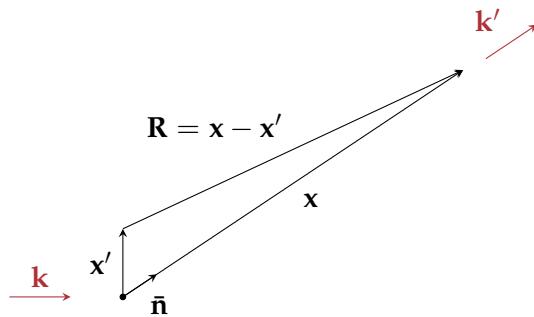
Cominciamo con un calcolo che è facile ritrovare in altri contesti di scattering di onde su sistemi, ad esempio nell'analisi dei **fattori di forma elettromagnetici**; questo non è un caso, perché il ragionamento è applicabile universalmente in ambito ondulatorio.

Con riferimento alla Fig. 14.3, eseguiamo una prima approssimazione: sia

$$|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'|$$

il che implica

$$R = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \simeq |\mathbf{x}| - \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}'}{|\mathbf{x}|} = |\mathbf{x}| - \bar{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}'$$



**Figura 14.3:** Notazione utilizzata per il calcolo approssimato dell'ampiezza di scattering.

dove  $\bar{\mathbf{n}} = \mathbf{x}/|\mathbf{x}|$  è il versore indicato in figura. Con questa approssimazione, l'Eq. (14.11) – che ricordiamo, funziona per  $r \rightarrow +\infty$  – si riduce a

$$\begin{aligned}\psi^{(1)}(\mathbf{x}) &\simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{x}' e^{ikz'} U(\mathbf{x}') \frac{e^{ik(|\mathbf{x}|-\bar{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}')}}{|\mathbf{x}|} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \underbrace{\int d^3\mathbf{x}' U(\mathbf{x}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}'}}_{=(2\pi)^{3/2}\tilde{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}\end{aligned}$$

dove  $\mathbf{k} = k\bar{\mathbf{z}}$  e  $\mathbf{k}' = k\bar{\mathbf{n}}$ , mentre  $|\mathbf{x}| = r$ . Al denominatore effettuiamo l'approssimazione violenta  $R \simeq |\mathbf{x}| = r$ , mentre portiamo più rispetto al fattore di fase. Compare una Trasformata di Fourier del potenziale

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) \simeq -\frac{\sqrt{2\pi m}}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \tilde{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$$

Definendo il **vettore impulso trasferito**  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$  possiamo scrivere

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{x}' U(\mathbf{x}') e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x}'| \cos \theta'}$$

dove  $\theta$  è per definizione l'angolo tra  $\mathbf{k}$  e  $\mathbf{k}'$ , e chiamiamo  $\theta'$  l'angolo compreso tra  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{x}'$ . Troviamo quindi l'**ampiezza di scattering**:

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \psi^{(1)}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{q}) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{con} \quad f(\mathbf{q}) = -\frac{\sqrt{2\pi m}}{\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{q})$$

Avevamo promesso di trovare un'ampiezza di scattering dipendente da  $\theta$ : lo scattering è elastico, ovvero  $k = k'$ , allora

$$\begin{aligned}|\mathbf{q}| &= |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \\ &= \sqrt{k^2 + k'^2 - 2|\mathbf{k}||\mathbf{k}'| \cos \theta} \\ &= k\sqrt{2(1 - \cos \theta)} \\ &= k\sqrt{4 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\end{aligned}$$

Segue che la dipendenza da  $\theta$  è nascosta in  $\mathbf{q}$ , quindi possiamo scrivere direttamente

$$f(\mathbf{q}(\theta)) \rightarrow f(\theta)$$

Questo ci fornisce proprio l'ampiezza di scattering cercata, con la giusta dipendenza<sup>1</sup>. Nel caso di potenziali centrali, dipendenti dalla sola coordinata radiale, l'integrale appena trovato può essere reso esplicito scrivendo

$$\begin{aligned}\tilde{U}(q) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^{+\infty} r'^2 dr' \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' U(r') e^{iqr' \cos \theta'} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} dr' r'^2 U(r') \int_{-1}^1 d \cos \theta' e^{iqr' \cos \theta'} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} dr' r'^2 U(r') \frac{e^{-iqr'} - e^{iqr'}}{iqr'} \\ &= \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} dr' r' U(r') \frac{\sin(qr')}{q}\end{aligned}$$

da cui giungiamo all'espressione per l'**ampiezza di scattering**

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} dr' r' U(r') \frac{\sin(qr')}{q} \quad (14.12)$$

Questa è un'espressione valida in generale nell'Approssimazione di Born (da lì abbiamo potuto scrivere il primo integrale) e nell'ipotesi di potenziale centrale.

#### 14.4.1 Esempio: potenziale uniforme a raggio d'azione finito

Supponiamo di avere un potenziale centrale della forma

$$U(r) = \begin{cases} -U_1 & \text{se } r \leq a \\ 0 & \text{se } r > a \end{cases} \quad \text{con} \quad U_1 \ll U_0 \equiv \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

La condizione imposta su  $U_1$  è già sufficiente a far valere l'Approssimazione di Born per lo scattering di particelle lente, e quindi anche nel caso di particelle veloci.

La sezione d'urto differenziale integrata su  $\phi$  si calcola a partire dall'Eq. (14.12) utilizzando la relazione (14.9):

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi \sin \theta} \frac{d\sigma}{d\theta} &= |f(\theta)|^2 \\ &= \left( \frac{2mU_1}{q^2\hbar^2} \right)^2 \left| \int_0^a dr' qr' \sin(qr') \right|^2 \\ &= \left( \frac{2mU_1}{q^3\hbar^2} \right)^2 \left| \int_0^{aq} ds s \sin s \right|^2 \\ &= \left( \frac{2mU_1}{q^3\hbar^2} \right)^2 \left| -aq \cos(aq) + \int_0^{aq} ds \cos s \right|^2 \\ &= 4a^2 \left( \frac{U_1}{U_0} \right)^2 \left( \frac{\sin(aq) - aq \cos(aq)}{(aq)^3} \right)^2\end{aligned}$$

dove abbiamo eseguito il cambio di variabile  $a = qr'$ . Possiamo dunque calcolare la sezione d'urto totale:

$$\begin{aligned}\sigma &= \int_0^{4\pi} d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_0^\pi \sin \theta |f(\theta)|^2 d\theta \\ &= 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta 4a^2 \left( \frac{U_1}{U_0} \right)^2 \left( \frac{\sin(aq) - aq \cos(aq)}{(aq)^3} \right)^2\end{aligned}$$

Questo integrale non è particolarmente divertente da risolvere, per cui ci affidiamo a [2] e ne riportiamo direttamente il risultato, che si ottiene sostituendo  $q = 2k \sin(\theta/2)$ :

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left( \frac{U_1}{U_0} \right)^2 \left( 1 - \frac{1}{(2ka)^2} + \frac{\sin(4ka)}{(2ka)^3} - \frac{\sin^2(2ka)}{(2ka)^4} \right)$$

#### 14.4.2 Esempio: potenziale di Yukawa

Consideriamo adesso un potenziale centrale del tipo:

$$U(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-r/a} \quad \text{con} \quad U_1 = \frac{\alpha}{a} \quad \text{e} \quad U_0 = \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

Questo potenziale, usato per descrivere le forze nucleari, fu introdotto nel 1935 da H. Yukawa. Stavolta l'approssimazione di Born per particelle lente è soddisfatta se vale

$$\alpha \ll \frac{\hbar^2}{ma}$$

Di nuovo, siamo interessati alla sezione d'urto differenziale. Con la stessa notazione dell'esempio precedente:

$$\begin{aligned}|f(\theta)|^2 &= \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \left| \int_0^{+\infty} dr' \alpha e^{-r'/a} \frac{\sin(qr')}{q} \right|^2 \\ &= \frac{4}{q^4} \left( \frac{\alpha}{a^2 U_0} \right)^2 \left| \int_0^{+\infty} ds e^{-s/aq} \sin s \right|^2 \\ &= \frac{4}{a^2 q^4} \left( \frac{U_1}{U_0} \right)^2 \left( \frac{(aq)^2}{1 + (aq)^2} \right)^2 = 4a^2 \left( \frac{U_1}{U_0} \frac{1}{1 + (aq)^2} \right)^2\end{aligned}$$

Per la soluzione di questo integrale rimandiamo al calcolo svolto in Sez. 4.5, Parte II. Dall'ampiezza di scattering risaliamo alla sezione d'urto:

$$\begin{aligned}\sigma &= \int d\Omega |f(\theta)|^2 \\ &= 8\pi a^2 \left( \frac{U_1}{U_0} \right)^2 \int_{-1}^{+1} d\cos \theta \left( \frac{1}{1 + (aq)^2} \right)^2\end{aligned}$$

Usiamo la relazione tra  $\theta$  e  $q$ :

$$q = 2k \sin \left( \frac{\theta}{2} \right) = 2k \sqrt{\frac{1 - \cos \theta}{2}} \quad \Rightarrow \quad q^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$$

da cui segue la relazione differenziale

$$\cos \theta = 1 - \frac{q^2}{2k^2} \quad \Rightarrow \quad d\cos \theta = -\frac{dq^2}{2k^2}$$

Allora l'integrale si risolve come segue

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^{+1} d\cos\theta \left( \frac{1}{1+(aq)^2} \right)^2 &= - \int_{4k^2}^0 \frac{dq^2}{k^2} \left( \frac{1}{1+(aq)^2} \right)^2 \\
 &= \frac{1}{2(ak)^2} \int_0^{4k^2} d(aq)^2 \left( \frac{1}{1+(aq)^2} \right)^2 \\
 &= \frac{1}{2(ak)^2} \int_0^{(2ak)^2} \frac{ds}{(1+s)^2} \\
 &= -\frac{1}{2(ak)^2} \frac{1}{1+s} \Big|_0^{(2ak)^2} \\
 &= \frac{1}{2(ak)^2} \left( 1 - \frac{1}{1+(2ak)^2} \right) = \frac{2}{1+(2ak)^2}
 \end{aligned}$$

per cui, in conclusione, la sezione d'urto totale risulta uguale a

$$\sigma = 16\pi a^2 \left( \frac{U_1}{U_0} \right)^2 \frac{1}{1+(2ak)^2} = 16\pi \left( \frac{m\alpha a^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{1+(2ak)^2}$$

Studiamone i limiti:

- per  $a \rightarrow 0$ , come ci aspetteremmo da un potenziale confinato in una regione infinitesima di spazio, la sezione d'urto totale tende ad annullarsi;
- per  $a \rightarrow +\infty$  troviamo un'inattesa divergenza, ma ciò non costituisce un problema: in questo limite il potenziale si riduce a quello coulombiano, che con queste tecniche non può essere trattato, come abbiamo anticipato poco sopra in questo capitolo.

## 14.5 SECONDA SOLUZIONE: TRATTAZIONE PERTURBATIVA TIME-DEPENDENT

Torniamo a studiare la forma della  $\psi^{(1)}$  con un approccio perturbativo. In particolare useremo la Teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo, formalismo introdotto nel Cap. 11, Parte I.

Esponiamo innanzitutto l'idea che sta alla base di tutta questa derivazione. Siccome siamo interessati ai limiti asintotici e i potenziali **indipendenti dal tempo** che consideriamo sono significativamente non nulli entro un raggio d'azione finito, possiamo affermare che il proiettile incidente interagirà con il potenziale solamente in una regione finita di spazio; questo significa che se sommiamo all'hamiltoniana imperturbata  $\hat{H}_0$  un termine perturbativo  $U$  solo *durante* il passaggio ravvicinato del proiettile al centro diffusore, commettiamo un errore trascurabile sulla dinamica. Ovviamente, tutto questo andrebbe quantificato: la condizione fondamentale che richiediamo è che i potenziali siano asintoticamente nulli, e vedremo che questo basterà a determinare un risultato.

Sia quindi data l'hamiltoniana perturbata

$$\hat{H}(t) = \begin{cases} \hat{H}_0 & \text{per } t < 0, t > T \\ \hat{H}_0 + \hat{U}(\mathbf{x}) & \text{per } 0 \leq t \leq T \end{cases}$$

dove  $T$  è un tempo arbitrario che impostiamo noi, sufficientemente lungo, in linea ideale, da coprire tutta la parte importante dell'evoluzione d'interazione. Non è importante specificare quanto lungo: lo manderemo presto a infinito, immaginando di misurare i flussi in uscita a distanze asintotiche.

In Sez. 11.4 abbiamo visto che, su spettri discreti non degeneri, l'evoluzione di un sistema inizialmente in un autostato dell'hamiltoniana imperturbata  $|i\rangle$  è dato da ( $\hbar = 1$ )

$$|\psi(t=0)\rangle = |i\rangle \quad \rightarrow \quad |(\psi(t > T)\rangle = \sum_n a_n(T) e^{-i\epsilon_n t} |n\rangle$$

dove adottiamo la stessa notazione usata in quel contesto. La probabilità di misurare l'energia  $\epsilon_f$  si scrive come

$$\mathcal{P}_{\epsilon_f}(t > T) = |a_f(T)|^2 \quad \text{con} \quad a_f(T) = -i \int_0^T dt \langle f | \hat{H}_{\text{pert}}(t) | i \rangle e^{i(\epsilon_f - \epsilon_i)t}$$

dove  $\hat{H}_{\text{pert}}$  indica una generica hamiltoniana di perturbazione.

Lavoriamo in uno spettro continuo fortemente degenere: una volta fissato  $|\mathbf{k}|$ , l'energia è la stessa in ogni direzione. L'autostato di partenza è  $|\psi(0)\rangle = |\mathbf{i}\rangle$ , ma in uscita abbiamo un'onda sferica, non piana. In ogni caso potremmo pensare di sviluppare lo stato in termini di autostati dell'impulso:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |\psi(t)\rangle \stackrel{?}{\simeq} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{k}' \underbrace{a(\mathbf{k}', T) e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}'} t}}_{\tilde{\psi}(\mathbf{k}', t) = \langle \mathbf{k}' | \psi(t) \rangle} |\mathbf{k}'\rangle \quad (14.13)$$

Dobbiamo tuttavia prestare attenzione al fatto che questa è un'estensione al continuo **sbagliata** (o quantomeno ambigua) della formula discreta. Vedremo nella prossima sezione dove risieda il problema, e come correggere il tiro.

#### 14.5.1 La relazione di completezza su stati del continuo

Apriamo una parentesi importante: nei precedenti capitoli non è generalmente sorta la necessità di svolgere questa precisazione, che però si rivelerà funzionale nel seguito.

Sia  $\{|\mathbf{x}\rangle\}$  la base completa degli autostati dell'operatore Posizione, normalizzata come una  $\delta$ : questo significa, e qui eseguiamo un'imposizione arbitraria, che vale

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$$

La relazione di completezza su questa base ci fornisce una scrittura per l'identità in termini degli operatori di stato associati ai  $|\mathbf{x}\rangle$

$$\mathbb{1} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle\langle \mathbf{x}|$$

Ora, sappiamo che esiste una base ortogonale completa di autostati dell'operatore impulso: sia  $\{|\mathbf{k}\rangle\}$  quella normalizzata come una  $\delta$ , per cui valgono

cioè le stesse considerazioni esposte appena sopra. In particolare – rimaniamo al Cap. 3 per la dimostrazione – questa base è rappresentata nelle coordinate dalle funzioni d'onda

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

Sappiamo che per una base siffatta la probabilità (infinitesima) che sullo stato  $|\psi\rangle$  si misuri un impulso contenuto entro un volume  $\hbar^3 d^3\mathbf{k}$  attorno all'impulso  $\hbar\mathbf{k}$  è data da<sup>2</sup>

$$d\mathcal{P} = d^3\mathbf{k} |\langle \mathbf{k}|\psi\rangle|^2$$

Questa probabilità è correttamente normalizzata: sottintendendo ovunque l'integrazione su  $\mathbb{R}^3$ , abbiamo

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \int d\mathcal{P} \\ &= \int d^3\mathbf{k} \langle \psi|\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|\psi\rangle \\ &= \int d^3\mathbf{k} d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} \langle \psi|\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|\mathbf{y}\rangle \langle \mathbf{y}|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} x\psi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{y}) \underbrace{\int d^3\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{y}-\mathbf{x})}}_{=(2\pi)^3\delta^{(3)}(\mathbf{y}-\mathbf{x})} = \int d^3\mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 \end{aligned}$$

e ciò risulta verificato essendo la funzione d'onda correttamente normalizzata. Questo calcolo ci fornisce anche automaticamente la corretta relazione di completezza su questa base:

$$\mathbb{1} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle\langle \mathbf{k}|$$

Se adesso decidiamo di usare una base di funzioni d'onda della forma

$$C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

i.e. se lavoriamo con degli impulsi arbitrariamente normalizzati

$$|\mathbf{k}^a\rangle = (2\pi)^{3/2} C(\mathbf{k}) |\mathbf{k}\rangle$$

ove l'apice  $a$  indica proprio l'arbitrarietà, allora la corretta definizione di probabilità è data da

$$d\mathcal{P} = d^3\mathbf{k} |\langle \mathbf{k}|\psi\rangle|^2 = \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2} |\langle \mathbf{k}^a|\psi\rangle|^2$$

e la corretta relazione di completezza da usare è

$$\mathbb{1} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2} |\mathbf{k}^a\rangle\langle \mathbf{k}^a|$$

Da questo risultato discende la sezione seguente: abbiamo ritenuto necessario precisare questi semplici calcoli per esplicitare la generalità di quanto deriveremo.

### 14.5.2 Lo spazio delle fasi

Torniamo al nostro problema: nota la forma che assume la relazione di completezza sotto normalizzazioni arbitrarie, scriviamo la corretta espressione dell'oggetto con cui stiamo lavorando

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |\psi(t)\rangle \simeq \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2} a(\mathbf{k}, T) e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}} t} |\mathbf{k}^a\rangle$$

Questa è l'estensione che corregge l'ambigua scrittura (14.13). A scanso di equivoci, specifichiamo che stiamo lavorando con autofunzioni arbitrariamente normalizzate

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k}^a \rangle = C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$$

e sottintendiamo, in questa sezione, l'apice  $a$ . Come esposto nella sezione precedente, la probabilità infinitesima corretta è

$$d\mathcal{P} = |a(\mathbf{k}, T)|^2 \underbrace{\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2}}_{\equiv d\Phi}$$

dove  $d\Phi$  è usualmente definito **Spazio delle fasi**; rimandiamo a [3] al riguardo. La definizione di questa quantità permette, una volta che ci siamo accordati su come normalizziamo la base degli impulsi, di effettuare un calcolo probabilistico che pesi correttamente gli oggetti considerati. In ogni caso, nella prossima sezione deriveremo una formula del tutto indipendente dalla scelta della normalizzazione.

### 14.5.3 Il rate di probabilità

Nella sezione appena precedente abbiamo visto che, scelta la normalizzazione della base degli impulsi

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k}^a \rangle = C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \implies \langle \mathbf{k}_1^a | \mathbf{k}_2^a \rangle = C^*(\mathbf{k}_1) C(\mathbf{k}_2) (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$$

se in questa base abbiamo calcolato i coefficienti  $a(\mathbf{k}, T)$  allora possiamo calcolarne il modulo quadro e integrarlo in  $d\Phi$  per ottenere una probabilità correttamente definita. Come al solito, indichiamo con  $|\mathbf{k}\rangle$  gli autostati con normalizzazione a  $\delta$ :

$$\langle \mathbf{k}_1 | \mathbf{k}_2 \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$$

Sia  $|\mathbf{i}\rangle$  il nostro stato incidente di partenza, con impulso  $\mathbf{k}_0$ : rappresentandolo nelle coordinate, diciamo che

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{i} \rangle = \psi_{\mathbf{i}}(\mathbf{x}) = I(\mathbf{k}_0) e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}}$$

con  $I$  un'ampiezza arbitraria. Potrebbe sembrare strano lasciare questa libertà, visto che il fascio di particelle incidenti è "fisso": motiveremo più avanti, mostrando come in realtà la derivazione sia indipendente dalla scelta di questa ampiezza. In termini degli stati correttamente normalizzati  $|\mathbf{k}\rangle$ , lo stato  $|\mathbf{i}\rangle$  ha la forma

$$|\mathbf{i}\rangle = (2\pi)^{3/2} I(\mathbf{k}_0) |\mathbf{k}_0\rangle$$

Definito lo stato di partenza, possiamo applicare la Teoria delle Perturbazioni per calcolare i termini  $|a(\mathbf{k}, T)|^2$ . Per motivi che saranno chiari fra poco, lavoriamo nella base a normalizzazione arbitraria  $|\mathbf{k}^a\rangle$ . La perturbazione  $\hat{U}$  che stiamo analizzando dipende unicamente dalla posizione, non dal tempo: si ottiene, tenendo  $\hbar = 1$

$$\begin{aligned} a(\mathbf{k}, T) &= -i \langle \mathbf{k}^a | \hat{U} | \mathbf{i} \rangle \int_0^T dt e^{i(\epsilon - \epsilon_0)t} \\ &= -i(2\pi)^3 C^*(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}_0) \langle \mathbf{k} | \hat{U} | \mathbf{k}_0 \rangle \int_0^T dt e^{i(\epsilon - \epsilon_0)t} \\ &= -i(2\pi)^{3/2} C^*(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}_0) \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \int_0^T dt e^{i(\epsilon - \epsilon_0)t} \end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo calcolato una Trasformata di Fourier

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | \hat{U} | \mathbf{k}_0 \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{x} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} U(\mathbf{x}) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{U}(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \end{aligned}$$

Ci interessa di  $a(\mathbf{k}, T)$  il modulo quadro nel limite  $T \rightarrow +\infty$ :

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow +\infty} |a(\mathbf{k}, T)|^2 &= \lim_{T \rightarrow +\infty} |\langle \mathbf{k}^a | \hat{U} | \mathbf{i} \rangle|^2 \left| \int_0^T dt e^{i(\epsilon - \epsilon_0)t} \right|^2 \\ &= \lim_{T \rightarrow +\infty} |\langle \mathbf{k}^a | \hat{U} | \mathbf{i} \rangle|^2 \left( \frac{\sin(\frac{\epsilon - \epsilon_0}{2} T)}{\frac{\epsilon - \epsilon_0}{2}} \right)^2 \end{aligned}$$

Il modulo quadro dell'elemento di matrice,  $|\langle \mathbf{k}^a | \hat{U} | \mathbf{i} \rangle|^2$  non presenta alcuna dipendenza dal tempo, quindi può uscire dal limite, mentre dalla Teoria delle Distribuzioni sappiamo che

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(xT)}{\pi T x^2} \stackrel{d}{=} \delta(x)$$

e per noi  $x = (\epsilon - \epsilon_0)/2$ . Ricordando la proprietà della distribuzione *delta* per cui

$$\delta(c(y - y_0)) = \frac{1}{|c|} \delta(y - y_0)$$

abbiamo

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{|a(\mathbf{k}, T)|^2}{T} = 2\pi |\langle \mathbf{k}^a | \hat{U} | \mathbf{i} \rangle|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0)$$

Per utilizzare il limite noto sopra riportato, è necessario dividere  $|a(\mathbf{k}, T)|^2$  per  $T$ . Se adesso moltiplichiamo per il differenziale dello spazio delle fasi  $d\Phi$ , otteniamo al membro destro una quantità indipendente da  $T$  e fisicamente interpretabile: il **rate di probabilità** (infinitesimo)  $dR$  relativo all'impulso in uscita di modulo  $\hbar k$  orientato dentro l'elemento di angolo solido  $d\Omega$ :

$$dR(\mathbf{k}) \equiv \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{|a(\mathbf{k}, T)|^2}{T} d\Phi = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}^a | \hat{U} | \mathbf{i} \rangle|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0) d\Phi$$

dove il termine  $\hbar$  a dividere nasce dal fatto che  $|a|^2$  in unità  $\hbar \neq 1$  va rimoltiplicato per  $\hbar^{-2}$ , ma in queste unità la  $\delta$  correttamente definita (dal momento che nell'esponenziale è sottinteso un  $\hbar^{-1}$ ) è

$$\delta\left(\frac{\epsilon' - \epsilon}{\hbar}\right) = \hbar\delta(\epsilon' - \epsilon)$$

per la stessa proprietà della distribuzione *delta* utilizzata anche prima.

Rendendo esplicite le normalizzazioni, otteniamo

$$\begin{aligned} dR(\mathbf{k}) &= \frac{2\pi}{\hbar}(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2 |I(\mathbf{k}_0)|^2 |\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0) \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |I(\mathbf{k}_0)|^2 |\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0) d^3\mathbf{k} \end{aligned}$$

cioè siamo riusciti a trovare una quantità indipendente dalla scelta della normalizzazione della base degli impulsi. Questo è un risultato da non trascurare: dobbiamo derivare delle quantità fisicamente osservabili, che devono essere indipendenti da come sceglieremo di normalizzare una base sul continuo. Non esiste una normalizzazione giusta e una sbagliata, perché **a ogni normalizzazione arbitraria corrisponde un riscalamento connesso dello spazio delle fasi**, e questo garantisce che il calcolo si possa svolgere in ogni caso, con un risultato tale da risultare sempre interpretabile come una probabilità.

È invece perfettamente sensata la proporzionalità al termine  $|I|^2$ : il rate di probabilità, essendo una probabilità di rivelazione per unità di tempo, deve dipendere dal numero di proiettili che inviamo contro il bersaglio, che qui viene rappresentato dall'intensità del fascio incidente.

#### 14.5.4 La regola d'oro: il continuo

A questo punto possiamo sfruttare a piena potenza quanto derivato: se la normalizzazione che sceglieremo non varia il risultato, possiamo derivare una forma esplicita per la sezione d'urto differenziale. Partiamo ricordando quanto detto in Eq. 14.6

$$\frac{dR}{d\Omega} = \frac{dN_i}{dt d\Omega} = |\mathbf{J}^{(i)}| \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

dove a sinistra abbiamo riportato il **rate** per unità di angolo solido, che sappiamo calcolare: ricordando infatti com'è definita la corrente di probabilità

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^{(i)} &= \operatorname{Re}\{\psi_i^*(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{v}} \psi_i(\mathbf{x})\} \\ &= |I(\mathbf{k}_0)|^2 \operatorname{Re}\left\{e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}} \frac{-i\hbar \nabla}{m} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}}\right\} = |I(\mathbf{k}_0)|^2 \frac{\hbar \mathbf{k}_0}{m} \end{aligned}$$

Dunque nel calcolo di  $d\sigma/d\Omega$  si cancella anche il termine  $|I|^2$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{|\mathbf{J}^{(i)}|} \frac{dR}{d\Omega} = \frac{1}{d\Omega} \frac{2\pi m}{\hbar^2 k_0} |\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0) d^3\mathbf{k} \quad (14.14)$$

e questo è sensato: la sezione d'urto differenziale non deve dipendere dal numero di particelle che inviamo contro il bersaglio, perché rappresenta proprio la costante di proporzionalità tra il numero di particelle in entrata e il

numero di particelle che nell'unità di tempo attraversano la superficie sottesa da  $d\Omega$ .

I risultati qui sviluppati in questo modo macchinoso permettono di trarre le seguente conclusione: dato un generico stato di partenza  $|\mathbf{i}\rangle$  di particella incidente, la quantità

$$dR(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k} | \hat{U} | \mathbf{i} \rangle|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0) d\Phi \quad (14.15)$$

rappresenta il **rate di probabilità** di misurare un impulso in uscita  $\hbar\mathbf{k}$  indipendentemente dalla normalizzazione scelta per gli autostati dell'impulso. Si tratta della **Regola d'Oro di Fermi** (già incontrata in Sez. 11.4.3) applicata per transizioni dal continuo al continuo. Inoltre la quantità  $dR$  rappresenta anche un  $d\sigma$  a meno di un riscalamento dovuto al modulo della corrente di probabilità. Si ha in particolare che per flussi unitari il rate per unità di angolo solido rappresenta esattamente la sezione d'urto differenziale.

#### 14.5.5 Verifica della consistenza: confrontiamo i due approcci

Confrontiamo adesso questo risultato con quello ottenuto tramite l'Approssimazione di Born: vogliamo quindi usare l'Eq. 14.14 per calcolare la sezione d'urto totale. Cominciamo riscrivendo la  $\delta$  che vi compare come

$$\begin{aligned} \delta(\epsilon - \epsilon_0) &= \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}\right) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \delta(k^2 - k_0^2) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \left[ \frac{\delta(k - k_0)}{2k_0} + \frac{\delta(k + k_0)}{2k_0} \right] = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \delta(k - k_0) \end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo usato l'ovvia condizione  $k = |\mathbf{k}| > 0$  per assassinare il secondo addendo. Il differenziale di volume  $d^3\mathbf{k}$  può essere scritto come

$$d^3\mathbf{k} = k^2 dk d\Omega$$

dove  $d\Omega$  è esattamente il differenziale di angolo solido che compare nella sezione d'urto differenziale: ricordiamo che il nostro rate di probabilità è definito sugli stati in uscita che (asintoticamente) sono onde piane il cui vettore d'onda è diretto entro  $d\Omega$ . In questo modo dalla (14.15) si ottiene, ponendo tutto insieme

$$d\sigma = \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} |\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 \delta(k - k_0) dk$$

che integrato dà

$$\sigma = \int d\sigma = \left| \frac{\sqrt{2\pi m}}{\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \right|^2_{|\mathbf{k}|=|\mathbf{k}_0|}$$

Il risultato è coerente con l'ampiezza di scattering che avevamo trovato nella Sez. 14.4.

## 14.6 SVILUPPO IN ONDE PARZIALI

Accenniamo adesso un terzo approccio che si può seguire per risolvere il problema di scattering elastico formulato nelle scorse sezioni. Non entreremo in tutti i dettagli matematici riguardanti le equazioni differenziali che compaiono nel procedimento, ma ci concentreremo sui risultati. L'obiettivo è sempre risolvere l'equazione alle autofunzioni (14.10), che riscriviamo per comodità come

$$\nabla^2\psi + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}U(r)\right)\psi = 0$$

a cui dovremo imporre l'andamento asintotico

$$\psi_{r \rightarrow \infty} = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r}f(\theta, \phi)$$

L'idea è di sviluppare la funzione d'onda non come sovrapposizione di autostati dell'impulso, come nella precedente sezione, ma come sovrapposizione di autofunzioni  $|E, l, m\rangle$  con  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l,m} a_{lm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (14.16)$$

scrittura che è anche nota come *espansione in onde parziali*<sup>3</sup>.

*Dimostrazione.* Partiamo da alcune proprietà generali della soluzione dell'equazione di Schrödinger in campo centrale. Come abbiamo visto in Sez. 6.3.2, se cerchiamo una soluzione fattorizzata  $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$  dell'equazione  $H\psi = E'\psi$  (i.e. se cerchiamo una soluzione che oltre ad essere autostato per  $\hat{H}$ , lo sia anche per  $\hat{L}^2$  e per  $\hat{L}_z$ ), allora la parte radiale deve soddisfare la seguente equazione dipendente da  $l$ :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E' - U(r)) R(r) = 0$$

Il Teorema di non degenerazione implica che, fissato  $l$ , questa equazione è risolta soltanto da un insieme *discreto* di funzioni  $R_{E'l}$ . In altri termini esiste un insieme discreto di energie  $\{E'\}$  per cui questa equazione ammette soluzioni non identicamente nulle: battezziamo  $R_{E'l}$  tale *set* di soluzioni. Osserviamo che in questo insieme ci sono in generale soluzioni relative a scattering *anelastico*, in cui le onde uscenti hanno impulso diverso (energia diversa) da quello incidente.

Noi stiamo studiando invece lo scattering elastico, per cui poniamo  $E' \stackrel{!}{=} E = \hbar^2 k^2 / (2m)$  e cerchiamo una soluzione  $R_{kl}$  corrispondente a questo specifico autovalore dell'energia<sup>4</sup>:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_{kl}(r) \right] - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{kl}(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - U(r) \right] R_{kl}(r) = 0 \quad (14.17)$$

In questo senso  $k$  è un numero quantico fissato a priori dall'impulso delle particelle incidenti, e non ci interessa farlo variare. Per ogni  $l$  allora avremo una diversa soluzione  $R_{kl}$ . In questo modo abbiamo caratterizzato tutte

le funzioni d'onda degli stati stazionari con energia  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$  e con momento angolare  $(l, m)$  definito:

$$\psi_{klm}(r, \theta, \phi) = R_{kl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Tuttavia noi stiamo cercando funzioni ad energia definita, non ad energia e momento angolare definiti. Poiché la base  $|l, m\rangle$  del momento angolare è completa nell'autospazio di energia  $E$ , una generica funzione con energia  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$  potrà essere scritta come combinazione lineare delle funzioni trovate:

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l,m} a_{lm} \psi_{klm} = \sum_{l,m} a_{lm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \square$$

Tuttavia, il fatto che il potenziale  $U = U(r)$  sia centrale permette, data la simmetria assiale del problema, di considerare solo le onde parziali con  $m = 0$  in quanto sono le uniche indipendenti dall'angolo azimutale  $\phi$ :

$$\psi(r, \theta) = \sum_l a_l R_{kl}(r) Y_{l0}(\theta)$$

che può essere riscritta in termini dei polinomi di Legendre

$$\psi(r, \theta) = \sum_l a_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta) \quad (14.18)$$

dove le opportune normalizzazioni sono gestite dal *set* di costanti  $a_l$ .

In particolare l'Eq. (14.17) per la parte radiale  $R_{kl}$ , a seguito del cambio di variabile  $u_{kl} = r R_{kl}$  diventa

$$\frac{d^2 u_{kl}}{dr^2} + [k^2 - V(r)] u_{kl} = 0 \quad (14.19)$$

dove  $V(r)$  è proporzionale al *potenziale efficace* del problema radiale

$$V(r) = \frac{2m}{\hbar^2} U_{\text{eff}}(r) = \frac{2m}{\hbar^2} U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}$$

A questo punto osserviamo che l'equazione (14.19), per  $r$  molto grande (formalmente  $r \gg a$ ), dato che  $V(r) \rightarrow 0$ , ha la soluzione approssimata

$$\frac{d^2 u_{kl}}{dr^2} + k^2 u_{kl} \simeq 0 \implies u_{kl}(r) \sim A e^{ikr} + B e^{-ikr}$$

In particolare si dimostra che la scelta giusta delle costanti di normalizzazione corrisponde al seguente andamento asintotico

$$u_{kl}(r) \sim 2 \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right)$$

dove le  $\delta_l$  sono fasi che dipendono dallo specifico potenziale  $U(r)$  sotto esame, oltre che dall'indice  $l$  della funzione radiale considerata. Le  $\delta_l$  prendono il nome di **fasi di scattering**. Pertanto, massaggiando un po' l'espressione,

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\sim \frac{2}{r} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \\ &= \frac{1}{ir} \left[ e^{i(kr-l\pi/2+\delta_l)} - e^{-i(kr-l\pi/2+\delta_l)} \right] \\ &= \frac{(-i)^l}{ir} e^{-i\delta_l} \left[ e^{ikr} e^{2i\delta_l} - (-1)^l e^{-ikr} \right] \\ &= \frac{(-i)^l}{ir} e^{-i\delta_l} \left[ e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} + (e^{2i\delta_l} - 1) e^{ikr} \right] \end{aligned}$$

dove abbiamo sommato e sottratto  $e^{ikr}$  nell'ultimo passaggio, in modo tale da separare i termini che sarebbero presenti anche con  $U = 0$  (cioè quando  $\delta_l = 0$ ) dall'ultimo binomio, dovuto proprio alla presenza del potenziale. Allora inserendo  $R_{kl}$  in (14.18) si trova che l'andamento asintotico di  $\psi$  deve essere

$$\psi(r, \theta) \sim \sum_l a_l \frac{(-i)^l}{ir} e^{-i\delta_l} \left[ e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} + (e^{2i\delta_l} - 1) e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta)$$

Se non ci fosse potenziale, sarebbe  $U(r) \equiv 0$  e pertanto la soluzione all'equazione di Schrödinger sarebbe banalmente l'onda incidente imperturbata,  $\psi(\mathbf{x}) = e^{ikz}$ , che a grandi distanze ha l'andamento asintotico

$$e^{ikz} \sim \sum_l \frac{2l+1}{2ikr} \left[ e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} \right] P_l(\cos \theta)$$

La richiesta che per  $U = 0$  l'andamento sia proprio questo porta alla seguente condizione sui coefficienti di normalizzazione:

$$a_l \frac{(-i)^l}{ir} e^{-i\delta_l} \stackrel{!}{=} \frac{2l+1}{2ikr}$$

ossia

$$a_l = \frac{1}{2k} (2l+1) i^l e^{i\delta_l}$$

Fermiamoci un secondo e ricordiamo i passaggi importanti. Abbiamo espanso la funzione d'onda in onde parziali, trovando un andamento asintotico per grandi  $r$  di ogni funzione radiale  $R_{kl}$ . Il potenziale deve avere un effetto tale da ricondurre alla soluzione di particella libera se sostituiamo ovunque  $U = 0$  (dunque  $\delta_l = 0$ ). Questo impone che la normalizzazione da usare sia la normalizzazione di particella libera: in questo modo mettendo  $U = 0$  troviamo precisamente la funzione d'onda (sviluppata in onde parziali) di un'onda piana propagante lungo  $z$ .

Pertanto la funzione d'onda può essere approssimata come

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta) &\sim \sum_l \frac{2l+1}{2ikr} P_l(\cos \theta) \left[ e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} + (e^{2i\delta_l} - 1) e^{ikr} \right] \\ &= \sum_l \frac{2l+1}{2ikr} P_l(\cos \theta) \left[ e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} \right] \\ &\quad + \sum_l \frac{2l+1}{2ikr} P_l(\cos \theta) \left[ (e^{2i\delta_l} - 1) e^{ikr} \right] \\ &\stackrel{!}{=} e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \end{aligned}$$

La prima somma è per costruzione il corretto sviluppo asintotico di  $e^{ikz}$ , mentre nella seconda possiamo leggere l'ampiezza di scattering:

$$f(\theta) = \sum_l \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l} - 1) \quad (14.20)$$

In particolare le fasi  $\delta_l$  prendono il nome di *fasi di scattering*, e la loro conoscenza permette di risalire alla sezione d'urto.

### 14.6.1 Scattering da particelle lente

Vogliamo studiare, alla luce della trattazione di questa sezione, il processo di scattering di un flusso incidente di particelle “lente”, ossia nel limite

$$ka \ll 1$$

nelle stesse ipotesi usate finora, cioè di un potenziale approssimativamente nullo per  $r > a$ . Equivalentemente, studiamo il limite

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ll \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

cioè con energia molto più piccola del modulo tipico del potenziale nella regione di interazione.

Si può dimostrare che in questo limite la fase introdotta dal potenziale ha la seguente dipendenza da  $k$

$$\delta_l = (c_l k)^{2l+1}$$

dove  $c_l$  è una costante moltiplicativa (opportunamente dimensionata) irrilevante per le considerazioni qualitative seguenti. Questo ci permette di sviluppare l'esponenziale nell'ampiezza di scattering

$$e^{2i\delta_l} - 1 \simeq 2i\delta_l = 2ic_l^{2l+1}k^{2l+1}$$

dunque

$$\begin{aligned} f(\theta) &\simeq \sum_l \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos \theta) 2ic_l^{2l+1} k^{2l+1} \\ &= \sum_l (2l+1) c_l^{2l+1} P_l(\cos \theta) k^{2l} \end{aligned}$$

Pertanto possiamo affermare che, nel limite  $ka \ll 1$ , cioè per  $k$  “piccolo” la somma è dominata dal termine con  $l = 0$  (la cosiddetta *onda s*) mentre i termini successivi sono sempre più soppressi all'aumentare di  $l$ . Dal momento che

$$P_0(\cos \theta) = 1$$

consistentemente col fatto che  $l = 0$  significa simmetria rotazionale, possiamo concludere che nel limite in cui possiamo trascurare i termini della somma superiori al primo

$$f(\theta) \simeq \text{costante}$$

cioè il processo è isotropo all'ordine dominante, e la sezione d'urto differenziale è la stessa in tutte le direzioni. Oltre a ciò, sempre nello stesso limite di particelle lente la sezione d'urto non dipende dall'energia delle particelle: infatti nell'espressione sopra riportata per  $f(\theta)$ , nel caso  $ka \ll 1$  gli unici termini che sopravvivono in ciascuna somma sono quelli dove compare  $k^0$ , quindi indipendenti dall'energia. Si può scrivere allora

$$\sigma = 4\pi\alpha^2$$

dove  $\alpha$  è detta *lunghezza di diffusione* del processo.

## NOTE

1. A dir la verità,  $|\mathbf{q}|$  dipende anche da  $k$ . Questo è un fatto rilevante nell'analisi spettrale del problema, allo stesso modo in cui questa dipendenza è fondamentale ad esempio nel contesto dell'analisi dello Scattering Rayleigh.
2. Questo è solo un modo involuto di riferirsi, in coordinate cartesiane, a un impulso compreso, nello spazio degli impulsi, entro il "volume"

$$[k_x, k_x + dk_x] \times [k_y, k_y + dk_y] \times [k_z, k_z + dk_z]$$

3. Consideriamo inizialmente la serie di Fourier

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{k', l, m} a_{k'lm} R_{k'l}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

per la funzione d'onda  $\psi(r, \theta, \phi)$ , dove  $R_{k'l}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$  sono le autofunzioni di un operatore autoaggiunto per cui sia possibile trovare lo spettro usando la separazione delle variabili. Tali autofunzioni fattorizzate contengono la dipendenza delle coordinate angolari solamente nelle armoniche sferiche  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ . Questo permette di usare il teorema di non degenerazione sulla parte radiale, in modo che i possibili valori di  $k'$  siano discreti; in caso avverso, la somma deve essere sostituita con un integrale. I primi operatori che affiorano alla mente con uno spettro di questo tipo sono probabilmente gli hamiltoniani a potenziale centrale, ad esempio quello dell'atomo di idrogeno, dell'oscillatore armonico tridimensionale o di particella libera. In ogni caso

$$\{R_{k'l}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)\}_{k'l m}$$

costituisce una **base completa** dello spazio di Hilbert  $L^2(\mathbb{R}^3)$ . Ricordiamo infatti che, in virtù dell'estensione infinito-dimensionale del Teorema Spettrale, il *set* di autofunzioni di un operatore lineare autoaggiunto costituisce una base completa dello spazio funzionale. Inoltre, possiamo sempre considerare una base che sia anche ortogonale. Vogliamo far notare che la funzione d'onda  $\psi(r, \theta, \phi)$  di cui scriviamo l'espansione può essere il frutto, a questo livello, di un processo di scattering contro un **potenziale generico**, anche privo della simmetria centrale.

Per espandere in serie la  $\psi(r, \theta, \phi)$ , potremmo dunque usare le autofunzioni dell'hamiltoniano dell'atomo di idrogeno o dell'oscillatore armonico tridimensionale: ovviamente esse costituirebbero una buona base, anche se forse non la più "comoda" per descrivere le autofunzioni dell'hamiltoniano che stiamo considerando *adesso*. In questo problema stiamo cercando delle funzioni con energia ben definita, poiché studiamo il caso di scattering elastico, dunque l'energia che osserviamo in uscita è l'energia relativa all'impulso del flusso incidente:

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = E' \stackrel{!}{=} E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Questo implica che nella serie di Fourier scritta appena sopra consideriamo un solo  $k'$  fissato:

$$a_{k'lm} \propto \delta_{k,k'}$$

quindi per il presente problema la serie si riduce almeno alla forma

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l,m} a_{lm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

4. Ci potremmo chiedere cosa garantisca l'esistenza di una soluzione a questa equazione differenziale con il  $k$  dell'onda incidente. Si può giustificare la necessità dell'esistenza dello scattering elastico citando il *teorema ottico*:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0)$$

pertanto in ogni processo di scattering con sezione d'urto totale non nulla, l'ampiezza di scattering elastico in avanti deve essere non nulla: lo scattering elastico deve esistere. Il teorema ottico è una conseguenza dell'unitarietà del processo, cioè della conservazione della probabilità.

## IN BREVE...

- ◊ Nell'analisi quantistica dello scattering elastico si perde il concetto di traiettoria. Si deve passare a una descrizione più matura: alla particella incidente sostituiamo un flusso di probabilità incidente  $\mathbf{J}^{(i)}$ , associato a una "funzione d'onda incidente" di particella libera:

$$\psi^{(i)}(\mathbf{x}) = Ae^{ikz} \quad \mathbf{J}^{(i)} = |A|^2 \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}$$

- ◊ Il problema che vogliamo risolvere è lo scattering di una particella tramite l'interazione con un potenziale a raggio d'azione finito. Nelle regioni asintotiche ( $r \rightarrow +\infty$ ) tale potenziale avrà contributo irrilevante nell'hamiltoniana, e le autofunzioni del problema dovranno mostrare un andamento da particella libera. Chiamando  $\psi^{(s)}$  l'autofunzione dell'hamiltoniana di particella libera (in coordinate sferiche), e richiedendo che l'autofunzione globale del problema sia scrivibile come

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \psi(\mathbf{x}) = \psi^{(i)}(\mathbf{x}) + \psi^{(s)}(\mathbf{x})$$

con l'imposizione che lo scattering sia elastico, i.e. che  $k' = k$  con  $\hbar \mathbf{k}$  l'impulso della particella incidente e  $\hbar \mathbf{k}'$  quello della particella diffusa, si trova che

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} = Ae^{ikz} + A \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \phi)$$

con  $f(\theta, \phi)$  l'**ampiezza di scattering**.

- ◊ Perché la descrizione del punto precedente abbia senso, si deve poter scrivere la corrente totale come la somma di correnti indipendenti. Questo è possibile se assumiamo nulli gli effetti di interferenza tra le parti, quindi lavoriamo nel limite di grandi distanze sia della sorgente che del rivelatore dal bersaglio.
- ◊ La **sezione d'urto differenziale** è il fattore di proporzionalità tra il numero di particelle diffuse per unità di tempo nell'unità di angolo solido  $d\Omega$  e il modulo del flusso di particelle incidente. Si dimostra che

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2$$

e per potenziali centrali

$$\frac{1}{2\pi \sin \theta} \frac{d\sigma}{d\theta} = |f(\theta)|^2$$

- ◊ L'**approssimazione di Born** consiste nel trattare perturbativamente (al primo ordine nel parametro perturbativo) il problema di scattering. Posto un potenziale  $U(\mathbf{x})$  significativamente non nullo entro una regione  $|\mathbf{x}| < a$ , questa approssimazione è applicabile nei regimi

$$\begin{aligned} |U| &\ll \frac{\hbar^2}{ma^2} && \text{per particelle lente } (ka \ll 1) \\ |U| &\ll \frac{\hbar^2}{ma^2} ka && \text{per particelle veloci } (ka \gg 1) \end{aligned}$$

La funzione d'onda totale si scrive perturbativamente al primo ordine come  $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$ . Tramite la teoria delle Funzioni di Green, si dimostra che

$$\psi^{(0)}(\mathbf{x}) = e^{ikz} \quad \psi^{(1)}(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{x}' U(\mathbf{x}') \psi^{(0)}(\mathbf{x}') \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

- ◊ Nel punto precedente  $U$  è non nullo solo in una regione ristretta di spazio. Nel limite  $|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'|$  si trova che

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \psi^{(1)}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{q}) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{con} \quad f(\mathbf{q}) = -\frac{\sqrt{2\pi m}}{\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{q})$$

con  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ , e se lavoriamo con potenziali centrali si ha infine

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} dr' r' U(r') \frac{\sin(qr')}{q}$$

- ◊ Il problema di scattering può essere studiato anche con la Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo. In particolare lo stato finale sarà descrivibile nella base degli autostati dell'impulso:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |\psi(t)\rangle \simeq \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}, T) e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}} t} |\mathbf{k}\rangle \quad \text{con} \quad \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$$

e vogliamo calcolare la probabilità di transizione a uno di questi autostati, i.e.  $|a|^2$ . Rimandiamo direttamente alle sezioni dedicate per precisazioni sulla scelta della normalizzazione. In questa normalizzazione si trova che il rate di probabilità di transizione allo stato  $|\mathbf{k}'\rangle$ , partendo da uno stato incidente  $|\mathbf{k}\rangle$ , è dato da

$$dR(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | \hat{U} | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(\epsilon' - \epsilon) d\Phi' \quad \text{con} \quad d\Phi' = \frac{d^3\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}$$

- ◊ Un altro possibile approccio al problema di scattering è l'**espansione in onde parziali**. Se il potenziale è centrale, un buon set di autofunzioni del problema è dato dalle soluzioni all'equazione radiale ridotta  $R_{kl}(r)$  accoppiate alle armoniche sferiche  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ . Indagando solamente lo scattering elastico e usando il fatto che il potenziale è centrale, si trova che  $\psi(\mathbf{x})$  si può scrivere come

$$\psi(r, \theta) = \sum_l a_l R_{kl}(r) Y_{l0}(\theta) = \sum_l a_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta)$$

- ◊ La forma asintotica delle  $R_{kl}$  del punto precedente si esplicita studiando l'andamento per  $r \rightarrow +\infty$  della funzione radiale ridotta  $u_{kl} = r R_{kl}$ . Compare una dipendenza esplicita dalle *fasi di scattering*  $\delta_l$ :

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} u_{kl}(r) \sim 2 \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right)$$

- ◊ I coefficienti  $a_l$  dell'espansione in onde parziali di  $\psi$  si determinano imponendo che parte dell'espansione risultante si riconduca all'espansione di particella libera  $e^{ikz}$ , che compare nella nostra autofunzione come parte relativa al flusso incidente. Questo si ottiene riscrivendo l'espansione di  $\psi$ , dove compaiono le fasi di scattering  $\delta_l$  (unica informazione che abbiamo sul potenziale) come somma di due parti, identificando in una  $e^{ikz}$  e nell'altra la parte diffusa  $f(\theta) e^{ikr}/r$ . Questo permette di determinare l'ampiezza di scattering

$$f(\theta) = \sum_l \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l} - 1)$$

- ◊ Per particelle lente ( $ka \ll 1$ ) la somma che definisce  $f(\theta)$  è dominata dall'*onda s*, cioè dal termine  $l=0$ . Si dimostra in tal caso che l'ampiezza di scattering è una costante, e la sezione d'urto (indipendente dall'energia) è  $\sigma = 4\pi\alpha^2$ , con  $\alpha$  la lunghezza di diffusione del processo.



Parte II  
ESERCITAZIONI



## 1

## SISTEMA A DUE LIVELLI

*Spesso, in Meccanica Quantistica, un sistema fisico può essere ridotto – in particolari condizioni – a un sistema a due livelli (ad esempio i primi due livelli energetici dell’atomo); oppure si affrontano problemi relativi a effettivi sistemi a due stati, come i **qubit**. In questo esercizio affrontiamo rigorosamente la trattazione quantistica di un sistema a due livelli.*

Vogliamo trovare l’hamiltoniano associato a un sistema a due stati: per fissare le idee, consideriamo in prima battuta un *bit* classico. In un sistema del genere, gli unici output possibili sono 0 e 1. Nel caso quantistico, come vedremo, a partire da questi due stati è possibile costruire uno stato diverso da entrambi e coerente con le proprietà fondamentali che vogliamo che  $\hat{H}$  rispetti; infatti l’hamiltoniano contiene (nella forma, negli autovalori e autostati) l’informazione fisica sul sistema.

Possiamo scrivere i due stati in forma vettoriale, come segue

$$|0\rangle \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

La scelta è chiaramente arbitraria e qualsiasi base ortonormale dello spazio bidimensionale è equivalente; questa scelta è fatta puramente per comodità, come vedremo più avanti. Cerchiamo dunque un operatore  $\hat{H}$ , che sia hermitiano ed associato ad una matrice  $2 \times 2$  nella base di cui sopra (stiamo lavorando in uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  bidimensionale). Non possiamo aggiungere altre richieste, quindi ci fermiamo qui: *l’hamiltoniano è il più generale operatore hermitiano nello spazio  $2 \times 2$ .* Sotto forma di matrice, esso si può scrivere come:

$$H = \begin{bmatrix} a & b \\ b^* & c \end{bmatrix}$$

con  $a, c \in \mathbb{R}$ .

Conseguentemente, trovata una base di tale spazio, potremo scrivere  $\hat{H}$  come combinazione lineare di elementi di tale base. Introduciamo allo scopo le **Matrici di Pauli**:

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Si può dimostrare che, assieme all’identità, queste formano una base per lo spazio vettoriale (su campo reale) delle matrici hermitiane  $2 \times 2$ :

$$\mathcal{B} = \{\mathbb{1}, \sigma^x, \sigma^y, \sigma^z\}$$

*Forma generale dell’hamiltoniano per un sistema a due livelli.*

*Una possibile base per lo spazio: le matrici di Pauli.*

**PROPRIETÀ DELLE MATRICI DI PAULI** Facciamo una piccola digressione sulle proprietà di questo importante set di matrici. Come già detto, sono gli elementi non banali della base dello spazio degli operatori hermitiani: di conseguenza sono le portatrici di (quasi) tutto il contenuto fisico delle trasformazioni hermitiane nello spazio  $2 \times 2$ . Presentano proprietà di commutazione cicliche

$$[\sigma^\alpha, \sigma^\beta] = 2i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma^\gamma \quad \text{dove} \quad \epsilon_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} 1 & \text{se } \alpha\beta\gamma \in \Omega^+ \\ -1 & \text{se } \alpha\beta\gamma \in \Omega^- \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

dove  $\Omega^+$  sono le permutazioni pari di  $xyz$  e  $\Omega^-$  quelle dispari. Come al solito,  $[A, B] = AB - BA$ . Inoltre, vale:

$$\{\sigma^\alpha, \sigma^\beta\} = 2\delta_{\alpha\beta}\mathbb{1} \quad \text{dove} \quad \delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \text{se } \alpha = \beta \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

dove stavolta abbiamo usato l'*anticommutatore*:  $\{A, B\} = AB + BA$ . Per definizione, vale anche

$$\text{Tr}(\sigma^\alpha) = 0 \quad \alpha = x, y, z$$

ed è utile ricordare che

$$\sigma^\alpha \sigma^\beta = \delta_{\alpha\beta} + i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma^\gamma$$

Elenchiamo autovalori e autovettori normalizzati delle matrici:

$$\begin{aligned} \sigma^x &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} & \lambda_\pm &= \pm 1 & v_+^x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} & v_-^x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \\ \sigma^y &= \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} & \lambda_\pm &= \pm 1 & v_+^y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} & v_-^y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} i \\ 1 \end{bmatrix} \\ \sigma^z &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} & \lambda_\pm &= \pm 1 & v_+^z &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} & v_-^z &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Gli autovettori di  $\sigma^z$  sono particolarmente comodi per descrivere lo spazio  $\mathcal{H}$ : siano  $v_+^z \equiv |0\rangle$ ,  $v_-^z \equiv |1\rangle$ . Chiaramente vale

$$\langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1 \quad \langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0$$

Inoltre, ovviamente

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Terminiamo questa carrellata riscrivendo gli autovettori delle altre matrici in termini della base scelta:

$$v_\pm^x = \frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad v_\pm^y = \frac{|0\rangle \pm i|1\rangle}{\sqrt{2}}$$

□

se  $\mathcal{B}$ , studiamo – per esempio – l'hamiltoniano seguente (ricordando la convenzione sulla notazione operatori-matrici)

$$\hat{H} = a\hat{\sigma}^z + b\hat{\sigma}^x$$

dove affinché sia  $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$  dobbiamo impostare che  $a, b \in \mathbb{R}$ . Scritto in forma matriciale

$$H = \begin{bmatrix} a & b \\ b & -a \end{bmatrix}$$

Di questo operatore possiamo calcolare lo spettro, che come visto nella Parte I, Cap. 4 rappresenta l'insieme dei livelli energetici accessibili al sistema:

$$0 = \det(H - \lambda \mathbb{1}) = \begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ b & -a - \lambda \end{vmatrix} = -(a^2 - \lambda^2) - b^2$$

Segue che gli autovalori sono dati da

$$E_\pm = \pm \sqrt{a^2 + b^2}$$

da cui, operando banalmente per sostituzione e risolvendo il sistema lineare risultante, otteniamo gli autovettori normalizzati

$$V_\pm = \frac{1}{\sqrt{2(1+r^2 \mp r\sqrt{1+r^2})}} \begin{bmatrix} 1 \\ -r \pm \sqrt{1+r^2} \end{bmatrix}$$

dove abbiamo introdotto il rapporto  $r = a/b$ . Per verificare la coerenza della derivazione, calcoliamo i due limiti:

- $r \rightarrow 0$ , ossia  $a \ll b$ . In tal caso si ha  $\hat{H} \simeq b\hat{\sigma}^x$ , e in effetti

$$V_\pm \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{bmatrix}$$

che sono proprio gli autovettori di  $\hat{\sigma}^x$ ;

- $r \rightarrow +\infty$ , ossia  $a \gg b$ .

$$V_+ \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1+r^2 - r^2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -r + r \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$V_- \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{r^2 + r^2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -r - r \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

che, a meno di una normalizzazione nel caso  $V_+$  (che è sparita a causa dell'approssimazione), sono gli autovettori di  $\hat{\sigma}^z$ . Infatti nell'hamiltoniano predomina questo termine, per cui:  $\hat{H} \simeq a\hat{\sigma}^z$ .

**COSA STA ACCADENDO FISICAMENTE?** Semplifichiamo il sistema: ponendo  $b = 0$  spegniamo il grado di libertà a cui è associato l'operatore  $\hat{\sigma}^x$ . Abbiamo che  $\hat{H} \propto \hat{\sigma}^z$ , con  $\sigma^z = \text{diag}(1, -1)$ . Per un generico stato  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ , la sua evoluzione temporale è regolata dalla soluzione all'equazione di Schrödinger:

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

I due livelli sono in questo caso autostati dell'hamiltoniano, per cui evolvono semplicemente con una fase a moltiplicarli

$$|0(t)\rangle = e^{-i\omega t} |0\rangle \quad |1(t)\rangle = e^{i\omega t} |1\rangle$$

dove si è definito  $\omega = a/\hbar$ . Di conseguenza, quando  $\hat{H} \propto \hat{\sigma}^z$  l'operatore  $\hat{\sigma}^z$  ha il ruolo di sfasare i suoi autovalori nel tempo con frequenza proporzionale ad  $a$ . Di conseguenza l'evoluzione di un generico stato sarà regolata da

$$|\psi(t)\rangle = \alpha |0(t)\rangle + \beta |1(t)\rangle = \alpha e^{-i\omega t} |0\rangle + \beta e^{i\omega t} |1\rangle$$

Le due componenti di  $|\psi\rangle$  sono sfasate con uguale frequenza ma in direzione opposta, e periodicamente (per  $\omega t = \pi + 2k\pi$ ) si ha che  $\hat{\sigma}^z |\psi(t)\rangle = -|\psi\rangle$ .

Se ora accendiamo  $\hat{\sigma}^x$ , il sistema si complica:  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  non sono più autostati dell'hamiltoniano, quindi l'evoluzione del sistema è più complessa, e difficilmente interpretabile a vista. In generale possiamo solo dire che i nuovi autostati dell'hamiltoniano sono un mescolamento di quelli precedenti secondo la scrittura in coordinate trovata precedentemente per il vettore  $V_{\pm}$ .  $\square$

### 1.0.1 Due sottosistemi a due livelli

*Studio di un sistema composto di due sottosistemi a due livelli, tramite hamiltoniano "misto".*

Complichiamo la situazione: consideriamo un sistema costituito da due sottosistemi, ciascuno a due livelli (una coppia di *qubits*), i cui stati identificheremo con  $|\psi\rangle_1, |\psi\rangle_2$ . Ipotizziamo che per tale sistema valga

$$\hat{H} = J \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2$$

dove  $\hat{\sigma}_i = (\hat{\sigma}_i^x, \hat{\sigma}_i^y, \hat{\sigma}_i^z)$ , e

$$\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 = \sum_{i=\{x,y,z\}} \hat{\sigma}_1^i \hat{\sigma}_2^i$$

Utilizziamo la scrittura  $\hat{\sigma}_1^i \hat{\sigma}_2^i$  al posto di  $\hat{\sigma}_1^i \otimes \hat{\sigma}_2^i$ , benché quest'ultima sia più rigorosa: infatti i due operatori non stanno applicando la trasformazione sullo stesso spazio di Hilbert. Supponiamo che i due sistemi siano non interagenti, dunque ogni operatore si limiti a operare soltanto sugli stati del proprio spazio di Hilbert  $\mathcal{H}_i$ . Sappiamo che in questo caso la base del sistema complessivo è data dal prodotto tensore delle basi dei sottosistemi:

$$\mathcal{B}_1 = \{|\uparrow\rangle_1, |\downarrow\rangle_1\} \quad \mathcal{B}_2 = \{|\uparrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_2\}$$

dove abbiamo rinominato:  $|\uparrow\rangle \equiv |0\rangle, |\downarrow\rangle \equiv |1\rangle$ . Semplifichiamo ulteriormente la notazione sottintendendo l'ordinamento:

$$\mathcal{B} \equiv \mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_2 = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$$

Vogliamo quindi trovare una matrice  $4 \times 4$  che rappresenti l'hamiltoniano in questo caso. Sappiamo come agiscono le Matrici di Pauli sui vettori della base:

$$\begin{array}{ll} \hat{\sigma}^x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle & \hat{\sigma}^x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \\ \hat{\sigma}^y |\uparrow\rangle = i |\downarrow\rangle & \hat{\sigma}^y |\downarrow\rangle = -i |\uparrow\rangle \\ \hat{\sigma}^z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle & \hat{\sigma}^z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle \end{array}$$

Se per esempio, ricordando che gli operatori non agiscono su stati dell'altro spazio, studiamo l'azione dell'hamiltoniano su  $|\uparrow\uparrow\rangle$ :

$$\hat{H}|\uparrow\uparrow\rangle = J(\hat{\sigma}_1^x\hat{\sigma}_2^x + \hat{\sigma}_1^y\hat{\sigma}_2^y + \hat{\sigma}_1^z\hat{\sigma}_2^z)|\uparrow\uparrow\rangle = J(|\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\rangle) = J|\uparrow\uparrow\rangle$$

Si può verificare in modo del tutto analogo che:

$$\begin{aligned}\hat{H}|\uparrow\uparrow\rangle &= J|\uparrow\uparrow\rangle & \hat{H}|\uparrow\downarrow\rangle &= J(2|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle) \\ \hat{H}|\downarrow\downarrow\rangle &= J|\downarrow\downarrow\rangle & \hat{H}|\downarrow\uparrow\rangle &= J(2|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)\end{aligned}$$

*Azione dell'hamiltoniano  
sullo spazio  $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ .*

da cui ricaviamo una forma matriciale per l'hamiltoniano, della base  $\mathcal{B}$ :

$$H = J \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Siamo interessanti a ricavare lo *spettro* di tale operatore hamiltoniano: per farlo è necessario diagonalizzare la relativa matrice. In questo caso, la matrice è già "in parte" diagonale: è infatti evidente che  $|\uparrow\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\downarrow\rangle$  sono autostati di  $\hat{H}$ , relativi all'autovalore (degenere)  $J$ . Resta da diagonalizzare la matrice  $2 \times 2$  relativa al sottospazio bidimensionale  $\hat{H}$ -invariante generato da  $|\uparrow\downarrow\rangle$  e  $|\downarrow\uparrow\rangle$ :

$$J \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}$$

*Studio degli autovalori  
dell'hamiltoniano.*

Imponiamo allora

$$\begin{vmatrix} -J - \lambda & 2J \\ 2J & -J - \lambda \end{vmatrix} = (J + \lambda)^2 - 4J^2 = \lambda^2 + 2J\lambda - 3J^2 = 0$$

da cui si trovano gli autovalori:

$$\lambda_+ = J \quad \lambda_- = -3J$$

Per gli autovettori, il metodo standard, come già visto, è imporre

$$\left( J \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} - \mathbb{1}\lambda \right) \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

congiuntamente alla condizione di normalizzazione degli stati.

In questo caso, però, possiamo più velocemente notare che

$$J \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} = -J\mathbb{1} + 2J\sigma^x$$

pertanto gli autovettori di questa matrice coincidono con quelli di  $\sigma^x$ , che ricordiamo essere  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$  e  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ .

Ponendo tutto insieme, abbiamo lo spettro riportato in Tabella 3, ove l'autovalore  $J$  è triplamente degenere. Se  $J > 0$ , allora lo stato fondamentale ha energia  $-3J$  ed è non degenere, invece nel caso  $J < 0$ , lo stato fondamentale ha energia  $J$  ed è tre volte degenere.

autovalore	autovettore
$J$	$ \uparrow\uparrow\rangle$
$J$	$ \downarrow\downarrow\rangle$
$J$	$\frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow\downarrow\rangle +  \downarrow\uparrow\rangle)$
$-3J$	$\frac{1}{\sqrt{2}}( \uparrow\downarrow\rangle -  \downarrow\uparrow\rangle)$

Tabella 3: Autovalori ed autovettori del problema.

### 1.1 CAMPO MAGNETICO STATICO

Vogliamo studiare un sistema descritto dall'hamiltoniano:

$$\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

con  $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$  e  $\hat{\mu} = \frac{1}{2}\gamma\hbar\hat{\sigma} = \frac{1}{2}\gamma\hbar(\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z)$ , quindi

$$\hat{H} = -\frac{\gamma\hbar}{2}B_0\hat{\sigma}^z \propto -\hat{\sigma}^z$$

Studieremo il sistema sia tramite il formalismo di Schrödinger, facendo evolvere gli stati e studiando di conseguenza l'evoluzione temporale del sistema, che attraverso il formalismo di Heisenberg – che, ricordiamo, trasferisce agli operatori il compito di evolvere, lasciando “fermi” gli stati dello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ . In particolare, nel secondo caso generalizzeremo la trattazione considerando un campo magnetico generico  $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ , deducendo poi un'equazione differenziale agli operatori di Heisenberg.

**FORMALISMO DI SCHRÖDINGER** Dalla relazione di proporzionalità  $\hat{H} \propto -\hat{\sigma}^z$ , deduciamo immediatamente che  $\hat{H}$  ha autostati  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ , rispettivamente con autovalori

$$E_{\uparrow} = -\frac{\gamma\hbar}{2}B_0 \quad E_{\downarrow} = +\frac{\gamma\hbar}{2}B_0$$

Gli autovettori di  $\hat{H}$  costituiscono un set completo di autostati nello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ , ed è pertanto possibile scrivere qualsiasi stato come una combinazione lineare di questi. Se aggiungiamo il fatto che conosciamo l'evoluzione temporale di tali autostati grazie dall'equazione di Schrödinger, la conseguenza immediata è che siamo capaci di scrivere l'evoluzione temporale di un **qualsiasi** stato iniziale. Se infatti

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n a_n |E_n\rangle = a_1 |\uparrow\rangle + a_2 |\downarrow\rangle$$

con  $a_1, a_2 \in \mathbb{C}$  tali che  $\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$  (normalizzazione), e

$$|E_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |E_n\rangle$$

allora

$$|\psi(t)\rangle = a_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\uparrow} t} |\uparrow\rangle + a_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\downarrow} t} |\downarrow\rangle$$

Possiamo moltiplicare per una fase globale arbitraria senza modificare l'informazione statistica presente nello stato<sup>1</sup>. In particolare, se lo moltiplichiamo per la fase

$$e^{\frac{i}{2\hbar}(E_{\uparrow}+E_{\downarrow})t}$$

otterremo

$$|\psi(t)\rangle = a_1 e^{i\omega_0 \frac{t}{2}} |\uparrow\rangle + a_2 e^{-i\omega_0 \frac{t}{2}} |\downarrow\rangle \quad (1.1)$$

ove  $\omega_0 \equiv \frac{E_\downarrow - E_\uparrow}{\hbar}$  è la pulsazione caratteristica, direttamente proporzionale al divario energetico  $E_\downarrow - E_\uparrow$ .

Calcoliamo per esercizio il valore di aspettazione  $\langle \hat{\mu} \rangle$  su un generico stato  $|\psi(t)\rangle$ . Per quanto concerne la componente  $\langle \hat{\mu}^x \rangle$ , vale

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mu}^x \rangle &\equiv \frac{\gamma \hbar}{2} \langle \hat{\sigma}^x \rangle \equiv \frac{\gamma \hbar}{2} \langle \psi(t) | \hat{\sigma}^x | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{\gamma \hbar}{2} \left( a_1^* e^{-i\omega_0 \frac{t}{2}} \langle \uparrow | + a_2^* e^{i\omega_0 \frac{t}{2}} \langle \downarrow | \right) \hat{\sigma}^x \left( a_1 e^{i\omega_0 \frac{t}{2}} |\uparrow\rangle + a_2 e^{-i\omega_0 \frac{t}{2}} |\downarrow\rangle \right) \\ &= \frac{\gamma \hbar}{2} \left( a_1^* e^{-i\omega_0 \frac{t}{2}} \langle \uparrow | + a_2^* e^{i\omega_0 \frac{t}{2}} \langle \downarrow | \right) \left( a_1 e^{i\omega_0 \frac{t}{2}} |\downarrow\rangle + a_2 e^{-i\omega_0 \frac{t}{2}} |\uparrow\rangle \right) \\ &= \frac{\gamma \hbar}{2} \left( a_1^* a_2 e^{-i\omega_0 t} + a_2^* a_1 e^{i\omega_0 t} \right) \\ &= \hbar \gamma \operatorname{Re} (a_1^* a_2 e^{-i\omega_0 t}) \end{aligned}$$

*Studio del valore di aspettazione  $\langle \hat{\mu} \rangle$ .*

Ragionando in modo analogo ed utilizzando che  $z + z^* = 2 \operatorname{Re}(z)$ ,  $z - z^* = 2i \operatorname{Im}(z)$  e  $\operatorname{Im}(z^*) = -\operatorname{Im}(z)$  se  $z \in \mathbb{C}$ , troviamo le altre componenti:

$$\langle \hat{\mu} \rangle = \begin{bmatrix} \hbar \gamma \operatorname{Re} (a_1^* a_2 e^{-i\omega_0 t}) \\ \hbar \gamma \operatorname{Im} (a_1^* a_2 e^{-i\omega_0 t}) \\ \frac{\hbar \gamma}{2} (|a_1|^2 - |a_2|^2) \end{bmatrix}$$

Mentre  $\langle \hat{\mu}^x \rangle$  e  $\langle \hat{\mu}^y \rangle$  dipendono in generale dal tempo, questo non è vero per  $\langle \hat{\mu}^z \rangle$ , che corrisponde a una quantità conservata; del resto  $\hat{\mu}^z \propto \hat{\sigma}^z \propto \hat{H}$ , quindi ovviamente l'operatore  $\hat{\mu}^z$  commuta con  $\hat{H}$ . Ricordiamo infatti che, dalla (2.9), sappiamo che per operatori che commutano con l'hamiltoniano il valore di aspettazione su generici stati ha derivata nulla, ossia risulta conservato.

Per rendere le idee più chiare, consideriamo lo stato iniziale con  $a_1 = a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$$

*Moto di precessione: studio dell'evoluzione di  $\langle \hat{\mu} \rangle$  su uno stato specifico.*

Su questo stato, il valore di aspettazione vettoriale  $\langle \hat{\mu} \rangle$  corrisponde a

$$\langle \hat{\mu} \rangle = \frac{\hbar \gamma}{2} \begin{bmatrix} \cos(\omega_0 t) \\ -\sin(\omega_0 t) \\ 0 \end{bmatrix}$$

che nel tempo compie un moto di precessione intorno al vettore  $\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{z}}$ :

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mu} \rangle = -\frac{\hbar \gamma}{2} \omega_0 \begin{bmatrix} \sin(\omega_0 t) \\ \cos(\omega_0 t) \\ 0 \end{bmatrix} = \omega_0 \hat{\mathbf{z}} \times \langle \hat{\mu} \rangle$$

**FORMALISMO DI HEISENBERG** Proviamo ora ad approcciare lo stesso problema con il formalismo di Heisenberg, nel quale ricordiamo che l'evoluzione temporale è trasferita dagli stati agli operatori.

Ricordiamo inoltre che, per un dato operatore  $\hat{O}$  associato ad una osservabile, vale l'equazione di Heisenberg:

$$\frac{d}{dt}\hat{O}^{(H)}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}^{(H)}(t)] \quad \hat{O}^{(H)}(t) \equiv e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{O} e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$$

Vogliamo ora considerare il caso in cui l'operatore  $\hat{O}$  sia proprio una della componenti del vettore  $\hat{\sigma}$ , per scrivere infine un'equazione del moto per quest'ultimo. In questo modo si otterremo equivalentemente un'equazione del moto per il vettore di operatori:

$$\hat{\mu} = \gamma \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$$

ricordando che le sue componenti sono gli operatori associati alle componenti (vettoriali, nello spazio fisico) del momento magnetico del sistema in esame.

*Generalizzazione: campo magnetico qualsiasi, statico.*  
*Precessione degli operatori di Heisenberg.*

$$\frac{d}{dt}\hat{\sigma}^{(H)}(t) = \gamma \hat{\sigma}^{(H)}(t) \times \mathbf{B}$$

Dove  $\hat{\sigma}^{(H)}$  è il vettore delle matrici di Pauli à la Heisenberg:

$$\hat{\sigma}_j^{(H)}(t) = e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{\sigma}^j e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$$

*Dimostrazione.* Proviamo a convincerci di ciò ricavando l'equazione, ad esempio, per la componente  $x$ . L'operatore hamiltoniano è sempre:

$$\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

Per ogni componente di  $\hat{\sigma}^{(H)}(t)$  sarà valida l'equazione di Heisenberg:

$$\frac{d}{dt}\hat{\sigma}_x^{(H)}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\sigma}_x^{(H)}(t)]$$

e in particolare, per la componente  $x$  si avrà:

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\sigma}_x^{(H)}(t)] = -i\frac{\gamma}{2} [B_x \hat{\sigma}^x + B_y \hat{\sigma}^y + B_z \hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}_x^{(H)}(t)]$$

Considerando che

$$[\hat{H}, f(\hat{H}) \hat{O} g(\hat{H})] = f(\hat{H}) [\hat{H}, \hat{O}] g(\hat{H})$$

inserendo la definizione di  $\hat{\sigma}_x^{(H)}(t)$  ed utilizzando le relazioni per i commutatori tra le matrici di Pauli, ricaviamo

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\sigma}_x^{(H)}(t)] = -i\frac{\gamma}{2} e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} (2iB_z \hat{\sigma}^y - 2iB_y \hat{\sigma}^z) e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$$

e quindi

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\sigma}_x^{(H)}(t)] = \gamma (B_z \hat{\sigma}_y^{(H)} - B_y \hat{\sigma}_z^{(H)})$$

Ripetendo il calcolo analogamente sulle altre componenti, troviamo quanto cercato:

$$\frac{d}{dt}\hat{\sigma}^{(H)}(t) = \gamma \hat{\sigma}^{(H)}(t) \times \mathbf{B}$$

□

L'equazione qui derivata è senza dubbio interessante, e mostra l'equivalenza dell'approccio di Heisenberg: il comportamento che avevamo trovato per  $\langle \hat{\mu} \rangle$ , ossia il suo moto di precessione attorno a  $\mathbf{B}$ , è stato preservato. In una certa forma, se non sono gli stati a evolvere, per mantenere coerente quanto osservato su  $\langle \hat{\mu} \rangle$ , devono essere gli operatori a evolvere. Tutto mantiene la propria coerenza: la Fisica è salva ancora una volta.

Torniamo ora a considerare un campo magnetico uniforme e costante  $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$  e proviamo a ricavare la soluzione  $\hat{\sigma}_j^{(H)}(t)$  a partire dalla sua definizione. In questo caso specifico l'operatore hamiltoniano si riduce a:

*Campo magnetico diretto lungo  $\hat{z}$ : studio del sistema nel formalismo di Heisenberg.*

$$\hat{H} = -\gamma \frac{\hbar}{2} B_0 \hat{\sigma}^z$$

e quindi si ottiene

$$\hat{\sigma}_j^{(H)}(t) = e^{i \frac{\hat{H} t}{\hbar}} \hat{\sigma}^j e^{-i \frac{\hat{H} t}{\hbar}} = e^{-i \frac{\gamma}{2} B_0 \hat{\sigma}^z t} \hat{\sigma}^j e^{i \frac{\gamma}{2} B_0 \hat{\sigma}^z t}$$

Definendo  $\alpha = \frac{\gamma}{2} B_0 t$

$$\hat{\sigma}_j^{(H)}(t) = e^{-i\alpha \hat{\sigma}^z} \hat{\sigma}^j e^{i\alpha \hat{\sigma}^z}$$

A questo punto possiamo sviluppare in serie di Taylor l'esponenziale:

$$e^{i\alpha \hat{\sigma}^z} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\alpha \hat{\sigma}^z)^k}{k!}$$

Grazie al fatto che  $(\hat{\sigma}^z)^{2k} = \mathbb{1}$ ,  $(\hat{\sigma}^z)^{2k+1} = \hat{\sigma}^z$ , si può spezzare la sommatoria nelle sue parti pari e dispari e riconoscere gli sviluppi in serie di seno e coseno:

$$e^{i\alpha \hat{\sigma}^z} = \cos \alpha \mathbb{1} + i \sin \alpha \hat{\sigma}^z \quad (1.2)$$

da cui discende immediatamente, coniugando a sinistra la serie esponenziale

$$e^{-i\alpha \hat{\sigma}^z} = \cos \alpha \mathbb{1} - i \sin \alpha \hat{\sigma}^z$$

Siamo pronti a inserire il tutto all'interno dell'equazione di partenza:

$$\hat{\sigma}_j^{(H)}(t) = (\cos \alpha \mathbb{1} - i \sin \alpha \hat{\sigma}^z) \hat{\sigma}^j (\cos \alpha \mathbb{1} + i \sin \alpha \hat{\sigma}^z)$$

e sviluppando il prodotto

$$\hat{\sigma}_j^{(H)}(t) = \cos^2 \alpha \mathbb{1} + \sin^2 \alpha \hat{\sigma}^z \hat{\sigma}^j \hat{\sigma}^z + i \sin \alpha \cos \alpha (\hat{\sigma}^j \hat{\sigma}^z - \hat{\sigma}^z \hat{\sigma}^j)$$

Dato che  $[\hat{\sigma}^j, \hat{\sigma}^z] = \hat{\sigma}^j \hat{\sigma}^z - \hat{\sigma}^z \hat{\sigma}^j = 2i\epsilon_{jzk} \hat{\sigma}^k$ , sostituendo si ricava:

$$\hat{\sigma}_j^{(H)}(t) = \cos^2 \alpha \mathbb{1} + \sin^2 \alpha \hat{\sigma}^z \hat{\sigma}^j \hat{\sigma}^z - 2\epsilon_{jzk} \hat{\sigma}^k \sin \alpha \cos \alpha$$

dove sostituendo per un certo  $j$ , e avendo  $k \neq j$  e  $\neq z$ , si ottiene una soluzione ben definita per la componente  $j$ -esima del vettore  $\hat{\sigma}$ . Svolgendo i calcoli per i tre casi possibili, si ricavano:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x^{(H)}(t) &= \hat{\sigma}^x \cos 2\alpha + \hat{\sigma}^y \sin 2\alpha \\ \hat{\sigma}_y^{(H)}(t) &= \hat{\sigma}^y \cos 2\alpha - \hat{\sigma}^x \sin 2\alpha \\ \hat{\sigma}_z^{(H)}(t) &= \hat{\sigma}^z \end{aligned}$$

dove si ricordi che la dipendenza dal tempo è implicita nel parametro  $\alpha = \frac{\gamma}{2} B_0 t$ . Le equazioni per le componenti di  $\hat{\mu}$  si ottengono immediatamente, dalla definizione.

## 1.2 CAMPO MAGNETICO VARIABILE NEL TEMPO

In questa sezione complichiamo ulteriormente la situazione, studiando campi che variano nel tempo secondo leggi orarie specifiche. In particolare, ci focalizziamo su semplici precessioni spaziali che danno luogo a interessanti fenomeni di risonanza.

**RISONANZA DI SPIN** Introduciamo un primo esempio di operatore hamiltoniano dipendente dal tempo. Consideriamo quindi il sistema studiato finora, immaginando che il campo magnetico  $\mathbf{B}$  non sia più costante nel tempo, bensì sia tale che presa un'origine in un sistema di assi cartesiani, il vettore  $\mathbf{B}$  compia un moto di precessione circolare intorno all'asse  $\bar{\mathbf{z}}$ .

In termini matematici la cosa si traduce come segue:

$$\mathbf{B} = B_0 \bar{\mathbf{z}} + B_1 (\cos(\omega t) \bar{\mathbf{x}} + \sin(\omega t) \bar{\mathbf{y}})$$

dove  $\omega$  è la velocità angolare di precessione. L'operatore hamiltoniano si scrive quindi come:

$$\hat{H}(t) = -\hbar \frac{\gamma}{2} \mathbf{B} \cdot \hat{\sigma} = -\hbar \frac{\gamma}{2} [B_0 \hat{\sigma}^z + B_1 (\cos(\omega t) \hat{\sigma}^x + \sin(\omega t) \hat{\sigma}^y)]$$

Per quanto mostrato nella sezione precedente, il termine che moltiplica  $B_1$  è

$$\hat{\sigma}^x \cos\left(2 \frac{\omega t}{2}\right) + \hat{\sigma}^y \sin\left(2 \frac{\omega t}{2}\right) = e^{-i \frac{\omega t}{2} \hat{\sigma}^z} \hat{\sigma}^x e^{i \frac{\omega t}{2} \hat{\sigma}^z}$$

Anche se ovvio, conviene sottolineare che la scrittura qui riportata **non è**  $\hat{\sigma}_x^{(H)}$ , ma una pura riscrittura algebrica derivata dall'espansione in serie dei due esponenziali e dalle proprietà costruttive delle matrici di Pauli. Per sostituzione, ricaviamo:

$$\hat{H}(t) = -\hbar \frac{\gamma}{2} \left[ B_0 \hat{\sigma}^z + B_1 e^{-i \frac{\omega t}{2} \hat{\sigma}^z} \hat{\sigma}^x e^{i \frac{\omega t}{2} \hat{\sigma}^z} \right]$$

Questo operatore hamiltoniano descrive l'evoluzione dello stato che stiamo analizzando, esattamente come quando in Meccanica Classica l'hamiltoniana di un sistema era specifica del contesto fisico in esame.

Per qualunque stato  $|\psi(t)\rangle$  del sistema deve valere l'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

Il fatto che l'operatore hamiltoniano dipenda esplicitamente dal tempo ci impedisce di scrivere la sua soluzione in modo immediato, per mezzo di un evolutore.

Notiamo che il rotatore  $e^{i \frac{\omega t}{2} \hat{\sigma}^z}$  è anche presente nell'hamiltoniano iniziale, a trasformare la matrice  $\hat{\sigma}^x$ , istante per istante. Possiamo quindi supporre che l'evoluzione sia fattorizzabile, ovvero che introducendo un termine di sfasamento che tenga conto della precessione del campo magnetico, sia possibile riportare il problema al caso statico. Se proviamo a cercare una soluzione che abbia la forma:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i \frac{\omega t}{2} \hat{\sigma}^z} |\phi(t)\rangle$$

otteniamo

$$\begin{aligned} i\hbar e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z} \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= i\hbar e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z} \frac{d}{dt} \left( e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z} |\phi(t)\rangle \right) \\ &= i\hbar \frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle + i\hbar e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z} \left( -i\frac{\omega}{2}\hat{\sigma}^z \right) e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z} |\phi(t)\rangle \end{aligned}$$

e quindi, esplicitando per il termine contenente la derivata di  $|\phi(t)\rangle$  e applicando<sup>2</sup> l'equazione di Schrödinger per  $|\psi(t)\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle = i\hbar e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z} \left( i\frac{\omega}{2}\hat{\sigma}^z \right) e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z} |\phi(t)\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z} \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

d'altronde conosciamo la forma dell'operatore  $\hat{H}(t)$  e sappiamo come  $|\psi(t)\rangle$  dipende da  $|\phi(t)\rangle$ . Quindi abbiamo tutti gli ingredienti per poter scrivere l'equazione di Schrödinger per lo stato  $|\phi(t)\rangle$ . Riarrangiando i vari pezzi, alla fine si ottiene:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle = \left[ -\frac{\hbar}{2}(\omega + \gamma B_0)\hat{\sigma}^z - \frac{\hbar}{2}\gamma B_1\hat{\sigma}^x \right] |\phi(t)\rangle$$

dove in particolare abbiamo usato il fatto che  $\hat{\sigma}^z$  commuta con l'esponenziale di se stesso.

Notiamo che l'operatore hamiltoniano che descrive l'evoluzione dello stato  $|\phi(t)\rangle$  è indipendente dal tempo.

Possiamo asserire che l'aver moltiplicato lo stato  $|\psi(t)\rangle$  per il rotatore  $e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z}$ , ci ha ricondotti allo studio dello stesso sistema in un riferimento in rotazione, che segue la precessione del campo magnetico, dove infatti ci aspettiamo che l'operatore hamiltoniano non dipenda più dal tempo.

*Definizione  
dell'hamiltoniano efficace del  
sistema, analogo al caso  
statico.*

Chiameremo questo nuovo operatore *hamiltoniano efficace*:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} &= -\frac{\hbar}{2}(\omega + \gamma B_0)\hat{\sigma}^z - \frac{\hbar}{2}\gamma B_1\hat{\sigma}^x \\ &\equiv -\frac{\hbar}{2}[(\omega_0 + \omega)\hat{\sigma}^z + \omega_1\hat{\sigma}^x] \end{aligned}$$

dove abbiamo definito  $\omega_0 = \gamma B_0$  e  $\omega_1 = \gamma B_1$ . Da questo hamiltoniano possiamo risolvere l'equazione precedente per  $|\phi\rangle$ , la cui soluzione coincide con quella dell'Equazione di Schrödinger per  $\hat{H}$  indipendente dal tempo:

$$|\phi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\text{eff}}t} |\phi(0)\rangle$$

da cui possiamo determinare la soluzione cercata originariamente:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\text{eff}}t} e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}^z} |\psi(0)\rangle$$

dove abbiamo banalmente trasformato  $|\phi\rangle \rightarrow |\psi\rangle$ , per mezzo della definizione.

Scriviamo in forma compatta l'hamiltoniano efficace

$$\hat{H}_{\text{eff}} \equiv -\frac{1}{2}\hbar\alpha\hat{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{n}}$$

*Soluzione all'Equazione di  
Schrödinger nel sistema  
rotante.*

dove abbiamo definito

$$\bar{\mathbf{n}} \equiv \frac{1}{\alpha} \begin{bmatrix} \omega_1 \\ 0 \\ \omega_0 + \omega \end{bmatrix} \quad \alpha \equiv \sqrt{\omega_1^2 + (\omega_0 + \omega)^2}$$

Come è evidente, per costruzione  $\hat{\mathbf{n}}$  è di norma 1. Per risolvere il problema, utilizziamo la seguente generalizzazione di Eq. (1.2):

$$e^{ia\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}} = \mathbb{1} \cos(a) + i\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} \sin(a)$$

valida per un generico versore  $\hat{\mathbf{n}}$  di modulo unitario, ed avendo  $a \in \mathbb{R}$ . Questo ci permette di scrivere in modo immediato l'evolutore temporale efficace

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\text{eff}}t} &= e^{i\frac{\alpha}{2}t\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}} \\ &= \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}t\right) + i\left(\frac{\omega+\omega_0}{\alpha}\right)\sin\left(\frac{\alpha}{2}t\right) & i\frac{\omega_1}{\alpha}\sin\left(\frac{\alpha}{2}t\right) \\ i\frac{\omega_1}{\alpha}\sin\left(\frac{\alpha}{2}t\right) & \cos\left(\frac{\alpha}{2}t\right) - i\left(\frac{\omega+\omega_0}{\alpha}\right)\sin\left(\frac{\alpha}{2}t\right) \end{bmatrix} \quad (1.3) \\ &\equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Chiamiamo per brevità  $a_{ij}$  gli elementi di matrice, tutti dipendenti esplicitamente dal tempo. Con questa espressione, fissato uno stato iniziale arbitrario, siamo capaci di descrivere la successiva evoluzione temporale del sistema.

*Evoluzione dello stato  $|\uparrow\rangle$  nel sistema rotante.*

Consideriamo ad esempio la seguente condizione iniziale:

$$|\phi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$$

allora sarà

$$\begin{aligned} |\phi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\text{eff}}t} |\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}t\right) + i\left(\frac{\omega+\omega_0}{\alpha}\right)\sin\left(\frac{\alpha}{2}t\right) \\ i\frac{\omega_1}{\alpha}\sin\left(\frac{\alpha}{2}t\right) \end{bmatrix} \\ &\equiv a_{11} |\uparrow\rangle + a_{21} |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo eseguito la moltiplicazione della matrice in (1.3) con il vettore  $|\uparrow\rangle = (1, 0)$ , ed espresso il risultato in termini della base canonica  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ .

Possiamo tornare allo stato  $|\psi\rangle$  corrispondente, usando  $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}^z$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t\hat{S}_z} |\phi(t)\rangle$$

la qual cosa è particolarmente facile dato che abbiamo scritto  $|\phi\rangle$  in funzione degli spin up e down, i quali, ricordiamo, sono autostati per  $\hat{S}_z$ :

$$\hat{S}_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \quad \hat{S}_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$$

e di conseguenza per  $e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t\hat{S}_z}$ , con autovalori

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t\hat{S}_z} |\uparrow\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t\frac{\hbar}{2}} |\uparrow\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} |\uparrow\rangle \\ e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t\hat{S}_z} |\downarrow\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t(-\frac{\hbar}{2})} |\downarrow\rangle = e^{i\frac{\omega t}{2}} |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Dunque possiamo scrivere

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} a_{11} |\uparrow\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}} a_{21} |\downarrow\rangle \quad (1.4)$$

che risolve formalmente il problema dell'evoluzione temporale. Ricordiamo che anche gli elementi  $a_{ij}$  dipendono dal tempo.

**PROBABILITÀ DI TRANSIZIONE DA  $|\uparrow\rangle$  A  $|\downarrow\rangle$**  Supponiamo di avere lo stesso campo magnetico della sezione precedente, e di spegnere la parte *time-dependent* ad un istante  $T$ , ovvero consideriamo

$$\mathbf{B}(t) = \begin{cases} B_0\bar{\mathbf{z}} + \mathbf{B}_1(t) & \text{se } 0 < t < T \\ B_0\bar{\mathbf{z}} & \text{se } t > T \end{cases}$$

ci chiediamo quale sia la probabilità che al tempo  $T$  il sistema evolva dallo stato iniziale  $|\uparrow\rangle$  allo stato finale  $|\downarrow\rangle$ .

Scriviamo l'hamiltoniano

$$\hat{H}(t) = -\gamma \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

e scriviamo l'evoluto al tempo  $T$  dello stato  $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$ , usando la (1.4)

$$|\psi(T)\rangle = e^{-i\frac{\omega T}{2}} a_{11}(T) |\uparrow\rangle + e^{i\frac{\omega T}{2}} a_{21}(T) |\downarrow\rangle \quad (1.5)$$

mentre, poiché per ipotesi l'hamiltoniano non dipende più dal tempo, si può scrivere l'evoluzione per tempi successivi a  $T$  dello stato nel seguente modo

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\frac{\hbar}{\hbar}\hat{H}(t-T)} |\psi(T)\rangle \\ &= e^{i\frac{\omega_0(t-T)}{2}} e^{-i\frac{\omega T}{2}} a_{11}(T) |\uparrow\rangle + e^{-i\frac{\omega_0(t-T)}{2}} e^{i\frac{\omega T}{2}} a_{21}(T) |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo usato la (1.5) e il fatto che, essendo  $\hat{H} \propto \hat{\sigma}^z$  per  $t > T$ ,  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  sono anche autostati dell'hamiltoniano relativi agli autovalori  $\mp\frac{\hbar\omega_0}{2}$ , per cui l'evoluzione si scrive come in (1.1).

Si deduce allora la probabilità di misurare il sistema nello stato  $|\downarrow\rangle$  al tempo  $t = T$

$$P_{\downarrow}(t = T) \equiv |\langle \downarrow | \psi(T) \rangle|^2 = |a_{21}(T)|^2 = \left| \frac{\omega_1}{\alpha} \sin\left(\frac{\alpha}{2}T\right) \right|^2$$

in sostanza, dato che la componente lungo  $|\downarrow\rangle$  di  $|\psi\rangle$  evolve nel tempo in modo *banale*, cioè con una fase, dopo aver spento  $\mathbf{B}_1$ , allora la probabilità che l'osservabile  $\hat{S}_z$  sia  $-\hbar/2$  rimane costante per tutti i tempi  $t > T$ .

In particolare essa raggiunge un massimo quando l'argomento del seno raggiunge  $\pi/2$ , cioè in  $T = \pi/\alpha$ , e vale

$$\max P_{\downarrow} = \left| \frac{\omega_1}{\alpha} \right|^2 = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\omega + \omega_0)^2} \leq 1$$

Inoltre, per  $\omega = -\omega_0$ , condizione che possiamo chiamare **risonanza**, si ha

$$(P_{\downarrow})_{\omega=-\omega_0} = \sin^2\left(\frac{\omega_1}{2}T\right)$$

pertanto

$$(\max P_{\downarrow})_{\omega=-\omega_0} = 1$$

cioè a risonanza è possibile far evolvere con certezza (spegnendo  $\mathbf{B}_1(t)$  al tempo  $T = \pi/\alpha$  o in un suo multiplo dispari) lo stato  $|\uparrow\rangle$  in  $|\downarrow\rangle$ .

In definitiva, abbiamo imparato che l'evoluzione temporale quando lo spin è soggetto ad un campo uniforme e costante lungo un certo asse  $\bar{\mathbf{z}}$  – riportata in Eq. (1.1) – è tale da non cambiare le probabilità di misurare  $\langle \hat{S}_z \rangle = \hbar/2$  o  $-\hbar/2$ .

Al contrario, la presenza di un campo magnetico rotante nel piano  $(x, y)$  può modificare queste probabilità, per mezzo dei termini di *mescolamento* dati dagli  $a_{ij}(t)$  in Eq. (1.4), portando ad una condizione limite di *risonanza*.

## NOTE

1. In questo passaggio stiamo arbitrariamente modificando lo stato di una fase  $\delta$ : formalmente, l'operazione è:

$$|\phi\rangle \rightarrow e^{i\delta} |\phi\rangle \sim |\phi\rangle$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo stabilito un'equivalenza tra la due definizioni di  $|\phi\rangle$ , sfruttando l'invarianza del valore di aspettazione sotto composizione per un'arbitraria fase complessa.

2. In quanto, per le proprietà di hermitianità dell'hamiltoniano, vale  $[\hat{H}, \exp\{\alpha\hat{H}\}] = 0$ .

# 2

## PROBLEMI UNIDIMENSIONALI

*In questo capitolo risolveremo in rappresentazione delle coordinate l'equazione di Schrödinger per particelle quantistiche sotto l'azione di alcuni tipici potenziali unidimensionali.*

### 2.1 BUCA DI POTENZIALE QUADRATA

Con riferimento a Fig. 2.1, consideriamo il generico operatore Hamiltoniano caratterizzato dal potenziale unidimensionale, scritto in funzione delle coordinate

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } |x| < a/2 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Possiamo pertanto dividere lo spazio delle coordinate nelle tre zone

$$\text{I : } \left(-\infty, -\frac{a}{2}\right) \quad \text{II : } \left(-\frac{a}{2}, +\frac{a}{2}\right) \quad \text{III : } \left(+\frac{a}{2}, +\infty\right)$$

su ciascuna delle quali il potenziale è continuo e, in questo esempio, anche costante. Adotteremo la strategia di risolvere nelle varie porzioni della retta reale l'equazione di Schrödinger e raccordare le soluzioni, richiedendo la continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima, così da garantire la continuità del flusso di probabilità  $J$ .<sup>1</sup>

L'equazione di Schrödinger per gli autostati di  $\hat{H}$ ,

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

assume la forma, nella rappresentazione delle coordinate:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)$$

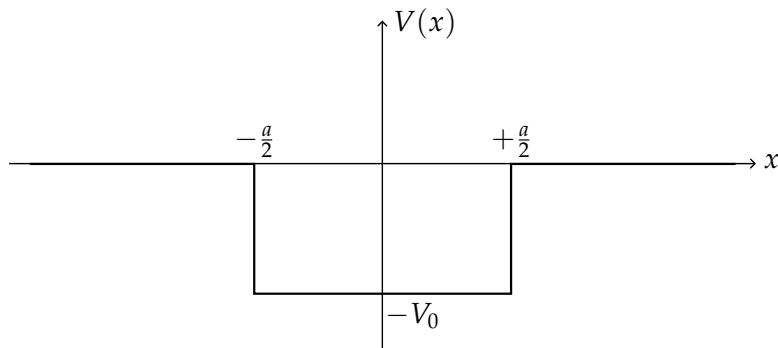


Figura 2.1: Illustrazione della buca di potenziale quadrata.

Nel caso  $E > 0$ , per  $|x| > a/2$  abbiamo  $V(x) = 0$ , quindi nelle zone I e III la soluzione ha forma

$$\psi(x) = Ae^{+i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + Be^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}$$

ed è pertanto identica alla soluzione per particella libera. Sempre per  $E > 0$ , nell'intervallo II l'autofunzione si scrive come

$$\psi(x) = A'e^{+i\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}x} + B'e^{-i\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}x}$$

Le due espressioni devono essere raccordate, con le regolarità già discusse, alle frontiere delle zone, in modo da ottenere soluzioni valide su tutto lo spazio. Queste hanno forma di onde piane, con un numero d'onda che varia in modo discontinuo in  $|x| = \frac{a}{2}$ , inoltre non sono normalizzabili e non tendono a zero asintoticamente.

Apprendiamo in questo modo che, per avere degli *stati legati*, è necessaria la condizione  $E < 0$ .

D'altronde, dovrà essere  $E \geq -V_0$ , in quanto affinché un autostato  $|\psi\rangle$  di  $\hat{H}$  sia normalizzabile

$$\begin{aligned} E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \frac{1}{2m} \langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) |\psi(x)|^2 \\ &\geq \min_{x \in \mathbb{R}} V(x) \int_{-\infty}^{\infty} dy |\psi(y)|^2 = -V_0 \end{aligned}$$

dove abbiamo utilizzato la positività di  $\langle p^2 \rangle$  e richiesto la sopra citata normalizzazione dell'autostato  $|\psi\rangle$ .

- $V(x) = 0$ . In I e III, l'equazione per le autofunzioni si scrive

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

che per  $E < 0$  ha come soluzioni  $\psi \propto \exp\{\pm\lambda x\}$ , con

$$\lambda = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}$$

cioè

$$\psi(x) = Ae^{\lambda x} + Be^{-\lambda x}$$

- $V(x) = -V_0$ . Nella zona II, dev'essere invece

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

che ha come soluzioni  $\psi \propto \exp\{\pm i\eta x\}$ , con

$$\eta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}$$

( $\eta > 0$  perché  $E > -V_0$  in base alle considerazioni fatte sopra). Dunque

$$\psi(x) = Ce^{i\eta x} + De^{-i\eta x}$$

Per unire le soluzioni, cominciamo a scartare quelle evidentemente prive di significato fisico. Le soluzioni

$$B_1 e^{-\lambda x} \quad \text{ed} \quad A_3 e^{\lambda x}$$

(usiamo i pedici per riferirci a quale delle 3 regioni stiamo considerando) devono senza dubbio essere escluse, perché divergono rispettivamente per  $x \rightarrow -\infty$  e  $x \rightarrow +\infty$ . Allora, se indichiamo con  $\psi'(x)$  la derivata rispetto a  $x$  di  $\psi$ , occorre impostare alla soluzione generale le condizioni al contorno

$$\begin{aligned} \psi_1\left(-\frac{a}{2}\right) &= \psi_2\left(-\frac{a}{2}\right) & \psi'_1\left(-\frac{a}{2}\right) &= \psi'_2\left(-\frac{a}{2}\right) \\ \psi_2\left(\frac{a}{2}\right) &= \psi_3\left(\frac{a}{2}\right) & \psi'_2\left(\frac{a}{2}\right) &= \psi'_3\left(\frac{a}{2}\right) \end{aligned}$$

Dalla prima delle condizioni al contorno, si ottiene

$$A_1 e^{-\lambda \frac{a}{2}} = C_2 e^{-i\eta \frac{a}{2}} + D_2 e^{i\eta \frac{a}{2}}$$

mentre dalla seconda

$$\lambda A_1 e^{-\lambda \frac{a}{2}} = i\eta C_2 e^{-i\eta \frac{a}{2}} - i\eta D_2 e^{i\eta \frac{a}{2}}$$

Risolvendo per  $C_2$ ,  $D_2$ , dalle precedenti condizioni si arriva a

$$\begin{aligned} C_2 &= \exp\left\{-\left(\lambda - i\eta\right)\frac{a}{2}\right\} \frac{i\eta + \lambda}{2i\eta} A_1 \\ D_2 &= \exp\left\{-\left(\lambda + i\eta\right)\frac{a}{2}\right\} \frac{i\eta - \lambda}{2i\eta} A_1 \end{aligned}$$

Dalle altre due condizioni di continuità in  $x = \frac{a}{2}$ , si giunge in modo analogo alle relazioni

$$\begin{aligned} B_3 e^{-\lambda \frac{a}{2}} &= C_2 e^{-i\eta \frac{a}{2}} + D_2 e^{i\eta \frac{a}{2}} \\ -\lambda B_3 e^{-\lambda \frac{a}{2}} &= i\eta C_2 e^{i\eta \frac{a}{2}} - i\eta D_2 e^{-i\eta \frac{a}{2}} \end{aligned}$$

anch'esse da porre a sistema. Sostituendo in tale sistema le espressioni per  $C_2$  e  $D_2$  trovate dalle condizioni in  $x = -\frac{a}{2}$ , otteniamo due differenti scritture di  $B_3$  in funzione di  $A_1$ :

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

Le equazioni devono essere consistenti, perciò eguagliamo i termini posti tra parentesi

$$e^{i\eta a \frac{\lambda+i\eta}{2i\eta}} - e^{-i\eta a \frac{\lambda-i\eta}{2i\eta}} = -e^{i\eta a \frac{\lambda+i\eta}{2\lambda}} - e^{-i\eta a \frac{\lambda-i\eta}{2\lambda}}$$

e perveniamo in questo modo a una relazione indipendente dai coefficienti, contenente informazioni sulle energie permesse per gli stati legati. Un'immediata riscrittura di questa equazione è

$$\exp(i\eta a) \frac{\lambda^2 + 2i\lambda\eta - \eta^2}{2i\lambda\eta} = \exp(-i\eta a) \frac{\lambda^2 - 2i\lambda\eta - \eta^2}{2i\lambda\eta}$$

da cui segue

$$\exp(2i\eta a) \frac{(\lambda + i\eta)^2}{(\lambda - i\eta)^2} = 1$$

che ha, per la frazione, due soluzioni distinte:

$$\frac{\lambda - i\eta}{\lambda + i\eta} = \pm \exp(i\eta a)$$

Chiamiamo pertanto **a** il caso legato alla soluzione con segno negativo, **b** quello in cui invece scegliamo la soluzione positiva.

- caso **a**

$$\frac{\lambda - i\eta}{\lambda + i\eta} = -\exp(i\eta a)$$

può essere anche scritta come

$$\frac{\frac{\lambda}{\eta} - i}{\frac{\lambda}{\eta} + i} = -\exp(i\eta a) \implies \frac{\lambda}{\eta} \left(1 + e^{i\eta a}\right) = i \left(1 - e^{i\eta a}\right)$$

e da qui

$$\frac{\lambda}{\eta} = \tan\left(\frac{\eta a}{2}\right) \quad (2.1)$$

- caso **b**

$$\frac{\lambda - i\eta}{\lambda + i\eta} = +\exp(i\eta a)$$

ci porta, per vie del tutto analoghe, a

$$\frac{\lambda}{\eta} \left(1 - e^{i\eta a}\right) = i \left(1 + e^{i\eta a}\right)$$

e quindi a

$$\frac{\lambda}{\eta} = \frac{-1}{\tan\left(\frac{\eta a}{2}\right)} \quad (2.2)$$

Soffermiamoci un momento sulle informazioni che (2.1) e (2.2) comunicano sulla forma delle autofunzioni relative, rispettivamente, al caso **a** e al caso **b**:

- caso **a**

Tra i coefficienti, possiamo verificare che valgono le relazioni

$$\frac{A_1}{B_3} = -e^{i\eta a} \frac{\lambda + i\eta}{\lambda - i\eta} = 1$$

$$\frac{C_2}{D_2} = e^{i\eta a} \frac{\lambda + i\eta}{2i\eta} - e^{-i\eta a} \frac{\lambda - i\eta}{2i\eta} = 1$$

quindi le autofunzioni sono simmetriche rispetto allo zero, i.e. sono *pari*:

$$\psi_a(x) = \psi_a(-x)$$

e nello specifico abbiamo

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

- caso b

In modo del tutto identico, si trova che

$$\frac{A_1}{B_3} = -1 \quad \frac{C_2}{D_2} = -1$$

quindi le autofunzioni risultano antisimmetriche rispetto a zero, cioè *dispari*:

$$\psi_b(x) = -\psi_b(-x)$$

e nel nostro caso

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

**COME FARE MENO FATICA: INVARIANZA PER PARITÀ** I calcoli che abbiamo sopra svolto non sono né divertenti né particolarmente istruttivi, benché costituiscano un buon esempio di procedimento generale per trovare lo spettro e le autofunzioni di un generico hamiltoniano  $\hat{H}$  in un problema unidimensionale. Le equazioni (2.1) e (2.2) possono essere trovate in un modo molto più veloce: anziché verificare soltanto in fondo il fatto che le autofunzioni siano pari oppure dispari, avremmo dovuto notare che, in questo problema,

$$[\hat{\mathcal{P}}, V(\hat{x})] = 0$$

ove  $\hat{\mathcal{P}}$  è l'operatore di parità rispetto allo zero. Abbiamo visto che questo è sufficiente ad affermare che il sistema studiato gode di simmetria per trasformazione di parità:

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}] = 0$$

Ciò implica che esiste una base comune di autovettori di  $\hat{\mathcal{P}}$  e  $\hat{H}$ , e conseguentemente le autofunzioni cercate devono avere parità definita, i.e. devono essere pari o dispari rispetto all'origine nella variabile  $x$ , a seconda dell'autovalore di  $\hat{\mathcal{P}}$  a cui fanno riferimento, rispettivamente +1 e -1. Traduciamo questa condizione aggiuntiva imponendo

$$A_1 = B_3 \quad C_2 = D_2$$

per il caso di *parità positiva*, mentre

$$A_1 = -B_3 \quad C_2 = -D_2$$

per le autofunzioni con *parità negativa*.

Sin da subito, consideriamo

- per le autofunzioni pari

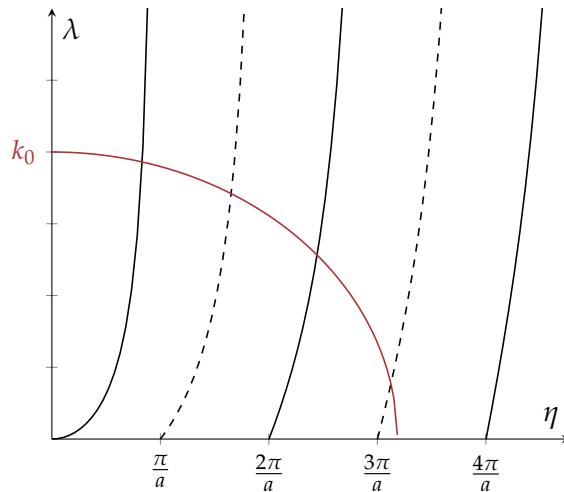
$$\psi_p(x) = \begin{cases} A_1 e^{\lambda x} & \text{per } x < -\frac{a}{2} \\ 2B_2 \cos(\eta x) & \text{per } |x| < \frac{a}{2} \\ A_1 e^{-\lambda x} & \text{per } x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

- per le autofunzioni dispari

$$\psi_d(x) = \begin{cases} A_1 e^{\lambda x} & \text{per } x < -\frac{a}{2} \\ 2iB_2 \sin(\eta x) & \text{per } |x| < \frac{a}{2} \\ -A_1 e^{-\lambda x} & \text{per } x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

Da qui, si trovano in modo rapido le equazioni (2.1) e (2.2): per mero esempio, considerando le condizioni di raccordo in  $x = +a/2$  nel caso pari

$$\begin{aligned} B_2 \cos\left(\frac{\eta a}{2}\right) &= A_1 \exp\left(-\lambda \frac{a}{2}\right) \\ -\eta B_2 \sin\left(\frac{\eta a}{2}\right) &= -A_1 \lambda \exp\left(-\lambda \frac{a}{2}\right) \end{aligned}$$



**Figura 2.2:** Soluzione con metodo grafico per le energie degli autostati dell'hamiltoniano.

**STUDIO DELLO SPETTO ENERGETICO** Per trovare le energie degli stati legati del sistema fisico, basta imporre che valgano congiuntamente, nel caso di autofunzioni pari, l'equazione (2.1), ovvero

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

e la relazione che lega  $\lambda$  a  $\eta$ :

$$k_0 \equiv \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{\lambda^2 + \eta^2} \quad (2.3)$$

Troviamo dunque le energie come soluzioni di

$$\eta \tan\left(\eta \frac{a}{2}\right) = \sqrt{k_0^2 - \eta^2}$$

Analogamente, per il caso dispari poniamo a sistema la (2.3) con la (2.2), cioè con

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

per ottenere

$$\frac{-\eta}{\tan\left(\eta \frac{a}{2}\right)} = \sqrt{k_0^2 - \eta^2}$$

Queste equazioni non sono facili da risolvere in modo analitico, perciò si utilizza tipicamente un metodo grafico, come riportato nella figura 2.2: in funzione di  $\eta$  si costruiscono  $\lambda = \eta \tan(\eta \frac{a}{2})$  per le pari (a tratto spesso nel grafico) e  $\lambda = \frac{-\eta}{\tan(\eta \frac{a}{2})}$  per le dispari (disegnata invece a trattini), poi si traccia il quarto di circonferenza che rispetta l'equazione  $\lambda = \sqrt{k_0^2 - \eta^2}$ , si individuano le intersezioni  $\eta_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_n + V_0)}$  e da qui è possibile ricavare le energie  $E_n$ , che ricordiamo essere negative. Per quanto possa essere piccolo il raggio  $k_0$ , i.e. per quanto poco profondo possa essere il dislivello  $V_0$ , esiste sempre una energia fondamentale, relativa alla prima autofunzione pari. Per  $k_0 < \frac{\pi}{a}$ , tale soluzione è anche unica. Inoltre, l'autofunzione fondamentale non presenta nodi: all'interno della buca  $\psi_0(x) \propto \cos(\eta_0 x)$ , ma  $\eta_0 < \frac{\pi}{a}$ , perciò l'argomento di tale coseno non riesce a raggiungere il valore  $\frac{\pi}{2}$ , dunque non si annulla. Per  $k_0 \geq \frac{\pi}{a}$ , esiste almeno una autofunzione dispari. In generale, una volta definiti  $P$  e  $D$  il numero di soluzioni rispettivamente pari e dispari, mentre  $N = P + D$  il numero complessivo delle autofunzioni, è facile trovare che

$$\begin{aligned} P &= \left\lceil \frac{k_0 a}{2\pi} \right\rceil = 1 + \max_{n \in \mathbb{N}} \left\{ n \quad \text{t.c.} \quad \frac{2\pi}{a} n \leq k_0 \right\} \\ D &= \left\lfloor \frac{1}{2} \left( \frac{k_0 a}{\pi} - 1 \right) \right\rfloor = \max_{n \in \mathbb{N}} \left\{ n \quad \text{t.c.} \quad \frac{(2n+1)\pi}{a} \leq k_0 \right\} \\ N &= \left\lceil \frac{k_0 a}{\pi} \right\rceil = 1 + \max_{n \in \mathbb{N}} \left\{ n \quad \text{t.c.} \quad \frac{\pi}{a} n \leq k_0 \right\} \end{aligned}$$

### 2.1.1 Buca di potenziale infinita

Proviamo ora ad analizzare il caso di *buca infinita*, in cui formalmente consideriamo il limite  $|V_0| \rightarrow \infty$ . Questo implica che

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \rightarrow \infty$$

dove ricordiamo che  $k_0$  è il valore del raggio della circonferenza in figura 2.2.

Vediamo subito che, in questo limite, i valori di  $\eta$  per i casi **a** e **b** possono essere calcolati semplicemente guardando il grafico 2.2, e si riducono a

$$\eta_n = \begin{cases} \frac{(2n+1)\pi}{a} & \text{per le autofunzioni pari, con } n \geq 0 \\ \frac{2n\pi}{a} & \text{per le autofunzioni dispari, con } n \geq 1 \end{cases}$$

corrispondenti alle ascisse degli asintoti verticali di  $\eta \tan(\eta \frac{a}{2})$  e  $-\frac{\eta}{\tan(\eta \frac{a}{2})}$ . Banalmente, per  $V_0 \rightarrow +\infty$ , l'intersezione tra l'arco di circonferenza e le curve avviene per punti infinitamente distanti, i.e. per  $\eta = n\pi/a$ . Troviamo quindi un numero infinito numerabile di soluzioni, in entrambi i casi.

Notiamo inoltre che

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} \eta_k^2 - V_0 \rightarrow -\infty \quad \forall k \in \mathbb{N}$$

da cui

$$\lambda_k = \sqrt{-\frac{2mE_k}{\hbar^2}} \rightarrow \infty, \forall k \in \mathbb{N}$$

Definiamo ora una normalizzazione per le autofunzioni trovate nella sezione precedente. Le riportiamo per comodità:

$$\begin{aligned} \psi_p^{(n)}(x) &= \begin{cases} A_1 e^{\lambda_n x} & \text{se } x < -a/2 \\ 2B_2 \cos(\eta_n x) & \text{se } |x| < a/2 \\ A_1 e^{-\lambda_n x} & \text{se } x > a/2 \end{cases} \\ \psi_d^{(n)}(x) &= \begin{cases} A_1 e^{\lambda_n x} & \text{se } x < -a/2 \\ 2iB_2 \sin(\eta_n x) & \text{se } |x| < a/2 \\ -A_1 e^{-\lambda_n x} & \text{se } x > a/2 \end{cases} \end{aligned}$$

Per normalizzarle, è sufficiente imporre la condizione

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \stackrel{!}{=} 1$$

Consideriamo le autofunzioni pari. Spezzando l'integrale nelle tre regioni si trova

$$\int_{-\infty}^{-a/2} A_1^2 e^{2\lambda_n x} dx + \int_{-a/2}^{a/2} 4B_2^2 \cos^2(\eta_n x) dx + \int_{a/2}^{\infty} A_1^2 e^{-2\lambda_n x} dx \stackrel{!}{=} 1$$

Per la continuità delle funzioni d'onda in  $x = a/2$ , otteniamo

$$2B_2 \cos\left(\frac{\eta_n a}{2}\right) = A_1 e^{-\lambda_n a/2}$$

da cui, integrando nelle regioni I e III e passando al limite  $\lambda_n \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} 4B_2^2 \left[ \frac{1}{\lambda} \cos^2\left(\frac{\eta_n a}{2}\right) + \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2(\eta_n x) dx \right] &\stackrel{!}{=} 1 \\ \xrightarrow[\forall n]{\lambda_n \rightarrow \infty} 4B_2^2 \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2(\eta_n x) dx &\stackrel{!}{=} 1 \end{aligned}$$

e svolgendo l'integrale rimanente si trova

$$4B_2^2 \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2(\eta_n x) dx = 4B_2^2 \frac{a}{2} = 2aB_2^2 \stackrel{!}{=} 1$$

dato che in questo caso  $\eta_n = (2n+1)\pi/a$ . In conclusione,  $B_2 \stackrel{!}{=} 1/\sqrt{2a}$ . Troviamo quindi che

$$\psi_p^{(n)}(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\eta_n a}{2}\right) e^{\lambda_n(x+\frac{a}{2})} & \text{per } x < -\frac{a}{2} \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(\eta_n x) & \text{per } |x| < \frac{a}{2} \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\eta_n a}{2}\right) e^{-\lambda_n(x-\frac{a}{2})} & \text{per } x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

notando che nel limite in cui  $\forall n \quad \lambda_n \rightarrow \infty$ , la funzione d'onda tende a zero bruscamente nelle regioni I e III. Quindi possiamo concludere che, nel limite di buca infinitamente profonda, i.e. invalicabile,

$$\psi_p^{(n)}(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < -\frac{a}{2} \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{a}x\right) & \text{per } |x| < \frac{a}{2} \quad n \geq 0 \\ 0 & \text{per } x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

Un procedimento analogo vale per le autofunzioni dispari, per le quali si ottiene

$$\psi_d^{(n)}(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < -\frac{a}{2} \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) & \text{per } |x| < \frac{a}{2} \quad n \geq 1 \\ 0 & \text{per } x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

che come le autofunzioni pari, si annullano in  $x = \pm a/2$ . La discontinuità delle autofunzioni è chiaramente dovuta alla singolarità del potenziale negli estremi. Notiamo come tutto ciò risulti sorprendentemente simile al problema della cavità risonante in elettromagnetismo classico, nel quale le barriere di potenziale erano rappresentate dalle pareti conduttrici della cavità, su cui i campi **E** e **B** erano forzati ad annullarsi.

**L'APPROCCIO STANDARD** Descriviamo adesso il modo più semplice di risolvere il problema della buca unidimensionale infinita. Abbiamo visto che le soluzioni non sono altro che le onde stazionarie all'interno della buca. Per un dominio simmetrico rispetto all'origine, queste sono i "seni pari" e i "coseni dispari" (con riferimento ai fattori  $2n$  e  $2n+1$ ,  $n \in \mathbb{N}$ ).

Delle soluzioni ancora più compatte si hanno per un dominio

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 < x < a \\ \infty & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Per  $x < 0$ ,  $x > a$  la funzione d'onda deve annullarsi,  $\psi(x) = 0$ . Questo impone delle condizioni di raccordo agli estremi della scatola

$$\psi(0) = \psi(a) = 0$$

mentre dentro la scatola stessa, la soluzione di particella libera si può scrivere

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \tag{2.4}$$

con

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

questa soluzione deriva dall'equazione agli autovalori di  $\hat{H}$  in modo del tutto simile a quanto fatto sopra, e dall'assunzione che sia  $E > 0$  (la quale discende dalla positività di  $\langle p^2 \rangle$ , si veda la Sez. 4.4). Imponendo la condizione di raccordo in  $x = 0$  a (2.4) si ottiene immediatamente  $B = 0$ , mentre poiché deve essere  $A \neq 0$

$$\psi(a) = 0 \implies \sin(ka) = 0 \implies k = \frac{n\pi}{a}$$

da cui concludiamo (omettiamo il semplice calcolo per determinare la normalizzazione)

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

che corrisponde all'insieme di **onde stazionarie** nell'intervallo  $[0, a]$ . Le energie corrispondenti sono

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (2.5)$$

### 2.1.2 Buca di potenziale a delta di Dirac

Se ora, nel problema di buca finita, ci poniamo nel limite

$$V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0$$

mantenendo il prodotto  $aV_0 \equiv \alpha$  costante, allora il potenziale avrà la forma

$$V(x) = -\alpha \delta(x)$$

dove  $\alpha$  rappresenta l'*area* costante sottesa al grafico di  $|V(x)|$ .

Da questo segue che

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{a}} \xrightarrow{a \rightarrow 0} \infty$$

Dal grafico in Fig. 2.2 deduciamo che la soluzione  $\eta$  è soltanto una, in quanto l'ascissa  $n\pi/a$  – con  $n \in \mathbb{N}$  – di ogni asintoto tende a  $\infty$  per  $a \rightarrow 0$  con una rapidità ancora maggiore rispetto a  $k_0$ . Di conseguenza, in questo limite troviamo un'unica intersezione all'infinito.

Consideriamo la soluzione pari. Dato che

$$\eta^2 + \lambda^2 = k_0^2$$

allora sicuramente  $\eta \leq k_0 \propto 1/\sqrt{a}$ . Questo implica che

$$\frac{\eta a}{2} \leq \frac{\sqrt{a}}{2} \xrightarrow{a \rightarrow 0} 0$$

Nelle condizioni analizzate, possiamo quindi approssimare l'espressione di  $\lambda$  con uno sviluppo di Taylor al primo ordine:

$$\lambda = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \eta \tan\left(\frac{\eta a}{2}\right) \approx \frac{a}{2} \eta^2$$

da cui, ricordando che  $\eta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}$

$$\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{a}{2} \left[ \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0) \right] = \frac{ma}{\hbar^2}(E + V_0)$$

e usando che  $\alpha = aV_0$ , arriviamo a

$$\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{mE}{\hbar^2}a + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

dove ci possiamo avvalere della condizione  $E > -V_0$ , per cui  $E$  non potrà mai tendere a  $-\infty$  tanto rapidamente quanto  $V_0$ . Infine restiamo con la seguente equazione

$$\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

e risolvendo per  $E$ , si ottiene

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

che è l'autovalore associato all'unica autofunzione che stiamo cercando, nonché l'unico valore di energia consentito per gli autostati simmetrici.

Dal valore di  $E$  appena trovato otteniamo

$$\lambda = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

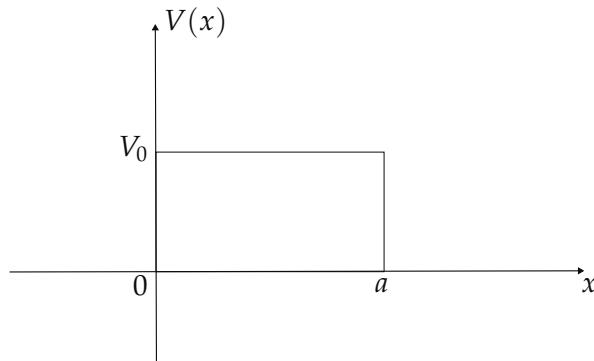
Notiamo infine che nel limite  $a \rightarrow 0$ , la regione II si riduce ad un punto. La soluzione sarà quindi

$$\psi_p(x) = Ce^{-\lambda|x|}$$

dalla quale si esclude il punto  $x = 0$ , in cui  $\psi(x)$  non è ben definita. Questo potrebbe sconvolgere in prima battuta; tuttavia ricordiamo che l'espressione per  $V(x)$ , in questo esempio specifico, non è una funzione. Quindi non abbiamo la possibilità di concludere che la soluzione dell'equazione differenziale (4.2) sia anch'essa una funzione.

In realtà, il risultato ottenuto è perfettamente coerente con la Teoria delle Distribuzioni: considerando  $\psi(x)$  come una distribuzione, avremmo potuto risolvere formalmente l'equazione differenziale alle autofunzioni riconoscendo la presenza di una  $\delta$  e richiedendo quindi che la distribuzione associata a  $\psi$  fosse continua in ogni punto e discontinua a salto nella derivata prima.

## 2.2 SCATTERING DA POTENZIALE

**Figura 2.3:** Rappresentazione di una barriera di potenziale.

Consideriamo ora il potenziale in figura 2.3

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < 0 \\ V_0 & \text{per } 0 < x < a \\ 0 & \text{per } x > a \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{I} \\ \text{II} \\ \text{III} \end{matrix}$$

e analizziamo il caso di una particella proveniente da  $x \rightarrow -\infty$ , con una certa energia  $E$ .

Secondo la meccanica classica, la particella può superare la barriera di potenziale soltanto se  $E > V_0$ . Se invece la particella ha un'energia  $E < V_0$ , l'unica possibilità è che questa sia riflessa, tornando indietro. Per capire cosa accade quantisticamente, studiamo l'autofunzione associata all'autovalore  $E$ , in tutto il dominio spaziale  $(-\infty, +\infty)$ .

Nel caso in cui  $0 < E < V_0$ , risolvendo l'equazione di Schrödinger per le autofunzioni si ottiene la soluzione generale

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{i\lambda x} + Ae^{-i\lambda x} & \text{per } x < 0 \\ Be^{\eta x} + B'e^{-\eta x} & \text{per } 0 < x < a \\ Ce^{i\lambda(x-a)} & \text{per } x > a \end{cases}$$

con

$$\lambda = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \eta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

dove abbiamo volutamente rimosso la soluzione della forma  $e^{-i\lambda(x-a)}$  escludendo così la possibilità di avere un'onda piana – quindi un qualsiasi sistema libero – proveniente dalle  $x > a$ . Abbiamo invece mantenuto entrambe le soluzioni per  $x < 0$ , in modo tale da poter tenere conto sia di una particella libera incidente, sia di una riflessa, come ci aspettiamo classicamente.

Inoltre, l'aver fissato a priori l'ampiezza dell'onda piana incidente a 1 non è scorretto: l'equazione di Schrödinger è omogenea, dunque è sempre possibile una ridefinizione dei coefficienti delle soluzioni, ad esempio tramite un raccoglimento globale del tipo

$$De^{\lambda x} + D'e^{-\lambda x} \longrightarrow e^{\lambda x} + D''e^{-\lambda x}$$

Infine, paragonando l'ampiezza di una forma d'onda ad un *peso probabilistico*, è lecito attendere una conservazione di questo, cioè possiamo aspettarci che valga

$$|A|^2 + |C|^2 = 1$$

Per fissare le idee, ripetiamo in modo sintetico il punto centrale del problema. L'equazione di Schrödinger vale in *tutto* lo spazio considerato, con le opportune limitazioni di carattere matematico e/o fisico. Il potenziale  $V(x)$ , contribuisce a fissare la forma delle soluzioni, dettando - ad esempio - le espressioni analitiche per l'autofunzione nelle regioni II e III. Proprio in queste due regioni, l'approccio quantistico che stiamo adottando fornisce delle risposte non coerenti con una visione classica del fenomeno.

Imponendo la continuità dell'autofunzione in  $x = 0$  e in  $x = a$ , otteniamo

$$1 + A = B + B' \quad Be^{\eta a} + B'e^{-\eta a} = C$$

mentre per la continuità della derivata prima

$$i\lambda(1 - A) = \eta(B - B') \quad \eta Be^{\eta a} - \eta Be^{-\eta a} = i\lambda C$$

Riscrivendo  $C$  come

$$C = (B + B') \cosh(\eta a) + (B - B') \sinh(\eta a)$$

e anche come

$$C = -i\frac{\eta}{\lambda}[(B - B') \cosh(\eta a) + (B + B') \sinh(\eta a)]$$

e sostituendo i valori di  $(B + B')$  e  $(B - B')$  ricavati dalle condizioni al bordo, si ottiene il seguente sistema di due equazioni

$$\begin{cases} C = (1 + A) \cosh(\eta a) + i\frac{\lambda}{\eta}(1 - A) \sinh(\eta a) \\ C = (1 - A) \cosh(\eta a) - i\frac{\eta}{\lambda}(1 + A) \sinh(\eta a) \end{cases}$$

con  $C$  ed  $A$  incogniti. Risolvendo per  $C$  arriviamo a

$$C = \frac{2}{2 \cosh(\eta a) + i(\frac{\eta}{\lambda} - \frac{\lambda}{\eta}) \sinh(\eta a)}$$

da cui, considerando il modulo quadro ed esplicitando  $\lambda$  e  $\eta$ , otteniamo l'ampiezza di probabilità

$$|C|^2 = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(\eta a)}$$

che prende il nome di *coefficiente di trasmissione*. Allo stesso modo ricaviamo  $A$

$$A = -\frac{i \sinh(\eta a) (\frac{\lambda}{\eta} + \frac{\eta}{\lambda})}{2 \cosh(\eta a) - i(\frac{\eta}{\lambda} - \frac{\lambda}{\eta}) \sinh(\eta a)}$$

e quindi il suo modulo quadro, definito *coefficiente di riflessione*

$$|A|^2 = \frac{V_0^2 \sinh^2(\eta a)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(\eta a)}$$

Con un po' di algebra, rammentando che  $(\frac{\lambda}{\eta} + \frac{\eta}{\lambda})^2 - 4 = (\frac{\lambda}{\eta} - \frac{\eta}{\lambda})^2$ , si dimostra che, come atteso, vale la relazione

$$|A|^2 + |C|^2 = 1 \quad (2.6)$$

Questo non è altro che un esempio del celeberrimo *effetto tunnel quantistico*: esiste la possibilità di rivelare la particella oltre la barriera di potenziale, con un'ampiezza di probabilità pari a  $|C|^2$ .

**CONSERVAZIONE DELLA PROBABILITÀ** La relazione (2.6) (formalmente identica alla legge di conservazione dell'energia per problemi di raccordo dei campi all'interfaccia tra due mezzi in Elettromagnetismo Classico) può essere interpretata qui come la conservazione della probabilità.

Un modo equivalente per convincersene è ricordare l'equazione di continuità per la densità di probabilità

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \partial_t |\psi(x, t)|^2 = 0$$

dove

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

rappresenta la corrente di probabilità. In particolare sappiamo che se  $\psi_E(x)$  è un autostato dell'hamiltoniano (con  $\hat{H}$  indipendente dal tempo) con energia  $E$ , allora evolve nel tempo solo con una fase

$$\psi(x, t) = \psi_E(x) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

da cui

$$\partial_t |\psi(x, t)|^2 = 0$$

in accordo con l'interpretazione di  $\psi_E$  come *stato stazionario*. In questo caso allora l'equazione di continuità si riduce al fatto che  $\mathbf{J}$  sia solenoidale:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (2.7)$$

Imponiamo adesso la (2.7) nel nostro problema 1D e guardiamo se il risultato è in accordo con i nostri calcoli.

L'equazione si riduce a

$$\frac{dJ(x)}{dx} = 0$$

ossia, semplificando le costanti moltiplicative

$$\frac{d}{dx} [\psi^*(x)\psi'(x) - \psi(x)(\psi^*)'(x)] = 0$$

dove abbiamo indicato con  $\psi'(x)$  la derivata di  $\psi$  rispetto a  $x$ . In sostanza  $J(x)$  deve essere una costante: presi  $x_1 < 0$  e  $x_2 > a$  si può scrivere  $J(x_1) = J(x_2)$ , da cui

$$\psi^*(x_1)\psi'(x_1) - \psi(x_1)(\psi^*)'(x_1) = \psi^*(x_2)\psi'(x_2) - \psi(x_2)(\psi^*)'(x_2)$$

osserviamo tuttavia che ogni membro di quest'espressione è immaginario: infatti definito il numero complesso  $z_i = \psi^*(x_i)\psi'(x_i)$  l'equazione dice

$$z_1 - z_1^* = z_2 - z_2^*$$

ossia

$$2i \operatorname{Im}[z_1] = 2i \operatorname{Im}[z_2]$$

che significa

$$\operatorname{Im}[\psi^*(x_2)\psi'(x_2)] = \operatorname{Im}[\psi^*(x_1)\psi'(x_1)] \quad (2.8)$$

Guardiamo il membro di destra dell'espressione. Si deve considerare (poiché  $x_1 < 0$ )  $\psi(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx}$ . Allora

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}[\psi^*(x_1)\psi'(x_1)] &= \operatorname{Im}[(e^{-ikx_1} + A^*e^{ikx_1})(ik e^{ikx_1} - ik A e^{-ikx_1})] \\ &= \operatorname{Im}[ik - ik A e^{-2ikx_1} + A^*ik e^{2ikx_1} - ik|A|^2] \\ &= k - k|A|^2 \end{aligned}$$

dove si è usato il fatto che il secondo ed il terzo termine dell'ultima espressione dentro la parte immaginaria sono uno il complesso coniugato dell'altro, dunque la loro somma è reale.

Il primo membro si riscrive ricordando che in  $x_2 > a$ ,  $\psi(x) = Ce^{ikx}$ :

$$\operatorname{Im}[\psi^*(x_2)\psi'(x_2)] = \operatorname{Im}[C^*e^{-ikx_2}(ik)Ce^{ikx_2}] = k|C|^2$$

per cui l'Eq. 2.8 dice

$$k - k|A|^2 = k|C|^2$$

ossia

$$|A|^2 + |C|^2 = 1$$

## NOTE

1. D'altronde, l'equazione di Schrödinger dice per ogni  $x$  che la derivata seconda di  $\psi(x)$  è uguale ad un certo valore finito (se  $V(x) < \infty$ ), e ciò richiede la continuità di  $\psi'(x)$ . Diverso è il caso di potenziali con discontinuità infinite, per cui potrebbe essere opportuno fare ragionamenti più raffinati.

# 3 PROBLEMI TRIDIMENSIONALI

## 3.1 SPIN DELL'ELETTRONE NELL'ATOMO DI IDROGENO

Nel calcolo dei livelli dell'atomo di idrogeno, effettuato in Sez. 7.1, non abbiamo tenuto conto del fatto che l'elettrone possiede un momento angolare intrinseco, indipendente da quello orbitale; in questa sezione introduciamo gli effetti che emergono da una descrizione più raffinata di tale sistema.

Come sappiamo l'elettrone possiede un momento angolare intrinseco, che nel linguaggio degli operatori in meccanica quantistica riconduce al valore

$$s = \frac{1}{2}$$

ovvero il massimo dei **numeri quantici di spin**

$$s_z = \pm \frac{1}{2}$$

autovalori dell'operatore  $\hat{S}_z$ .

Ci aspettiamo quindi che – ad esempio – due atomi di idrogeno allo stato fondamentale siano distinguibili a causa della duplice possibilità che l'elettrone ha di trovarsi in un dato stato di spin.

Nel modello che ci accingiamo a descrivere, non consideriamo le interazioni possibili legate allo spin – ad esempio l'interazione spin-orbita, né tantomeno l'interazione con lo spin del nucleo – e dividiamo quindi quanto visto finora nelle due casistiche di *spin up* e *spin down*, senza modificare l'hamiltoniano del sistema.

In questo modo risulta naturale espandere il set degli autostati dell'hamiltoniano tramite un prodotto tensoriale con una base dello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}_{\text{spin}}$  come segue

$$|nlm\rangle \otimes |s, s_z\rangle$$

dove i due possibili stati dell'elettrone per questo grado di libertà aggiuntivo si possono indicare anche come segue

$$|\uparrow\rangle = \left| s = \frac{1}{2}, s_z = \frac{1}{2} \right\rangle \equiv \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|\downarrow\rangle = \left| s = \frac{1}{2}, s_z = -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Ciò implica che la degenerazione degli autostati dell'hamiltoniano sarà il doppio rispetto al caso precedente, vale a dire

$$\text{Deg}_H^{\text{spin}}(n) = 2 \cdot \text{Deg}_H(n) = 2n^2$$

Modulo il livello energetico  $n$ , associamo all'elettrone un autostato della forma

$$|l, s, m, s_z\rangle \quad \leftrightarrow \quad \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z$$

dove ricordiamo quali sono gli operatori riconducibili agli autovalori presenti nel *ket*.

Come discusso nel capitolo 9, è possibile effettuare un cambiamento di base che sostituisca la dipendenza dello stato dai numeri quantici  $m$  e  $s_z$  con quella dai numeri quantici associati agli operatori

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$$

$$\hat{J}^2 = (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}})^2$$

vale a dire – rispettivamente –

$$M = m_1 + m_2 \equiv m + s_z$$

$$|l - s| \leq J \leq |l + s|$$

dove in questo caso specifico possiamo già fissare  $s \equiv 1/2$ . Tutto ciò è lecito in quanto gli operatori  $\hat{\mathbf{S}}$  e  $\hat{\mathbf{L}}$  sono, presi singolarmente, associati a momenti angolari, per cui soddisfano le regole relative alla composizione viste nel capitolo 9, per definizione, con  $\hat{\mathbf{J}}$  operatore associato al momento angolare totale dell'elettrone.

Quindi la trasformazione che vogliamo effettuare – la motivazione sarà giustificata a breve – è la seguente

$$|l, s, m, s_z\rangle \longrightarrow |l, s, J, M\rangle$$

con  $J$  ed  $M$  definiti dalle relazioni di sopra. Ciò è possibile se si considera l'equazione

$$|l, s, J, M\rangle = \sum_{m, s_z} |l, s, m, s_z\rangle C_{l s m s_z}^{JM}$$

che definisce formalmente il coefficiente di **Clebsch-Gordan** di questo caso specifico

$$C_{l s m s_z}^{JM} = \langle l, s, m, s_z | l, s, J, M \rangle$$

Notando che

$$m = M - s_z$$

possiamo trasferire la dipendenza da  $m$  in una dipendenza da  $s_z$ , con  $M$  parametro libero dell'autostato di arrivo.

Inoltre, fissando  $s \equiv 1/2$  si ha anche

$$\left|l - \frac{1}{2}\right| \leq J \leq \left|l + \frac{1}{2}\right|$$

da cui deduciamo che gli unici due valori ammessi per  $J$  sono

$$J = l - \frac{1}{2} \quad J = l + \frac{1}{2}$$

essendo  $J$  quantizzato con passo unitario (capitolo 9).

Questo implica la separazione del calcolo nei due casi seguenti

$$|l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, M\rangle = \sum_{s_z} \left|l, \frac{1}{2}, M - s_z, s_z\right\rangle C_{l, \frac{1}{2}, M - s_z, s_z}^{l + \frac{1}{2}, M}$$

$$\left| l, \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, M \right\rangle = \sum_{s_z} \left| l, \frac{1}{2}, M - s_z, s_z \right\rangle C_{l, \frac{1}{2}, M - s_z, s_z}^{l - \frac{1}{2}, M}$$

con  $s_z = \pm \frac{1}{2}$ . Esplicitando le sommatorie per questi due valori si ottengono rispettivamente le espressioni

$$\begin{aligned} \left| l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, M \right\rangle &= \left| l, \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle C_{l, \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l + \frac{1}{2}, M} \\ &\quad + \left| l, \frac{1}{2}, M + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle C_{l, \frac{1}{2}, M + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{l + \frac{1}{2}, M} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left| l, \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, M \right\rangle &= \left| l, \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle C_{l, \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l - \frac{1}{2}, M} \\ &\quad + \left| l, \frac{1}{2}, M + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle C_{l, \frac{1}{2}, M + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{l - \frac{1}{2}, M} \end{aligned}$$

dall'aspetto poco rassicurante.

I coefficienti di Clebsch-Gordan se esplicitati possono essere riscritti come

$$\begin{aligned} C_{l, \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l + \frac{1}{2}, M} &= (2l + 1)^{-1/2} \left( l + M + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \\ C_{l, \frac{1}{2}, M + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{l + \frac{1}{2}, M} &= (2l + 1)^{-1/2} \left( l - M + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \\ C_{l, \frac{1}{2}, M - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{l - \frac{1}{2}, M} &= -(2l + 1)^{1/2} \left( l + M + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \\ C_{l, \frac{1}{2}, M + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{l - \frac{1}{2}, M} &= (2l + 1)^{1/2} \left( l + M + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \end{aligned}$$

Se ora scriviamo i due stati risultanti in termini della base

$$|\uparrow\rangle = \left| s = \frac{1}{2}, s_z = \frac{1}{2} \right\rangle \equiv \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|\downarrow\rangle = \left| s = \frac{1}{2}, s_z = -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

otteniamo gli spinori

$$\begin{aligned} \left| l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, M \right\rangle_{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle} &= (2l + 1)^{-1/2} \begin{pmatrix} \left( l + M + \frac{1}{2} \right)^{1/2} |l, M - \frac{1}{2}\rangle \\ \left( l - M + \frac{1}{2} \right)^{1/2} |l, M + \frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix} \\ \left| l, \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, M \right\rangle_{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle} &= (2l + 1)^{-1/2} \begin{pmatrix} - \left( l - M + \frac{1}{2} \right)^{1/2} |l, M - \frac{1}{2}\rangle \\ \left( l + M + \frac{1}{2} \right)^{1/2} |l, M + \frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix} \end{aligned}$$

che giustifica il cambiamento di base scelto inizialmente. Infatti questa scrittura consente di calcolare in modo relativamente agevole, ad esempio, la probabilità di trovare un elettrone con *spin up* piuttosto che con *spin down* in un dato orbitale dell'atomo di idrogeno, in base ai valori di  $l$  e di  $m = M - s_z$ , dove  $s_z = \pm \frac{1}{2}$  a seconda della componente *up* o *down* dello spinore.

Per esempio, possiamo chiederci quale sia la probabilità che l'elettrone si trovi nella configurazione di *spin up*, quando esso si trovi nel livello energetico  $n = 2$ , con  $l = 1$ ; in aggiunta, immaginiamo di aver preparato il sistema complessivo nello stato

$$\left| J = \frac{1}{2}, M = \frac{1}{2} \right\rangle$$

Il sistema non può essere compatibile con il valore

$$J = l + \frac{1}{2}$$

motivo per cui ci limitiamo – soltanto in questo caso specifico – al secondo spinore dei due sopra, relativo invece a

$$J = l - \frac{1}{2}$$

che dà  $J = \frac{1}{2}$  nel caso  $l = 1$  di nostro interesse.

A questo punto, essendo interessati all'ampiezza di probabilità relativa al solo *spin up*, selezioniamo lo stato nella prima componente, vale a dire

$$-(2l+1)^{-1/2} \left( l - M + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \left| l, M = \frac{1}{2} \right\rangle$$

che ricordiamo, è scritto a meno del prodotto tensoriale con l'autostato associato al livello energetico  $n = 2$ ;

$$-(2l+1)^{-1/2} \left( l - M + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \left| l, M = \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n = 2\rangle$$

Sostituendo tutti i numeri quantici noti, abbiamo

$$-\frac{1}{\sqrt{3}} \left| n = 2, l = 1, m = M - \frac{1}{2} = 0 \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} |2, 1, 0\rangle$$

e quindi, proiettando sullo spazio delle coordinate, otteniamo la funzione d'onda

$$\psi_{2,1,0}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle \mathbf{x} | 2, 1, 0 \rangle \equiv -\frac{1}{\sqrt{3}} R_{2,1}(r) Y_{1,0}(\theta, \varphi)$$

Ed essendo  $R_{2,1}(r) Y_{1,0}$  normalizzato ad uno, integrando su tutto lo spazio otteniamo

$$P(\uparrow)_{n=2, l=1}^{J=\frac{1}{2}, M=\frac{1}{2}} = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_{2,1,0}(\mathbf{x})|^2 d^3\mathbf{x} \equiv \frac{1}{3}$$

Per completezza, riportiamo anche il risultato più generale per gli spinori ricavati, nella rappresentazione delle coordinate

$$\Psi_{n,l}^{J=l \pm \frac{1}{2}, M}(r, \theta, \varphi) = \frac{R_{n,l}(r)}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l \pm M + \frac{1}{2}} Y_{l,M-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{l \mp M + \frac{1}{2}} Y_{l,M+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

Usando questa notazione, possiamo scrivere la probabilità appena calcolata come

$$P(\uparrow)_{n=2, l=1}^{J=\frac{1}{2}, M=\frac{1}{2}} = \int_{\mathbb{R}^3} \left| \left\langle \uparrow \left| \Psi_{n=2, l=1}^{J=\frac{1}{2}, M=\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) \right. \right\rangle \right|^2 d^3\mathbf{x} = \frac{1}{3}$$

# 4 PROBLEMI DI TEORIA PERTURBATIVA

## 4.1 PERTURBAZIONE ALL'OSCILLATORE ARMONICO BIDIMENSIONALE

Consideriamo un oscillatore armonico bidimensionale, con hamiltoniana

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2)$$

vogliamo trovare la prima correzione agli stati stazionari e alle relative energie introducendo una perturbazione del tipo

$$\hat{H}_1 = \varepsilon m\omega^2 \hat{x}\hat{y}$$

dove  $\varepsilon$  è un parametro reale che assumiamo essere piccolo, ossia  $\varepsilon \ll 1$ . Pertanto l'hamiltoniana complessiva è

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + \varepsilon m\omega^2 \hat{x}\hat{y}$$

**SOLUZIONE DEL PROBLEMA IMPERTURBATO** Il problema  $\hat{H} = \hat{H}_0$  è stato estensivamente trattato in Sez. 7.2 della Parte I, nel caso ancor più generale di 3 dimensioni spaziali.

In particolare vale il risultato che gli stati prodotto, ottenuti unendo gli autostati  $|n_x\rangle$  del problema su  $x$  e quelli  $|n_y\rangle$  del problema su  $y$ , sono anche autostati di  $\hat{H}$ , ossia

$$\hat{H}_0 |n_x n_y\rangle = E_{n_x n_y} |n_x n_y\rangle$$

con energie corrispondenti

$$E_{n_x n_y} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1) \quad n_x, n_y = 0, 1, \dots$$

In particolare ci concentreremo sullo stato fondamentale, che è non degenero:

$$|00\rangle \quad \text{con energia} \quad E_{00} = \hbar\omega$$

e i primi eccitati, con degenerazione doppia

$$|10\rangle, |01\rangle \quad \text{con energia} \quad E_{10} = E_{01} = 2\hbar\omega$$

ed infine gli stati stazionari immediatamente successivi con degenerazione tripla

$$|20\rangle, |11\rangle, |02\rangle \quad \text{con energia} \quad E_{20} = E_{11} = E_{02} = 3\hbar\omega$$

**SOLUZIONE PERTURBATIVA: GROUND STATE** Nel limite  $\varepsilon \ll 1$  possiamo sfruttare la strategia descritta nella Parte I, Sez. 11.2 espandendo gli autostati di  $\hat{H}$  come una serie di potenze in  $\varepsilon$

$$\hat{H} |\psi_{n_x n_y}\rangle = E'_{n_x n_y} |\psi_{n_x n_y}\rangle$$

con (tenendo solo fino al primo ordine)

$$\begin{aligned} E'_{n_x n_y} &= E_{n_x n_y} + \varepsilon E_{n_x n_y}^{(1)} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ |\psi_{n_x n_y}\rangle &= |\psi_{n_x n_y}^{(0)}\rangle + \varepsilon |\psi_{n_x n_y}^{(1)}\rangle + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Consideriamo dapprima il *ground state*  $|00\rangle$ , che è non degenere. Un risultato noto di teoria delle perturbazioni è che la prima correzione all'energia, nel caso non degenere, è data dall'elemento diagonale di matrice della perturbazione (o equivalentemente dal valore atteso della perturbazione) sull'autostato imperturbato:

$$E_{00}^{(1)} = \langle 00 | \hat{H}_1 | 00 \rangle$$

Ma d'altronde tale elemento di matrice risulta nullo, e ciò può essere giustificato in vari modi.

- In rappresentazione delle coordinate,

$$\begin{aligned} \langle 00 | \hat{H}_1 | 00 \rangle &= \int dx dy \langle 00 | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \hat{H}_1 | 00 \rangle \\ &\propto \int dx dy \phi_{00}^* xy \phi_{00} = \int dx dy |\phi_{00}|^2 xy = 0 \end{aligned}$$

dove abbiamo chiamato  $\phi_{00}$  la funzione d'onda dell'oscillatore bidimensionale, e l'ultimo integrale è nullo perché  $\phi_{00}$  è pari e dunque l'integrandino è dispari. Ancor più semplicemente essendo le due coordinate disaccoppiate si ha

$$\langle 00 | \hat{H}_1 | 00 \rangle \propto \langle 00 | \hat{x} \hat{y} | 00 \rangle = \langle 0 | \hat{x} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{y} | 0 \rangle = 0$$

L'ultima uguaglianza è anch'essa vera per parità oppure può essere verificata come nel punto seguente.

- Per via algebrica,

$$\begin{aligned} \langle 00 | \hat{H}_1 | 00 \rangle &\propto \langle 00 | \hat{x} \hat{y} | 00 \rangle \propto \langle 00 | (\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger) | 00 \rangle \\ &= \langle 00 | \hat{a}_x \hat{a}_y + \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x^\dagger | 00 \rangle = 0 \end{aligned}$$

Questa volta l'ultima uguaglianza è vera perché tutti e quattro i termini danno un contributo nullo, essendo

$$\hat{a} |0\rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle 0 | \hat{a}^\dagger = 0$$

per una qualunque delle direzioni  $x$  o  $y$ , pertanto applicando l'operatore opportuno a sinistra o a destra si vede che ognuno dei 4 termini della somma si annulla.

**SOLUZIONE PERTURBATIVA: PRIMI STATI ECCITATI** Questa volta abbiamo a che fare con una degenerazione. Purtroppo la matrice della perturbazione nella base imperturbata (ristretta a questo sottospazio degenere) non è diagonale. Nella fattispecie

$$[\hat{H}_1] \equiv \begin{bmatrix} \langle 01|\hat{H}_1|01\rangle & \langle 01|\hat{H}_1|10\rangle \\ \langle 10|\hat{H}_1|01\rangle & \langle 10|\hat{H}_1|10\rangle \end{bmatrix} = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

cosa che può essere verificata esplicitamente elemento per elemento usando il fatto che

$$\hat{x} = \frac{l_\omega}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger) \quad \hat{y} = \frac{l_\omega}{\sqrt{2}}(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger)$$

con  $l_\omega = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$  scala di lunghezza del problema. Per esempio calcoliamo esplicitamente un elemento:

$$\begin{aligned} \langle 01|\hat{H}_1|10\rangle &= \langle 01|\varepsilon m\omega^2 \hat{x}\hat{y}|10\rangle \\ &= \varepsilon m\omega^2 \frac{l_\omega^2}{2} \langle 01|(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger)|10\rangle \\ &= \varepsilon m\omega^2 \frac{l_\omega^2}{2} \langle 01|\hat{a}_x\hat{a}_y + \hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y + \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x^\dagger|10\rangle \\ &= \varepsilon m\omega^2 \frac{l_\omega^2}{2} [\langle 01|0 + \langle 01|01\rangle + \langle 01|0 + \langle 01|21\rangle] = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{2} \end{aligned}$$

dove per esempio si sono dapprima applicati gli operatori ai *ket*. L'ultima uguaglianza segue dall'ortonormalità degli stati  $|n_x n_y\rangle$ . I calcoli per gli altri 3 elementi sono analoghi (in realtà gli ultimi 2 sono fissati dai primi essendo  $\hat{H}_1$  hermitiano).

Per risolvere il problema occorre diagonalizzare la matrice 2x2. Gli autostati sono

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{con energia } \lambda_+ = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{2} \\ |-\rangle &= \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{con energia } \lambda_- = -\frac{\varepsilon\hbar\omega}{2} \end{aligned}$$

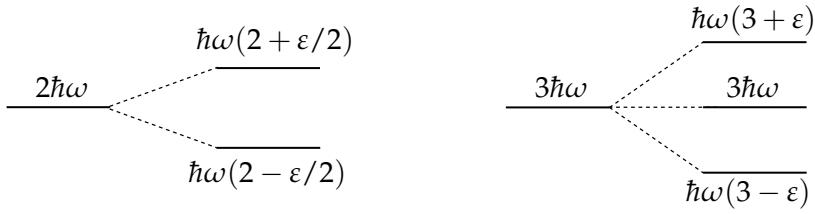
Soltanto adesso possiamo scrivere  $E_+^{(1)} = \langle +|\hat{H}_1|+\rangle = \varepsilon\hbar\omega/2$  e  $E_-^{(1)} = \langle -|\hat{H}_1|- \rangle = -\varepsilon\hbar\omega/2$  come correzioni all'energia dei primi stati eccitati. Pertanto *la degenerazione dei primi stati eccitati viene risolta dalla perturbazione*, e si ha al primo ordine

$$E_+ = \hbar\omega \left(2 + \frac{\varepsilon}{2}\right) \quad E_- = \hbar\omega \left(2 - \frac{\varepsilon}{2}\right)$$

Gli autostati relativi a queste energie, all'ordine 0, sono proprio  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$  ossia quegli autostati di  $\hat{H}_0$  che rendono diagonale la matrice di  $\hat{H}_1$  ristretta a questo sottospazio.

**SOLUZIONE PERTURBATIVA: SECONDI STATI ECCITATI** Neanche in questo sottospazio la matrice dell'hamiltoniano perturbante è diagonale:

$$[\hat{H}_1] \equiv \begin{bmatrix} \langle 02|\hat{H}_1|02\rangle & \langle 02|\hat{H}_1|11\rangle & \langle 02|\hat{H}_1|20\rangle \\ \langle 11|\hat{H}_1|02\rangle & \langle 11|\hat{H}_1|11\rangle & \langle 11|\hat{H}_1|20\rangle \\ \langle 20|\hat{H}_1|02\rangle & \langle 20|\hat{H}_1|11\rangle & \langle 20|\hat{H}_1|20\rangle \end{bmatrix} = \frac{\varepsilon\hbar\omega}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$



**Figura 4.1:** Illustrazione dello *splitting* dei primi livelli energetici degeneri dell'oscillatore bidimensionale con perturbazione  $\varepsilon m\omega^2 \hat{x}\hat{y}$ .

di questo ci si può convincere calcolando nel modo usuale ciascun elemento di matrice. Per esempio

$$\begin{aligned} \langle 20 | \hat{H}_1 | 11 \rangle &= \langle 20 | \varepsilon m\omega^2 \hat{x}\hat{y} | 11 \rangle \\ &= \varepsilon m\omega^2 \frac{l_\omega^2}{2} \langle 20 | \hat{a}_x \hat{a}_y + \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x | 11 \rangle \\ &= \frac{\varepsilon \hbar \omega}{2} \langle 20 | \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y | 11 \rangle = \frac{\varepsilon \hbar \omega}{2} \sqrt{2} \langle 20 | 20 \rangle = \frac{\varepsilon \hbar \omega}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

dove si è usato  $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ ; e analogamente gli altri elementi.

Il polinomio caratteristico della matrice è

$$P(\lambda) = -\lambda(\lambda^2 - \varepsilon^2 \hbar^2 \omega^2)$$

pertanto gli autovalori sono  $\lambda = 0$ ,  $\lambda_{\pm} = \pm \varepsilon \hbar \omega$ . Anche in questo caso allora la degenerazione tripla viene risolta, e al primo ordine

$$E_+ = \hbar \omega (3 + \varepsilon) \quad E_- = 3 \hbar \omega \quad E_- = \hbar \omega (3 - \varepsilon)$$

**SOLUZIONE ESATTA** La separazione dei livelli energetici, illustrata in Fig. 4.1, può essere ricavata anche in modo indipendente dalla teoria perturbativa: il problema può essere risolto esattamente. Usiamo la seguente riscrittura

$$\begin{aligned} \hat{H} &\equiv \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + \varepsilon m \omega^2 \hat{x}\hat{y} \\ &= \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + m \omega^2 \left[ \frac{(\hat{x} + \hat{y})^2 + (\hat{x} - \hat{y})^2}{4} + \varepsilon \frac{(\hat{x} + \hat{y})^2 - (\hat{x} - \hat{y})^2}{4} \right] \\ &= \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m \omega^2}{2} \left[ \left( \frac{\hat{x} + \hat{y}}{\sqrt{2}} \right)^2 + \left( \frac{\hat{x} - \hat{y}}{\sqrt{2}} \right)^2 + \varepsilon \left( \frac{\hat{x} + \hat{y}}{\sqrt{2}} \right)^2 - \varepsilon \left( \frac{\hat{x} - \hat{y}}{\sqrt{2}} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

e definiamo le nuove variabili

$$\hat{x}' = \frac{\hat{x} + \hat{y}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{y}' = \frac{\hat{x} - \hat{y}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{p}_{x'} = \frac{\hat{p}_x + \hat{p}_y}{\sqrt{2}}, \quad \hat{p}_{y'} = \frac{\hat{p}_x - \hat{p}_y}{\sqrt{2}}$$

per le quali sono soddisfatte le relazioni di commutazione canoniche

$$[\hat{x}', \hat{p}_{x'}] = i\hbar \quad [\hat{y}', \hat{p}_{y'}] = i\hbar \quad \text{eccetera}$$

Allora si può scrivere

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_{x'}^2 + \hat{p}_{y'}^2}{2m} + \frac{m \omega^2}{2} [(1 + \varepsilon) \hat{x}'^2 + (1 - \varepsilon) \hat{y}'^2]$$

che altro non è che l'hamiltoniano di un oscillatore armonico anisotropo, cioè

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_{x'}^2 + \hat{p}_{y'}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_{x'}^2\hat{x}'^2 + \frac{1}{2}m\omega_{y'}^2\hat{y}'^2$$

dove  $\omega_{x'} = \omega\sqrt{1+\epsilon}$ , mentre  $\omega_{y'} = \omega\sqrt{1-\epsilon}$ . Ma in questo hamiltoniano (in modo concettualmente identico ad uno isotropo come  $\hat{H}_0$ ), sono disaccoppiate le due dimensioni, pertanto le energie del sistema saranno la somma delle energie dei due problemi unidimensionali

$$\begin{aligned} E_{n_{x'}n_{y'}} &= \hbar\omega_{x'}\left(n_{x'} + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_{y'}\left(n_{y'} + \frac{1}{2}\right) \\ &= \hbar\omega\left[\sqrt{1+\epsilon}\left(n_{x'} + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{1-\epsilon}\left(n_{y'} + \frac{1}{2}\right)\right] \end{aligned}$$

con gli autostati relativi dati dagli stati prodotto  $|n_{x'}n_{y'}\rangle$ .

Al primo ordine in  $\epsilon$  risulta  $\sqrt{1 \pm \epsilon} \simeq 1 \pm \epsilon/2$  e pertanto si trova

$$\begin{aligned} E_{00} &\simeq \hbar\omega & E_{10} &\simeq \hbar\omega\left(2 + \frac{\epsilon}{2}\right) & E_{20} &\simeq \hbar\omega(3 + \epsilon) \\ E_{01} &\simeq \hbar\omega\left(2 - \frac{\epsilon}{2}\right) & E_{11} &\simeq 3\hbar\omega & \\ E_{02} &\simeq \hbar\omega(3 - \epsilon) \end{aligned}$$

che sono proprio i risultati ottenuti perturbativamente.

## 4.2 EFFETTO STARK PER L'ATOMO DI IDROGENO

Vediamo ora un'altra applicazione della teoria delle perturbazioni studiata sin ora. Ciò che ci accingiamo ad analizzare prende il nome di **effetto Stark-Lo Surdo**, o più in breve **effetto Stark**, in onore dei suoi scopritori. La teoria delle perturbazioni è in grado di spiegare la separazione delle linee spettrali corrispondenti a livelli energetici degeneri, osservabile negli esperimenti di spettroscopia atomica e molecolare. Noi ci limiteremo qui al semplice caso di un atomo di idrogeno.

Consideriamo quindi un atomo di idrogeno immerso in un campo elettrico uniforme e diretto parallelamente ad un certo asse arbitrario, che chiameremo  $\bar{z}$

$$\mathbf{E} = E\bar{z}$$

Immaginiamo poi di poter associare all'elettrone legato al nucleo un **memento di dipolo elettrico**

$$\mathbf{p}_e = -e\mathbf{r}$$

dove  $\mathbf{r}$  è il vettore che individua la posizione dell'elettrone rispetto al nucleo, ed  $-e$  è la carica elementare dell'elettrone.

Dall'elettrostatica sappiamo che un sistema di questo tipo, quando immerso in un campo elettrico uniforme, risente di un forza che tende a riallineare il dipolo in direzione parallela al campo elettrico, in maniera del tutto simile a quanto visto per un dipolo magnetico in campo magnetico. L'esistenza di questa forza può essere formulata in termini di un'energia potenziale

$$U = -\mathbf{p}_e \cdot \mathbf{E} \equiv -p_e E \cos(\pi - \phi) = -eEz$$

dove  $\theta = \pi - \phi$  è l'angolo compreso tra il momento di dipolo elettrico ed il vettore campo, i.e. l'angolo polare, in coordinate sferiche, mentre  $z = r \cos(\phi)$  è la proiezione della posizione dell'elettrone lungo l'asse  $\bar{z}$ . Ricordiamo in particolare che si raggiunge l'equilibrio stabile – minimo del potenziale – quando  $\phi = 0$ , ovvero quando il dipolo si orienta antiparallelamente al campo. Riportiamo in Figura 4.2 una illustrazione schematica e *classicheggiante* del sistema.

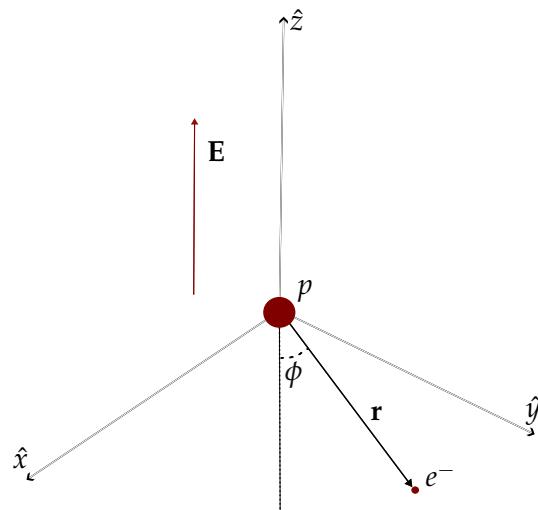
In termini di operatori, per descrivere l'atomo di idrogeno con questo modello è necessario inserire un termine di perturbazione all'interno dell'hamiltoniano, termine che coincide sostanzialmente con il potenziale di cui sopra

$$\hat{H}_1 = -eE\hat{Z}$$

dove  $\hat{Z}$  è l'operatore associato alla coordinata lungo la direzione individuata dal versore  $\bar{z}$ . L'hamiltoniano complessivo si scrive come

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \equiv \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}} - eE\hat{Z}$$

Chiaramente, siamo sempre in un contesto *perturbativo*, per cui ipotizziamo che questa correzione all'hamiltoniano sia *piccola* rispetto al termine dominante. Ciò può essere rivisto fisicamente nell'ipotesi di campo elettrico esterno *debole*, di certo non in grado di ionizzare il sistema. L'effetto Stark



**Figura 4.2:** Schema classico per un atomo di idrogeno immerso in un campo elettrico uniforme, costante e parallelo all'asse  $\hat{z}$ . L'angolo  $\phi$  è un indicatore della distanza del dipolo elettrico associato  $p_e = -er$  dalla posizione di equilibrio.

è solitamente detto *del primo* o *del secondo ordine*, a seconda che la correzione allo spettro abbia una dipendenza lineare o quadratica dal modulo del campo elettrico  $|E|$ .

Sappiamo risolvere il problema con  $\hat{H}_0$ , quindi ora valutiamo le correzioni dovute al nuovo termine perturbativo. Ci interessano in particolare le correzioni allo spettro energetico. Ormai sappiamo bene che per ogni livello energetico  $n$  il sistema presenta un degenerazione e che, trascurando in questa sede lo spin ed eventuali correzioni relativistiche, vale

$$\text{Deg}(n) = n^2$$

Ci chiediamo se la perturbazione introdotta dal campo elettrico uniforme nel quale il sistema è immerso sia in grado di risolvere – del tutto, o anche solo parzialmente – la degenerazione per un dato livello  $n$  scelto a piacere, e in generale quali siano le conseguenze di tale perturbazione sugli autovalori dell'hamiltoniano.

In questa sezione focalizzeremo la nostra attenzione sul *ground state* ( $n = 1$ , privo di degenerazione) e sul primo livello eccitato ( $n = 2$ , avente degenerazione 4). Inizieremo analizzando il primo livello eccitato, in quanto vedremo che il *ground state* necessita di una trattazione leggermente più approfondita, della quale ci occuperemo alla fine di questa sezione.

Prima di procedere, introduciamo la seguente notazione per gli autovalori dell'hamiltoniano

$$E_n = -\frac{\text{Ry}}{n^2}$$

dove  $\text{Ry} = 13.6 \text{ eV}$  è la *costante di Rydberg* espressa in unità di energia, ovvero

$$\hbar c R_H \equiv 1 \text{ Ry}$$

e  $R_H = 1.09 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  è la costante di Rydberg vera e propria.

**CORREZIONI AL PRIMO STATO ECCITATO** Per l'atomo di idrogeno non perturbato e al primo livello eccitato, avevamo individuato quattro autostati dell'hamiltoniano corrispondenti alla stessa energia  $E_2 = -\text{Ry}/4$

$$\mathcal{B} = \left\{ \underbrace{|200\rangle}_{2s}, \underbrace{|210\rangle}_{2p_z}, \underbrace{|211\rangle}_{2p_y}, \underbrace{|21-1\rangle}_{2p_x} \right\}$$

dove indichiamo la denominazione nota in letteratura per gli orbitali associati nella rappresentazione delle coordinate; l'aver associato il ket  $|210\rangle$  all'orbitale  $2p_z$  sarà giustificato a breve.

Per trattare il primo livello eccitato, consideriamo la procedura adottabile per la teoria delle perturbazioni degenere: diagonalizziamo l'operatore associato alla perturbazione nel sottospazio degenere, che in questo caso coincide con tutto lo spazio generato dagli autovettori di base di sopra. Chiamando rispettivamente  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$  gli autoket di base, ci interessa diagonalizzare la matrice di elementi

$$\langle i | \hat{H}_1 | j \rangle \quad i, j = 1, 2, 3, 4$$

composta da ben 16 elementi non nulli da calcolare, ma che possiamo ridurre ben presto ad 1, grazie ad argomenti di simmetria.

Iniziamo con la **parità**: essendo  $\hat{H}_1 \propto \hat{Z}$ , gli unici elementi di matrice potenzialmente non nulli saranno quelli che restano invariati sotto la trasformazione di parità  $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$ . Infatti dal momento che

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}} |200\rangle &= |200\rangle \\ \hat{\mathcal{P}} |21m\rangle &= -|21m\rangle \quad m = 0, \pm 1 \end{aligned}$$

e dato che

$$\hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{Z} \hat{\mathcal{P}} = -\hat{Z}$$

allora si avrà

$$\langle 2l'm' | \hat{H}_1 | 2lm \rangle = -\langle 2l'm' | \hat{H}_1 | 2lm \rangle$$

per tutti quegli elementi di matrice costituiti da autoket di stessa parità. Infatti, svolgendo il conto esplicito si trova:

$$\begin{aligned} \langle 2l'm' | -\hat{H}_1 | 2lm \rangle &= \langle 2l'm' | \hat{\mathcal{P}}^\dagger \hat{H}_1 \hat{\mathcal{P}} | 2lm \rangle \\ &= (-1)^{l'+l} \langle 2l'm' | \hat{H}_1 | 2lm \rangle \end{aligned}$$

per cui, se  $l$  e  $l'$  sono entrambi pari o entrambi dispari (i.e. i relativi autostati sono entrambi pari o entrambi dispari) allora perché sia verificata l'ugualianza deve annullarsi l'elemento di matrice. Le coppie di autoket con parità opposte costituiranno invece gli elementi di matrice eventualmente non nulli. Il tutto si può schematizzare come segue

$$[\hat{H}_1]_{\mathcal{B}} = \begin{bmatrix} 2s & 2p_z & 2p_y & 2p_x \\ 0 & * & * & * \\ * & 0 & 0 & 0 \\ * & 0 & 0 & 0 \\ * & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

A questo punto invochiamo l'**invarianza sotto rotazioni** attorno all'asse  $\hat{\mathbf{z}}$  che abbiamo fissato. Una volta individuata la direzione del vettore campo elettrico  $\mathbf{E}$ , la perturbazione scalare  $\hat{H}_1$  presenterà una simmetria cilindrica attorno ad essa; non importa in quale direzione il dipolo si allontana dall'asse del campo elettrico: il valore dell'angolo polare  $\theta$  prescinde da quello dell'angolo azimutale  $\varphi$  (Fig.4.2), per cui il modulo della forza di richiamo applicata al dipolo non dipende da quest'ultimo.

Ciò si scrive in termini operatoriali come

$$[\hat{L}_z, \hat{H}_1] = 0$$

dove ricordiamo che questo commutatore nullo è un operatore anch'esso, per cui è lecito calcolarne il valore di aspettazione su coppie di autostati – in generale distinti, ad esempio quelli della base  $\mathcal{B}$

$$0 = \langle n l' m' | [\hat{L}_z, \hat{H}_1] | n l m \rangle$$

Sviluppiamo utilizzando la definizione di commutatore e ricordando che  $\hat{H}_1 \propto \hat{Z}$ , per ottenere

$$(m - m') \langle n l' m' | \hat{Z} | n l m \rangle = 0$$

da cui deduciamo che

$$\begin{aligned} \langle n l' m' | \hat{Z} | n l m \rangle &= 0 \quad \text{per } m \neq m' \\ \langle n l' m' | \hat{Z} | n l m \rangle &\neq 0 \quad \text{per } m = m' \end{aligned}$$

e quindi la matrice si semplifica ulteriormente nella forma

$$[\hat{H}_1]_{\mathcal{B}} = \begin{bmatrix} 2s & 2p_z & 2p_y & 2p_x \\ 0 & * & 0 & 0 \\ * & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Rammentando che la matrice è associata ad un operatore hermitiano e che perciò sarà anch'essa hermitiana, deduciamo che i due elementi di matrice restanti saranno l'uno il coniugato dell'altro. In particolare mostriamo ora che questi sono reali, quindi necessariamente coincidenti.

Non ci resta che svolgere il calcolo dell'unico coefficiente necessario a determinare l'intero operatore di perturbazione nella base  $\mathcal{B}$ . Calcoliamo quindi l'elemento di matrice

$$\langle 2 0 0 | \hat{H}_1 | 2 1 0 \rangle$$

Passando per la rappresentazione delle coordinate e ricordando in particolare che

$$\begin{aligned} R_{21}(r) &= \frac{r}{(2r_B)^{3/2}(\sqrt{3}r_B)} e^{-r/2r_B} & Y_{10}(\theta) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ R_{20}(r) &= \frac{1}{(2r_B)^{3/2}} \left( 2 - \frac{r}{r_B} \right) e^{-r/2r_B} & Y_{00}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \end{aligned}$$

otteniamo

$$\begin{aligned}\langle 200|\hat{H}_1|210\rangle &= eE \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \langle 200|x\rangle \langle x|-\hat{Z}|210\rangle \\ &= eE \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\pi}^{\pi} Y_{10}(\theta) Y_{00}^*(\theta) \cos\theta \sin\theta d\theta \int_0^\infty r^3 R_{21}(r) R_{20}^*(r) dr\end{aligned}$$

dove abbiamo tenuto conto del fatto che, preso  $\theta = \pi - \phi$ , allora

$$\langle x|-\hat{Z}|210\rangle = r \cos\theta \langle x|210\rangle$$

Sostituendo le funzioni di sopra abbiamo

$$\begin{aligned}\frac{eE}{16r_B^4} \underbrace{\left( \int_{-1}^1 \cos^2\theta d\cos\theta \right)}_{2/3} \int_0^\infty r^4 \left( 2 - \frac{r}{r_B} \right) e^{-\frac{r}{r_B}} dr \\ = \frac{eE}{24r_B^4} \int_0^\infty r^4 \left( 2 - \frac{r}{r_B} \right) e^{-\frac{r}{r_B}} dr\end{aligned}$$

Riscrivendo ciò che resta dell'integrale nella variabile  $\rho \equiv r/r_B$ , otteniamo

$$\langle 200|\hat{H}_1|210\rangle = \frac{eE}{24} r_B \int_0^\infty \rho^4 (2 - \rho) e^{-\rho} d\rho$$

e ricordando che l'integrale adimensionale residuo si può calcolare con

$$\int_0^\infty \rho^k e^{-\alpha\rho} d\rho \equiv \frac{k!}{\alpha^{k+1}}$$

otteniamo

$$\langle 200|\hat{H}_1|210\rangle = \frac{eE}{24} r_B (2 \cdot 4! - 5!) = -3eEr_B$$

e quindi la forma finale per la perturbazione  $\hat{H}_1$  nella base  $\mathcal{B}$  è

$$[\hat{H}_1]_{\mathcal{B}} = -3eEr_B \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Vogliamo ora diagonalizzare l'operatore  $\hat{H}_1$  nel sottospazio

$$\text{Span}\{|200\rangle, |210\rangle\}$$

e sappiamo bene che la soluzione è

$$\begin{aligned}E_2^{(1)\pm} &= \mp 3eEr_B \\ |v_\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|210\rangle \pm |200\rangle)\end{aligned}$$

Notiamo in particolare che, su quattro correzioni allo spettro attese (al più), ne abbiamo trovate soltanto due. Non solo, queste correzioni sono state ottenute diagonalizzando la perturbazione nel sottospazio generato a due

autoket in particolare – quelli che nella rappresentazione delle coordinate sono associati agli orbitali  $2s$  e, detta da noi,  $2p_z$ .

La forma degli autoket ci porta ad una importante osservazione: i due autostati di partenza si mescolano e formare due autostati intermedi. Infatti, nella nuova base

$$\mathcal{B}' = \left\{ \underbrace{|v_+\rangle}_{2s \oplus 2p_z}, \underbrace{|v_-\rangle}_{2s \ominus 2p_z}, \underbrace{|211\rangle}_{2p_y}, \underbrace{|22-1\rangle}_{2p_x} \right\}$$

sia la perturbazione  $\hat{H}_1$  che l'hamiltoniano di partenza  $\hat{H}_0$  sono diagonali; si ottiene agevolmente che in questa base l'hamiltoniano  $\hat{H}$  assume la forma

$$[\hat{H}]_{\mathcal{B}'} = \begin{bmatrix} E_2^{(0)} - 3eEr_B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} + 3eEr_B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2^{(0)} \end{bmatrix}$$

notando in particolare che  $\langle v_- | v_+ \rangle = 0$ , con  $E_2^{(0)} = -Ry/4$ .

Dunque, a questo stadio, considerando anche la perturbazione  $\hat{H}_1$ , la base  $\mathcal{B}'$  sembra descrivere in modo completo il sottospazio vettoriale di livello  $n = 2$ , diagonalizzando anche l'hamiltoniano totale.

Osserviamo inoltre che il nominativo *orbitale*  $2p_z$  per l'autostato  $|210\rangle$  non è stata una scelta del tutto azzardata: la perturbazione ha elementi di matrice nulli nella base  $\mathcal{B}/\{|200\rangle, |210\rangle\}$ , ovvero non ha influenza sugli autostati  $|21-1\rangle$  e  $|211\rangle$  che, vista la direzione del campo elettrico, possono essere associati arbitrariamente agli orbitali  $2p_x$  e  $2p_y$ , per simmetria cilindrica attorno all'asse  $\bar{z}$ .

Una possibile interpretazione di ciò che sta accadendo potrebbe essere in prima battuta la seguente: la perturbazione ha provocato la risoluzione parziale della degenerazione del primo stato eccitato, senza effetti sulle energie degli orbitali  $2p_x$  e  $2p_y$ ; mescolando gli orbitali  $2s$  e  $2p_z$ , si ottiene una base in cui l'hamiltoniano totale è diagonale. Quindi si potrebbe pensare che gli orbitali  $2s$  e  $2p_z$  si mescolino proprio in questa maniera, sotto l'azione della perturbazione  $\hat{H}_1$ , dando vita a due stati con energie corrette e diverse tra loro, vale a dire  $E_2^\pm = E_2^{(0)} \pm 3eEr_B$

Questa correzione sembra tuttavia in disaccordo con gli elementi sulla diagonale dell'operatore  $\hat{H}$  scritto nella base  $\mathcal{B}'$ . Il punto è che la Teoria delle perturbazioni prevede anche delle correzioni agli autostati, che in questa sede non abbiamo la possibilità di calcolare: dovremmo in tal caso sommare su *tutti* gli autostati dell'hamiltoniano, che sono un'infinità non numerabile, poiché devono essere compresi anche quelli dello spettro continuo; dal canto suo,  $\mathcal{B}'$  è una base per il solo sottospazio con  $n = 2$ .

**CORREZIONE GROUND STATE** Come anticipato, la correzione al **ground state** necessita di una trattazione ulteriore. Infatti, non è sufficiente il calcolo

della correzione allo spettro al primo ordine, in quanto questo è nullo. Infatti, assumendo al solito che

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_2^{(2)} + \dots \quad E_1^{(0)} = -\text{Ry}$$

troviamo la correzione  $E_1^{(1)}$  grazie alla relazione

$$E_1^{(1)} = \langle 100 | \hat{H}_1 | 100 \rangle$$

ed otteniamo

$$\langle 100 | \hat{H}_1 | 100 \rangle \propto \langle 100 | \hat{Z} | 100 \rangle = 0$$

per parità dello stato fondamentale.

Allora proviamo a calcolare la seconda correzione allo spettro; prima di fare ciò, introduciamo questa notazione per le correzioni all'autostato fondamentale

$$|\psi_0\rangle = |100\rangle + |100\rangle_1 + |100\rangle_2 \dots$$

Il nostro obiettivo è calcolare

$$E_1^{(2)} = \langle 100 | \hat{H}_1 | 100 \rangle_1$$

Non ci resta quindi che calcolare la prima correzione all'autostato fondamentale, ovvero  $|100\rangle_1$ .

Scrivendo l'equazione per l'autostato fondamentale approssimata al primo ordine perturbativo – ricordando che  $E_1^{(1)} = 0$  – otteniamo

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}_1)(|100\rangle + |100\rangle_1) = E_1^{(0)}(|100\rangle + |100\rangle_1)$$

e rendendo esplicita la prima correzione, conservando solo correzioni al primo ordine, abbiamo

$$(\hat{H}_0 - E_1^{(0)}) |100\rangle_1 = -\hat{H}_1 |100\rangle$$

Passando alla rappresentazione delle coordinate, otteniamo

$$\langle \mathbf{x} | (\hat{H}_0 - E_1^{(0)}) | 100 \rangle_1 = -\langle \mathbf{x} | \hat{H}_1 | 100 \rangle$$

e da qui, possiamo immaginare che la correzione che risolve questa equazione possa essere espressa in funzione dell'autostato imperturbato.

È possibile mostrare che in questo caso una buona *Ansatz* in coordinate sferiche può essere

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | 100 \rangle_1 &= f(r, \theta) \langle \mathbf{x} | 100 \rangle \\ f(r, \theta) &= (A + Br + Cr^2) \cos \theta e^{-r/r_B} \end{aligned}$$

Infatti, possiamo ricavare un'equazione differenziale per  $f(r, \theta)$ , inserendo le espressioni per gli operatori  $\hat{H}_0$  e  $\hat{H}_1$  nella rappresentazione delle coordinate, ottenendo questa espressione

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\hat{\mathbf{x}}) - E_1^{(0)} \right] f(r, \theta) \psi_{100}^{(0)}(\mathbf{x}) = -eEr \cos \theta \psi_{100}^{(0)}(\mathbf{x})$$

dove  $\psi_{100}^{(0)}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | 100 \rangle = \psi_{100}^{(0)}(r, \theta, \varphi)$ , ovvero l'autofunzione del *ground state* all'ordine zero; inoltre consideriamo  $\nabla^2$  in coordinate sferiche. Applicando l'operatore  $\nabla^2$  al prodotto di funzioni  $f(r, \theta)\psi_{100}^{(0)}$  e ricordando che  $\psi_{100}^{(0)}$  è soluzione dell'equazione differenziale

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\hat{\mathbf{x}}) - E_1^{(0)} \right] \psi_{100}^{(0)} = 0$$

si ottiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ 2\boldsymbol{\nabla}\psi_{100}^{(0)} \cdot \boldsymbol{\nabla}f(r, \theta) + \psi_{100}^{(0)} \nabla^2 f(r, \theta) \right] = -eEr \cos \theta \psi_{100}^{(0)}$$

D'altronde, conosciamo già la forma dell'autofunzione  $\psi_{100}^{(0)}$

$$\psi_{100}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} e^{-r/r_B}$$

indipendente dagli angoli  $\theta$  e  $\varphi$ , per cui il suo gradiente in coordinate sferiche ha come unica direzione non nulla quella radiale  $\bar{\mathbf{r}}$

$$\boldsymbol{\nabla}\psi_{100}^{(0)} = \partial_r \psi_{100}^{(0)} \bar{\mathbf{r}} = -\frac{1}{r_B} \psi_{100}^{(0)} \bar{\mathbf{r}}$$

quindi nell'ultima espressione che abbiamo ottenuto il prodotto scalare  $\boldsymbol{\nabla}\psi_{100}^{(0)} \cdot \boldsymbol{\nabla}f(r, \theta)$  si riduce semplicemente a

$$\boldsymbol{\nabla}\psi_{100}^{(0)} \cdot \boldsymbol{\nabla}f(r, \theta) = -\frac{1}{r_B} \psi_{100}^{(0)} \partial_r f(r, \theta)$$

per cui l'equazione ricavata diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\frac{2}{r_B} \psi_{100}^{(0)} \partial_r f(r, \theta) + \psi_{100}^{(0)} \nabla^2 f(r, \theta) \right] = -eEr \cos \theta \psi_{100}^{(0)}$$

e semplificando il fattore  $\psi_{100}^{(0)}$  – è sempre non nullo – otteniamo infine l'equazione differenziale in  $f(r, \theta)$  cercata

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \nabla^2 f(r, \theta) - \frac{2}{r_B} \partial_r f(r, \theta) \right] = eEr \cos \theta$$

che è ben definita nelle variabili  $r, \theta, \varphi$ . Risolvendola e sostituendo in

$$\psi_{100}^{(1)}(r, \theta, \varphi) = f(r, \theta) \psi_{100}^{(0)}(r)$$

si può mostrare che l'espressione finale per  $\psi_{100}^{(1)}$  è

$$\psi_{100}^{(1)}(r, \theta, \varphi) = -\frac{meEr_B}{2\hbar^2} \sqrt{\pi r_B^3} (r^2 + 2r_B r) e^{-r/r_B} \cos \theta$$

Possiamo finalmente calcolare

$$E_1^{(2)} = \langle 100 | \hat{H}_1 | 100 \rangle_1$$

e risulta oramai necessario farlo nella rappresentazione delle coordinate; inserendo come al solito una relazione di completezza

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\mathbf{x}\rangle\langle \mathbf{x}| = \mathbb{1}$$

ed esplicitando  $\hat{H}_1$  nella rappresentazione scelta, abbiamo

$$E_1^{(2)} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_0^{\infty} dr r^2 \sin \theta \psi_{100}^{(0)} [eEr \cos \theta] \psi_{100}^{(1)}$$

e svolgendo il calcolo con le stesse tecniche della sezione precedente, otteniamo

$$E_1^{(2)} = -\frac{9me^2E^2r_B^4}{4\hbar^2}$$

per cui l'espressione per l'energia dello stato fondamentale perturbata al secondo ordine è

$$E_1 \approx -\text{Ry} - \frac{9}{4} \frac{me^2E^2r_B^4}{\hbar^2}$$

### 4.3 RISONANZA DI SPIN – TRATTAZIONE PERTURBATIVA

Vogliamo adesso tornare ad un problema già visto e –per dirla tutta– risolto in modo esatto in Sez. 1.2, con l'intenzione approcciarlo con i mezzi della Teoria perturbativa dipendente dal tempo, e confrontare infine i due risultati. Qualcuno potrebbe chiedersi il motivo per cui vogliamo avventurarci di nuovo in questo problema precedentemente trattato e risolto senza introdurre approssimazioni. I motivi sono due, e quello didattico –esercitarsi sulla teoria delle perturbazioni– non è affatto quello più importante: il punto principale è che siamo arrivati alla soluzione esatta in modo piuttosto macchinoso e con procedure certo valide, ma *non-standard*, mentre è un sospetto fondato che, avvalendoci della teoria delle perturbazioni  $t$ -dipendenti, riusciremo ad arrivare in fondo all'esercizio in modo rapido e indolore.

Una particella con spin  $1/2$ , che quindi può accedere a due soli stati di spin, i consueti  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ , è sottoposta all'azione di due campi magnetici sovrapposti. Uno è un campo magnetico costante ed uniforme, diretto parallelamente all'asse  $\bar{z}$ , mentre l'altro è uniforme ma non costante, poiché ruota allo scorrere del tempo nel piano  $xy$ , ortogonale a  $\bar{z}$ , con pulsazione  $\omega$ . Il campo complessivo si scrive quindi, ad un tempo  $t$  generico, come

$$\mathbf{B}(t) = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1(t) = B_0\bar{\mathbf{z}} + B_1(\cos(\omega t)\bar{\mathbf{x}} + \sin(\omega t)\bar{\mathbf{y}})$$

L'hamiltoniana di dipolo magnetico ha la forma

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\gamma \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}$$

dove  $\hat{\mathbf{S}}$  corrisponde a

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$$

e  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  è il vettore di operatori che riunisce le tre matrici di Pauli. Ricordiamo che, se fingessimo di avere  $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 = B_0\bar{\mathbf{z}}$ , indipendente da  $t$ , osserveremmo il vettore  $\hat{\mathbf{S}}$  eseguire un eterno moto di precessione attorno all'asse  $\bar{z}$ . Aggiungiamo le seguenti ipotesi:

- Abbiamo preparato il sistema in modo tale che lo stato iniziale sia  $|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow\rangle$
- Il campo magnetico  $\mathbf{B}_1(t)$  è acceso solamente per un lasso di tempo finito, ovvero per  $t$  tale che  $0 < t < T$ .

Vogliamo:

- (o) riepilogare quanto già trovato tramite calcolo esatto;
- (1) usare la Teoria delle perturbazioni per calcolare la probabilità di transizione allo stato  $|\downarrow\rangle$ ;
- (2) analizzare in particolare il caso della **risonanza**, in cui  $\omega = -\gamma B_0$ .

(o) Iniziamo riepilogando quanto trovato precedentemente. A partire dalle ipotesi del problema, come abbiamo concluso nella già citata Sez. 1.2, anche chi è allergico ai campi magnetici variabili nel tempo potrà eseguire una misura dello spin salvaguardando tanto la propria incolumità quanto la correttezza delle misure, poiché per  $t \geq T$  lo stato del sistema si scrive nella forma

$$|\psi(t \geq T)\rangle = e^{i\omega_0 \frac{(t-T)}{2}} e^{-i\omega \frac{T}{2}} a_1(T) |\uparrow\rangle + e^{-i\omega_0 \frac{(t-T)}{2}} e^{i\omega \frac{T}{2}} a_2(T) |\uparrow\rangle$$

con i coefficienti

$$\begin{aligned} a_1(t) &\equiv \cos\left(\frac{\alpha}{2}t\right) + i\frac{\omega_0 + \omega}{\alpha} \sin\left(\frac{\alpha}{2}t\right) \\ a_2(t) &\equiv i\frac{\omega_1}{\alpha} \sin\left(\frac{\alpha}{2}t\right) \end{aligned}$$

dove

$$\omega_0 \equiv \gamma B_0 \quad \omega_1 \equiv \gamma B_1 \quad \alpha \equiv \sqrt{(\omega_0 + \omega)^2 + \omega_1^2}$$

Scriviamo adesso la probabilità di misura dello *spin down*: la probabilità di transizione da  $|\uparrow\rangle$  a  $|\downarrow\rangle$  è

$$\begin{aligned} P_{\downarrow}(t \geq T) &= P_{\downarrow}(t = T) \\ &= |\langle \downarrow | \psi(T) \rangle|^2 \\ &= |a_2(T)|^2 = \left| \frac{\omega_1}{\alpha} \sin\left(\frac{\alpha}{2}T\right) \right|^2 \end{aligned}$$

che oscilla con  $T$ , tempo di spegnimento di  $\mathbf{B}_1(t)$ , ed è indipendente da  $t$ . Vogliamo far notare che la statistica è “congelata” a partire dall’istante  $T$ , in quanto l’evoluzione temporale dovuta alla hamiltoniana indipendente dal tempo non riesce a cambiarla. La probabilità  $P_{\downarrow}$  ha un massimo per  $T = \pi/\alpha$ :

$$\max P_{\downarrow} = \left| \frac{\omega_1}{\alpha} \right|^2 = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\omega + \omega_0)^2} \leq 1$$

Si chiama **risonanza** la condizione  $\omega = -\omega_0$ , per cui  $P_{\downarrow}$  assume la forma

$$P_{\downarrow}|_{\omega=-\omega_0} = \sin^2\left(\frac{\omega_1}{2}T\right)$$

In tal caso, il sistema oscilla tra gli stati di spin puramente  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ : fintantoché il campo  $\mathbf{B}_1(t)$  rimarrà acceso, assisteremo periodicamente al grande ritorno dello stato iniziale. Questo è tutto ciò che ci serve ricordare della soluzione esatta.

(1) Adesso utilizzeremo la teoria perturbativa dipendente dal tempo: del tutto in generale, partiamo da un hamiltoniano della forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1(t)$$

con  $\lambda$  parametro “piccolo” ed  $\hat{H}_1(t)$  dipendente dal tempo. Gli stati evoluti sono scrivibili come

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t / \hbar} |n\rangle$$

dove separiamo l'evoluzione dovuta ad  $\hat{H}_0$  da quella relativa all'hamiltoniana di perturbazione. Vogliamo far notare che la base  $\mathcal{B} = \{|n\rangle\}_n$  è costituita dagli autostati del solo operatore  $\hat{H}_0$ , e non di  $\hat{H}$ . Supponendo che i coefficienti  $t$ -dipendenti  $a_n(t)$  siano analitici in  $\lambda$ , e cioè che

$$a_n(t) = a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)}(t) + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

otteniamo l'*equazione di evoluzione* (11.17):

$$\dot{a}_n^{(1)}(t) = -\lambda \frac{i}{\hbar} \sum_m \langle n | \hat{H}_1(t) | m \rangle e^{i\omega_{nm} t} a_m^{(0)}$$

con  $\omega_{nm} = (\epsilon_n - \epsilon_m) / \hbar$ . Per ottenere  $a_n^{(1)}(t)$  è sufficiente integrare sul tempo nell'intervallo finito  $[0, T]$ :

$$a_n^{(1)}(T) = -\lambda \frac{i}{\hbar} \int_0^T \sum_m \langle n | \hat{H}_1(t) | m \rangle e^{i\omega_{nm} t} a_m^{(0)} dt$$

Se però supponiamo di partire da uno stato ben preciso  $|\psi(t=0)\rangle = |i\rangle$  e cerchiamo la probabilità che, ad un tempo  $t \geq T$ , misuriamo l'energia  $E_f$  relativa allo stato  $|f\rangle$ , con  $f \neq i$ , troviamo

$$a_f^{(1)}(T) = -\lambda \frac{i}{\hbar} \int_0^T \langle f | \hat{H}_1(t) | i \rangle e^{i\omega_{fi} t} dt$$

essendo  $a_m^{(0)} = a_i(t=0) = \delta_{mi}$  per l'ipotesi. Ovviamente, per avere al primo ordine non nullo in  $\lambda$  la probabilità, bisogna prendere il modulo quadro del coefficiente  $a_f^{(1)}(T)$ .

Per quanto concerne la probabilità di misurare l'energia fondamentale, possiamo avanzare il seguente ragionamento: crolli l'Universo, lo stato del sistema è normalizzato ad ogni istante

$$1 = \langle \psi(t \geq T) | \psi(t \geq T) \rangle = |a_i(T)|^2 + \sum_{k \neq i} |a_k(T)|^2 = |a_i(T)|^2 + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

dove la sommatoria è di ordine  $\lambda^2$  poiché  $\forall k \neq i$  l'elemento di matrice  $\langle k | \lambda \hat{H}_1(t) | i \rangle$  è un  $\mathcal{O}(\lambda)$ . Inoltre abbiamo utilizzato il fatto che la statistica del problema non cambia nei tempi che seguono lo spegnimento. Ne consegue che

$$|a_i(t \geq T)|^2 = |a_i(T)|^2 = 1 - \mathcal{O}(\lambda^2)$$

cioè la probabilità che il sistema, nonostante la perturbazione, permanga nello stato iniziale è unitaria a meno di termini quadratici in  $\lambda$ . I venticinque lettori perdoneranno la poco formale scrittura  $-\mathcal{O}$ , che è equivalente a  $\mathcal{O}$ : ci serve solamente per sottolineare che, dovendo essere unitaria la probabilità totale, la correzione all'unità sarà negativa.

Tornando al problema, scriviamo i due termini dell'hamiltoniana:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= -\frac{\hbar\gamma}{2} B_0 \hat{\sigma}_z \\ \hat{H}_1(t) &= -\frac{\hbar\gamma}{2} B_1 (\cos(\omega t) \hat{\sigma}_x + \sin(\omega t) \hat{\sigma}_y) \end{aligned}$$

dove si ricordi che  $\hat{H}_1(t)$  è attivo soltanto nell'intervallo  $[0, T]$ . A  $t = 0$  prepariamo il sistema nello stato di spin  $|\uparrow\rangle$ , quindi misurando lo spin ad un tempo  $t \geq T$  (con tutta calma, come abbiamo verificato), troveremo una probabilità di permanenza circa unitaria

$$\left|a_{\uparrow}^{(1)}(T)\right|^2 = 1 - \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (4.1)$$

mentre l'ampiezza di probabilità di transizione a  $|\downarrow\rangle$  è

$$a_{\downarrow}^{(1)}(T) = -\lambda \frac{i}{\hbar} \int_0^T \langle \downarrow | \hat{H}_1(t) | \uparrow \rangle e^{i\omega_{\downarrow\uparrow} t} dt$$

dove è facile vedere che  $\omega_{\downarrow\uparrow} = (\epsilon_{\downarrow} - \epsilon_{\uparrow})/\hbar = \omega_0$ , essendo

$$\epsilon_{\uparrow} = -\frac{\gamma B_0}{2} \quad \epsilon_{\downarrow} = \frac{\gamma B_0}{2} \quad \omega_0 = \gamma B_0$$

Calcoliamo l'elemento di matrice presente sotto il segno d'integrale: ponendo

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \langle \downarrow | = (0 \quad 1)$$

scriviamo la matrice di  $\hat{H}_1(t)$  in questa base canonica, e troviamo

$$H_1(t) = -\frac{\hbar\gamma B_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}$$

per cui

$$\langle \downarrow | \hat{H}_1(t) | \uparrow \rangle = -\frac{\hbar\gamma B_1}{2} (0 \quad 1) \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar\gamma B_1}{2} e^{i\omega t}$$

Allora otteniamo

$$a_{\downarrow}^{(1)}(T) = \lambda \frac{i}{\hbar} \frac{\hbar\gamma B_1}{2} \int_0^T e^{i(\omega + \omega_0)t} dt$$

che è un integrale facile da risolvere: il risultato è

$$a_{\downarrow}^{(1)}(T) = i\lambda e^{i(\omega + \omega_0)T/2} \gamma B_1 \frac{\sin((\omega + \omega_0)T/2)}{\omega + \omega_0}$$

La probabilità di transizione allo spin *down* è, al primo ordine, il suo modulo quadro:

$$\left|a_{\downarrow}^{(1)}(T)\right|^2 = \lambda^2 \sin^2\left((\omega + \omega_0) \frac{T}{2}\right) \frac{\omega_1^2}{(\omega + \omega_0)^2} \quad (4.2)$$

ovvero una probabilità  $\mathcal{O}(\lambda^2)$ , compatibilmente con la normalizzazione e con l'Eq.(4.1). Confrontiamo la soluzione (4.2), ottenuta perturbativamente, con il risultato esatto di Sez. 1.2, corrispondente a

$$\left|a_{\downarrow}(T)\right|^2 = \left(\frac{\omega_1}{\alpha}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\alpha T}{2}\right) \quad \text{con} \quad \alpha^2 = (\omega_0 + \omega)^2 + \omega_1^2$$

Notiamo che, essendo questa la formula esatta, non c'è l'apice (1), derivato dall'espansione in serie perturbativa. Risulta evidente che il risultato trovato per mezzo della teoria delle perturbazioni coincide con quello esatto nel limite in cui il campo  $\mathbf{B}_1(t)$  è debole, i.e. quantitativamente quando è verificata la condizione

$$\omega_1^2 \ll (\omega_0 + \omega)^2$$

(2) L'Eq. (4.2) vale soltanto fuori dalla condizione di risonanza, mentre nel caso  $\omega = -\omega_0$  dobbiamo eseguire il limite per ottenere

$$\left|a_{\downarrow}^{(1)}(T)\right|_{\omega=-\omega_0}^2 = \lim_{\omega \rightarrow -\omega_0} \left|a_{\downarrow}^{(1)}(T)\right|^2 = \lambda^2 \left(\frac{\omega_1 T}{2}\right)^2 \propto T^2 \quad (4.3)$$

A risonanza, come soluzione esatta avevamo trovato

$$\left|a_{\downarrow}(T)\right|_{\omega=-\omega_0}^2 = \sin^2\left(\frac{\omega_1 T}{2}\right)$$

L'approssimazione perturbativa (4.3) è quindi una linearizzazione, valida nella condizione  $\omega_1 T \ll 1$ . Avendo libertà sia sul modulo di  $\mathbf{B}_1(t)$ , e pertanto su  $\omega_1$ , sia sul tempo di perturbazione  $T$ , è evidente che potremo permetterci  $T$  lunghi solo con campi molto deboli, e campi potenti solo con perturbazioni rapide, in modo che risulti sempre  $\omega_0 T \ll 1$ .

## 4.4 PERTURBAZIONE SPIN-POSIZIONE

Consideriamo l'hamiltoniano di un atomo di idrogeno, con l'aggiunta di un termine perturbativo

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{W}$$

dove abbiamo indicato con  $\hat{H}_0$  l'hamiltoniano imperturbato dell'atomo di idrogeno (11.12), mentre la perturbazione  $\lambda \hat{W}$  è dipendente dallo spin dell'elettrone  $\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}$  e dalla sua posizione  $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ :

$$\hat{W} = \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{r}}$$

Iniziamo lavorando, nello spazio di Hilbert degli stati, con la base usuale

$$|n, l, m; s, \sigma\rangle \longleftrightarrow \hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z \quad (4.4)$$

che diagonalizza simultaneamente tutti gli operatori scritti a destra, e descrive in modo completo ma non ridondante lo stato del sistema. Si noti la presenza del segno interpuntivo ";" che servirà a contraddistinguere questa base.

L'elettrone è una particella con spin  $s = 1/2$ , quindi nel problema il numero quantico  $s$  sarà sempre lo stesso. Vogliamo calcolare la correzione al primo livello energetico eccitato (corrispondente a  $n = 2$ ), ovviamente utilizzando i mezzi della Teoria delle Perturbazioni. Rammentiamo dalla Sezione 7.1, Parte I, che la degenerazione energetica relativa al livello  $n$ -esimo dell'atomo di idrogeno imperturbato è, senza contare lo spin dell'elettrone,

$$\text{Deg}_{\text{orb}}(n) = n^2$$

Tenendo conto della duplice possibilità sullo stato di spin dell'elettrone,  $|\uparrow\rangle$  oppure  $|\downarrow\rangle$ , avremo la degenerazione

$$\text{Deg}(n) = 2n^2$$

dal momento che tale stato non entra in  $\hat{H}_0$ . Pertanto il primo stato eccitato avrà degenerazione 8, come riportiamo nella tabella 4.

$l$	$m$	$\sigma$	stati
0	0	$\pm 1/2$	2
1	$0, \pm 1$	$\pm 1/2$	6

Tabella 4: Otto stati degeneri nell'energia imperturbata per il primo livello eccitato.

Come abbiamo visto nella Sezione 11.2, Parte I, nel caso di spettro degenero è innanzitutto necessario utilizzare una base tale per cui la perturbazione, nell'autospazio energeticamente degenero, sia diagonale, e dunque diagonalizzi simultaneamente  $\hat{H}_0$  e  $\hat{W}$ . Utilizzando la base riportata nell'espressione (4.4), il generico elemento di matrice di  $\hat{W}$  è

$$W_{l,l',\sigma,\sigma'} = \left\langle l, m; \frac{1}{2}, \sigma \middle| \hat{W} \middle| l', m'; \frac{1}{2}, \sigma' \right\rangle$$

dove abbiamo eliminato il numero quantico principale  $n = 2$ , che risulta superfluo se lavoriamo all'interno di questo sottospazio. L'oggetto  $W_{l,l',\sigma,\sigma'}$

costituisce una matrice  $8 \times 8$  a coefficienti complessi ed hermitiana, e quest'ultimo vincolo, già da solo, fa sì che, di 64 elementi, ne siano indipendenti soltanto 36. Ora, nonostante questo sconto, eviteremmo volentieri di calcolare direttamente questi 36 coefficienti, quindi è meglio pensare bene, prima di principiare un lavoro titanico, se non esistano delle **regole di selezione** che riducano ulteriormente il loro numero e, con esso, la fatica richiesta.

**PARITÀ** Esaminiamo subito il comportamento di  $\hat{W}$  sotto parità:

$$\begin{aligned}\hat{W} &\longrightarrow \hat{P}\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{r}}\hat{P} = \hat{P}\hat{\mathbf{S}}\hat{P} \cdot \hat{P}\hat{\mathbf{r}}\hat{P} \\ &= -\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{r}} = -\hat{W}\end{aligned}\quad (4.5)$$

Poiché l'operatore posizione  $\hat{\mathbf{r}}$  è dispari, mentre  $\hat{\mathbf{S}}$  è invariante sotto trasformazione di parità, segue che  $\hat{W}$  è dispari sotto l'applicazione di  $\hat{P}$ . Dato che gli operatori scalari rispetto al momento angolare orbitale sono invarianti per parità, dobbiamo concludere che  $\hat{W}$  **non è un operatore scalare rispetto a  $\hat{\mathbf{L}}$** . Questa caratteristica farà ritorno più avanti. Gli stati della base (4.4) possiedono parità definita:

$$\hat{P} \left| l, m; s = \frac{1}{2}, \sigma \right\rangle = (-1)^l \left| l, m; s = \frac{1}{2}, \sigma \right\rangle \quad (4.6)$$

quindi stati con la stessa parità hanno elementi di matrice nulli: utilizzando assieme le equazioni (4.6) e (4.5), otteniamo

$$\langle l, m | \hat{W} | l', m' \rangle = (-1)^{l+l'+1} \langle l, m | \hat{W} | l', m' \rangle \quad (4.7)$$

dove abbiamo omesso i numeri quantici relativi allo stato di spin, ininfluenti per questa equazione. Per  $l' + l + 1$  dispari, gli elementi di matrice risultano sicuramente nulli. Abbiamo quindi

$$\langle l = 0, m = 0 | \hat{W} | l' = 0, m = 0 \rangle = 0 \quad \langle l = 1, m | \hat{W} | l' = 1, m' \rangle = 0$$

con  $m, m' = 0, \pm 1$ . In sostanza, poiché  $n = 2$  e quindi  $l = 0, 1$ , dobbiamo calcolare elementi di matrice con  $l \neq l'$ . Dei 36 superstiti, ben 20 muoiono così, massacrati da questa regola di selezione: infatti, considerando la sola parte orbitale, abbiamo 1 elemento di matrice nel caso  $l = l' = 0$  e  $3 \times 3 = 9$  nel caso  $l = l' = 1$ ; lo spin raddoppia il numero di questi elementi di matrice.

Potenzialmente non nulli rimangono quindi tutti i 12 elementi di matrice – di cui però solo 6 sono indipendenti, per hermitianità – della forma

$$\langle l = 0, m = 0; s, \sigma | \hat{W} | l' = 1, m'; s, \sigma \rangle$$

e i loro complessi coniugati.

**COMMUTAZIONE CON IL MOMENTO ANGOLARE** Nell'esercizio della Sezione 4.2 abbiamo mostrato che, dato un operatore  $\hat{V}$

$$[\hat{L}_z, \hat{V}] = 0 \implies \langle l', m' | \hat{V} | l, m \rangle \propto \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Questa eventuale regola di selezione, se fosse valida, potrebbe restringere ancor più il numero di elementi di matrice da calcolare. Sperando che valga

$$[\hat{L}_z, \hat{W}] \stackrel{?}{=} 0$$

eseguiamo il calcolo. Sottintendendo la somma su indici ripetuti, scriveremo  $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{r}} = \hat{S}_j \hat{r}_j$ :

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{W}] &= [\hat{L}_i, \hat{S}_j \hat{r}_j] \\ &= \hat{S}_j [\hat{L}_i, \hat{r}_j] \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{S}_j \hat{r}_k \end{aligned}$$

Il risultato non è nullo, ad esempio

$$[\hat{L}_z, \hat{W}] = i\hbar (\hat{S}_x \hat{y} - \hat{S}_y \hat{x})$$

Non commutando con  $\hat{\mathbf{L}}$ , questa perturbazione **non è scalare rispetto a  $\hat{\mathbf{L}}$** , come avevamo anche anticipato.

Tuttavia,  $\hat{W}$  è **uno scalare rispetto a  $\hat{\mathbf{J}}$** , il momento angolare totale

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$$

Infatti, si verifica immediatamente che per ciascuna componente  $i = x, y, z$

$$\begin{aligned} [\hat{J}_i, \hat{S}_j \hat{r}_j] &= [\hat{L}_i + \hat{S}_i, \hat{S}_j \hat{r}_j] \\ &= \hat{S}_j [\hat{L}_i, \hat{r}_j] + [\hat{S}_i, \hat{S}_j] \hat{r}_j \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} (\hat{S}_j \hat{r}_k + \hat{S}_k \hat{r}_j) = 0 \end{aligned}$$

L'espressione finale è nulla in quanto il tensore di Ricci-Levi Civita è antisimmetrico, mentre la parentesi è simmetrica, sotto lo scambio degli indici  $(j, k)$  su cui stiamo sommando.

In modo analogo al caso di commutazione con il momento angolare orbitale, abbiamo

$$[\hat{J}_z, \hat{W}] = 0 \implies \langle J, M | \hat{W} | J', M' \rangle \propto \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \quad (4.8)$$

Evidentemente, qui stiamo utilizzando una nuova base, relativa alla composizione dei momenti angolari orbitale e di spin ( $s = 1/2$ ):

$$|n, l, s, J, M\rangle \longleftrightarrow \hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z \quad (4.9)$$

Come prima, ci permetteremo di non scrivere ripetutamente  $n$  a vuoto, dato che lavoriamo con  $n = 2$ . Non siamo intenzionati a scrivere la matrice di  $\hat{W}$  in questa base, semplicemente ci fa comodo utilizzarla per sfruttare la regola di selezione (4.8), poi dovremo tornare a quella precedente utilizzando i **Coefficienti di Clebsch-Gordan**.

**CONVENZIONE** Nel seguito, per non confonderci tra le due basi e per non dover sempre scrivere le lettere dei numeri quantici, adotteremo la seguente convenzione: scriveremo la base (4.4) con un punto e virgola tra la parte orbitale e la parte di spin, mentre con la (4.9) useremo solo virgolette, con gli ordini già stabiliti.

dove indichiamo con  $J$  il numero quantico relativo a  $\hat{J}^2$  – il cui autovalore è  $J(J+1)$  – e con  $M$  quello relativo a  $\hat{J}_z$ . Valgono pertanto delle **regole di selezione** sul momento angolare totale. Vogliamo far notare che questa può essere vista anche come conseguenza del Teorema di Wigner-Eckart esposto

in Sez. 10.1.2, Parte I, ricordando che in effetti gli operatori scalari sono tensori sferici di rango nullo.

È stato scritto sopra che avremmo dovuto calcolare soltanto elementi di matrice con  $l = 0$  e  $l' = 1$ , e questo continuerà a valere anche utilizzando la nuova base: ci interessano soltanto elementi del tipo

$$\left\langle 0, \frac{1}{2}, J, M \middle| \hat{W} \middle| 1, \frac{1}{2}, J', M' \right\rangle$$

Tuttavia, se utilizziamo la regola di selezione (4.8) appena trovata, notiamo che saranno non nulli solo elementi con  $J = J'$  e con  $M = M'$ , quindi scrivibili come

$$\left\langle 0, \frac{1}{2}, J, M \middle| \hat{W} \middle| 1, \frac{1}{2}, J, M \right\rangle$$

Ricordiamo che  $M = m + \sigma$ , e che  $l = 0$  ammette solo  $m = 0$  perciò, essendo  $\sigma = \pm 1/2$ , il *bra* dell'elemento appena riportato non potrà che avere  $J = 1/2$ . Di conseguenza, dovendo comparire lo stesso  $J$  anche a destra per avere un valore non nullo, il calcolo di elementi di matrice di questo tipo si limita a trovare

$$\phi_{\pm} \equiv \left\langle 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, M = \pm \frac{1}{2} \middle| \hat{W} \middle| 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, M = \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (4.10)$$

e quindi il drammatico calcolo di 64 elementi di matrice è stato, infine, addomesticato. Quanto segue è pura algebra.

Adesso serve utilizzare i già citati **Coefficienti di Clebsch-Gordan**, presentati nella Sezione 9.2, Parte I. In appendice se ne possono vedere le tabelle. In questa occasione, dovremo fare riferimento alle composizioni

$$\mathbf{0} \otimes \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \quad \mathbf{1} \otimes \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \oplus \frac{3}{2}$$

Ricordiamo che

$$|l, s, J, M\rangle = \sum C_{M|m,\sigma}^{J|l,s} |l, m; s, \sigma\rangle$$

Evidentemente abbiamo

$$\left| 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \sum C_{\pm \frac{1}{2}|m,\sigma}^{\frac{1}{2}|0,\frac{1}{2}} \left| 0, m; \frac{1}{2}, \sigma \right\rangle = \left| 0, 0; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$$

dove il secondo passaggio è dovuto ancora al fatto che  $l = 0$  ammette solamente con  $m = 0$ . Troviamo quindi come scrivere il *bra* dell'espressione (4.10). L'altro caso, invece, si biforca in due sottocasi, uno relativo a  $M = +\frac{1}{2}$ , l'altro a  $M = -\frac{1}{2}$ , che analizzeremo separatamente:

- $M = +\frac{1}{2}$ :

$$\begin{aligned} \left| 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle &= C_{\frac{1}{2}|1,-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}|1,\frac{1}{2}} \left| 1, +1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + C_{\frac{1}{2}|0,+\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}|1,\frac{1}{2}} \left| 1, 0; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, +1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, 0; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

- $M = -\frac{1}{2}$ :

$$\begin{aligned} \left| 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= C_{-\frac{1}{2}|0,-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}|1,\frac{1}{2}} \left| 1, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + C_{-\frac{1}{2}|-1,\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}|1,\frac{1}{2}} \left| 1, -1; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, -1; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

Potremmo, volendo, unire le due espressioni, per ottenere

$$\left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\right\rangle = \mp \sqrt{\frac{1}{3}} \left|1, 0; \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\right\rangle \pm \sqrt{\frac{2}{3}} \left|1, \pm 1; \frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2}\right\rangle$$

Sostituiamo queste combinazioni lineari in equazione (4.10), nei due casi  $\phi_+$  e  $\phi_-$ . Siccome i due casi sono analoghi, riportiamo il primo per esteso.

Se diamo ai *ket*

$$\left|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \quad \left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$$

scritti nella base (4.9), i nomi di  $|0_+\rangle$  e  $|1_+\rangle$  rispettivamente, nello  $\text{Span}\{|0_+\rangle, |1_+\rangle\}$  la matrice di  $\hat{W}$  si scrive come

$$W_+ = \begin{pmatrix} & \phi_+ \\ \phi_+^* & \end{pmatrix}$$

dove l'unico elemento indipendente è

$$\phi_+ = \sqrt{\frac{2}{3}} \left\langle 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| \hat{W} \left| 1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \left\langle 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| \hat{W} \left| 1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

Procediamo a calcolare questi elementi di matrice di  $\hat{W}$  in modo esplicito. Prima di tutto, definiamo gli operatori di salita e di discesa

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$$

Ricordando come  $\hat{\mathbf{S}} = \hbar \frac{\hat{\sigma}}{2}$ , possiamo verificare che i due operatori funzionano a dovere:

$$\hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle \quad \hat{S}_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle \quad \hat{S}_- |\downarrow\rangle = \hat{S}_+ |\uparrow\rangle = 0$$

dove

$$|\uparrow\rangle = \left|s = \frac{1}{2}, \sigma = +\frac{1}{2}\right\rangle \quad |\downarrow\rangle = \left|s = \frac{1}{2}, \sigma = -\frac{1}{2}\right\rangle$$

Da queste definizioni segue che

$$\hat{S}_x = \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} \quad \hat{S}_y = \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2i}$$

e pertanto possiamo riscrivere  $\hat{W}$  come

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{r}} &= \hat{S}_x x + \hat{S}_y y + \hat{S}_z z \\ &= \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} x + \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2i} y + \hat{S}_z z \end{aligned}$$

Chiaramente, gli operatori  $\hat{S}_*$  agiscono sullo spazio dello stato di spin, mentre gli operatori posizione sullo spazio di stato orbitale. Allora

$$\begin{aligned}
 \phi_+ = & \sqrt{\frac{2}{3}} \left[ \langle \uparrow | \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} | \downarrow \rangle \langle 0, 0 | \hat{x} | 1, 1 \rangle + \langle \uparrow | \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2i} | \downarrow \rangle \langle 0, 0 | \hat{y} | 1, 1 \rangle \right. \\
 & + \langle \uparrow | \hat{S}_z | \downarrow \rangle \langle 0, 0 | \hat{z} | 1, 1 \rangle \left. \right] - \sqrt{\frac{1}{3}} \left[ \langle \uparrow | \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} | \downarrow \rangle \langle 0, 0 | \hat{x} | 1, 0 \rangle \right. \\
 & + \langle \uparrow | \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2i} | \downarrow \rangle \langle 0, 0 | \hat{y} | 1, 0 \rangle + \langle \uparrow | \hat{S}_z | \downarrow \rangle \langle 0, 0 | \hat{z} | 1, 0 \rangle \left. \right] \\
 = & \hbar \sqrt{\frac{2}{3}} \langle 0, 0 | \frac{\hat{x} - i\hat{y}}{2} | 1, 1 \rangle - \hbar \sqrt{\frac{1}{3}} \langle 0, 0 | \frac{\hat{x} - i\hat{y}}{2} | 1, 0 \rangle
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

## 4.5 TRANSIZIONI ADIABATICHE E IONIZZAZIONE

Consideriamo un atomo di idrogeno nel suo stato fondamentale ( $n = 1$ ), descritto dall'hamiltoniana imperturbata

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{k}{r}$$

Si calcolino:

- (1) la probabilità di transizione a un generico stato del primo livello eccitato ( $n = 2$ ), quando sottoposto a un campo elettrico che decade con legge esponenziale:

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-t/\tau}$$

- (2) il rate di probabilità di ionizzazione (transizione a uno stato dello spettro continuo di  $\hat{H}$ ) quando sottoposto a una perturbazione del tipo

$$V(\mathbf{x}, t) = V_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)$$

quindi la probabilità per unità di tempo che l'elettrone venga emesso dall'atomo con impulso  $\mathbf{p}'$ .

Affronteremo il problema avvalendoci sia delle tecniche di Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo (Cap. 11, Parte I) che della Teoria dello scattering (Cap. ??, Parte I).

- (1) L'atomo di idrogeno è soggetto a una perturbazione elettrica. Al solito, scegliamo l'asse  $\bar{\mathbf{z}}$  allineato alla direzione del campo

$$\mathbf{E}(t) = E(t)\bar{\mathbf{z}}$$

dove con  $\bar{\mathbf{z}}$  indichiamo il versore diretto lungo  $z$ . Allora l'effetto del campo è un termine perturbativo che si somma all'hamiltoniana

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t) \quad \text{con} \quad \hat{H}'(t) = eE_0 e^{-t/\tau} \hat{z}$$

che si ottiene semplicemente come integrazione del campo. Con questa scelta degli assi, la base naturale da utilizzare è quella canonica  $|nlm\rangle$ , che diagonalizza simultaneamente gli operatori

$$\hat{H}_0 \quad \hat{\mathbf{L}}^2 \quad \hat{L}_z$$

In questa base lo stato iniziale è  $|1\ 0\ 0\rangle$ ; ci chiediamo quali stati siano raggiungibili nel secondo autospazio dell'hamiltoniana, del tipo  $|2\ lm\rangle$ . Notiamo che la perturbazione è proporzionale all'operatore  $\hat{z}$ : ricordando quanto esposto nel Cap. 10, vediamo che possiamo mappare l'operatore vettoriale  $\hat{\mathbf{q}}$  nelle tre componenti sferiche

$$\hat{T}_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{\hat{x} \pm i\hat{y}}{\sqrt{2}} \quad \hat{T}_0^{(1)} = \hat{z}$$

dove l'apice indica il rango del tensore. Quindi la perturbazione agisce sul ground-state come l'operatore sferico  $\hat{T}_0^{(1)}$ ; per il Teorema di Wigner-Eckart si ha che

$$\langle 2\ lm | \hat{H}'(t) | 1\ 0\ 0 \rangle \propto \langle 2\ lm | \hat{T}_0^{(1)} | 1\ 0\ 0 \rangle = C_{m|0,0}^{l|1,0} \langle l' | \hat{T}^{(1)} | l \rangle$$

per cui si possono sfruttare le regole di selezione indotte dai Coefficienti di Clebsh-Gordan:

- sono non nulli gli elementi di matrice dove  $l = 1$ , perché

$$\mathbf{0} \otimes \mathbf{1} = \mathbf{1}$$

- siccome  $0 + 0 = 0$ , tra gli elementi con  $l = 1$  rimane solo quello con  $m = 0$ ;

quindi l'unica possibile transizione è

$$|i\rangle = |100\rangle \quad \rightarrow \quad |f\rangle = |210\rangle$$

La probabilità che tale transizione avvenga in funzione del tempo trascorso si calcola come esposto nella Sez. 11.4.1, Parte I, relativa alle perturbazioni dipendenti dal tempo attive per un tempo finito. Avevamo trovato che

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} &= \left| -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i(E_{|f\rangle} - E_{|i\rangle})t'/\hbar} \langle 210 | \hat{H}'(t') | 100 \rangle \right|^2 \\ &= \left| -\frac{i}{\hbar} eE_0 \langle 210 | \hat{z} | 100 \rangle \int_0^t dt' e^{i(E_2 - E_1)t'/\hbar} e^{-t'/\tau} \right|^2 \end{aligned}$$

dove con  $E_j$  indichiamo il  $j$ -esimo livello energetico. Calcoliamo adesso l'elemento di matrice. Chiamiamo  $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$  la funzione d'onda che rappresenta lo stato  $|nlm\rangle$ : quelle che ci servono sono

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/a_B} \quad \psi_{210}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_B^3}} \frac{r}{a_B} e^{-r/(2a_B)} \cos \theta$$

con  $a_B$  raggio di Bohr. Si trova che

$$\begin{aligned} \langle 210 | \hat{z} | 100 \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} \psi_{210}^*(\mathbf{r}) z \psi_{100}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{4\pi\sqrt{2}a_B^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} \frac{r}{a_B} e^{-r/(2a_B)} \cos \theta z e^{-r/a_B} \\ &= \frac{1}{4\pi\sqrt{2}a_B^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{+\infty} r^2 dr \cos^2 \theta \frac{r^2}{a_B^2} e^{-3r/(2a_B)} \\ &= \frac{a_B}{2\sqrt{2}} \int_{-1}^{+1} d\cos \theta \cos^2 \theta \int_0^{+\infty} \frac{dr}{a_B} \frac{r^4}{a_B^4} e^{-3r/(2a_B)} \\ &= \frac{1}{3} \left( \frac{2}{3} \right)^5 \frac{a_B}{\sqrt{2}} \int_0^{+\infty} ds s^4 e^{-s} \\ &= \frac{2^5}{3^6} \frac{a_B}{\sqrt{2}} \Gamma(5) \\ &= \frac{2^5}{3^6} 4! \frac{a_B}{\sqrt{2}} = \frac{256}{243} \frac{a_B}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Resta da calcolare l'integrale: chiamiamo

$$\omega \equiv \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad \omega' = \frac{1}{\tau}$$

da cui

$$\begin{aligned} \left| \int_0^t dt' e^{i(E_2 - E_1)t'/\hbar} e^{-t'/\tau} \right|^2 &= \left| \frac{e^{(i\omega - \omega')t} - 1}{i\omega - \omega'} \right|^2 \\ &= \frac{(e^{(i\omega - \omega')t} - 1)(e^{(-i\omega - \omega')t} - 1)}{\omega^2 + \omega'^2} \\ &= \frac{e^{-2\omega't} - e^{-\omega't}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) + 1}{\omega^2 + \omega'^2} \\ &= \frac{1 - 2e^{-\omega't} \cos(\omega t) + e^{-2\omega't}}{\omega^2 + \omega'^2} \end{aligned}$$

per cui, mettendo tutto insieme, si ha che

$$\mathcal{P} = \left( \frac{256}{243} \frac{eE_0 a_B}{\sqrt{2}\hbar} \right)^2 \frac{1 - 2e^{-t/\tau} \cos(\omega t) + e^{-2t/\tau}}{\omega^2 + 1/\tau^2}$$

Analizziamo il risultato ottenuto in due regimi:

- per  $t \rightarrow +\infty$  troviamo la probabilità totale di transizione a tempi lunghi:

$$\mathcal{P} = \left( \frac{256}{243} \frac{eE_0 a_B}{\sqrt{2}\hbar} \right)^2 \frac{\tau^2}{1 + (\omega\tau)^2}$$

che rimane quindi non nulla;

- per  $\tau \rightarrow +\infty$  dobbiamo ritrovare il risultato ottenuto nel caso di una perturbazione costante per un tempo finito: usando l'identità trigonometrica

$$2 - 2 \cos x = 4 \sin^2 \left( \frac{x}{2} \right)$$

e raccogliendo tutte le costanti numeriche in un prefattore  $\kappa$ , si trova il noto risultato

$$\mathcal{P} = \kappa \frac{\sin^2(\omega t/2)}{\omega^2}$$

che coincide con le attese.

**(2)** Passiamo al secondo punto. Stavolta sommiamo all'hamiltoniana il termine perturbativo  $V(\mathbf{x}, t)$ , che tratteremo senza perdita di generalità come un campo elettromagnetico incidente. In prima battuta, la dipendenza dalla posizione può sembrare non banale da trattare; tuttavia dobbiamo inizialmente ragionare sui regimi di approssimazione in cui lavoriamo:

- perché la Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo sia applicabile nella forma studiata, dobbiamo prima di tutto richiedere che la perturbazione ondulatoria agisca in modo uniforme sul sistema. La larghezza tipica è  $a_B$ , per cui deve essere ( $\lambda$  è la lunghezza d'onda)

$$\frac{\lambda}{a_B} \stackrel{!}{\gg} 1 \quad \Rightarrow \quad \omega \stackrel{!}{\ll} \frac{2\pi c}{a_B} = 4\pi \frac{\text{Ry}}{\hbar\alpha}$$

dove abbiamo utilizzato la relazione di dispersione  $\omega = kc$ .

- affinché il fotone incidente possa ionizzare l'atomo, deve essere più energetico della profondità della buca di potenziale in cui si trova l'elettrone; siccome lo stato iniziale è il ground-state, tale buca è profonda  $Ry \approx 13.6$  eV. Non richiediamo solo questo: affinché lo stato in uscita sia trattabile come un'onda piana, non deve risentire dell'interazione coulombiana. Questo è equivalente a richiedere che

$$E_e = E_\gamma - Ry \stackrel{!}{\gg} Ry \quad \Rightarrow \quad \hbar\omega = E_\gamma \stackrel{!}{\gg} Ry$$

con  $E_e$  l'energia dell'elettrone emesso e  $E_\gamma$  quella del fotone incidente.

Mettendo insieme queste due richieste troviamo una banda di energie che realizza entrambe:

$$1 \ll \frac{\hbar\omega}{Ry} \ll \frac{4\pi}{\alpha} \approx 1722$$

per cui, ad esempio, una buona energia potrebbe essere dell'ordine di  $\hbar\omega \approx 2$  keV. Stando all'interno di questa banda possiamo usare la Teoria delle perturbazioni e considerare lo stato finale come una pura onda piana di impulso  $\mathbf{p}'$ , autostato dell'operatore Impulso:

$$|f\rangle \simeq |\mathbf{p}'\rangle = \hbar |\mathbf{k}'\rangle$$

Passiamo adesso alla soluzione. Come primo passo, allineiamo l'asse  $\hat{\mathbf{z}}$  con il vettore d'onda della perturbazione incidente  $\mathbf{k}$ ; in questo modo la perturbazione si riscrive come

$$\hat{H}'(t) = \frac{V_0}{2} \left( e^{i(kz - \omega t)} + e^{-i(kz - \omega t)} \right) = \hat{V} e^{-i\omega t} + \hat{V}^\dagger e^{i\omega t}$$

(quindi è un buon operatore hermitiano) in cui riconosciamo una somma di termini: come esposto nel Cap. 11, il primo è relativo a un assorbimento, il secondo a un'emissione. Siccome siamo inizialmente al ground-state l'unico possibile processo è un assorbimento: ne segue che dovremo tenere in conto solamente  $\hat{V}$ . Il calcolo del rate di probabilità si esegue applicando la Regola d'oro di Fermi, Eq. (14.15):

$$dR = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 dn$$

dove con  $\hat{V}_{fi}$  indichiamo l'elemento di matrice di  $\hat{V}$  tra gli stati iniziale e finale. A rigore, avevamo derivato la Regola d'oro usando un'onda piana come stato iniziale, ma il ragionamento può essere modificato e applicato ugualmente in questo contesto, come si legge in [3]. Invece  $dn$  rappresenta la densità di stati nell'intorno dello stato finale. La scelta del prefattore davanti agli autostati dell'Impulso, su cui c'è una certa arbitrarietà, implica una forma ben precisa per  $dn$ :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \stackrel{!}{=} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad \Rightarrow \quad dn = \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

Rimandiamo al Cap. 14 per una discussione più approfondita sull'argomento. Si ha:

$$\begin{aligned}
 V_{fi} &= \frac{V_0}{2} \left\langle e^{ikz} \right\rangle_{fi} \\
 &= \frac{V_0}{2} \langle \mathbf{k}' | e^{ikz} | 100 \rangle \\
 &= \frac{V_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} \langle \mathbf{k}' | e^{ikz} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | 100 \rangle \\
 &= \frac{V_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} - kz)} \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/a_B} \\
 &= \frac{V_0}{2} \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} e^{-i(\mathbf{k}' - k\bar{\mathbf{z}}) \cdot \mathbf{r}} e^{-r/a_B} = \frac{V_0}{2} \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} e^{-r/a_B}}_{\equiv \mathcal{I}}
 \end{aligned}$$

dove abbiamo banalmente riscritto  $z = \mathbf{r} \cdot \bar{\mathbf{z}}$  e definito  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k}' - k\bar{\mathbf{z}}$ . Nell'ultima espressione abbiamo la libertà di scegliere come vogliamo le variabili sferiche: chiamiamo quindi  $\theta'$  l'angolo compreso tra  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{r}$ , e fissiamolo come angolo azimutale. Ne segue che l'integrale precedente ( $\mathcal{I}$ ) risulta uguale a (con le coordinate primarie indichiamo le coordinate sferiche)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I} &= \int_0^{+\infty} r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' e^{-iqr \cos \theta'} e^{-r/a_B} \\
 &= 2\pi \int_0^{+\infty} dr r^2 e^{-r/a_B} \int_{-1}^{+1} d \cos \theta' e^{-iqr \cos \theta'} \\
 &= 2\pi \int_0^{+\infty} dr r^2 e^{-r/a_B} \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr} \\
 &= \frac{2\pi}{iq^3} \int_0^{+\infty} d(qr) qre^{-qr/(qa_B)} (e^{iqr} - e^{-iqr}) \\
 &= \frac{2\pi}{iq^3} \underbrace{\int_0^{+\infty} ds se^{(i-\beta)s}}_{\equiv \mathcal{J}(i-\beta)} - \frac{2\pi}{iq^3} \underbrace{\int_0^{+\infty} ds se^{(-i-\beta)s}}_{\equiv \mathcal{J}(-i-\beta)}
 \end{aligned}$$

con  $\beta \equiv 1/(qa_B)$ , e dove abbiamo indicato con  $\mathcal{J}(\alpha)$  l'integrale

$$\mathcal{J}(\alpha) \equiv \int_0^{+\infty} ds se^{\alpha s}$$

Questo integrale si svolge, al solito, col Trucco di Feynman:

$$\mathcal{J}(\alpha) = \frac{d}{d\alpha} \int_0^{+\infty} ds e^{\alpha s} = \frac{d}{d\alpha} \left( \frac{e^{\alpha s}}{\alpha} \Big|_0^{+\infty} \right)$$

Siccome  $\beta > 0$ , si avrà

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}(i-\beta) &= -\frac{d}{d\alpha} \frac{1}{\alpha} \Big|_{\alpha=i-\beta} = \frac{1}{(i-\beta)^2} \\
 \mathcal{J}(-i-\beta) &= -\frac{d}{d\alpha} \frac{1}{\alpha} \Big|_{\alpha=-i-\beta} = \frac{1}{(-i-\beta)^2}
 \end{aligned}$$

per cui

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I} &= \frac{2\pi}{iq^3} (\mathcal{J}(i - \beta) - \mathcal{J}(-i - \beta)) \\
 &= \frac{2\pi}{iq^3} \frac{(i + \beta)^2 - (i - \beta)^2}{(i - \beta)^2(i + \beta)^2} \\
 &= \frac{2\pi}{iq^3} \frac{4i\beta}{(1 + \beta^2)^2} \\
 &= \frac{8\pi}{q^3} \frac{(qa_B)^3}{(1 + (qa_B)^2)^2} = 8\pi \frac{a_B^3}{(1 + (qa_B)^2)^2}
 \end{aligned}$$

quindi concludiamo che:

$$V_{fi}^\dagger = 8\sqrt{\pi} \frac{V_0}{2} \frac{a_B^{3/2}}{(1 + (qa_B)^2)^2}$$

Prendendone il modulo quadro si trova il rate di probabilità:

$$\begin{aligned}
 dR &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| 8\sqrt{\pi} \frac{V_0}{2} \frac{a_B^{3/2}}{(1 + (qa_B)^2)^2} \right|^2 \frac{d^3 \mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \\
 &= 32V_0^2 \frac{\pi^2}{\hbar} \left( \frac{a_B^{3/2}}{a_B^4 (q^2 + 1/a_B^2)^2} \right)^2 \frac{d^3 \mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \\
 &= \frac{4V_0^2}{\pi a_B^5 \hbar} \left( \frac{1}{|\mathbf{k}' - k\bar{\mathbf{z}}|^2 + 1/a_B^2} \right)^4 k'^2 dk' d\Omega'
 \end{aligned}$$

Questa forma, se integrata, conduce al rate di probabilità totale. Proviamo adesso a spingerci leggermente oltre nei calcoli, decisamente tediosi. Facciamo notare come l'integrazione angolare sia non banale, poiché le variabili angolari compaiono al denominatore dell'espressione:

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{k}' - k\bar{\mathbf{z}}|^2 &= |k' \sin \theta' (\cos \varphi' \bar{\mathbf{x}} + \sin \varphi' \bar{\mathbf{y}}) + (k' \cos \theta' - k) \bar{\mathbf{z}}|^2 \\
 &= k'^2 \sin^2 \theta' (\cos^2 \varphi' + \sin^2 \varphi') + (k'^2 \cos^2 \theta' - 2k' k \cos \theta' + k^2) \\
 &= k'^2 - 2k' k \cos \theta' + k^2
 \end{aligned}$$

Si ha quindi:

$$\begin{aligned}
 dR &= \frac{4V_0^2}{\pi a_B^5 \hbar} \left( \frac{1}{k'^2 - 2k' k \cos \theta' + k^2 + 1/a_B^2} \right)^4 k'^2 dk' d\Omega' \\
 &= \frac{4V_0^2}{\pi a_B^5 \hbar} \frac{1}{(2k' k)^4} \left( \frac{1}{c - \cos \theta'} \right)^4 k'^2 dk' d\Omega' \quad \text{con } c = \frac{k'^2 + k^2 + 1/a_B^2}{2k' k}
 \end{aligned}$$

Consideriamo allora l'integrale

$$\begin{aligned}
 \int_0^{4\pi} d\Omega' \left( \frac{1}{c - \cos \theta'} \right)^4 &= 2\pi \int_{-1}^{+1} d\cos \theta' \left( \frac{1}{c - \cos \theta'} \right)^4 \\
 &= -2\pi \int_{c+1}^{c-1} ds \frac{1}{s^4} \\
 &= \frac{2\pi}{3} \frac{1}{s^3} \Big|_{c+1}^{c-1} \\
 &= \frac{2\pi}{3} \left( \frac{1}{(c-1)^3} - \frac{1}{(c+1)^3} \right) = \frac{2\pi}{3} \frac{6c^2 + 2}{(c^2 - 1)^3}
 \end{aligned}$$

Qui gettiamo la spugna: non c'è alcuna speranza per gli autori di raggiungere una forma chiusa per l'integrale che segue in tempi brevi. Ci limitiamo a riportare l'integrale implicito che rimarrebbe da calcolare, evidenziando la dipendenza di  $c$  da  $k'$ :

$$R = \frac{V_0^2}{6a_B^2\hbar k^2} \int_*^{+\infty} dk' \frac{1}{k'^2} \frac{3c^2(k') + 1}{(c^2(k') - 1)^3}$$

Integrali di questo tipo sono chiamati *integrali indicopleusti*: un'ottima tecnica risolutiva è consultabile al link <https://www.wolframalpha.com/>. Sull'estremo inferiore di integrazione c'è una certa arbitrarietà: esso deve corrispondere a un valore di  $k'$  tale da poter approssimare la funzione d'onda dell'elettrone uscente come un'onda piana, che ignora l'esistenza del potenziale coulombiano. Ricordiamo a tal proposito che deve valere la condizione

$$E_e \stackrel{!}{\gg} \text{Ry} \approx 13.6 \text{ eV}$$

per cui un buon limite inferiore è dato da

$$\hbar k' \simeq \sqrt{2m_e E_e} \stackrel{!}{\gg} 3.73 \text{ keV/c}$$

dove l'ultima stima è stata eseguita considerando

$$m_e \approx 0.5 \text{ MeV/c}^2$$

## 4.6 DUE FERMIONI IN UN POTENZIALE ARMONICO

Due particelle identiche, con spin  $s = 1/2$ , sono sottoposte ad un potenziale armonico unidimensionale.

- (1) Scrivere l'operatore hamiltoniano  $\hat{H}_0$  del sistema, quindi elencare gli stati del livello fondamentale e dei primi due eccitati.
- (2) Considerare un nuovo operatore hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

con l'aggiunta, rispetto alla situazione precedente, del termine perturbativo  $\hat{H}_1$

$$\hat{H}_1 = \alpha (\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2) \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2$$

e calcolare le correzioni al primo ordine alle energie dei livelli, utilizzando la teoria delle perturbazioni.

(1)

L'hamiltoniano  $\hat{H}_0$  è

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^2 \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}_i^2 \right)$$

Le particelle sono **identiche** e dotate di **spin**  $s = 1/2$ , quindi il loro stato complessivo sarà determinato da uno **stato orbitale** composto, grazie a un prodotto tensore, con uno **stato di spin**. Inoltre, dalla teoria del Capitolo 13, Parte I, ricordiamo che per i fermioni il **postulato di simmetrizzazione** impone uno **stato complessivo antisimmetrico** sotto lo scambio di particelle  $\Pi_{12}$ , cioè  $1 \leftrightarrow 2$ . Lo spin non entra nell'hamiltoniano, quindi determina una degenerazione e non modifica i livelli dello spettro di  $\hat{H}_0$ . Considerando lo stato orbitale, per il livello fondamentale e i primi due eccitati abbiamo gli stati riportati in Tabella 5. In generale, l'autovalore di energia

### autovalori autostati

---

$E_0 = \hbar\omega$	$ n_1 = 0, n_2 = 0\rangle$
$E_1 = 2\hbar\omega$	$ n_1 = 1, n_2 = 0\rangle$
$E_2 = 3\hbar\omega$	$ n_1 = 2, n_2 = 0\rangle$
	$ n_1 = 0, n_2 = 1\rangle$
	$ n_1 = 1, n_2 = 1\rangle$
	$ n_1 = 0, n_2 = 2\rangle$

**Tabella 5:** Elenchiamo gli stati relativi alla sola parte orbitale, per il livello fondamentale e i primi due eccitati.

$$E_n = E_{n_1, n_2} = \hbar\omega(n+1) \quad \text{con} \quad n = n_1 + n_2$$

è relativo agli stati orbitali

$$|n_1 = n, n_2 = 0\rangle \quad |n_1 = n-1, n_2 = 1\rangle \quad \dots \quad |n_1 = 0, n_2 = n\rangle$$

con degenerazione  $\text{Deg}(n) = n+1$ . Tali stati, eccetto quelli per cui  $n_1 = n_2$ , non sono né simmetrici né antisimmetrici sotto scambio di particelle, quindi

dobbiamo riscriverli in modo tale da ottenere, in ciascun autospazio di  $\hat{H}_0$ , una base che sia composta da vettori  $|*\rangle$  tali per cui valga

$$\Pi_{12} |*\rangle = \pm |*\rangle$$

ovvero simmetrici o antisimmetrici sotto lo scambio  $1 \leftrightarrow 2$ . Il livello fondamentale ha un solo stato orbitale, evidentemente simmetrico, mentre troviamo per il 1° eccitato gli stati

$$\frac{|1,0\rangle + |0,1\rangle}{\sqrt{2}} \quad \frac{|1,0\rangle - |0,1\rangle}{\sqrt{2}}$$

rispettivamente simmetrico e antisimmetrico, e per il 2° eccitato gli stati

$$|1,1\rangle \quad \frac{|2,0\rangle + |0,2\rangle}{\sqrt{2}} \quad \frac{|2,0\rangle - |0,2\rangle}{\sqrt{2}}$$

dove i primi due sono simmetrici e l'ultimo antisimmetrico. Per semplicità di notazione, abbiamo omesso di specificare  $n_1$  ed  $n_2$  e persevereremo nel farlo.

Rivolgiamo ora la nostra attenzione agli stati di spin. Lo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}_{\text{spin}}$  è 4-dimensionale, e ne riconosciamo una base in

$$\mathcal{A} = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$$

ovvero la base  $|s_1, s_2, \sigma_1, \sigma_2\rangle$ , dove  $s_1 = s_2 = 1/2$  sono fissati dalla traccia del problema. Tuttavia, questa base  $\mathcal{A}$  non è composta da autostati di  $\Pi_{12}$ , pertanto dobbiamo passare alla base

$$\mathcal{B} = \left\{ |\uparrow\uparrow\rangle, \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, |\downarrow\downarrow\rangle, \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right\}$$

cioè a quella dello spin totale  $|s_1, s_2, s, \sigma\rangle$ . Possiamo infatti riscrivere  $\mathcal{B}$  in questo modo, notando che i primi tre stati sono quelli del tripletto, simmetrici sotto scambio, mentre l'ultimo è il singoletto, antisimmetrico.

$$\mathcal{B} = \{|s=1, \sigma=1\rangle, |s=1, \sigma=0\rangle, |s=1, \sigma=-1\rangle, |s=0, \sigma=0\rangle\}$$

dove abbiamo conservato l'ordine dei *ket*, e li abbiamo semplicemente rinominati.

### **Livello fondamentale**

Utilizzando il postulato di simmetrizzazione, ci rendiamo conto facilmente che l'unico stato di spin accessibile per il livello fondamentale è quello di singoletto  $|s=0, \sigma=0\rangle$ , poiché la parte di stato orbitale è simmetrica, e lo stato deve essere complessivamente antisimmetrico:

$$|GS\rangle = |0,0\rangle \otimes |s=0, \sigma=0\rangle$$

Notiamo che, grazie all'indistinguibilità delle particelle, questo livello è non degenere: se le particelle 1, 2 fossero in qualche modo distinguibili, la degenerazione sarebbe 4.

**1° eccitato**

Sempre usando lo stesso principio, abbiamo gli stati

$$\begin{aligned} \frac{|1,0\rangle + |0,1\rangle}{\sqrt{2}} &\otimes |s=0, \sigma=0\rangle \\ \frac{|1,0\rangle - |0,1\rangle}{\sqrt{2}} &\otimes |s=1, \sigma=+1, 0, -1\rangle \end{aligned}$$

Per brevità, il secondo di questi ket ne indica in realtà 3 contemporaneamente, al variare dell'autovalore  $\sigma$ . Il livello è dunque 4 volte degenero. Se 1, 2 fossero state distinguibili, avremmo invece avuto un livello 8 volte degenero.

**2° eccitato**

Gli stati accessibili sono

$$\begin{aligned} |1,1\rangle &\otimes |s=0, \sigma=0\rangle \\ \frac{|2,0\rangle + |0,2\rangle}{\sqrt{2}} &\otimes |s=0, \sigma=0\rangle \\ \frac{|2,0\rangle - |0,2\rangle}{\sqrt{2}} &\otimes |s=1, \sigma=+1, 0, -1\rangle \end{aligned}$$

quindi l'indice di degenerazione è 5.

(2)

Adesso consideriamo l'operatore hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \sum_{i=1}^2 \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}_i^2 \right) + \alpha (\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2) \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2$$

dove  $\alpha$  è un parametro sufficientemente piccolo da permetterci di utilizzare la teoria delle perturbazioni. L'hamiltoniano perturbativo  $\hat{H}_1$  è composto da una parte che agisce soltanto sullo stato di spin, i.e. il prodotto scalare  $\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$ , e da una che agisce solo sullo stato orbitale, ovvero  $\hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2$ . Nella base  $|s_1, s_2, s, \sigma\rangle$ , il termine  $\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$  è diagonale, infatti, ponendo come di consueto  $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ , abbiamo

$$\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 = \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{s}}^2 - \hat{\mathbf{s}}_1^2 - \hat{\mathbf{s}}_2^2]$$

da cui segue che l'autovalore non dipende da  $\sigma$ :

$$\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 |s_1, s_2, s, \sigma\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left[ s(s+1) - \frac{3}{2} \right]$$

Nei due casi, abbiamo allora

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 |s=0, \sigma=0\rangle &= -\frac{3}{4}\hbar^2 |s=0, \sigma=0\rangle \\ \hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 |s=1, \sigma\rangle &= \frac{1}{4}\hbar^2 |s=1, \sigma\rangle \end{aligned}$$

Calcoliamo adesso le correzioni al primo ordine per i livelli trattati al punto precedente.

### Prima correzione al livello fondamentale

Questo livello è non degenere, quindi per trovare la correzione al primo ordine, scriviamo direttamente

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \langle 0, 0 | \otimes \langle s = 0, \sigma = 0 | \alpha \hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 | s = 0, \sigma = 0 \rangle \otimes | 0, 0 \rangle \\ &= -\frac{3}{4} \hbar^2 \alpha \langle 0, 0 | \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 | 0, 0 \rangle \\ &= -\frac{3}{4} \hbar^2 \alpha \langle 0 | \hat{x}^2 | 0 \rangle^2 \end{aligned}$$

Nell'ultimo passaggio spezziamo l'elemento di matrice, rammentando che  $\hat{x}_i^2$  opera soltanto sullo spazio di Hilbert orbitale relativo alla  $i$ -esima particella, e sfruttiamo il fatto che

$$\langle n_1 = 0 | \hat{x}_1^2 | n_1 = 0 \rangle = \langle n_2 = 0 | \hat{x}_2^2 | n_2 = 0 \rangle \equiv \langle n = 0 | \hat{x}^2 | n = 0 \rangle$$

Ricordando come

$$\hat{x} = \frac{l}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

ove  $l = \sqrt{\hbar/m\omega}$  è la lunghezza caratteristica dell'oscillatore armonico, si trova che

$$\langle n = 0 | \hat{x}^2 | n = 0 \rangle = \| \hat{x} | 0 \rangle \|^2 = \frac{l^2}{2} \| (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | 0 \rangle \|^2 = \frac{l^2}{2}$$

Dunque, se sostituiamo nell'equazione per  $E_0^{(1)}$  l'espressione appena scritta, otteniamo la correzione

$$E_0^{(1)} = -\frac{3}{16} \hbar^2 l^4 \alpha$$

### Prima correzione al 1° livello eccitato

Questo livello imperturbato è 4 volte degenere nell'energia, quindi bisogna controllare che l'hamiltoniano perturbativo sia diagonale nella base scelta. Se così non fosse, dovremmo cambiare base, in modo da diagonalizzarlo e usare le consuete equazioni che valgono anche nel caso senza degenerazioni. Notiamo che  $\hat{H}_1$  commuta con  $\hat{\mathbf{s}}$ , e quindi anche con  $\hat{\mathbf{s}}^2$ :  $[\hat{H}_1, \hat{\mathbf{s}}] = 0 \implies [\hat{H}_1, \hat{\mathbf{s}}^2] = 0$ . Allora, scrivendo la matrice di  $\hat{H}_1$  nella base (si noti l'ordine)

$$\left\{ \frac{|1, 0\rangle + |0, 1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |s = 0, \sigma = 0\rangle, \frac{|1, 0\rangle - |0, 1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |s = 1, \sigma = +1, 0, -1\rangle \right\}$$

costituita da autoket di  $\hat{\mathbf{s}}^2$ , allora tale matrice è diagonale a blocchi, con un blocco  $1 \times 1$  ed uno  $3 \times 3$ , relativi rispettivamente a  $s = 0$  e a  $s = 1$ . Non soltanto, ma essendo la base costituita anche da autoket di  $\hat{\mathbf{s}}$ , e quindi di  $\hat{s}_z$ , il blocco  $3 \times 3$  risulta diagonale, e siccome il calcolo dell'elemento di matrice non dipende da  $\sigma$ , è anche proporzionale a  $\mathbb{1}_3$ . Abbiamo pertanto

$$[H_1] = \begin{bmatrix} a & & & \\ & b & & \\ & & b & \\ & & & b \end{bmatrix}$$

Non resta che calcolare  $a$  e  $b$ .

$$\begin{aligned} a &= -\frac{3}{4}\hbar^2 \left\langle \frac{\langle 10| + \langle 01|}{\sqrt{2}} \left| \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 \right| \left( \frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}} \right) \right\rangle \\ &= -\frac{3}{8}\hbar^2 [ \langle 10| \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 |10\rangle + \langle 01| \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 |01\rangle + \langle 10| \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 |01\rangle + \langle 01| \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 |10\rangle ] \end{aligned}$$

Possiamo come prima spezzare questi elementi di matrice, e notare che gli ultimi due termini sono nulli: per parità si dimostra facilmente che

$$\langle 0| \hat{x}^2 |1\rangle = 0$$

in quanto

$$\mathcal{P} \hat{x}^2 \mathcal{P} = \hat{x}^2 \quad \mathcal{P} |n\rangle = (-1)^n |n\rangle$$

Allora

$$\begin{aligned} a &= -\frac{3}{4}\hbar^2 \alpha \langle 0| \hat{x}^2 |0\rangle \langle 1| \hat{x}^2 |1\rangle \\ &= -\frac{3}{4}\hbar^2 \alpha \cdot \frac{l^2}{2} \cdot \frac{3}{2}l^2 \\ &= -\frac{9}{16}\hbar^2 \alpha l^4 \end{aligned}$$

Infatti si dimostra in modo analogo a prima che

$$\begin{aligned} \langle 1| \hat{x}^2 |1\rangle &= \|\hat{x}|1\rangle\|^2 \\ &= \frac{l^2}{2} \left\| (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) |1\rangle \right\|^2 \\ &= \frac{l^2}{2} \left\| |0\rangle + \sqrt{2} |1\rangle \right\|^2 = \frac{3}{2}l^2 \end{aligned}$$

Per trovare  $b$ , i calcoli sono identici: cambia soltanto la parte di spin, relativa ora a  $s = 1$ , mentre il segno – della parte orbitale non è influente, poiché i termini misti, come abbiamo visto, risultano nulli.

$$b = +\frac{3}{16}\hbar^2 \alpha l^2$$

La degenerazione è risolta solo parzialmente: dei 4 stati iniziali, i 3 stati con  $s = 1$  continuano ad essere degeneri nell'energia.

### **Prima correzione al 2° livello eccitato**

Consideriamo la base

$$\{|1\rangle, |2\rangle, |+\rangle, |0\rangle, |-\rangle\}$$

dove abbiamo dato dei nomi più sintetici ai ket sopra riportati, conservando l'ordine precedente. Ancora possiamo dire che  $\hat{H}_1$  commuta con  $\hat{s}^2$ , quindi la matrice di  $\hat{H}_1$ , scritta in questa base, deve essere diagonale a blocchi, con un blocco  $2 \times 2$  relativo ai due ket che riportano, nella parte di spin, il singoletto, e uno  $3 \times 3$ , relativo al tripletto  $s = 1$ . Poiché  $[\hat{H}_1, \hat{s}_z] = 0$ , la sottomatrice  $3 \times 3$  è diagonale e, sempre ragionando come prima, proporzionale a  $\mathbb{1}_3$ , ma

si noti bene come non sia a priori assicurato che la sottomatrice  $2 \times 2$  risulti diagonale.

$$[H_1] = \begin{bmatrix} c_1 & d & & \\ d^* & c_2 & & \\ & & b & \\ & & & b \\ & & & b \end{bmatrix}$$

"Fortunatamente", nel nostro caso vale  $d = 0$ : per parità

$$\langle 11 | \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 | 20 \rangle = \langle 1 | \hat{x}^2 | 2 \rangle \langle 1 | \hat{x}^2 | 0 \rangle = 0$$

In realtà, questo risultato si può raggiungere anche in altri modi, ad esempio passando in rappresentazione delle coordinate ed integrando.

Gli elementi  $b, c_1, c_2$  si trovano con ragionamenti del tutto identici a quelli di prima, e con un po' di noia

$$\begin{aligned} c_1 &= -\frac{3}{4}\hbar^2\alpha \langle 1 | \hat{x}^2 | 1 \rangle^2 \\ &= -\frac{27}{16}\hbar^2\alpha l^4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_2 &= -\frac{3}{4}\hbar^2\alpha \cdot \frac{1}{2} \left[ \langle 20 | \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 | 20 \rangle \langle 02 | \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 | 02 \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle 20 | \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 | 02 \rangle + \langle 02 | \hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 | 20 \rangle \right] \\ &= -\frac{3}{4}\hbar^2\alpha \left[ \langle 2 | \hat{x}^2 | 2 \rangle \langle 0 | \hat{x}^2 | 0 \rangle + \langle 2 | \hat{x}^2 | 0 \rangle^2 \right] \\ &= -\frac{3}{4}\hbar^2\alpha l^4 \left( \frac{5}{4} + \frac{1}{2} \right) \\ &= -\frac{21}{16}\hbar^2\alpha l^4 \end{aligned}$$

$$b = +\frac{7}{16}\hbar^2\alpha l^4$$

Il livello imperturbato era 5 volte degenere, ma la perturbazione esegue una risoluzione parziale: i due stati di singoletto si separano, ciascuno costituendo un sottolivello non degenere, mentre i tre stati di tripletto finiscono in un sottolivello con degenerazione 3.

## 4.7 DUE SPIN 1 IN POTENZIALE ARMONICO ISOTROPO

Consideriamo due particelle identiche di massa  $m$  e spin 1 soggette ad un potenziale armonico tridimensionale,

$$V(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2) = \frac{1}{2}m\omega^2(r_1^2 + r_2^2)$$

con  $r_i = |\mathbf{x}_i|$ .

- (1) Si scriva lo spettro di  $\hat{H}$ , discutendo la degenerazione dello stato fondamentale e quella del primo livello eccitato, e si identifichino i relativi autostati.
- (2) Si scriva la correzione al primo ordine all'energia del primo livello eccitato se aggiungiamo la perturbazione

$$W = \lambda(2\hat{x}_1 + 3\hat{y}_1 + 4\hat{z}_1)(2\hat{x}_2 + 3\hat{y}_2 + 4\hat{z}_2)$$

### SOLUZIONE

- (1) L'hamiltoniana è

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2r_1^2 + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2r_2^2$$

Le energie dipendono dai *set* di numeri quantici di ciascuna particella,  $\mathbf{n}_1 = (n_{x1}, n_{y1}, n_{z1})$  e  $\mathbf{n}_2 = (n_{x2}, n_{y2}, n_{z2})$ . Ogni particella  $i = 1, 2$  dà un contributo all'energia

$$E_n^{(i)} = \hbar\omega \left( n_{xi} + n_{yi} + n_{zi} + \frac{3}{2} \right)$$

pertanto

$$E_n = E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega(n + 3)$$

dove  $n$  è la somma dei sei numeri quantici, tre per ogni particella.

In particolare lo stato fondamentale ha energia

$$E_0 = 3\hbar\omega$$

mentre il primo eccitato corrisponde a quando uno solo dei numeri quantici è uguale ad 1 e tutti gli altri sono 0

$$E_1 = 4\hbar\omega$$

Le particelle hanno spin intero, dunque devono occupare stati globalmente simmetrici per scambio di 1 e 2. Occorre pertanto esprimere gli stati (separatamente nella parte orbitale e quella di spin) in modo che abbiano simmetria definita sotto scambio.

Lo stato dato dal prodotto tensore degli autostati su ogni dimensione, che chiamiamo  $|\mathbf{n}_1; \mathbf{n}_2\rangle = |n_{x1}, n_{y1}, n_{z1}; n_{x2}, n_{y2}, n_{z2}\rangle$ , non presenta in generale buone proprietà di simmetria. Il fondamentale è simmetrico per scambio

$$|\mathbf{0}; \mathbf{0}\rangle = |000; 000\rangle$$

Mentre il primo autospazio eccitato può essere generato da 3 stati simmetrici e 3 antisimmetrici per scambio

$$\begin{aligned} |\text{sym}_x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|100; 000\rangle + |000; 100\rangle) \\ |\text{sym}_y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|010; 000\rangle + |000; 010\rangle) \\ |\text{sym}_z\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|001; 000\rangle + |000; 001\rangle) \\ |\text{asym}_x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|100; 000\rangle - |000; 100\rangle) \\ |\text{asym}_y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|010; 000\rangle - |000; 010\rangle) \\ |\text{asym}_z\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|001; 000\rangle - |000; 001\rangle) \end{aligned}$$

Allo stesso modo il prodotto tensore delle parti di spin  $|1\sigma_1; 1\sigma_2\rangle$ , dove  $\sigma_i$  è la proiezione di spin lungo  $\bar{\mathbf{z}}$  della particella  $i$ , non è in generale autostato dell'operatore di permutazione. Una base alternativa dello spazio dello stato di spin è quella dello spin totale: poiché  $\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} = \mathbf{0} \oplus \mathbf{1} \oplus \mathbf{2}$ , la base dello spin totale sarà data da un singoletto, un tripletto e un quintupletto:

$$\{|S_T, \sigma_T\rangle\} \quad S_T = 0, 1, 2$$

e in virtù di quanto esposto in Sez. 9.2.3, Parte I è composta da stati a simmetria per scambio definita. Infatti dalla proprietà

$$C_{M|m_1 m_2}^{J|j_1 j_2} = (-1)^{j_1 + j_2 - J} C_{M|m_2 m_1}^{J|j_2 j_1}$$

nel caso  $j_1 = j_2 = 1$  si ottiene che per  $J = S_T$  pari la combinazione che dà luogo a  $|S_T, \sigma_T\rangle$  è simmetrica sotto scambio; mentre per  $S_T$  dispari lo stato  $|S_T, \sigma_T\rangle$  è antisimmetrico.

$$|S_T, \sigma_T\rangle = \begin{cases} |2, \sigma_T\rangle & \sigma_T = -2, \dots, 2 \quad \text{è simmetrico} \\ |1, \sigma_T\rangle & \sigma_T = -1, 0, 1 \quad \text{è antisimmetrico} \\ |0, 0\rangle & \text{è simmetrico} \end{cases}$$

Questa proprietà può essere verificata controllando esplicitamente la struttura di ciascuno dei 9 stati in funzione della base originale, consultando una tabella dei coefficienti di C-G. Vale la pena notare che questa è solo una delle possibilità: avremmo potuto scegliere una base diversa, l'importante è che sia ortonormale (ci servirà nel prossimo punto) e con simmetria definita. Per esempio dalla base originale  $|1\sigma_1; 1\sigma_2\rangle \equiv |\sigma_1; \sigma_2\rangle$  si poteva passare a

$$\begin{array}{ccc} |0; 0\rangle & |1; 1\rangle & |-1; 1\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|0; -1\rangle \pm | -1; 0\rangle) & \frac{1}{\sqrt{2}}(|0; 1\rangle \pm |1; 0\rangle) & \frac{1}{\sqrt{2}}(|1; -1\rangle \pm | -1; 1\rangle) \end{array}$$

Quelli della prima riga e quelli della seconda con il segno + sono simmetrici, quelli con il segno - antisimmetrici: il numero di stati simmetrici ed antisimmetrici è coerente. Nel seguito useremo tuttavia la base dello spin

totale.

Perché lo **stato fondamentale** sia globalmente simmetrico sotto scambio, essendo simmetrica la parte orbitale, deve esserlo anche quella di spin. Pertanto una base di stati possibili è

$$|0;0\rangle \otimes |2,\sigma_T\rangle \quad \text{oppure} \quad |0;0\rangle \otimes |0,0\rangle$$

per un totale di  $5 + 1 = 6$  stati possibili.

Affinché il **primo eccitato** sia globalmente simmetrico si può scegliere invece

$$\underbrace{|\text{sym}_i\rangle \otimes |2,\sigma_T\rangle}_{3 \times 5 = 15} \quad \underbrace{|\text{asym}_i\rangle \otimes |1,\sigma_T\rangle}_{3 \times 3 = 9} \quad \underbrace{|\text{sym}_i\rangle \otimes |0,0\rangle}_3 \quad (4.12)$$

per un totale di  $15 + 9 + 3 = 27$  stati.

(2) La perturbazione si può scrivere come

$$W = \lambda(\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{u})(\mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{u})$$

con  $\mathbf{u} = (2, 3, 4)$ . Essendo  $\mathbf{u}$  un vettore fissato, la perturbazione non è invariante sotto rotazioni globali. Tuttavia un'osservazione utile riguarda il fatto che l'oscillatore isotropo tridimensionale è invariante per rotazioni: siamo liberi di ridefinire gli assi e gli autostati avranno una forma del tutto uguale a quelli trovati nella parte precedente. Se riscriviamo  $W$  come

$$W = \lambda'(\mathbf{x}_1 \cdot \bar{\mathbf{u}})(\mathbf{x}_2 \cdot \bar{\mathbf{u}})$$

con  $\bar{\mathbf{u}} = (2, 3, 4)/\sqrt{29}$  versore di norma unitaria, e  $\lambda' = \sqrt{29}\lambda$ , nulla ci vieta di prendere un nuovo set di assi cartesiani  $(\bar{\mathbf{x}}', \bar{\mathbf{y}}', \bar{\mathbf{z}}')$  ruotati rispetto a quelli originali, e tali che  $\bar{\mathbf{z}}' = \bar{\mathbf{n}}$ . Nella nuova base l'hamiltoniana imperturbata resta uguale ma la perturbazione si semplifica:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1'^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2r_1'^2 + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2'^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2r_2'^2 + \lambda'\hat{z}'_1\hat{z}'_2$$

Come base del primo livello eccitato possiamo prendere la base uguale a quella composta di 27 stati di Eq. (4.12), considerando però  $|\text{sym}_{i'}\rangle$  e  $|\text{asym}_{i'}\rangle$  definiti a partire dagli stati prodotto riferiti ai nuovi assi.

Mostriamo adesso che la matrice della perturbazione è diagonale in questa base. A tal fine è utile usare gli operatori di creazione e distruzione

$$\hat{z}'_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_{z'i}^\dagger + \hat{a}_{z'i}) \quad i = 1, 2$$

Partiamo notando che la perturbazione agisce solo sulle coordinate: poiché la base dello spin totale è ortonormale,  $W$  avrà elementi di matrice non nulli soltanto tra stati con uguale stato di spin  $|S_T, \sigma_T\rangle$ . Inoltre ogni qual volta si considera un elemento di matrice di  $W$  che coinvolge uno degli stati

$$\left\{ |\text{sym}_{x'}\rangle, |\text{sym}_{y'}\rangle, |\text{asym}_{x'}\rangle, |\text{asym}_{y'}\rangle \right\}$$

allora tale elemento è nullo. Il motivo si può vedere usando il fatto che per tali stati si ha  $n_{z'1} = n_{z'2} = 0$ . Chiamiamo infatti  $|n_{z'1} = 0, n_{z'2} = 0\rangle$  un

generico stato con  $n_{z'1} = n_{z'2} = 0$ . Allora per un generico *bra* del primo eccitato  $\langle *|$  si ha

$$\begin{aligned}\langle *|\hat{W}|n_{z'1}=0, n_{z'2}=0\rangle &\propto \left\langle *\left| \left(\hat{a}_{z'1}^\dagger + \hat{a}_{z'1}\right) \left(\hat{a}_{z'2}^\dagger + \hat{a}_{z'2}\right) \right| n_{z'1}=0, n_{z'2}=0 \right\rangle \\ &= \left\langle *\left| \hat{a}_{z'1}^\dagger \hat{a}_{z'2}^\dagger + \hat{a}_{z'1}^\dagger \hat{a}_{z'2} + \hat{a}_{z'1} \hat{a}_{z'2}^\dagger + \hat{a}_{z'1} \hat{a}_{z'2} \right| 0, 0 \right\rangle \\ &= \langle *|n_{z'1}=1, n_{z'2}=1\rangle = 0\end{aligned}$$

dove l'ultimo prodotto scalare è nullo poiché nessuno degli stati del primo eccitato ha  $n_{z'1} = 1, n_{z'2} = 1$ .

Gli elementi non matrice non banali per la parte orbitale coinvolgono soltanto  $|\text{sym}_{z'}\rangle$  e  $|\text{asym}_{z'}\rangle$ :

$$\begin{aligned}\langle \text{sym}_{z'} |\hat{W}|\text{sym}_{z'} \rangle &= \lambda' \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{1}{2} \langle \text{sym}_{z'} |\left(\hat{a}_{z'1}^\dagger + \hat{a}_{z'1}\right) \left(\hat{a}_{z'2}^\dagger + \hat{a}_{z'2}\right) |\text{sym}_{z'} \rangle \\ &= \lambda' \frac{\hbar}{4m\omega} \left[ \langle 000; 001 | \hat{a}_{z'1}^\dagger \hat{a}_{z'2}^\dagger | 001, 000 \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle 001, 000 | \hat{a}_{z'1}^\dagger \hat{a}_{z'2} | 000, 001 \rangle \right] \\ &= \lambda' \frac{\hbar}{2m\omega}\end{aligned}$$

E analogamente

$$\langle \text{asym}_{z'} |\hat{W}|\text{asym}_{z'} \rangle = -\lambda' \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Mentre

$$\langle \text{asym}_{z'} |\hat{W}|\text{sym}_{z'} \rangle = 0$$

Il calcolo di questi ultimi due elementi di matrice è analogo a quello sopra ma cambiano rispettivamente entrambi oppure uno solo dei due segni dentro la parentesi quadra. Adesso, grazie all'ortogonalità degli stati di spin concludiamo che la matrice  $27 \times 27$  è diagonale: sono connessi gli stati con uguale parte orbitale (eccitata lungo  $z$  come appena visto) ed uguale parte di spin. Concludiamo che i sei stati

$$|\text{sym}_{z'}\rangle \otimes |0,0\rangle \quad |\text{sym}_{z'}\rangle \otimes |2,\sigma_T\rangle \quad \sigma_T = -2, \dots, 2$$

subiscono uno *shift* in energia pari a

$$E_{\text{sym}}^{(1)} = \lambda' \frac{\hbar}{2m\omega}$$

mentre i 3 stati

$$|\text{asym}_{z'}\rangle \otimes |1,\sigma_T\rangle \quad \sigma_T = -1, 0, 1$$

subiscono una correzione

$$E_{\text{asym}}^{(1)} = -\lambda' \frac{\hbar}{2m\omega}$$

I restanti 18 stati non hanno variazioni al primo ordine.

## 4.8 OSCILLATORE CON PERTURBAZIONE ESPONENZIALE

Si consideri un oscillatore armonico unidimensionale

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

soggetto, per tempi  $t \geq 0$ , ad una perturbazione data da una forza uniforme e di intensità esponenzialmente decrescente nel tempo:

$$F(t) = -F_0 e^{-t/\tau}$$

- (1) Si calcoli, ipotizzando che il sistema occupasse lo stato fondamentale  $|0\rangle$  al tempo  $t = 0$ , la probabilità asintotica di transizione nel primo stato eccitato:

$$P_{0 \rightarrow 1}(t \rightarrow \infty)$$

- (1) L'hamiltoniana di perturbazione si scrive facilmente come:

$$\hat{H}' = \hat{x}F_0 e^{-t/\tau}$$

e quindi l'hamiltoniana complessiva è

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'(t)$$

dove  $\lambda$  è il parametro (adimensionale) perturbativo. L'oscillatore armonico unidimensionale ha spettro non degenere, quindi possiamo applicare la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo direttamente. Nel Cap. 11 avevamo visto che, data una base  $|n\rangle$  di autostati di  $\hat{H}_0$ , relativi agli autovalori  $\epsilon_n$ , questa è completa a ogni istante; ha quindi senso espandere il generico  $|\psi(t)\rangle$  in termini di questa base

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-i\epsilon_n t} |n\rangle$$

dove i termini  $a_n(t)e^{-i\epsilon_n t/\hbar}$  sono i coefficienti istantanei di espansione di  $|\psi(t)\rangle$ . Inserendo quest'espansione nell'Equazione di Schrödinger, si trova l'Eq. (11.16). Poi, sviluppando in serie perturbativa i coefficienti  $a_n(t)$  nel parametro  $\lambda$  si trova, al primo ordine:

$$\dot{a}_m^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n a_n^{(0)}(t) e^{i\omega_{mn} t} \langle m | \hat{H}' | n \rangle$$

con  $\omega_{mn} \equiv (\epsilon_m - \epsilon_n)/\hbar$ . Partiamo dallo stato fondamentale, quindi  $a_n^{(0)}(t) = \delta_{n,0}$ ; lo stato di arrivo è il primo eccitato, quindi impostiamo  $m = 1$ . Si trova che

$$\begin{aligned} a_1^{(1)}(t) &= \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega t} \langle 1 | \hat{x} F_0 e^{-t'/\tau} | 0 \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} F_0 \int_0^t dt' e^{(i\omega - \omega')t'} \langle 1 | \hat{x} | 0 \rangle \end{aligned}$$

con  $\omega' \equiv 1/\tau$ . Il calcolo dell'elemento di matrice, al solito, si esegue tramite gli operatori di creazione e distruzione:

$$\langle 1 | \hat{x} | 0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle 1 | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | 0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

e l'integrale che rimane da calcolare è banale:

$$a_1^{(1)}(t) = \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} F_0 \int_0^t dt' e^{(i\omega - \omega')t'} = \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} F_0 \frac{e^{(i\omega - \omega')t} - 1}{i\omega - \omega'}$$

Da qui si ha che in prima approssimazione la probabilità di transizione al primo livello eccitato è

$$\begin{aligned} P_{0 \rightarrow 1}(t) &\simeq \lambda^2 |a_1^{(1)}(t)|^2 + \mathcal{O}(\lambda^4) \\ &= \frac{\lambda^2 F_0^2}{2m\omega\hbar} \frac{|e^{i\omega t} e^{-t/\tau} - 1|^2}{\omega^2 + 1/\tau^2} \\ &= \frac{\lambda^2 F_0^2}{2m\omega\hbar} \frac{1}{\omega^2 + 1/\tau^2} \left( e^{-2t/\tau} - 2 \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} e^{-t/\tau} + 1 \right) \\ &= \frac{\lambda^2 F_0^2}{2m\omega\hbar} \frac{1}{\omega^2 + 1/\tau^2} \left( e^{-2t/\tau} - 2 \cos(\omega t) e^{-t/\tau} + 1 \right) \end{aligned}$$

Prendiamone il limite per  $t \rightarrow +\infty$ : si ottiene

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} P_{0 \rightarrow 1}(t) = \frac{\lambda^2 F_0^2}{2m\omega\hbar} \frac{1}{\omega^2 + 1/\tau^2}$$

## 4.9 ELETTRONE CONTRO ATOMO DI IDROGENO

Consideriamo un elettrone  $e_{(i)}^-$  inizialmente libero che incide su un atomo di idrogeno, costituito da un protone e da un altro elettrone. Indichiamo con  $m$  la massa dell'elettrone, con  $m_p$  la massa del protone e con  $e = |e|$  la carica elettronica, di modo che la carica di un elettrone sia  $-e$ . Dal momento che  $m_p \gg m$ , approssimeremo la posizione del protone come fissa, e la useremo come origine. Indichiamo con  $\mathbf{r}$  la posizione dell'elettrone incidente  $e_{(i)}^-$  rispetto al nucleo, mentre con  $\mathbf{r}_a$  quella dell'elettrone atomico  $e_{(a)}^-$ , sempre riferita rispetto al nucleo.

Assumeremo sempre che l'energia iniziale dell'elettrone  $e_{(i)}^-$  incidente sia insufficiente a ionizzare l'atomo, ovvero che dopo il processo d'urto l'atomo non sia "rotto", ma sopravviva come uno stato legato protone-elettrone.

Inizialmente  $e_{(i)}^-$  è libero, mentre l'atomo si trova nello stato fondamentale  $|1\rangle$ , con  $n = 1$ . Lo stato iniziale si scrive dunque come prodotto tensore dello stato dei due sottosistemi:

$$|\psi_1\rangle = |\mathbf{p}, 1\rangle$$

In rappresentazione delle coordinate, lo stato di particella libera di  $e_{(i)}^-$  si può scrivere come

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar}$$

poiché abbiamo libertà sulla scelta della normalizzazione. In questo caso, stiamo scegliendo quella per cui

$$\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (4.13)$$

Chiaramente  $\mathbf{p}$  è l'impulso iniziale dell'elettrone incidente. L'elettrone, una volta diffuso, osservato lontano dalla zona di interazione in seguito al processo d'urto, si troverà nello stato  $|\mathbf{p}'\rangle$ , in quanto nell'urto possono variare sia la direzione sia il modulo del suo momento lineare. In generale, lo stato finale del sistema complessivo sarà

$$|\psi\rangle = |\mathbf{p}', n\rangle$$

dato che è possibile, nel caso di **scattering anelastico**, eccitare l'atomo; questo, ovviamente, non può che accadere a spese dell'energia dell'elettrone incidente, che pertanto avrà in uscita un impulso di modulo minore rispetto a quello posseduto inizialmente.

Utilizzando la normalizzazione precedentemente citata, abbiamo

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle = e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r} / \hbar}$$

Soltanto nel caso di **scattering elastico** vale

$$p = p'$$

ove  $p = |\mathbf{p}|$ , mentre  $p' = |\mathbf{p}'|$ . Questo corrisponde alla situazione fisica in cui l'impulso dell'elettrone cambia solo la propria direzione. È evidente che, per conservazione dell'energia, un urto elastico non può portare l'atomo in uno stato eccitato. In tal caso possiamo scrivere

$$|\psi_{\text{el}}\rangle = |\mathbf{p}', 1\rangle \quad \text{con} \quad p' = p$$

Utilizziamo la **Regola d'Oro di Fermi** per il tasso di probabilità infinitesimo  $dR$ :

$$dR = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p}', n | \hat{U} | \mathbf{p}, 1 \rangle|^2 \delta\left(\frac{\mathbf{p}'^2 - \mathbf{p}^2}{2m} + E_n - E_1\right) \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (4.14)$$

dove la *delta* di Dirac assicura la conservazione dell'energia. Compare l'operatore potenziale, relativo alla funzione vettoriale del potenziale coulombiano

$$U(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa}) = -\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\kappa}|}$$

Imponiamo adesso che nella Eq. (4.14) lo stato **incidente** sia scritto con una normalizzazione diversa dalla (4.13), ovvero quella di **flusso unitario** di probabilità, per cui vale

$$|\mathbf{J}^{(i)}| = 1 \quad (4.15)$$

Scegliendo questa, la rappresentazione in coordinate di  $|\mathbf{p}\rangle$  differisce da quella riportata sopra per la costante moltiplicativa  $\sqrt{m/p} = v^{-1/2}$ :

$$\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \sqrt{\frac{m}{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar}$$

Inoltre, considerando  $|\mathbf{p}, 1\rangle$  normalizzato in questo modo nella (4.14), otteniamo al posto del *rate* di probabilità  $dR$  la probabilità per unità di tempo e di flusso, ovvero la sezione d'urto  $d\sigma$ , dal momento che vale

$$dR = |\mathbf{J}^{(i)}| d\sigma \quad (4.16)$$

Al contrario, la normalizzazione dello stato finale di particella libera  $|\mathbf{p}'\rangle$  è del tutto irrilevante, poiché normalizzando  $|\mathbf{p}'\rangle$  in modo diverso dovremmo aggiungere anche il modulo quadro dello stesso termine di normalizzazione anche al denominatore dello spazio delle fasi, pertanto il termine si eliderebbe sotto ogni scelta. Abbiamo quindi ottenuto

$$\begin{aligned} d\sigma &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p}', n | \hat{U} | \mathbf{p}_u, 1 \rangle|^2 \delta\left(\frac{\mathbf{p}'^2 - \mathbf{p}^2}{2m} + E_n - E_1\right) \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \\ &= \frac{2\pi m}{\hbar p} |\langle \mathbf{p}', n | \hat{U} | \mathbf{p}, 1 \rangle|^2 \delta\left(\frac{\mathbf{p}'^2 - \mathbf{p}^2}{2m} + E_n - E_1\right) \frac{p'^2 dp' d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned} \quad (4.17)$$

ove indichiamo con  $|\mathbf{p}_u\rangle$  il *ket* normalizzato secondo la regola (4.15), inoltre utilizziamo

$$d^3 \mathbf{p}' = p'^2 dp' d\Omega'$$

Integrando nella variabile  $p'$  possiamo rimuovere la *delta*: il valore di  $p'$  è vincolato dalla conservazione dell'energia al salto energetico  $E_n - E_1$  relativo ai livelli atomici

$$\frac{p'^2 - p^2}{2m} = E_n - E_1$$

Ricordando le proprietà della *delta* e imponendo la positività di  $p' = |\mathbf{p}'|$  troviamo

$$\begin{aligned} \delta\left(\frac{\mathbf{p}'^2 - \mathbf{p}^2}{2m} + E_n - E_1\right) &= 2m\delta(p'^2 - p^2 + 2mE_n - 2mE_1) \\ &= \frac{2m}{p'} \delta\left(p' - \sqrt{p^2 + 2mE_1 - 2mE_n}\right) \end{aligned}$$

dove la disequazione  $p' > 0$  è stata usata tra la prima e la seconda riga, in modo da eliminare il termine  $(2m/p')\delta(p' + \sqrt{p^2 + 2mE_1 - 2mE_n})$ .

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \frac{p'}{p} \left| \int d^3\mathbf{r} \int d^3\boldsymbol{\kappa} U(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi_n^*(\boldsymbol{\kappa}) \psi_1(\boldsymbol{\kappa}) \right|^2 d\Omega' \quad (4.18)$$

Soltanto da adesso imponiamo che lo scattering sia **elastico**: in tal caso  $p' = p$  e sostituiammo a  $\psi_n^*(\boldsymbol{\kappa})$  la funzione  $\psi_1^*(\boldsymbol{\kappa})$ , quindi

$$d\sigma_{\text{el}} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int d^3\mathbf{r} \int d^3\boldsymbol{\kappa} U(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} |\psi_1(\boldsymbol{\kappa})|^2 \right|^2 d\Omega' \quad (4.19)$$

Nella sezione d'urto differenziale compare la Trasformata di Fourier del potenziale  $U(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa})$ . Definiamo

$$\tilde{U}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\kappa}) \equiv \int d^3\mathbf{r} U(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$$

e in questo modo la (4.19) assume una forma più breve:

$$d\sigma_{\text{el}} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int d^3\boldsymbol{\kappa} \tilde{U}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\kappa}) |\psi_1(\boldsymbol{\kappa})|^2 \right|^2 d\Omega' \quad (4.20)$$

Il potenziale coulombiano soddisfa l'**Equazione di Poisson**:

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa}) = -4\pi\rho(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa})$$

ove  $U(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa}) = e\Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa})$  e la densità volumica di carica si scrive grazie a delle *delta* di Dirac, in quanto consideriamo protone ed elettrone come cariche puntiformi:

$$\rho(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa}) = e\delta(\mathbf{r}) - e\delta(\mathbf{r} - \boldsymbol{\kappa})$$

Tenendo conto dell'interazione dell'elettrone con l'atomo di idrogeno, in  $\rho(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa})$  compaiono solo i termini relativi alla posizione del protone, fermo nell'origine, e di  $e_{(a)}^-$ : ciò è analogo ad affermare che nel potenziale  $U(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa})$  si leggono le interazioni  $e_{(i)}^-$  – protone ed  $e_{(i)}^- - e_{(a)}^-$ , ma  $e_{(i)}^-$  non interagisce con se stesso.

Sappiamo che  $\mathcal{F}[\nabla^2 f(\mathbf{r})] = -q^2 \mathcal{F}[f(\mathbf{r})]$ , dove  $q = |\mathbf{q}|$ , perciò

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r} \nabla^2 U(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} &= -q^2 \int d^3\mathbf{r} U(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \\ &= -4\pi e \int \rho(\mathbf{r}, \boldsymbol{\kappa}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{r} \\ &= -4\pi e^2 \left( 1 - e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\kappa}/\hbar} \right) \end{aligned}$$

Questo equivale a scrivere

$$\tilde{U}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\kappa}) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \left( 1 - e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\kappa}/\hbar} \right)$$

Sostituendo nella (4.20) otteniamo

$$d\sigma_{\text{el}} = \frac{4m^2e^4}{\hbar^2 q^4} \left| 1 - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\boldsymbol{\kappa} e^{-i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\kappa}} |\psi_1(\boldsymbol{\kappa})|^2 \right|^2 d\Omega' \quad (4.21)$$

### 4.9.1 Soluzione approssimata in due regimi estremali per $q$

Arrivati a questo punto, risolviamo il problema in due regimi contrapposti ed effettuando delle approssimazioni. Nello scattering elastico sappiamo che vale

$$q = 2p \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (4.22)$$

Consideriamo i due casi

- (1) **grandi**  $q$
- (2) **piccoli**  $q$

(1) Dalla relazione (4.22) è facile intuire che, una volta fissato  $p$ , a “piccoli”  $q$  corrispondano angoli “piccoli”. Permettiamoci dunque di linearizzare il seno:

$$q \simeq p\theta$$

Per valutare se questa quantità sia piccola o no, è necessario effettuare un confronto con una scala di grandezza propria del sistema che stiamo analizzando. Pensando all’atomo di idrogeno, il parametro che per primo potrebbe sovvenire è il raggio di Bohr, e in effetti questa è una buona idea: riscriviamo l’equazione precedente come

$$\frac{qr_B}{\hbar} \simeq \frac{p\theta r_B}{\hbar} = \frac{mv\theta r_B}{\hbar}$$

sostituendo  $p = mv$ , da qui la condizione di piccoli  $q$  è

$$mv \frac{\theta r_B}{\hbar} \ll 1 \implies v \ll \frac{\hbar}{m\theta r_B} \quad (4.23)$$

Riconosciamo in  $v_0 \equiv \hbar/(mr_B) = \alpha c$  la velocità tipica dell’elettrone nell’atomo di idrogeno. Se è vero che

$$v \ll v_0 = \frac{\hbar}{mr_B} \quad (4.24)$$

dal momento che questa seconda diseguaglianza è analoga alla (4.23) per  $\theta = 1$  rad, un angolo decisamente non piccolo, allora *a fortiori* sarà verificata la condizione (4.23) per tutti gli angoli piccoli, anzi più in generale per tutti gli angoli  $\theta < 1$  rad.

Ipotizziamo quindi che l’elettrone incidente  $e_{(i)}^-$  proceda ad una velocità minore rispetto alla scala tipica di velocità dell’elettrone atomico  $e_{(a)}^-$ , ovvero che sia vera la diseguaglianza (4.24). Per  $q$  piccoli espandiamo in serie di Taylor l’esponenziale in Eq. (4.21)

$$\begin{aligned} e^{-i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu}/\hbar} &= 1 - i\left(\frac{\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu}}{\hbar}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu}}{\hbar}\right)^2 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu}}{\hbar}\right)^3\right) \\ &= 1 - i\xi - \frac{1}{2}\xi^2 + \mathcal{O}(\xi^3) \end{aligned}$$

ove per chiarezza abbiamo battezzato  $\xi \equiv \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu}/\hbar$ . Il termine di ordine zero dello sviluppo elimina l’1 presente nell’integrale della (4.21); il termine

di prim'ordine, dispari su  $\mathbb{R}^3$ , moltiplica la funzione pari  $|\psi_0(\boldsymbol{\nu})|^2$ , quindi stiamo integrando una funzione complessivamente dispari sull'intero dominio  $\mathbb{R}^3$ : questo termine – e ancor più in generale ciascun termine di ordine dispari – porta un contributo nullo

$$-i \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu}}{\hbar} |\psi_0(\boldsymbol{\nu})|^2 d^3 \boldsymbol{\nu} = 0$$

Il primo contributo non nullo è dato dal termine di second'ordine: trascurando ordini superiori in  $\xi$  si trova

$$\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega'} \simeq \frac{4m^2e^2}{\hbar^4 q^4} \left| \int \frac{1}{2} (\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu})^2 |\psi_1(\boldsymbol{\nu})|^2 d^3 \boldsymbol{\nu} \right|^2$$

Saltiamo i calcoli: l'integrale si può ridurre a

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega'} &\simeq \frac{m^2 e^4}{9\hbar^4} \left| \int \nu^2 |\psi_1(\boldsymbol{\nu})|^2 d^3 \boldsymbol{\nu} \right|^2 \\ &= \frac{1}{9r_B^2} \left| \int \nu^2 |\psi_1(\boldsymbol{\nu})|^2 d^3 \boldsymbol{\nu} \right|^2 \end{aligned}$$

dove  $\nu = |\boldsymbol{\nu}|$  e rammentiamo che, nel sistema metrico CGS,

$$r_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Riconosciamo poi a secondo membro il modulo quadro di un integrale calcolato in Sez. 7.1.3, cioè  $\langle \nu^2 \rangle = 3r_B^2$ , allora per  $q$  **piccoli** troviamo

$$\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega'} \simeq \frac{r_B^2}{3}$$

(2) Per **grandi**  $q$ , ovvero per

$$\frac{qr_B}{\hbar} \gg 1$$

la fase  $e^{-i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu}/\hbar}$  in Eq. (4.21) oscilla in modo molto violento, quindi in quella equazione possiamo eseguire una approssimazione e trascurare il contributo dell'integrale in cui la fase compare. Otteniamo come risultato

$$\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega'} = \frac{4m^2e^4}{\hbar^2 q^4}$$

Utilizziamo infine le relazioni (4.22) e  $p = mv$  per trovare la **Sezione d'urto differenziale di Rutherford**:

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{\text{el, Ruth}} = \left( \frac{e}{2mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \left( \frac{\theta}{2} \right)} \quad (4.25)$$

### 4.9.2 Soluzione esatta

Partendo nuovamente da Eq. (4.21) sostituiamo

$$\psi_1(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{e^{-r/r_B}}{\sqrt{\pi r_B^3}}$$

e quindi integriamo. L'integrale che compare là dentro è stato trattato in Es. 4.5: il risultato, in questo caso, è

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3 \boldsymbol{\kappa} e^{-i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\kappa}/\hbar} |\psi_1(\boldsymbol{\kappa})|^2 = \left(1 + \frac{r_B^2 q^2}{4\hbar^2}\right)^{-2} = \left(1 + \frac{\zeta}{4}\right)^{-2}$$

dove rinominiamo  $\zeta = (r_B q / \hbar)^2$ . Da qui segue che

$$\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega'} = 4e^4 \frac{(8 + \zeta)^2}{(4 + \zeta)^4} \quad (4.26)$$

# 5

## PROBLEMI DI ESAME

### 5.1 POSITRONIO

Si consideri il sistema isolato elettrone-positrone (il positrone ha massa  $m$  uguale e carica  $e$  opposta all'elettrone), mutuamente interagenti secondo un potenziale coulombiano

$$U(r) = -\frac{k}{r}$$

con  $r = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$  coordinata relativa tra elettrone (1) e positrone (2). Gli stati legati di questo sistema formano il cosiddetto *positronio*.<sup>1</sup>

- (1) Scrivere l'operatore hamiltoniano  $\hat{H}$  del sistema nelle coordinate  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ . Quali sono le quantità conservative?

- (2) Riscrivere  $\hat{H}$  usando la coordinata del centro di massa e la coordinata relativa

$$\mathbf{x}_{CM} \equiv \frac{m\mathbf{x}_1 + m\mathbf{x}_2}{m+m} = \frac{\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2}{2} \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$$

- (3) Scrivere la funzione d'onda dello stato fondamentale nel sistema del centro di massa, e calcolare la distanza quadratica media

$$\sqrt{\langle r^2 \rangle} = \sqrt{\left\langle |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|^2 \right\rangle}$$

- (4) Eseguire il calcolo del punto (3) per i primi stati eccitati ( $n = 2$ ), quando  $l = 1$  oppure  $l = 0$ .

- (5) Dire come si scrive la funzione d'onda in un sistema di riferimento in moto con velocità costante  $\mathbf{V} = V\hat{\mathbf{x}}$  rispetto al centro di massa.

- (6) Il positronio può decadere in due fotoni a seguito dell'annichilazione di  $e^+$  ed  $e^-$ . Assumiamo che questo possa avvenire quando la distanza tra le particelle è minore della lunghezza d'onda Compton  $\lambda = \alpha r_p = \hbar/(\mu c)$ . Valutare la probabilità dell'evento nello stato fondamentale, secondo la stima approssimata

$$P_{\text{decay}} \sim P(r < \lambda)$$

usando  $\lambda \ll r_p$ .

- (7) Aggiungiamo all'hamiltoniano del sistema un ulteriore termine di interazione tra spin

$$\hat{H}_{\text{spin}} = \beta \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$$

dove per comodità indichiamo  $e^-$  con 1 ed  $e^+$  con 2. Come cambiano le funzioni d'onda?

- (8) Descrivere lo spettro in presenza dell'interazione spin-spin  $H_{\text{spin}}$ , trattandola come perturbazione e discutendo la degenerazione dei livelli energetici.
- (9) Poniamo  $\beta = 0$ , annullando in questo modo l'hamiltoniana di perturbazione del punto precedente, e consideriamo invece la presenza di un'interazione del tipo  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ , più precisamente

$$\hat{H}_{LS} = \gamma \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

dove  $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$  e  $\hat{\mathbf{L}}$  è il momento angolare spaziale totale nel sistema del centro di massa. Discutere le leggi di conservazione in presenza di questa interazione. In particolare si conserva il momento angolare totale  $\mathbf{J}$ ? Si conservano il momento angolare spaziale  $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$  (calcolato rispetto al centro di massa) e lo spin totale  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ ? Si conservano poi  $\mathbf{S}^2$  e  $\mathbf{L}^2$ ?

- (10) Scrivere lo spostamento dei livelli energetici dei primi stati dello spettro assumendo l'interazione  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  come perturbativa, discutere i limiti di validità dell'approssimazione e la degenerazione dei livelli in presenza di questa perturbazione.

#### SOLUZIONE

- (1) L'operatore hamiltoniano si scrive tenendo conto dei termini cinetici di singola particella e del potenziale

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{k}{r}$$

Supponiamo, in analogia con l'atomo di idrogeno, di definire gli stati del positronio come gli stati legati  $|nlm\rangle$  di questo sistema, autostati simultanei di  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_z$ . Pertanto, l'**energia** è una costante del moto, dato che il positronio fa parte dello spettro discreto di  $\hat{H}$  ed avrà un'energia  $E$ .

L'**impulso totale** è anch'esso conservato, dato che l'hamiltoniano dipende solo dalla differenza  $r = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$  ed è pertanto invariante sotto traslazioni globali

$$\mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_1 + \Delta \mathbf{x} \quad \mathbf{x}_2 \rightarrow \mathbf{x}_2 + \Delta \mathbf{x}$$

L'hamiltoniana commuta con l'operatore di traslazione globale, dunque la variabile dinamica associata al generatore di tale gruppo di trasformazioni deve conservarsi. Per una discussione approfondita di questa implicazione si veda il Cap. 3.

Il **vettore momento angolare totale**  $\hat{\mathbf{L}}$  è il generatore delle rotazioni: essendo  $\hat{H}$  invariante per rotazioni, tale momento angolare sarà conservato.

Infine, considerando la **parità**  $\hat{\mathcal{P}}$ , vale

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathbf{p}}_1^2] = [\hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathbf{p}}_2^2] = 0$$

e la parità manda  $(r, \theta, \phi) \rightarrow (r, \pi - \theta, \phi + \pi)$  dunque  $U(r) \rightarrow U(r)$ , o equivalentemente

$$[\hat{\mathcal{P}}, U(\hat{r})] = 0$$

per cui la parità commuta con l'hamiltoniano,  $[\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}] = 0$  e dunque è conservata.

(2) Per scrivere  $\hat{H}$  in termini di coordinate del CM e relativa è utile ricordare l'analogo classico. Infatti, in Meccanica Newtoniana un sistema isolato a due corpi  $m_1$  e  $m_2$ , interagente secondo un potenziale  $U(r)$  che dipende solo dalla distanza reciproca, può essere separato nel moto del centro di massa, il quale è perfettamente equivalente ad una particella puntiforme di massa  $M = m_1 + m_2$  che si muove di moto rettilineo uniforme (poiché  $\sum \mathbf{F}_{\text{ext}} = 0$ ), sovrapposto in senso galileiano al moto di una particella di massa  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  sottoposta ad un campo di forze centrali  $U(r)$ .

Come esposto in Parte I, Sez. 6.3.1, l'hamiltoniano si scrive allora in forma separata

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}_{CM}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_r^2}{2\mu} - \frac{k}{r}$$

dove

$$\hat{\mathbf{P}}_{CM} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 \quad \text{e} \quad \hat{\mathbf{p}}_r = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1 - \hat{\mathbf{p}}_2}{2} \quad (5.1)$$

in analogia col caso classico, per il quale valevano le relazioni:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{CM} &= M\dot{\mathbf{X}}_{CM} = M \frac{m_1 \dot{\mathbf{x}}_1 + m_2 \dot{\mathbf{x}}_2}{m_1 + m_2} = m_1 \dot{\mathbf{x}}_1 + m_2 \dot{\mathbf{x}}_2 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p}_r &= \mu \dot{\mathbf{r}} = \mu(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) = \mu \left( \frac{\mathbf{p}_1}{m_1} - \frac{\mathbf{p}_2}{m_2} \right) = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{p}_1 - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{p}_2 \end{aligned}$$

che nel caso particolare in cui  $m_1 = m_2 = m$  si riducono ad espressioni formalmente uguali a (5.1).

(3) Nel riferimento del centro di massa il sistema è equivalente al moto di una particella di massa  $\mu = m/2$  nel campo centrale  $U(r) = -k/r$ . Si tratta del problema dell'atomo di idrogeno, per cui le soluzioni sono note

$$|nlm\rangle \quad \text{autostati simultanei di } \hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$$

in particolare ricordiamo che lo stato fondamentale è  $n = 1, l = m = 0$ , e corrisponde alla funzione d'onda

$$\langle x | 100 \rangle = \psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{r_P^{3/2} \sqrt{\pi}} e^{-r/r_P}$$

dove  $r_P = \hbar / (\mu c \alpha)$  è il "raggio di Bohr efficace" del sistema, e deriva da  $r_B$  con la sola sostituzione  $m \rightarrow \mu$ . In particolare vale  $r_P = 2r_B$ .

Per calcolare il raggio quadratico medio usiamo la rappresentazione delle coordinate considerando  $|\psi|^2$  come una distribuzione di probabilità:

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &= \langle 100 | r^2 | 100 \rangle \\ &= \int r^2 |\psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2 d^3x \\ &= \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 |\psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= 4\pi \int_0^{+\infty} r^4 \left( \frac{1}{r_P^{3/2} \sqrt{\pi}} e^{-r/r_P} \right)^2 dr \\ &= \frac{4}{r_P^3} \int_0^{+\infty} r^4 e^{-2r/r_P} dr \end{aligned}$$

dove abbiamo usato l'elemento di volume  $d^3x = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$ . L'integrale si può risolvere integrando per parti un certo numero di volte, oppure si può usare il *trucco di Feynman*, considerando il seguente integrale parametrizzato da  $\alpha \in \mathbb{R}$

$$I = \int_0^{+\infty} r^4 e^{-\alpha r} dr$$

osservando che

$$\frac{d}{d\alpha} e^{-\alpha r} = -r e^{-\alpha r} \quad \text{e analogamente} \quad \frac{d^4}{d\alpha^4} e^{-\alpha r} = r^4 e^{-\alpha r}$$

si può scrivere  $I$  come derivata rispetto ad  $\alpha$  di un'espressione più semplice, scambiando i segni di derivata ed integrale

$$I = \int_0^{+\infty} \frac{d^4}{d\alpha^4} e^{-\alpha r} dr = \frac{d^4}{d\alpha^4} \left[ \int_0^{+\infty} e^{-\alpha r} dr \right] = \frac{d^4}{d\alpha^4} \left[ \frac{1}{\alpha} \right] = \frac{24}{\alpha^5}$$

dove l'ultimo integrale è elementare. Un ultimo modo alternativo è di riconoscere che, col cambio di variabile  $u = \alpha r$ ,

$$I = \int_0^{+\infty} \frac{u^4}{\alpha^4} e^{-u} \frac{du}{\alpha} = \frac{1}{\alpha^5} \int_0^{+\infty} u^4 e^{-u} du = \frac{1}{\alpha^5} \Gamma(5) = \frac{4!}{\alpha^5} = \frac{24}{\alpha^5}$$

con  $\Gamma(n)$  funzione Gamma di Eulero. Nel nostro caso è  $\alpha = 2/r_P$ , da cui infine

$$\langle r^2 \rangle = \frac{4}{r_P^3} \int_0^{+\infty} r^4 e^{-2r/r_P} dr = \frac{4}{r_P^3} \frac{24}{(2/r_P)^5} = 3 r_P^2$$

Dunque la distanza quadratica media è

$$\sqrt{\langle r^2 \rangle} = \sqrt{3} r_P = \sqrt{3} \frac{\hbar}{\mu c \alpha}$$

**(4)** Facciamo il calcolo su  $|200\rangle$ . Ci è utile la formula della parte radiale dell'autofunzione

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2} r_P^{3/2}} \left( 1 - \frac{r}{2r_P} \right) e^{-r/(2r_P)}$$

per cui come sopra calcoliamo

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle_{200} &= \int r^2 |\psi_{200}(r, \theta, \phi)|^2 d^3x \\ &= \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 |\psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= \int_0^{+\infty} r^4 R_{20}^2 dr \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \frac{r^4}{r_P^3} \left( 1 - \frac{r}{2r_P} \right)^2 e^{-r/r_P} dr \end{aligned}$$

dove qui e nei prossimi integrali usiamo il fatto che le armoniche sferiche sono normalizzate sull'angolo solido, per cui l'integrale angolare è

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_{lm}|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1 \quad (5.2)$$

Per risolvere l'integrale radiale rimasto cambiamo variabile in  $u = \alpha r$

$$\begin{aligned}\langle r^2 \rangle_{200} &= \frac{r_P^2}{2} \int_0^{+\infty} u^4 \left(1 - \frac{u}{2}\right)^2 e^{-u} du \\ &= \frac{r_P^2}{2} \int_0^{+\infty} \left(u^4 - u^5 + \frac{u^6}{4}\right) e^{-u} du \\ &= \frac{r_P^2}{2} \left(4! - 5! + \frac{6!}{4}\right) \\ &= 42 r_P^2\end{aligned}$$

che è come atteso maggiore rispetto allo stato fondamentale.

Per quanto riguarda gli stati  $|21m\rangle$  con  $m = -1, 0, 1$  osserviamo che poiché il valore di aspettazione è fatto di una variabile radiale, gli integrali angolari sono sempre 1 per la (5.2), quindi il calcolo è lo stesso indipendentemente da  $m$ . Facendolo in modo identico ai precedenti si ottiene  $\langle r^2 \rangle_{21m} = 30r_P^2$ .

(5)

$$\psi(r, \theta, \phi) \rightarrow e^{iMVx/\hbar} \psi(r, \theta, \phi) \quad E_n \rightarrow E_n + \frac{1}{2}MV^2$$

(6) È utile il cambio di variabile  $x = r/\lambda$ :

$$\begin{aligned}P(r \leq \lambda) &= \int_0^\lambda dr \int d\Omega r^2 |\psi_{100}|^2 = \int_0^\lambda r^2 R_{10}^2 dr \\ &= \int_0^\lambda \frac{4r^2}{r_P^3} e^{-2r/r_P} dr \\ &= 4 \frac{\lambda^3}{r_P^3} \int_0^1 x^2 e^{-2x\lambda/r_P} dx \\ &\simeq 4 \frac{\lambda^3}{r_P^3} \int_0^1 x^2 \left(1 - 2x \frac{\lambda}{r_P}\right) dx \\ &= 4 \frac{\lambda^3}{r_P^3} \left(\frac{1}{3} - \frac{\lambda}{2r_P}\right) \simeq \frac{4}{3} \frac{\lambda^3}{r_P^3} = \frac{4}{3} \alpha^3\end{aligned}$$

dove abbiamo sviluppato l'esponenziale poiché  $\lambda \ll r_P$ . Dunque la probabilità è di meno di una parte per milione. Ripetendo il calcolo identicamente sugli stati  $|21m\rangle$  si ha

$$P_{(21m)}(r \leq \lambda) \simeq \frac{1}{120} \frac{\lambda^5}{r_P^5} = \frac{\alpha^5}{120}$$

più piccola rispetto a quella relativa allo stato fondamentale  $|100\rangle$ , e ciò è coerente con il fatto che le funzioni d'onda con momento angolare totale maggiore tendono più rapidamente a 0 ( $\sim r^l$ ) a piccole distanze, discusso nel capitolo 6.3.3. Evidenziamo che questa probabilità non dipende dal numero quantico  $m$ : il calcolo è svolto sulla parte radiale della funzione d'onda, poiché possiamo integrare sin da subito –come si vede nella prima riga– sulle armoniche sferiche, normalizzate a 1.

(7) Formalmente stiamo accendendo un ulteriore grado di libertà delle particelle: a livello di descrizione matematica occorrerà lavorare in uno spazio di Hilbert prodotto, ottenuto a partire dallo spazio di Hilbert del moto orbitale (l'unico finora considerato) e quello di due spin 1/2 interagenti, che come visto nel capitolo 1 ha dimensione 4 (è a sua volta il prodotto tensore di due spazi bidimensionali). Dunque

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{orb}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}} \quad |\psi\rangle = |\psi_{\text{orb}}\rangle \otimes |\psi_{\text{spin}}\rangle$$

vediamo come caratterizzare questi stati separabili.

Nel problema dei due qubit abbiamo visto che una buona base per lo spazio dei due spin è ottenuta dal prodotto delle due basi di autostati per  $\hat{S}_{z1}$  e  $\hat{S}_{z2}$ :

$$\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\} \quad (5.3)$$

La prima idea che può venire in mente, allora, è creare un set di stati

$$|\psi\rangle = |nlm\rangle \otimes |m_1 m_2\rangle$$

al variare di  $n, l, m$  e al variare di  $|m_1 m_2\rangle$  tra i 4 elementi di (5.3). Purtroppo questa base **non diagonalizza** l'hamiltoniano complessivo

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{orb}} + \hat{H}_{\text{spin}}$$

in quanto, per esempio, lo stato

$$|\phi\rangle = |nlm\rangle \otimes |\uparrow\downarrow\rangle$$

non è autostato di  $\hat{H}$ . Questo fatto può essere visto come conseguenza della forma matriciale per  $\hat{H}_{\text{spin}}$  vista nel capitolo 1:

$$\hat{H}_{\text{spin}} \propto \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

e che può essere ricavata applicando  $\hat{H}_{\text{spin}} = \beta \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$  ai quattro stati di base di (5.3), usando le matrici di Pauli poiché  $\hat{S}_i \propto \hat{\sigma}_i$ . Allora dei quattro stati di base soltanto  $|\uparrow\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\downarrow\rangle$  sono autostati di  $\hat{H}_{\text{spin}}$ , mentre non lo è  $|\uparrow\downarrow\rangle$ . Dunque per quanto riguarda  $|\phi\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{H} |\phi\rangle &= (\hat{H}_{\text{orb}} + \hat{H}_{\text{spin}}) |\phi\rangle \\ &\equiv (\hat{H}_{\text{orb}} \otimes \mathbb{1}_{\text{spin}} + \mathbb{1}_{\text{orb}} \otimes \hat{H}_{\text{spin}}) |nlm\rangle \otimes |\uparrow\downarrow\rangle \\ &= E_n |nlm\rangle \otimes |\uparrow\downarrow\rangle + |nlm\rangle \otimes \hat{H}_{\text{spin}} |\uparrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

questo ket non può essere multiplo di  $|\phi\rangle$  perché  $\hat{H}_{\text{spin}} |\uparrow\downarrow\rangle$  non è multiplo di  $|\uparrow\downarrow\rangle$ .

Il modo più semplice di trovare un'altra base che diagonalizzi  $\hat{H}_{\text{spin}}$  è utilizzare l'identità operatoriale

$$\hat{S}^2 = (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$$

da cui si trova un'espressione alternativa per  $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$ , in funzione degli spin totali:

$$\hat{H}_{\text{spin}} = \frac{\beta}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2)$$

**Fatto:** gli autostati di  $\hat{S}^2$  diagonalizzano  $\hat{H}_{\text{spin}}$ .

Questo è vero in quanto gli operatori  $\hat{S}_1^2$  e  $\hat{S}_2^2$  sono "banali": per proprietà delle matrici di Pauli

$$\hat{\sigma}_j^2 = \mathbb{1} \quad j = x, y, z$$

per cui

$$\hat{S}_i^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) = \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbb{1}_i$$

per  $i = 1, 2$ . D'altronde questo è coerente con l'idea che gli spin  $1/2$  sono per definizione i sistemi con  $J$  semintero e fissato a  $s = 1/2$ , e il valore corrispondente dello spin totale è  $s(s+1) = 3/4$  in unità di  $\hbar$ .

Allora se  $|S\rangle$  è autostato di  $\hat{S}^2$ , cioè (poniamo  $\hbar = 1$ )

$$\hat{S}^2 |S\rangle = s(s+1) |S\rangle$$

si ha

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{spin}} |S\rangle &= \frac{\beta}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2) |S\rangle \\ &= \frac{\beta}{2} \left[ s(s+1) - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] |S\rangle \end{aligned}$$

cioè  $|S\rangle$  è un autostato per l'hamiltoniano di spin. In particolare dato che  $[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$  si può prendere una base di autostati per entrambi.

Che valori può assumere lo spin totale  $S^2$ ? Per rispondere, guardiamo che valori può assumere il numero quantico  $s$ . Usiamo la regola di addizione per momenti angolari, per cui i valori possibili per  $s$  sono

$$|s_1 - s_2| \leq s \leq s_1 + s_2$$

ma  $s_1 = 1/2$  e  $s_2 = 1/2$ , per cui

$$s = 0 \quad \text{oppure} \quad s = 1$$

In particolare il valore  $s = 1$  sarà 3 volte degenere:

$$|s = 1, \sigma = -1\rangle \quad |s = 1, \sigma = 0\rangle \quad |s = 1, \sigma = 1\rangle$$

mentre  $s = 0$  implica che anche la proiezione su  $z$  sia nulla, ossia  $\sigma = 0$ , dunque il quarto autostato simultaneo di  $\hat{S}^2$  e  $\hat{S}_z$  è un singoletto  $|s = 0, \sigma = 0\rangle$ .

Verifichiamo adesso che

$$\begin{aligned} |s = 1, \sigma = 1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |s = 1, \sigma = 0\rangle &= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ |s = 1, \sigma = -1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \\ |s = 0, \sigma = 0\rangle &= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Per quanto riguarda  $|s = 1, \sigma = 1\rangle$  e  $|s = 1, \sigma = -1\rangle$  non c'è molto da dire: evidentemente per due particelle di spin  $1/2$  le uniche combinazione degli elementi di base che diano  $\sigma = \pm 1$  sono quelle con entrambi gli spin concordi.

I casi  $\sigma = 0$  sono leggermente più complicati. Adottiamo la seguente convenzione: i *ket* con numeri, del tipo  $|01\rangle$ , si riferiscono al momento angolare di spin totale; quelli con le frecce, del tipo  $|\uparrow\downarrow\rangle$  ai momenti angolari visti separatamente.

Restano dunque da studiare  $|00\rangle$  e  $|10\rangle$ : se applichiamo ad essi l'operatore  $\hat{S}^2$ , otteniamo

$$\hat{S}^2 |00\rangle = 0 \quad \hat{S}^2 |10\rangle = 2|10\rangle$$

in quanto, ricordiamo,  $\hat{S}^2 |s\rangle = s(s+1) |s\rangle$ . D'altronde sappiamo scrivere  $\hat{S}^2$  come:

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{S}_2^2$$

Vogliamo determinare i coefficienti  $\alpha, \beta$  tali che

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 (\alpha |\uparrow\downarrow\rangle + \beta |\downarrow\uparrow\rangle) &= (\hat{S}_1^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{S}_2^2) (\alpha |\uparrow\downarrow\rangle + \beta |\downarrow\uparrow\rangle) \\ &= \gamma (\alpha |\uparrow\downarrow\rangle + \beta |\downarrow\uparrow\rangle) \equiv \gamma |\psi\rangle \end{aligned}$$

con  $\gamma = 0, 2$ . Abbiamo escluso  $|\uparrow\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\downarrow\rangle$  perché, come vedremo, non servono a scrivere le combinazioni lineari cercate.

Studiamo separatamente i vari contributi a questo calcolo:

- Su ciascun spin  $1/2$  l'operatore  $\hat{S}_i^2$  agisce in modo noto:

$$\begin{aligned} \hat{S}_i^2 \alpha |\uparrow\downarrow\rangle &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right) \alpha |\uparrow\downarrow\rangle = \frac{3}{4} \alpha |\uparrow\downarrow\rangle && \text{dove } i = 1, 2; \\ \hat{S}_i^2 \beta |\downarrow\uparrow\rangle &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right) \beta |\downarrow\uparrow\rangle = \frac{3}{4} \beta |\downarrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

- Nel caso di spin  $1/2$ , possiamo scrivere (usiamo  $\hbar = 1$ ):

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{\sigma}_i}{2} \quad \text{con } \hat{\sigma}_i \text{ le matrici di Pauli.}$$

Questo implica che:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 |\uparrow\downarrow\rangle &= \frac{1}{4} [\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{2x} |\uparrow\downarrow\rangle + \hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2y} |\uparrow\downarrow\rangle + \hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z} |\uparrow\downarrow\rangle] \\ &= \frac{1}{4} [|\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle] = \frac{1}{2} |\downarrow\uparrow\rangle - \frac{1}{4} |\uparrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

dove si sono usati i risultati derivati nel Cap. 1, Parte II. In modo assolutamente analogo

$$\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 |\downarrow\uparrow\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{4} |\downarrow\uparrow\rangle$$

Mettiamo insieme i risultati:

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 |\psi\rangle &= (\hat{S}_1^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{S}_2^2) (\alpha |\uparrow\downarrow\rangle + \beta |\downarrow\uparrow\rangle) \\ &= \frac{3}{2} \alpha |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{3}{2} \beta |\downarrow\uparrow\rangle + \alpha \left(|\downarrow\uparrow\rangle - \frac{1}{2} |\uparrow\downarrow\rangle\right) + \beta \left(|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{2} |\downarrow\uparrow\rangle\right) \\ &= (\alpha + \beta) |\uparrow\downarrow\rangle + (\alpha + \beta) |\downarrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

Nel caso  $\gamma = 0$  devono annullarsi tutte le componenti di questa combinazione lineare:  $\alpha = -\beta$ , per cui

$$|00\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

dove si è già inclusa una normalizzazione. Analogamente per  $\gamma = 2$ , deve essere  $\alpha = \beta$  che porta a

$$|10\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

*quod erat demonstrandum.*

Dunque abbiamo diagonalizzato  $\hat{H}_{\text{spin}}$  sfruttando le composizioni di momenti angolari, ed il risultato è lo stesso che avevamo ottenuto nel capitolo 1 diagonalizzandola a mano.

(8) Ricapitolando il prezioso risultato del punto precedente, siamo partiti dalla base  $\mathcal{A}$  dello spazio di Hilbert dello stato di spin, la più immediata a cui possiamo pensare

$$\mathcal{A} = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$$

per trovare che questa non diagonalizza l'hamiltoniana di perturbazione. Eppure, come appreso nel capitolo 11, in presenza di degenerazioni è necessario utilizzare una base che, all'interno degli autospazi degeneri dell'hamiltoniano imperturbato  $\hat{H}_0$ , diagonalizzi al contempo anche l'hamiltoniano perturbativo, in questo caso  $\hat{H}_{\text{spin}}$ . La base opportuna è  $\mathcal{B}$ :

$$\mathcal{B} = \{|0,0\rangle, |1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$$

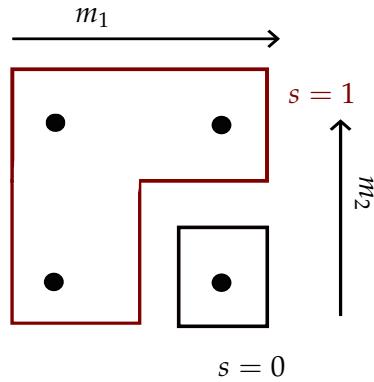
i cui *ket*  $|s, \sigma\rangle$  riportano set di numeri quantici relativi ad operatori commutanti: rispettivamente  $s(s+1)$  e  $\sigma$  sono autovalori di  $\hat{S}^2$  e di  $\hat{S}_z$ . Per trovare la correzione al primo ordine, dobbiamo calcolare il seguente elemento di matrice

$$\begin{aligned} & \langle n, l, m, s_1, s_2, s, \sigma | \hat{H}_{\text{spin}} | n, l, m, s_1, s_2, s, \sigma \rangle \\ &= \frac{\beta\hbar^2}{2} \left[ s(s+1) - \frac{3}{2} \right] \end{aligned}$$

scritto grazie a quanto abbiamo esposto nel punto precedente. Come si vede dalla figura 5.1, cambiamo base, e separiamo i 4 stati tra un tripletto con  $s = 1$  e il singuletto avente  $s = 0$ . Le correzioni energetiche sono quindi

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= +\frac{1}{4}\beta\hbar^2 \quad \text{per } s = 1 \\ E_0^{(1)} &= -\frac{3}{4}\beta\hbar^2 \quad \text{per } s = 0 \end{aligned}$$

Da questo possiamo evincere che la degenerazione è risolta solo parzialmente: gli stati del tripletto continuano infatti a posizionarsi sullo stesso livello.



**Figura 5.1:** Diagramma della composizione di due spin 1/2.

(9) La perturbazione che aggiungiamo è *scalare*, cioè invariante per rotazioni. Anche l'hamiltoniana imperturbata lo è, quindi l'intera hamiltoniana è scalare e, per definizione, il momento angolare totale  $\mathbf{J}$  è conservato:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}] = 0$$

Si dimostra infatti in modo veloce, usando la convenzione sugli indici ripetuti, che per ogni componente di  $\hat{\mathbf{J}}$  vale

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i \hat{S}_i, \hat{J}_j] &= [\hat{L}_i \hat{S}_i, \hat{L}_j + \hat{S}_j] \\ &= [\hat{L}_i \hat{S}_i, \hat{L}_j] + [\hat{L}_i \hat{S}_i, \hat{S}_j] \\ &= [\hat{L}_i, \hat{L}_j] \hat{S}_i + \hat{L}_i [\hat{S}_i, \hat{S}_j] \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} (\hat{L}_k \hat{S}_i + \hat{L}_i \hat{S}_k) = 0 \end{aligned}$$

poiché  $\epsilon_{ijk}$  è antisimmetrica sotto scambio  $(i, k)$ , mentre la parentesi è simmetrica, e stiamo sommando proprio sugli indici  $i, k^2$ .

Il momento angolare spaziale ed il momento angolare intrinseco **non** sono più conservati, poiché non commutanti con l'hamiltoniano perturbativo  $\hat{H}_{LS}$ . Considerando ad esempio le componenti di  $\hat{\mathbf{L}}$ , si trova

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i \hat{S}_i, \hat{L}_j] &= \hat{L}_i [\hat{S}_i, \hat{L}_j] + [\hat{L}_i, \hat{L}_j] \hat{S}_i \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \hat{S}_i \neq 0 \end{aligned}$$

e una relazione analoga attende chi ha voglia di eseguire il conto per  $\hat{\mathbf{S}}$ , poiché le relazioni di commutazione sono le stesse. Si conservano invece i quadrati  $\hat{S}^2$  e  $\hat{L}^2$ . Considerando di nuovo  $\hat{L}^2$ :

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i \hat{S}_i, \hat{L}_j \hat{L}_j] &= \hat{L}_j [\hat{L}_i, \hat{L}_j] \hat{S}_i + [\hat{L}_i, \hat{L}_j] \hat{S}_i \hat{L}_j \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{S}_i (\hat{L}_j \hat{L}_k + \hat{L}_k \hat{L}_j) = 0 \end{aligned}$$

che si annulla per lo stesso motivo sopra esposto. Poiché le relazioni di commutazione sono identiche, anche  $\hat{S}^2$  è conservato.

## 5.2 OSCILLATORE ARMONICO TRIDIMENSIONALE

Si consideri una particella di massa  $m$  e spin  $s = 1/2$  confinata nello spazio da una forza centrale armonica, il cui Hamiltoniano è

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{\mathbf{r}}^2}{2} \quad \text{con} \quad \hat{\mathbf{p}}^2 = \sum_{i=1}^3 \hat{p}_i^2 \quad \hat{\mathbf{r}}^2 = \sum_{i=1}^3 \hat{x}_i^2$$

L'operatore di spin  $\hat{\mathbf{S}}$  della particella non compare esplicitamente nell'Hamiltoniano.<sup>3</sup>

- (1) Definire le unità naturali del problema, che permettono di riscrivere l'equazione di Schrödinger in termini di quantità adimensionali. In particolare, scrivere la scala di lunghezza, di tempo e di energia del problema. Scrivere l'Hamiltoniano in termini degli operatori di costruzione e distruzione  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$  associati alle varie direzioni cartesiane.
- (2) Calcolare lo spettro energetico e, per i primi due autovalori dell'Hamiltoniana, le degenerazioni dei livelli.
- (3) Scrivere le funzioni d'onda dello stato fondamentale e dei primi stati eccitati (associati al primo autovalore dell'energia sopra quello dello stato fondamentale). Su questi stati calcolare la distanza quadratica media dal centro definita come

$$d \equiv \sqrt{\langle \psi | \hat{\mathbf{r}}^2 | \psi \rangle}$$

e l'impulso quadratico medio definito come

$$\kappa \equiv \sqrt{\langle \psi | \hat{\mathbf{p}}^2 | \psi \rangle}$$

Verificare il principio di indeterminazione

$$\Delta_{x_i} \Delta_{p_i} \geq \frac{\hbar}{2}$$

nello stato fondamentale, per ogni coppia  $\hat{x}_i$ ,  $\hat{p}_i$  associata alle varie direzioni.

- (4) Dato  $0 < c < 1$  esiste un valore  $r_{\max}$  tale che la probabilità di trovare la particella a distanza  $r < r_{\max}$  dal centro sia  $\mathcal{P}(r_{\max}) = c$ . Scrivere l'equazione che determina questo  $r_{\max}$  per lo stato fondamentale, lasciando indicati eventuali integrali adimensionali non scrivibili in termini di funzioni elementari.
- (5) Al fine di determinare le leggi di conservazione, consideriamo le osservabili  $\hat{O}$  di cui si conserva il valore di aspettazione  $\langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle$ , dove  $|\psi(t)\rangle$  è l'evoluzione temporale di un generico stato della particella. Dire quali delle seguenti osservabili soddisfano la proprietà di rimanere costanti nel tempo:

$$\hat{H} \quad \hat{\mathbf{x}} \quad \hat{\mathbf{p}} \quad \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad \hat{\mathbf{S}} \quad \hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \quad \hat{\mathcal{P}}$$

- (6) Determinare gli autovalori dell'operatore momento angolare  $\hat{\mathbf{L}}^2$  dello stato fondamentale e dei primi stati eccitati. Scrivere le funzioni d'onda corrispondenti in coordinate sferiche.
- (7) Assumiamo adesso che nel centro del sistema sia posta un'altra particella di spin  $s = 1/2$ , e che sia vincolata nella posizione  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ . Si consideri il sistema globale delle due particelle, e assumiamo una perturbazione spin-spin locale tra le due particelle (quella che si muove soggetta al potenziale armonico e quella vincolata al centro), cioè

$$\hat{V}(\hat{\mathbf{x}}) = \beta \delta(\hat{\mathbf{x}}) \hat{\mathbf{S}}_c \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

dove  $\hat{\mathbf{S}}_c$  è l'operatore di spin della particella vincolata nel centro. Calcolare l'effetto di questa perturbazione sui livelli più bassi, al primo ordine.

- (8) Consideriamo adesso un'interazione del tipo  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ , più precisamente

$$\hat{H}_{ls} = \gamma \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad \gamma = -\frac{\hbar^2 \omega^2}{2mc^2}$$

Rispondere alla domanda (5) in presenza di questa interazione (si consideri  $\beta = 0$ ).

- (9) Scrivere lo spostamento dei livelli energetici dei primi stati dello spettro assumendo l'interazione  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$  perturbativa, discutere i limiti di validità della approssimazione e la degenerazione dei livelli in presenza di questa perturbazione.
- (10) Vogliamo adesso studiare gli effetti di un'eventuale perturbazione dovuta ad un ulteriore potenziale centrale  $U(r) = -k/r$ . Si descriva il suo effetto sui primi livelli dello spettro dell'oscillatore armonico tridimensionale al primo ordine in  $k$  (assumendo  $\beta = \gamma = 0$ ).

Riportiamo per referenza le funzioni d'onda in rappresentazione di Schrödinger dei primi due livelli dell'oscillatore armonico unidimensionale:

$$\varphi_0(x) = \sqrt{\frac{1}{r_\omega \pi^{1/2}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2r_\omega^2}\right) \quad \varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{r_\omega \pi^{1/2}}} \frac{x}{r_\omega} \exp\left(-\frac{x^2}{2r_\omega^2}\right)$$

dove  $r_\omega$  è la lunghezza caratteristica dell'oscillatore armonico.

Alcuni integrali potenzialmente utili:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{d}{d\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{d}{d\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^{-3/2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{d^2}{d\alpha^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{d}{d\alpha} \alpha^{-3/2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \alpha^{-5/2}$$

**SOLUZIONE** Rimandiamo ai Cap. 4, 7 per una discussione approfondita dei vari risultati, che qui useremo applicativamente e senza dilungarci troppo nei calcoli.

(1) Le unità naturali del problema devono essere costruite a partire dal set di quantità  $\hbar, \omega, m$ : indicandole col pedice  $\omega$ , si ha

$$r_\omega = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad t_\omega = \frac{1}{\omega} \quad E_\omega = \hbar\omega \quad p_\omega = \sqrt{m\hbar\omega}$$

Tramite queste l'Hamiltoniano assume la forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega\hat{\mathbf{r}}^2}{\hbar} \right) = \frac{1}{2}\hbar\omega \left[ \underbrace{\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}}{p_\omega} \right)^2}_{\hat{\mathbf{P}}^2} + \underbrace{\left( \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r_\omega} \right)^2}_{\hat{\mathbf{Q}}^2} \right]$$

Ricordando la forma degli operatori di creazione e distruzione sulla direzione  $j$ -esima

$$\hat{a}_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q}_j + i\hat{P}_j) \quad \hat{a}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q}_j - i\hat{P}_j)$$

e invertendo queste due equazioni per scrivere gli operatori  $\hat{Q}_j, \hat{P}_j$  in funzione di  $\hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger$

$$\hat{Q}_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j) \quad \hat{P}_j = \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j)$$

determiniamo una forma semplice dell'Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{\mathbf{Q}}^2 + \hat{\mathbf{P}}^2) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \sum_{j=1}^3 (\hat{Q}_j^2 + \hat{P}_j^2) \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} \sum_{j=1}^3 \left[ (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j)^2 - (\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j)^2 \right] \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} \sum_{j=1}^3 (\hat{a}_j\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j + \hat{a}_j\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \sum_{j=1}^3 (2\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j + [\hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger]) = \hbar\omega \sum_{j=1}^3 \left( \hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

avendo usato il fatto noto che  $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ .

(2) Lo spettro di un oscillatore armonico tridimensionale isotropo è, come è noto

$$E_n = \hbar\omega \sum_{j=1}^3 \left( n_j + \frac{1}{2} \right) \quad \text{con} \quad n = n_1 + n_2 + n_3$$

Rimandiamo al Cap. 4 per la derivazione dello spettro unidimensionale e al Cap. 7 per l'estensione tridimensionale.

La degenerazione del ground state è doppia: infatti stiamo lavorando con una particella di spin 1/2 e, per quanto l'operatore  $\hat{\mathbf{S}}$  non compaia nell'Hamiltoniano, il fatto che lo spin possa essere *up* o *down* raddoppia tutte le degenerazioni.

Analogamente, la degenerazione sui primi livelli eccitati è 6, perché a  $E_1$  contribuiscono i tre stati

$$|100\rangle \quad |010\rangle \quad |001\rangle$$

ognuno dei quali esiste in versione *up* e in versione *down*.

Volendo generalizzare alla  $n$ -esima energia, si ha

$$\text{Deg}(n) = 2 \cdot \frac{(n+1)(n+2)}{2} = (n+1)(n+2)$$

dove il fattore 2 tiene conto dello spin.

(3) Le tre coordinate sono indipendenti tra loro: le funzioni d'onda saranno date semplicemente da

$$\langle \mathbf{r}|n_1 n_2 n_3\rangle = \varphi_{n_1}(x)\varphi_{n_2}(y)\varphi_{n_3}(z)$$

dove le  $\varphi_k$  sono le funzioni d'onda relative al  $k$ -esimo stato dell'oscillatore armonico unidimensionale.

**GROUND STATE** Partiamo dal *ground-state*: per questo stato la funzione d'onda è data da

$$\begin{aligned} \psi_{000}(x, y, z) &= \varphi_0(x)\varphi_0(y)\varphi_0(z) \\ &= \left(\frac{1}{r_\omega\pi^{1/2}}\right)^{3/2} \exp\left(-\overbrace{\frac{x^2+y^2+z^2}{2r_\omega^2}}^{r^2}\right) \end{aligned}$$

e di conseguenza per il calcolo di  $d$ , poiché tutti gli  $n_j$  sono nulli, conviene calcolare la distanza quadratica media su una sola direzione e usare il fatto che

$$d^2 = d_x^2 + d_y^2 + d_z^2$$

Preso e.g. la direzione  $x$ :

$$\begin{aligned} d_x^2 &= \langle \psi_{000} | \hat{x}^2 | \psi_{000} \rangle \\ &= \frac{1}{r_\omega\pi^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-x^2/r_\omega^2} \\ &= \frac{r_\omega^2}{\pi^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} ds s^2 e^{-s^2} = \frac{r_\omega^2}{2} \end{aligned}$$

avendo usato l'integrale notevole riportato in fondo alla traccia. Si ha dunque

$$d = \sqrt{d_x^2 + d_y^2 + d_z^2} = \sqrt{\frac{3}{2}} r_\omega$$

Un metodo algebrico sicuramente più rapido di procedere è tramite gli operatori di creazione e distruzione:

$$\begin{aligned} \langle 000 | \hat{Q}_j^2 | 000 \rangle &= \frac{1}{2} \langle 000 | (\hat{a}_j^\dagger)^2 + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger + (\hat{a}_j)^2 | 000 \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle 000 | \hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger | 000 \rangle = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

poiché  $\hat{a}_j |000\rangle = 0$ . Essendo  $\hat{r}_j = r_\omega \hat{Q}_j$ , segue immediatamente il risultato precedente:

$$d_j^2 = \frac{r_\omega^2}{2} \implies d = \sqrt{\frac{3}{2}} r_\omega$$

Per quanto riguarda  $\kappa$  il procedimento è analogo: conviene passare nello spazio degli impulsi: ricordiamo il risultato del Cap. 3, secondo cui la trasformata di Fourier di una funzione gaussiana è ancora gaussiana; in particolare si ha che su ciascuna coordinata:

$$\varphi_0(x) = \left( \frac{1}{2\pi\sigma_x^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \implies \tilde{\varphi}_0(p) = \left( \frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{2\sigma_x^2}{\hbar^2} p^2\right)$$

dove nel nostro caso

$$2\sigma_x^2 = r_\omega^2 \implies \sigma_x = \frac{r_\omega}{\sqrt{2}}$$

quindi l'autofunzione fondamentale rappresentata negli impulsi è

$$\tilde{\psi}_{000}(p) = \left( \frac{1}{p_\omega \pi^{1/2}} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{p^2}{2p_\omega^2}\right)$$

Questo problema è esattamente equivalente a quello affrontato sugli impulsi: saltando i calcoli, si trova il risultato analogo

$$\kappa_j^2 = \frac{p_\omega^2}{2} \implies \kappa = \sqrt{\kappa_x^2 + \kappa_y^2 + \kappa_z^2} = \sqrt{\frac{3}{2}} p_\omega$$

Naturalmente si sarebbe potuto procedere analogamente per via algebrica:

$$\begin{aligned} \langle 000 | \hat{P}_j^2 | 000 \rangle &= -\frac{1}{2} \langle 000 | (\hat{a}_j^\dagger)^2 - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger + (\hat{a}_j)^2 | 000 \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle 000 | \hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger | 000 \rangle = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

da cui, essendo  $\hat{p}_j = p_\omega \hat{P}_j$ , si ottiene lo stesso risultato

$$\kappa_j^2 = \frac{p_\omega^2}{2} \implies \kappa = \sqrt{\frac{3}{2}} p_\omega$$

Questo risultato permette di verificare su ciascuna coordinata il principio di indeterminazione: ricordando che le funzioni d'onda dello stato fondamentale sono simmetriche, il valor medio di coordinata e impulso sarà nullo, il che comporta:

$$\begin{aligned} \Delta_{x_j} &= \sqrt{\langle x_j^2 \rangle - \langle x_j \rangle^2} = \sqrt{\langle x_j^2 \rangle} = d_j \\ \Delta_{p_j} &= \sqrt{\langle p_j^2 \rangle - \langle p_j \rangle^2} = \sqrt{\langle p_j^2 \rangle} = \kappa_j \end{aligned}$$

da cui si ha

$$\Delta_{x_j} \Delta_{p_j} = d_j \kappa_j = \frac{r_\omega}{\sqrt{2}} \frac{p_\omega}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} = \frac{\hbar}{2}$$

**PRIMI STATI ECCITATI** Passiamo adesso a studiare il primo livello eccitato: qui avremo tre (sei, considerando lo spin) possibili stati

$$|100\rangle \quad |010\rangle \quad |001\rangle$$

e di conseguenza le funzioni d'onda saranno leggermente più complicate. Poiché il sistema è invariante per scambio delle coordinate, basterà e.g. svolgere il conto nel caso di  $|100\rangle$ . Sulle coordinate  $y$  e  $z$  il conto è lo stesso del caso precedente, per cui si ha immediatamente

$$d_y = d_z = \frac{r_\omega}{\sqrt{2}} \quad \kappa_y = \kappa_z = \frac{p_\omega}{\sqrt{2}}$$

mentre sulla coordinata  $x$  svolgiamo il conto esplicito:

$$\begin{aligned} d_x^2 &= \langle 100 | \hat{x}^2 | 100 \rangle \\ &= \frac{2}{r_\omega \pi^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \frac{x^2}{r_\omega^2} e^{-x^2/r_\omega^2} \\ &= \frac{2}{\pi^{1/2} r_\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} ds s^4 e^{-s^2} = \frac{3}{2} r_\omega^2 \end{aligned}$$

il che ci porta a

$$d = \sqrt{d_x^2 + d_y^2 + d_z^2} = \sqrt{\frac{5}{2}} r_\omega$$

Ancora una volta si poteva procedere per via algebrica:

$$\begin{aligned} \langle 100 | \hat{Q}_1^2 | 100 \rangle &= \frac{1}{2} \langle 100 | (\hat{a}_1^\dagger)^2 + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger + (\hat{a}_1)^2 | 100 \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle 100 | \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger | 100 \rangle = \frac{3}{2} \end{aligned}$$

dove stavolta abbiamo usato l'ortogonalità della base  $|n_1 n_2 n_3\rangle$  e il fatto che

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

Per il calcolo di  $\kappa_x$  conviene lavorare direttamente per via algebrica:

$$\begin{aligned} \langle 100 | \hat{P}_1^2 | 100 \rangle &= -\frac{1}{2} \langle 100 | (\hat{a}_1^\dagger)^2 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger + (\hat{a}_1)^2 | 100 \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle 100 | \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger | 100 \rangle = \frac{3}{2} \end{aligned}$$

da cui

$$\kappa_x^2 = \frac{3}{2} p_\omega^2 \quad \Rightarrow \quad \kappa = \sqrt{\kappa_x^2 + \kappa_y^2 + \kappa_z^2} = \sqrt{\frac{5}{2}} p_\omega$$

Come anticipato, questi risultati – ricavati per  $|100\rangle$  – sono validi anche per  $|010\rangle$ ,  $|001\rangle$ .

(4) Vogliamo integrare il modulo quadro della funzione d'onda in una regione di spazio  $\Sigma$  opportuna, affinché tale integrale coincida con la probabilità cercata  $c$ . Lavoriamo sullo stato fondamentale, per il quale sappiamo

scrivere la funzione d'onda in termini della pura distanza radiale  $r$ ; ne segue che

$$\begin{aligned} c &\stackrel{!}{=} \int_{\Sigma} d^3\mathbf{x} |\psi_{000}(\mathbf{x})|^2 \\ &= \frac{1}{r_{\omega}^3 \pi^{3/2}} \int_0^{r_{\max}} r^2 dr \int_0^{4\pi} d\Omega e^{-r^2/r_{\omega}^2} \\ &= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{s_{\max}} ds s^2 e^{-s^2} \end{aligned}$$

dove abbiamo sostituito  $s = r/r_{\omega}$  e imposto  $s_{\max} = r_{\max}/r_{\omega}$ . Questo è l'integrale adimensionale cercato.

(5) Per verificare la conservazione di una variabile dinamica, dobbiamo assicurarsi che l'operatore ad essa associato commuti con l'operatore hamiltoniano  $\hat{H}$ :

- Ovviamente  $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ , essendo  $\hat{H}$  indipendente dal tempo.
- Né la posizione né il momento lineare si conservano: prendendo ad esempio una componente del momento, vale

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{p}_i] &= \frac{m\omega^2}{2} \left[ \sum_{j=1}^3 \hat{x}_j^2, \hat{p}_i \right] \\ &= \frac{m\omega^2}{2} \sum_{j=1}^3 (\hat{x}_j [\hat{x}_j, \hat{p}_i] + [\hat{x}_j, \hat{p}_i] \hat{x}_j) \\ &= \frac{m\omega^2}{2} \sum_{j=1}^3 2i\hbar\delta_{ij}\hat{x}_j = i\hbar m\omega^2 \hat{x}_i \neq 0 \end{aligned}$$

e in modo uguale si dimostra che  $[\hat{H}, \hat{x}_i] = 0$ .

- $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$  si conserva: infatti l'operatore hamiltoniano di un oscillatore armonico isotropo è invariante per rotazioni spaziali, poiché contiene soltanto termini scalari ( $\mathbf{r}^2$  e  $\mathbf{p}^2$  sono scalari).
- $\mathbf{S}$  conserva anch'esso il proprio valor medio. Infatti l'hamiltoniano in esame agisce in modo banale sullo spazio di spin: si può pensare infatti di scrivere per esteso

$$\hat{H} = \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{\mathbf{r}}^2}{2} \right) \otimes \mathbb{1}$$

dove il primo spazio è quello orbitale, il secondo quello dello spin. Pertanto  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{S}}] = 0$  perché i due operatori agiscono in modo non banale su spazi diversi.

- $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  si conserva in quanto si conservano separatamente  $\mathbf{L}$  e  $\mathbf{S}$ .
- L'operatore parità commuta anch'esso con  $\hat{H}$ . Infatti la parte cinetica è pari e lo è anche il potenziale, in quanto sotto parità  $\mathbf{r}^2 \rightarrow \mathbf{r}^2$ ,  $\mathbf{p}^2 \rightarrow \mathbf{p}^2$  e dunque  $\hat{H} \rightarrow \hat{H}$ . Pertanto  $\hat{P} \hat{H} \hat{P} = \hat{H}$ , dunque  $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ .

(6) Noi abbiamo risolto il problema dell'oscillatore sfruttando la separazione dei moti lungo ciascuna coordinata. Tuttavia, il potenziale è centrale e quindi sarebbe stato possibile trovare una base di autostati per  $\hat{H}$  la cui rappresentazione nelle coordinate fosse della forma  $\psi(\mathbf{x}) = R_{El}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ , come descritto in Parte I, Sez. 6.3.2.

Formalmente, poiché  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0$  è possibile diagonalizzare simultaneamente i due operatori. Tuttavia, non è detto che gli autostati prodotto  $|n_x n_y n_z\rangle$  da noi utilizzati finora siano anche autostati di  $\hat{\mathbf{L}}^2$ .

**GROUND STATE** Usando il fatto che il momento angolare si scrive in rappresentazione delle coordinate come

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} = (-i\hbar) \left( \hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{\mathbf{L}}^2 &= -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]\end{aligned}$$

si può verificare che il fondamentale è a momento angolare nullo. Infatti abbiamo visto che in rappresentazione delle coordinate

$$\langle \mathbf{x} | 000 \rangle = \psi_{000}(\mathbf{x}) = \left( \frac{1}{r_\omega \pi^{1/2}} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{r^2}{2r_\omega^2} \right)$$

pertanto, poiché la funzione d'onda del fondamentale non dipende da  $\theta$  e  $\phi$ , allora  $\hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{000}(\mathbf{x}) = 0$ ,  $\hat{L}_z \psi_{000}(\mathbf{x}) = 0$ .

**PRIMI ECCITATI** Facendo il calcolo si può verificare che

$$\hat{L}^2 |100\rangle = 2\hbar^2 |100\rangle$$

e lo stesso vale per  $|010\rangle$  e  $|001\rangle$ , cioè tutti e tre stati hanno  $l = 1$ . In effetti la parte angolare delle funzioni d'onda (una volta scritte in coordinate sferiche) sono combinazioni lineari di armoniche sferiche con  $l = 1$ .

**STATI CON  $m$  DEFINITO** Adesso proviamo a rispondere ad una domanda più sottile: vogliamo verificare se i tre stati sono anche autostati di  $\hat{L}_z$ , e in caso contrario trovare una base per il primo livello eccitato composto da autostati  $|l m\rangle$  di  $\hat{H}$ ,  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{L}_z$ .

Le funzioni d'onda degli stati  $|100\rangle$ ,  $|010\rangle$ ,  $|001\rangle$  non sono autofunzioni della proiezione  $\hat{L}_z$ . Infatti le autofunzioni del momento angolare sono, in coordinate sferiche, le armoniche sferiche moltiplicate eventualmente per termini che dipendono soltanto da  $r$ . Ma se prendiamo per esempio  $\psi_{100}$ ,

$$\begin{aligned}\psi_{100}(\mathbf{x}) &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4} r_\omega^{3/2}} \frac{x}{r_\omega} \exp \left( -\frac{r^2}{2r_\omega^2} \right) \\ &= \underbrace{\frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4} r_\omega^{5/2}} r}_{\text{Parte radiale}} \exp \left( -\frac{r^2}{2r_\omega^2} \right) \underbrace{\sin \theta \cos \phi}_{\text{Parte angolare}}\end{aligned}$$

ci accorgiamo che non ha come parte angolare un'armonica sferica, e allo stesso modo neanche  $\psi_{010} \propto y \propto \sin \theta \sin \phi$ . Tuttavia la seguente combinazione lineare

$$\psi_{100}(\mathbf{x}) + i\psi_{010}(\mathbf{x}) \propto \sin \theta \cos \phi + i \sin \theta \sin \phi = \sin \theta e^{i\phi}$$

è un'autofunzione del momento angolare, perché ha la stessa dipendenza angolare dell'armonica sferica 1-1-esima:

$$Y_{11}(\theta, \phi) = i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$$

e pertanto abbiamo appena trovato un autostato del momento angolare orbitale,

$$\frac{\psi_{100}(\mathbf{x}) + i\psi_{010}(\mathbf{x})}{\sqrt{2}} = \langle \mathbf{x} | \left( \frac{|100\rangle + i|010\rangle}{\sqrt{2}} \right)$$

relativo ai numeri quantici  $l = 1, m = 1$ .

Per lo stesso motivo la combinazione  $\psi_{100}(\mathbf{x}) - i\psi_{010}(\mathbf{x})$  ha la stessa dipendenza angolare dell'armonica sferica con  $l = 1$  e  $m = -1$ :

$$\begin{aligned} \psi_{100}(\mathbf{x}) - i\psi_{010}(\mathbf{x}) &\propto \sin \theta \cos \phi - i \sin \theta \sin \phi = \sin \theta e^{-i\phi} \\ Y_{1-1}(\theta, \phi) &= i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \end{aligned}$$

Pertanto lo stato

$$\frac{|100\rangle - i|010\rangle}{\sqrt{2}}$$

è autostato di  $\hat{\mathbf{L}}^2$  con relativo numero quantico 1, e di  $\hat{L}_z$  con numero quantico  $-1$ .

Infine, fortunatamente, lo stato  $|001\rangle$  ci fa il favore di essere già un autostato di  $\hat{\mathbf{L}}^2$  e  $\hat{L}_z$ :

$$\begin{aligned} \psi_{001}(\mathbf{x}) &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4} r_\omega^{3/2}} \frac{z}{r_\omega} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_\omega^2}\right) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4} r_\omega^{3/2}} \frac{r}{r_\omega} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_\omega^2}\right) \cos \theta \end{aligned}$$

la cui parte angolare è multiplo di

$$Y_{10}(\theta, \phi) = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

dunque  $|001\rangle$  è un autostato del momento angolare con  $l = 1$  e  $m = 0$ .

Questa procedura sembra arbitraria e poco sistematica, sebbene in realtà possa essere legata ad un risultato più generale che abbiamo trattato in Parte I, capitolo 8, cioè dell'associazione tra operatori vettoriali e tensori sferici. In particolare, raccogliendo in un vettore le tre funzioni d'onda dei primi stati eccitati esse si possono scrivere come

$$\begin{bmatrix} \psi_{100}(\mathbf{x}) \\ \psi_{010}(\mathbf{x}) \\ \psi_{001}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4} r_\omega^{5/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_\omega^2}\right) \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \equiv \phi(r) \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

dove il prefattore comune  $\phi(r)$  è invariante sotto rotazioni. Sotto rotazione degli assi cartesiani, il vettore appena scritto trasforma dunque come il vettore  $\mathbf{x} = (x, y, z)$ , cioè in modo appunto *vettoriale*. Abbiamo visto che ad

un operatore vettoriale come  $\hat{\mathbf{x}}$  è possibile associare tre componenti di un tensore sferico di rango  $k = 1$ ,

$$\hat{T}_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} \pm i \hat{y}) \quad \hat{T}_0^{(1)} = \hat{z}$$

dove  $\hat{T}_q^{(k)}$  trasforma sotto rotazioni come un autostato di  $\hat{\mathbf{L}}^2$  e  $\hat{L}_z$  con  $l = k$  e con  $m = q$ .

Nel nostro caso abbiamo implicitamente sfruttato la proprietà secondo cui l'azione di un tensore sferico di rango  $k = 1$  su una funzione scalare è di ottenere uno stato con  $l = 1$  e  $m = q$ , illustrata in Parte I, Sez. 10.1.3.

Allora non ci stupisce che con queste combinazioniabbiamo trovato degli stati a momento angolare definito, in quanto

$$\begin{aligned} (x + iy)\phi(r) &\propto \hat{T}_1^{(1)}\phi(r) & l = 1, m = 1 \\ (x - iy)\phi(r) &\propto \hat{T}_{-1}^{(1)}\phi(r) & l = 1, m = -1 \\ z\phi(r) &\propto \hat{T}_0^{(1)}\phi(r) & l = 1, m = 0 \end{aligned}$$

coerentemente con quanto trovato allora. Questo ragionamento non è che un caso particolare di alcune proprietà generali, che abbiamo illustrato in Sez. 10.2, Parte I.

(7) Per calcolare l'effetto della perturbazione sulle energie, calcoliamo gli elementi di matrice della perturbazione. Possiamo prendere come base dello spazio di spin la base prodotto, scrivendo un generico stato del sistema come

$$|n_x n_y n_z\rangle \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \sigma_1 \sigma_2 \right\rangle = |n_x n_y n_z\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \sigma_1 \sigma_2 \right\rangle$$

dove usiamo la convenzione  $|s_1 s_2 \sigma_1 \sigma_2\rangle = |s_1 \sigma_1\rangle \otimes |s_2 \sigma_2\rangle$  per lo spazio di spin, e indichiamo con  $\sigma$  la proiezione lungo  $z$  dello spin,  $\sigma = \pm 1/2$ .

Un elemento generico di matrice si scrive allora

$$\begin{aligned} \left\langle n_x n_y n_z \left| \left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \sigma_1 \sigma_2 \right| \hat{V}(\mathbf{x}) \left| n_x n_y n_z \right\rangle \right| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \sigma_1 \sigma_2 \right\rangle \\ = \beta \langle n_x n_y n_z | \delta(\mathbf{x}) | n_x n_y n_z \rangle \left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \sigma_1 \sigma_2 | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_c | \frac{1}{2} \frac{1}{2} f \sigma_1 \sigma_2 \right\rangle \end{aligned}$$

La parte spaziale si calcola immediatamente in rappresentazione delle coordinate

$$\langle n_x n_y n_z | \delta(\mathbf{x}) | n_x n_y n_z \rangle = \int \psi_{n_x n_y n_z}^*(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x}) \psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{x}) d^3x = |\psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{0})|^2$$

mentre per la parte angolare la cosa più semplice è cambiare base: abbiamo visto più di una volta nei problemi precedenti che l'operatore  $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_c$ , essendo scalare sotto rotazioni generate dallo spin totale  $\hat{\mathbf{S}}_T = \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}_c$ , è diagonale nella base comune a  $\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{S}}_c, \hat{\mathbf{S}}_T$ , per cui facciamo il cambio di base

$$\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \sigma_1 \sigma_2 \right\rangle \rightarrow \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} s_T \sigma_T \right\rangle$$

con  $s_T = 0, 1$ . La perturbazione è diagonale perché si può scrivere

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_c = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{S}}_T^2 - \hat{\mathbf{S}}_c^2 - \hat{\mathbf{S}}^2)$$

Pertanto nella nuova base

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} s_T \sigma_T \middle| \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_c \middle| \frac{1}{2} \frac{1}{2} s_T \sigma_T \right\rangle &= \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} s_T \sigma_T \middle| \hat{\mathbf{S}}_T^2 - \hat{\mathbf{S}}_c^2 - \hat{\mathbf{S}}^2 \middle| \frac{1}{2} \frac{1}{2} s_T \sigma_T \right\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \left[ s_T(s_T + 1) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \left[ s_T(s_T + 1) - \frac{3}{2} \right] \end{aligned}$$

A questo punto abbiamo risolto il problema: essendo la perturbazione diagonale la correzione al primo ordine dell'energia è

$$E_{n_x n_y n_z s_T \sigma_T}^{(1)} = \frac{\beta \hbar^2}{2} |\psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{0})|^2 \left[ s_T(s_T + 1) - \frac{3}{2} \right]$$

e gli autostati relativi, che subiscono questo *shift* in energia sono

$$|n_x n_y n_z\rangle \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} s_T \sigma_T \right\rangle$$

Lo stato fondamentale è quattro volte degenere – nella base originale  $\sigma_1 = \pm 1/2$ ,  $\sigma_2 = \pm 1/2$  mentre non c'è degenerazione della parte orbitale  $|000\rangle$  – e pertanto, poiché

$$\psi_{000}(\mathbf{0}) = \left( \frac{1}{r_\omega \pi^{1/2}} \right)^{3/2}$$

si ha uno *splitting* dei livelli rispetto al valore imperturbato  $E_{000} = 3/2\hbar\omega$  di

$$E_{00011}^{(1)} = E_{00010}^{(1)} = E_{0001-1}^{(1)} = \frac{\beta \hbar^2}{4} \frac{1}{r_\omega^3 \pi^{3/2}}$$

e

$$E_{00000}^{(1)} = -\frac{3\beta \hbar^2}{4} \frac{1}{r_\omega^3 \pi^{3/2}}$$

cioè il singoletto  $s_T = 0$  ha una correzione negativa all'energia, mentre i tre stati con  $s_T = 1$  una uguale correzione positiva.

Per quanto riguarda i primi stati eccitati, poiché la parte orbitale dell'elemento di matrice è  $|\psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{0})|^2 = 0$  essendo le relative funzioni d'onda nulle nell'origine, la correzione al primo ordine è nulla.

(8) Introducendo una perturbazione “spin-orbita” non vale più l'invarianza per rotazioni nello spazio delle coordinate. Pertanto  $\mathbf{L}$  non è più una quantità conservata: infatti si può verificare che per le regole di commutazione  $[L_i, \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}] \neq 0$ . Analogamente  $[S_i, \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}] \neq 0$ . Le uniche quantità ancora conservate sono:

- Il momento angolare totale  $\mathbf{J}$ , poiché il termine  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$  è invariante sotto rotazioni globali generate da  $\hat{\mathbf{J}}$ .
- La parità  $\mathcal{P}$ , perché anche il nuovo termine è invariante sotto parità.
- L'energia,  $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ .

(9) Partiamo dalla scrittura alternativa

$$\hat{H}_{ls} = \frac{\gamma}{2} (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2)$$

**GROUND STATE** Lo stato fondamentale può essere scritto, con la convenzione  $|l m\rangle \otimes |s \sigma\rangle$

$$|0 0\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} \sigma \right\rangle$$

con  $\sigma = \pm 1/2$  autovalore di  $\hat{S}_z$ . Come nel punto precedente, anche in questo caso la perturbazione è diagonale nella base del momento angolare totale  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ . Tuttavia poiché  $l = 0$

$$\left| \frac{1}{2} - 0 \right| \leq J \leq \frac{1}{2} + 0 \quad \Rightarrow \quad J = \frac{1}{2}$$

Ma allora la matrice di perturbazione è nulla su uno stato della base del momento angolare totale:

$$|l s J M\rangle = \left| 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} M \right\rangle$$

dove  $M = \sigma + 0 = \sigma$ , e pertanto

$$\left\langle 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} M \middle| \frac{\gamma}{2} (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) \middle| 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} M \right\rangle = \frac{\gamma \hbar^2}{2} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - 0 - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \right] = 0$$

Dunque la correzione all'energia è nulla al primo ordine:

$$E_{g.s.}^{(1)} = 0$$

**PRIMI STATI ECCITATI** Anche in questo caso conviene partire dalla base trovata nel punto (6) del primo autospazio eccitato, con  $E_1 = 5/2\hbar\omega$ . Etichettiamo ognuno dei tre stati con i numeri quantici  $|l m\rangle$ :

$$\begin{aligned} |1 0\rangle &= \frac{|1 0 0\rangle + i |0 1 0\rangle}{\sqrt{2}} \\ |1 -1\rangle &= \frac{|1 0 0\rangle - i |0 1 0\rangle}{\sqrt{2}} \\ |1 0\rangle &= |0 0 1\rangle \end{aligned}$$

La degenerazione complessiva è 6 a causa della degenerazione di spin. Con lo stesso cambio di base dei punti precedenti, il momento angolare totale  $|l s J M\rangle$  può avere valori

$$\left| 1 - \frac{1}{2} \right| \leq J \leq 1 + \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$$

E la perturbazione è diagonale, ed ha come elementi di matrice

$$\begin{aligned} \left\langle 1 \frac{1}{2} J M \middle| \frac{\gamma}{2} (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) \middle| 1 \frac{1}{2} J M \right\rangle &= \frac{\gamma \hbar^2}{2} \left[ J(J+1) - 1(1+2) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \right] \\ &= \frac{\gamma \hbar^2}{2} \left[ J(J+1) - \frac{11}{4} \right] \end{aligned}$$

Pertanto gli stati con  $J = 3/2$  hanno il seguente *shift* in energia (e restano con degenerazione 4)

$$E_{\text{exc},J=3/2}^{(1)} = \frac{\gamma\hbar^2}{2}$$

mentre i due stati con  $J = 1/2$  restano degeneri e hanno uno *shift* negativo in energia

$$E_{\text{exc},J=1/2}^{(1)} = -\gamma\hbar^2$$

La condizione di validità dell'approssimazione è che la correzione sia piccola rispetto alla spaziatura in energia tra i livelli:

$$\gamma\hbar^2 \ll \hbar\omega$$

(10) La correzione all'energia dovuta all'introduzione di  $U(r)$  si scrive sullo stato fondamentale come

$$\begin{aligned} E_{\text{g.s.}}^{(1)} &= \left\langle 000 \left| -\frac{k}{r} \right| 000 \right\rangle \\ &= - \int |\psi_{000}(r)|^2 \frac{k}{r} r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\ &= -4\pi k \int_0^\infty r |\psi_{000}(r)|^2 dr \\ &= -\frac{4\pi k}{r_\omega^3 \pi^{3/2}} \int_0^\infty r e^{-r^2/r_\omega^2} dr \\ &= -\frac{4k}{r_\omega^3 \pi^{1/2}} \frac{r_\omega^2}{2} \int_0^\infty e^{-u} du \\ &= -\frac{2k}{r_\omega \pi^{1/2}} \end{aligned}$$

dove si è usato il cambio di variabile  $u = r^2/r_\omega^2$ ,  $du = 2r/r_\omega^2 dr$ .

Per i primi stati eccitati, occorre accertarsi che la perturbazione sia diagonale nel sottospazio generato da  $\{|100\rangle, |010\rangle, |001\rangle\}$ . Essa è sicuramente diagonale nella base a momento angolare definito, riportata nel punto precedente,  $\{|10\rangle, |11\rangle, |1-1\rangle\}$ , per il teorema di Wigner-Eckart. Una delle sue conseguenze, infatti, è che per perturbazioni scalari c'è una regola di selezione:

$$\left\langle lm \left| \frac{1}{r} \right| l'm' \right\rangle \propto \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

dunque nella base  $\{|10\rangle, |11\rangle, |1-1\rangle\}$  la perturbazione è diagonale.

D'altronde,  $|100\rangle$  e  $|010\rangle$  sono entrambi una combinazione lineare di  $|10\rangle$  e  $|1-1\rangle$ , mentre  $|001\rangle = |10\rangle$ . Dunque dal fatto che

$$\begin{aligned} \langle 11 | U(r) | 10 \rangle &= 0 \\ \langle 1-1 | U(r) | 10 \rangle &= 0 \end{aligned}$$

concludiamo che  $\text{Span}\{|100\rangle, |010\rangle\}$  (che coincide con  $\text{Span}\{|11\rangle, |1-1\rangle\}$ ) è in somma diretta con  $|001\rangle$ , dunque

$$\begin{aligned} \langle 100 | U(r) | 001 \rangle &= 0 \\ \langle 010 | U(r) | 001 \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Mentre si può verificare esplicitamente che il restante elemento fuori diagonale è nullo, in quanto guardando alle parti angolari del relativo integrale, poiché  $x = r \sin \theta \cos \phi$  e  $y = r \sin \theta \sin \phi$ :

$$\begin{aligned}\langle 100 | U(r) | 010 \rangle &\propto \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \sin \theta \cos \phi \sin \theta \sin \phi d\cos \theta d\phi \\ &\propto \int_0^{2\pi} \cos \phi \sin \phi d\phi = 0\end{aligned}$$

dove non abbiamo riportato la parte di integrale dipendente da  $r$ .

Riportiamo il calcolo della correzione per i primi eccitati:

$$\begin{aligned}E_{100}^{(1)} &= - \int |\psi_{100}(r)|^2 \frac{k}{r} r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\ &= - \frac{2k}{\pi^{3/2} r_\omega^5} \int r^2 e^{-r^2/r_\omega^2} \sin^2 \theta \cos^2 \phi r dr \sin \theta d\theta d\phi \\ &= - \frac{2k}{\pi^{3/2} r_\omega^5} \underbrace{\int_0^\infty r^3 e^{-r^2/r_\omega^2} dr}_{r_\omega^4/2} \underbrace{\int_{-1}^1 \sin^2 \theta d\cos \theta}_{4/3} \underbrace{\int_0^{2\pi} \cos^2 \phi d\phi}_{\pi} \\ &= - \frac{4k}{3r_\omega \pi^{1/2}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}E_{010}^{(1)} &= - \int |\psi_{010}(r)|^2 \frac{k}{r} r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\ &= - \frac{2k}{\pi^{3/2} r_\omega^5} \int r^2 e^{-r^2/r_\omega^2} \sin^2 \theta \sin^2 \phi r dr \sin \theta d\theta d\phi \\ &= - \frac{2k}{\pi^{3/2} r_\omega^5} \underbrace{\int_0^\infty r^3 e^{-r^2/r_\omega^2} dr}_{r_\omega^4/2} \underbrace{\int_{-1}^1 \sin^2 \theta d\cos \theta}_{4/3} \underbrace{\int_0^{2\pi} \sin^2 \phi d\phi}_{\pi} \\ &= - \frac{4k}{3r_\omega \pi^{1/2}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}E_{001}^{(1)} &= - \int |\psi_{001}(r)|^2 \frac{k}{r} r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\ &= - \frac{2k}{\pi^{3/2} r_\omega^5} \int r^2 e^{-r^2/r_\omega^2} \cos^2 \theta r dr \sin \theta d\theta d\phi \\ &= - \frac{2k}{\pi^{3/2} r_\omega^5} \underbrace{\int_0^\infty r^3 e^{-r^2/r_\omega^2} dr}_{r_\omega^4/2} \underbrace{\int_{-1}^1 \cos^2 \theta d\cos \theta}_{2/3} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{2\pi} \\ &= - \frac{4k}{3r_\omega \pi^{1/2}}\end{aligned}$$

d'altro canto non ci stupisce che i risultati siano gli stessi, perché l'operatore  $1/r$  è a simmetria sferica e dunque il suo valor medio non può dipendere da qual è la direzione in cui l'oscillatore è eccitato (dal momento che la scelta degli assi è arbitraria).

### 5.3 POTENZIALE ARMONICO BIDIMENSIONALE

Consideriamo un sistema costituito da una particella di massa  $m$ , vincolata a muoversi su un piano sotto l'azione di un potenziale armonico generico. La forma dell'hamiltoniano è la seguente

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{\alpha}{2}\hat{\mathbf{r}}^2 \quad \text{con} \quad \hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 \quad \hat{\mathbf{r}}^2 = \hat{x}^2 + \hat{y}^2$$

dove  $\alpha$  è un parametro reale, nonchè la costante elastica del sistema.<sup>4</sup>

- (1) Definire le unità naturali del problema, che permettono di riscrivere l'equazione di Schrödinger in termini di quantità adimensionali. In particolare, scrivere la scala di lunghezza, di tempo e di energia del problema.
- (2) Calcolare lo spettro energetico e le degenerazioni dei livelli.
- (3) Scrivere esplicitamente le funzioni d'onda dello stato fondamentale e dei primi stati eccitati.
- (4) Calcolare la posizione media e l'impulso medio della particella nello stato fondamentale e nei primi stati eccitati. Calcolare la distanza media dal centro per il livello fondamentale.
- (5) Calcolare la probabilità che la particella nello stato fondamentale si trovi ad una distanza  $r \leq r_*$  e la probabilità che abbia un impulso  $p \geq p_*$  ( $r_* > 0$  e  $p_* > 0$  sono valori generici).

La particella è adesso soggetta ad una forza aggiuntiva costante  $\mathbf{F}$  lungo uno degli assi.

- (6) Assumendo  $F$  piccola, calcolare le correzioni allo spettro, al primo ordine in  $F$ , sullo stato fondamentale e i primi stati eccitati.
- (7) Assumendo  $F$  piccola, calcolare al secondo ordine in  $F$  la correzione allo spettro per il livello fondamentale. Discutere la validità dell'approssimazione al secondo ordine.
- (8) Calcolare esattamente lo spettro in presenza di  $F$ . Confrontare con il calcolo perturbativo.

Consideriamo adesso due particelle identiche fermioniche di spin  $1/2$  soggette al potenziale armonico introdotto sopra, la cui Hamiltoniana è

$$\hat{H}_2 = \sum_{a=1}^2 \left( \frac{\hat{p}_a^2}{2m} + \frac{1}{2}\alpha\hat{r}_a^2 \right)$$

- (9) Assumendo che l'Hamiltoniana delle due particelle non dipenda dallo spin, scrivere la funzione d'onda dello stato fondamentale e dei primi stati eccitati, tenendo conto degli stati di spin.
- (10) Rispondere alla stessa domanda in (9), assumendo un'interazione spin-spin del tipo

$$\hat{H}_{\text{spin}} = \kappa \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$$

con  $\kappa > 0$ .

Riportiamo per referenza le funzioni d'onda in rappresentazione di Schrödinger dei primi due livelli dell'oscillatore armonico unidimensionale:

$$\varphi_0(x) = \sqrt{\frac{1}{\gamma\pi^{1/2}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\gamma^2}\right) \quad \varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\gamma\pi^{1/2}}}\frac{x}{\gamma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\gamma^2}\right)$$

dove  $\gamma$  è la lunghezza caratteristica dell'oscillatore armonico.

#### SOLUZIONE

(1) A differenza di quanto visto sin ora, qui il potenziale armonico non contiene esplicitamente la frequenza angolare  $\omega$ , utile a definire immediatamente la scala dei tempi del problema. Possiamo tuttavia notare che, dovendo l'hamiltoniano avere le dimensioni di una energia, allora si ha

$$[\alpha] = [M][T]^{-2}$$

che se invertita ci porta a concludere che la scala dei tempi dovrà essere

$$T_\alpha = \sqrt{\frac{m}{\alpha}}$$

Nota questa, la scala delle energie si estraie agevolmente come segue

$$E_\alpha = \frac{\hbar}{T_\alpha} \equiv \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

e ciò ci consente di ricavare anche la scala delle lunghezze tipiche

$$l_\alpha = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE_\alpha}} \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{m\alpha}}}$$

ricordando che siamo in un contesto non-relativistico, per cui  $p_\alpha \propto \sqrt{mE_\alpha}$ . D'ora in avanti scriveremo  $l_\alpha = \gamma$ .

(2) La forma dell'hamiltoniano ed il calcolo dimensionale appena svolto, suggeriscono che lo spettro energetico debba coincidere con quello dell'oscillatore armonico bidimensionale isotropo, a meno della seguente ridefinizione del parametro  $\omega$

$$\omega \longrightarrow \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

che quindi porta ad uno spettro della forma

$$E_n = \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{m}} (1 + n_x + n_y) \equiv E_\alpha (1 + n)$$

dove al solito  $n = n_x + n_y$ . A questo punto, la degenerazione dei vari livelli è identica a quella del problema appena citato; per i primi livelli abbiamo, ad esempio, gli autostati seguenti

$$\begin{array}{llll} \overbrace{|00\rangle}^{n_x n_y} & E_0 & = & E_\alpha \\ |10\rangle, |01\rangle & E_1 & = & 2E_\alpha \\ |20\rangle, |11\rangle, |02\rangle & E_2 & = & 3E_\alpha \end{array}$$

In generale, si avrà

$$\text{Deg}(n) = n + 1$$

il che può essere giustificato, ad esempio, notando che esistono  $n$  mosse del tipo

$$|n_x, n_y\rangle \rightarrow |n_x - 1, n_y + 1\rangle$$

e tali da ottenere una sequenza di  $n + 1$  autostati

$$|n, 0\rangle \rightarrow |n - 1, 1\rangle \rightarrow |n - 2, 2\rangle \rightarrow \dots \rightarrow |0, n\rangle$$

mantenendo costante  $n_x + n_y \equiv n$ .

(3) Passando alla rappresentazione delle coordinate, possiamo scrivere le funzioni d'onda associate ai vari autostati, notando che la dipendenza di queste dalle variabili  $x$  e  $y$  può essere fattorizzata, dato che il sistema può essere visto come la sovrapposizione di due sistemi unidimensionali indipendenti. Dunque avremo in generale

$$\psi_{n_x n_y}(x, y) = \varphi_{n_x}(x) \varphi_{n_y}(y)$$

dove abbiamo riportato le soluzioni unidimensionali  $\varphi_{n_i}(x_i)$  nella traccia della prova d'esame, per il *ground state* e per il primo livello eccitato.

Per questi livelli in particolare le autofunzioni globali per il sistema bidimensionale saranno dunque

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{r}} | 0, 0 \rangle &= \psi_{00}(x, y) = \varphi_0(x) \varphi_0(y) = \frac{1}{\gamma \sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{2\gamma^2}} \\ \langle \hat{\mathbf{r}} | 1, 0 \rangle &= \psi_{10}(x, y) = \varphi_1(x) \varphi_0(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{x}{\gamma^2} e^{-\frac{r^2}{2\gamma^2}} \\ \langle \hat{\mathbf{r}} | 0, 1 \rangle &= \psi_{01}(x, y) = \varphi_0(x) \varphi_1(y) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{y}{\gamma^2} e^{-\frac{r^2}{2\gamma^2}} \end{aligned}$$

dove  $r^2 = x^2 + y^2$ .

(4) Le funzioni d'onda appena ottenute ci aiutano a ricavare questi valori di aspettazione. Iniziamo con lo stato fondamentale; il valore atteso della posizione sarà per definizione il seguente

$$\langle 00 | \hat{\mathbf{r}} | 00 \rangle = \begin{bmatrix} \langle 00 | \hat{x} | 00 \rangle \\ \langle 00 | \hat{y} | 00 \rangle \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \int_{-\infty}^{\infty} x |\varphi_0(x)|^2 dx \\ \int_{-\infty}^{\infty} y |\varphi_0(y)|^2 dy \end{bmatrix}$$

dove abbiamo tenuto conto del fatto che le funzioni d'onda  $\varphi_0(x)$  e  $\varphi_0(y)$  sono già normalizzate, quando integrate nei rispettivi domini. Essendo l'integrando dispari in entrambi i casi, otteniamo

$$\langle 00 | \hat{\mathbf{r}} | 00 \rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Per quanto riguarda l'impulso medio, potremmo svolgere un calcolo analogo, passando per la rappresentazione degli impulsi; questo richiederebbe il calcolo della Trasformata di Fourier della funzione d'onda  $\varphi_0$ , che fortunatamente in questo caso è abbastanza semplice: si tratterebbe comunque di

una gaussiana. Da ciò – consistentemente con le attese – possiamo aspettarci che il risultato sia identico al precedente. Tuttavia, in casi più complessi questa potrebbe non essere la strada più furba da seguire; possiamo svolgere il calcolo passando per l'operatore di parità  $\hat{P}$ , ottenendo

$$\langle 00|\hat{\mathbf{p}}|00\rangle = \langle 00|\hat{P}^\dagger \hat{\mathbf{p}} \hat{P}|00\rangle = -\langle 00|\hat{\mathbf{p}}|00\rangle \implies \langle 00|\hat{\mathbf{p}}|00\rangle = 0$$

ricordando che quest'ultimo cambia il segno all'operatore  $\hat{\mathbf{p}}$ , lasciando inva-riato quello dell'autostato  $|00\rangle$ .

Veniamo ora al primo livello eccitato. Per la posizione media si ottiene

$$\langle 10|\hat{\mathbf{r}}|10\rangle = \begin{bmatrix} \langle 10|\hat{x}|10\rangle \\ \langle 10|\hat{y}|10\rangle \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \int_{-\infty}^{\infty} x |\varphi_1(x)|^2 dx \\ \int_{-\infty}^{\infty} y |\varphi_0(y)|^2 dy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

ancora una volta. Potremmo svolgere ancora conti di questo tipo, ma in realtà possiamo anche rispondere ai vari quesiti con il seguente argomento. Essendo gli operatori di posizione e di impulso antisimmetrici rispetto all'operazione di parità, dal momento che gli autostati hanno tutti parità definita dalla relazione

$$\hat{P}|n\rangle = (-1)^n |n\rangle$$

allora i valori medi di posizione ed impulso saranno determinati soltanto dalla parità di questi ultimi; si avrà sempre

$$\langle n|\hat{\mathbf{x}}|n\rangle = -(-1)^{2n} \langle n|\hat{\mathbf{x}}|n\rangle \implies \langle n|\hat{\mathbf{x}}|n\rangle = 0 \quad \forall n$$

e lo stesso vale per l'operatore  $\hat{\mathbf{p}}$ .

Resta da calcolare la distanza media dal centro nel *ground state*, che è ben diversa dalla posizione media. Dobbiamo infatti calcolare il valore atteso di quell'operatore che composto con se stesso dà

$$\hat{x}^2 + \hat{y}^2$$

e ciò è anche diverso dal calcolare la distanza RMS  $\sqrt{\langle \hat{r}^2 \rangle}$ . Sostanzialmente, cerchiamo il valore medio dell'operatore associato alla osservabile  $|\mathbf{r}|$ , sullo stato fondamentale. La rappresentazione delle coordinate risulta essere vantaggiosa in questo caso, infatti detto  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ , allora

$$\langle r \rangle = \int_{\mathbb{R}^2} \sqrt{x^2 + y^2} |\psi_{00}(x, y)|^2 d^2 \mathbf{r}$$

e passando in coordinate cilindriche – ricordiamo che l'elemento della misura diventa  $d^2 \mathbf{r} = r d\phi dr$

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \frac{1}{\pi \gamma^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} r^2 e^{-\frac{r^2}{\gamma^2}} dr \\ &= \frac{2}{\gamma^2} \int_0^{\infty} r^2 e^{-\frac{r^2}{\gamma^2}} dr \end{aligned}$$

Se chiamiamo  $\rho = r/\gamma$  allora otteniamo

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= 2\gamma \int_0^{\infty} \rho^2 e^{-\rho^2} d\rho \\ &= -2\gamma \frac{d}{d\beta} \left[ \int_0^{\infty} e^{-\beta \rho^2} d\rho \right]_{\beta=1} \\ &= -\gamma \frac{d}{d\beta} \left[ \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \right]_{\beta=1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \gamma \end{aligned}$$

dove abbiamo usato l'integrale gaussiano

$$\int_0^\infty e^{-\beta r^2} dr = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

(5) Per quanto riguarda la distanza, possiamo procedere secondo definizione

$$P(r \leq r_*) = \int_{r \leq r_*} |\psi_{00}(x, y)|^2 d^2 \mathbf{r}$$

e anche in questo caso, è conveniente passare in coordinate cilindriche

$$P(r \leq r_*) = \frac{1}{\pi \gamma^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{r_*} e^{-\frac{r^2}{\gamma^2}} r dr$$

e definendo anche qui  $\rho = r/\gamma$  otteniamo

$$P(r \leq r_*) = 2 \int_0^{\rho_*} e^{-\rho^2} \rho d\rho$$

dove  $\rho_* = r_*/\gamma$ . Notiamo in particolare che  $2\rho d\rho = d\rho^2$ ; detta quindi  $s = \rho^2$  abbiamo

$$P(r \leq r_*) = \int_0^{\rho_*^2} e^{-s} ds \equiv 1 - e^{-\frac{r_*^2}{\gamma^2}}$$

ovvero il risultato cercato; notiamo che – consistentemente con quanto atteso – se il valore  $r_*$  da noi scelto è molto maggiore della lunghezza tipica  $\gamma$  del sistema, allora questa probabilità tende ad essere asintoticamente unitaria. Non solo, essa ammette uno sviluppo in serie comodamente calcolabile nel caso di valori di  $r_*$  piccoli.

Per il calcolo della probabilità

$$P(p \geq p_*)$$

potremmo passare per la rappresentazione degli impulsi. La pigrizia ci impedisce ancora una volta di fare ciò, per cui scegliamo una strada più diversa ed istruttiva. Notiamo innanzi tutto che la probabilità complementare a quella cercata è legata a quest'ultima dalla relazione

$$P(p \geq p_*) = 1 - P(p \leq p_*)$$

e vedremo tra un attimo che abbiamo in realtà già calcolato  $P(p \leq p_*)$ . Notiamo infatti che l'hamiltoniano del sistema in esame

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{\alpha}{2} \hat{\mathbf{r}}^2$$

presenta una simmetria simbolica per scambio, dal momento che le operazioni

$$\begin{cases} \alpha \rightarrow \alpha' = \frac{1}{m} \\ m \rightarrow m' = \frac{1}{\alpha} \end{cases}$$

insieme a

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{r}} \rightarrow \hat{\mathbf{r}}' = -\hat{\mathbf{p}} \\ \hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}}' = \hat{\mathbf{r}} \end{cases}$$

lasciano simbolicamente invariato l'hamiltoniano

$$\hat{H}' = \frac{\hat{\mathbf{p}}'^2}{2m'} + \frac{\alpha'}{2} \hat{\mathbf{r}}'^2$$

ed anche le relazioni di commutazione tra posizione ed impulso, ad esempio. Precisiamo che il segno '−' in  $\hat{\mathbf{r}}' = -\hat{\mathbf{p}}$  serve proprio a tenere conto di un segno '−' nelle nuove relazioni di commutazione

$$[\hat{x}'_i, \hat{p}'_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

oltre a rendere del tutto interscambiabili queste due grandezze coniugate anche nelle due rappresentazioni reciproche, dal momento che, originariamente – indicando con il pedice la rappresentazione

$$\hat{\mathbf{p}}_{\hat{\mathbf{r}}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{r}}} \quad \text{ma} \quad \hat{\mathbf{r}}_{\hat{\mathbf{p}}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{p}}}$$

Tutto ciò ovviamente non influenza l'hamiltoniano del sistema, grazie al fatto che questo è quadratico negli operatori in questione; ma comprendiamo che tale pignoleria risulta necessaria, nel *far finta di rifare da capo* i calcoli delle autofunzioni nella rappresentazione delle *nuove* coordinate, che sono gli oggetti necessari – e da noi qui già noti – a svolgere i calcoli delle probabilità.

A questo punto il più è fatto, e siamo fortunati ancora una volta: dobbiamo calcolare la probabilità che l'impulso sia *in modulo* minore di  $p_*$ , dunque il segno '−' di cui sopra non intacca il tutto; si ha che

$$P(p \leq p_*) \iff P(r' \leq r'_*)$$

ma abbiamo già simbolicamente calcolato la seconda, che vale

$$P(r' \leq r'_*) = 1 - e^{-\frac{r_*'^2}{\gamma'^2}}$$

con  $r'_*$  e  $\gamma'$  da ridefinire in funzione delle grandezze nello spazio degli impulsi. Avendo come riferimento le trasformazioni dei parametri e degli operatori di sopra, ci convinciamo presto che questi nuovi parametri valgono

$$\begin{cases} \gamma' = \frac{\hbar}{\gamma} \\ r'_* = p_* \end{cases}$$

dal momento che

$$\gamma' = \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{m'\alpha'}}}$$

e che dovendo considerare i moduli delle due osservabili vettoriali, allora il segno non influenza la scelta del valore limite  $r'_*$ .

Ricordiamo infine che siamo interessati alla probabilità complementare a quella individuata sopra, per cui il risultato finale sarà

$$P(p \geq p_*) = 1 - P(r' \leq r'_*) \equiv e^{-\frac{\gamma^2 p_*^2}{\hbar^2}}$$

(6) Dovendo considerare una forza costante e diretta lungo una direzione specifica – qui poniamo che sia l'asse  $\hat{x}$  – allora sappiamo che l'operatore associato alla perturbazione sarà del tipo

$$\hat{H}_1 = -F\hat{x}$$

dove  $F$  è un parametro reale e positivo, che tiene conto del modulo della forza in senso classico. Vogliamo valutare gli effetti di questa perturbazione al primo ordine in  $F$ . In particolare ci interessa lo spettro energetico

$$E_n \simeq \epsilon_n + E_n^{(1)} + \dots$$

dove  $\epsilon_n = E_n^{(0)}$  sono le energie del sistema imperturbato.

Per il *ground state* ci accorgiamo presto che non vi sono correzioni allo spettro al primo ordine, dal momento che questa sarebbe per definizione

$$E_0^{(1)} = \langle 00|\hat{H}_1|00\rangle \propto -\langle 00|\hat{x}|00\rangle = 0$$

come abbiamo già visto al punto (4).

Per il primo livello eccitato – che ricordiamo avere degenerazione due – dobbiamo diagonalizzare l'operatore  $\hat{H}_1$  nel sottospazio degenero, vale a dire la matrice

$$[\hat{H}_1]_{n=1} = \begin{bmatrix} \langle 10|\hat{H}_1|10\rangle & \langle 10|\hat{H}_1|01\rangle \\ \langle 01|\hat{H}_1|10\rangle & \langle 01|\hat{H}_1|01\rangle \end{bmatrix}$$

come sopra, abbiamo già svolto il calcolo degli elementi di matrice sulla diagonale in (4), ed erano entrambi nulli a causa della parità definita degli autostati. Quindi resta

$$[\hat{H}_1]_{n=1} = \begin{bmatrix} 0 & \langle 10|\hat{H}_1|01\rangle \\ \langle 01|\hat{H}_1|10\rangle & 0 \end{bmatrix}$$

Ci basterà calcolare uno dei due elementi di matrice rimasti, dato che la perturbazione deve essere hermitiana, dunque lo sarà anche la sua matrice in una qualsiasi base. Se guardiamo ad esempio l'elemento  $\langle 10|\hat{H}_1|01\rangle$ , ci rendiamo presto conto che i due stati  $|10\rangle$  e  $|01\rangle$  hanno la stessa parità

$$\hat{P}|10\rangle = -|10\rangle \quad \hat{P}|01\rangle = -|01\rangle$$

e quindi, ancora una volta, questo elemento di matrice è nullo, quindi lo sarà anche il suo complesso coniugato  $\langle 01|\hat{H}_1|10\rangle$ . La matrice associata alla perturbazione in questa base coincide quindi con quella nulla, per cui sono nulli anche i suoi due autovalori; ne deduciamo che la perturbazione non produce modifiche allo spettro al primo ordine, neanche per il primo livello eccitato.

(7) Vogliamo calcolare le correzioni allo spettro al secondo ordine: anticipiamo che stavolta non saranno nulle, e dopo il calcolo espliciteremo la condizione di applicabilità della teoria delle perturbazioni (ossia quantificheremo l'aggettivo "piccola" riferito alla perturbazione introdotta).

Sul ground state, che è **non degenero**, la nota formula da applicare è

$$E_0^{(2)} = \sum_{(m,n) \neq (0,0)} \frac{|\langle mn| -F\hat{x}|00\rangle|^2}{E_{m+n} - E_0}$$

Non tutti gli elementi di matrice saranno nulli, anzi è possibile derivare una regola di selezione: in termini degli operatori di salita e di discesa

$$\hat{x} = \gamma \frac{\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger}{\sqrt{2}}$$

e quindi

$$\langle mn|\hat{x}|00\rangle = \frac{\gamma}{\sqrt{2}} \langle mn|\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger|00\rangle = \frac{\gamma}{\sqrt{2}} \langle n|1\rangle \langle m|0\rangle = \frac{\gamma}{\sqrt{2}} \delta_{n1} \delta_{m0}$$

Ne segue che l'unico elemento di matrice da calcolare è  $\langle 10| -F\hat{x}|00\rangle$ . La correzione al ground-state si ha immediatamente grazie al conto appena svolto, che conduce a

$$E_0^2 = -\frac{F^2 \gamma^2}{2E_\alpha} = -\frac{F^2}{2} \frac{\hbar}{\sqrt{m\alpha}} \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\alpha}{m}} = -\frac{F^2}{2\alpha}$$

cioé si ha uno shift verso il basso del livello fondamentale.

Il calcolo dell'elemento di matrice può essere alternativamente svolto nella rappresentazione delle coordinate:

$$\begin{aligned} \langle 10|\hat{x}|00\rangle &= \int_{\mathbb{R}^2} dx dy \varphi_1^*(x) \varphi_0^*(y) x \varphi_0(x) \varphi_0(y) \\ &= \frac{1}{\gamma^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx x^2 e^{-x^2/\gamma^2} \\ &= \gamma \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{\mathbb{R}} ds s^2 e^{-s^2} \\ &= -\gamma \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{\mathbb{R}} \frac{d}{d\beta} e^{-\beta s^2} \Big|_{\beta=1} \\ &= -\gamma \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{d}{d\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \Big|_{\beta=1} = \frac{\gamma}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

È il momento di discutere la validità della nostra derivazione: avevamo visto (rimandiamo al Cap. 11 per i dettagli) affinché il calcolo abbia senso la perturbazione deve essere piccola rispetto al *gap* energetico tra i livelli imperturbati: questo per noi si traduce in

$$|\langle mn| -F\hat{x}|00\rangle|^2 \ll |\epsilon_{m+n} - \epsilon_0| \quad \forall (m, n) \quad \Rightarrow \quad F \ll \frac{\hbar}{\gamma} \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

(8) In presenza di hamiltoniane quadratiche, lo spettro può essere calcolato esattamente. In questo caso il calcolo si esegue considerando un cambio di variabile. L'hamiltoniana perturbata può essere scritta come

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{\alpha}{2}\hat{\mathbf{x}}^2 - F\hat{\mathbf{x}} \\ &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\alpha}{2}\hat{x}^2 - F\hat{x} + \frac{F^2}{2\alpha} - \frac{F^2}{2\alpha} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\alpha}{2}\hat{y}^2 \\ &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\alpha}{2}\left(\hat{x} - \frac{F}{\alpha}\right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\alpha}{2}\hat{y}^2 - \frac{F^2}{2\alpha}\end{aligned}$$

dove omettiamo l'operatore identità per alleggerire la notazione. Adesso è sufficiente eseguire un cambio di coordinata: se definiamo

$$\hat{\chi} \equiv \hat{x} - \frac{F}{\alpha}$$

le relazioni di commutazione canoniche con l'impulso lungo l'asse  $x$  sono rispettate

$$[\hat{\chi}, \hat{p}_x] = [\hat{x}, \hat{p}_x]$$

il che garantisce che la derivazione dello spettro dell'oscillatore armonico unidimensionale sia ancora valida. Il termine costante è un semplice shift generale ai livelli energetici, per cui lo spettro è quello di un oscillatore armonico bidimensionale isotropo più una costante

$$E_n = \hbar\sqrt{\frac{\alpha}{m}}(1 + n_x + n_y) - \frac{F^2}{2\alpha} \quad \text{con } n = n_x + n_y \quad \text{e} \quad n_x, n_y \in \mathbb{N}$$

Vediamo subito che il conto è coerente con quello eseguito al punto (7); inoltre scopriamo che lo shift è costante su tutto lo spettro, e impariamo che in questo caso la correzione al secondo ordine è l'unica provocata dalla perturbazione.

(9) Stiamo lavorando con due particelle **fermioniche**: questo significa che lo stato complessivo della coppia di particelle deve essere antisimmetrico. Questo risultato si può ottenere sia usando una parte orbitale simmetrica e una di spin antisimmetrica che il contrario.

Cominciamo guardando lo spazio di spin globale: esso è il prodotto tensore di due spin  $1/2$ , quindi detto

$$\hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$$

si ha che i momenti angolari di spin si compongono nelle due rappresentazioni di spin  $0, 1$ ; in altri termini, sono possibili gli spin complessivi

$$s_1 = s_2 = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| = 0 \leq s \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

Indicando con le frecce il prodotto tensore tra gli spin delle due particelle (ad esempio  $|\uparrow\uparrow\rangle$ ) e con i numeri lo spin composto (ad esempio  $|00\rangle$ ), è

possibile mostrare che gli stati di singoletto ( $s = 0$ ) e di tripletto ( $s = 1$ ) sono rappresentati da

$$\begin{aligned} |0\ 0\rangle &= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} & |1\ 1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ && |1\ 0\rangle &= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ && |1\ -1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Notiamo immediatamente che lo stato di singoletto è antisimmetrico per scambio, ed è l'unico antisimmetrico che possiamo costruire; d'altra parte tutti gli stati simmetrici che possiamo costruire sono gli stati di tripletto. Questo naturalmente non è un caso: dal momento che i coefficienti di Clebsch-Gordan soddisfano la condizione

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} = (-1)^{j_1 + j_2 - j} C_{j_2 m_2 j_1 m_1}^{jm}$$

allora, come visto alla Sez. 9.2.3, Parte I, concludiamo che, essendo in questo caso  $s_1 + s_2 = 1$ , gli stati a  $s$  pari devono essere antisimmetrici e quelli a  $s$  dispari simmetrici.

Con questa considerazione il problema è sostanzialmente risolto. Useremo la notazione:

$$\left| n_x^{(1)} n_y^{(1)} ; n_x^{(2)} n_y^{(2)} \right\rangle \otimes |s\sigma\rangle$$

dove l'apice ( $i$ ) è riferito alla particella  $i$ -esima e  $s$  e  $\sigma$  si riferiscono allo spin totale.

**GROUND STATE** Lo **stato fondamentale**, non degenere, è (ovviamente) uno stato orbitale simmetrico per scambio, quindi la sua controparte di spin dovrà essere antisimmetrica. In altre parole avremo

$$|\text{GND}\rangle = |0\ 0; 0\ 0\rangle \otimes |0\ 0\rangle$$

per cui la funzione d'onda del ground-state è rappresentata da

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{GND}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \overbrace{\varphi_0(x_1)\varphi_0(y_1)}^{\equiv\psi_{00}^{(1)}(\mathbf{r}_1)} \overbrace{\varphi_0(x_2)\varphi_0(y_2)}^{\equiv\psi_{00}^{(2)}(\mathbf{r}_2)} \otimes \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \psi_{00}^{(1)} \\ \psi_{00}^{(2)} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Naturalmente la funzione d'onda non è rappresentabile da un solo prodotto di bispinori: lo stato di singoletto è *entangled* e non può essere fattorizzato in termini di due stati puri degli spin di ciascuna particella. Questa è anche l'unica funzione d'onda che possiamo costruire: abbiamo una degenerazione nulla nella parte orbitale, e abbiamo visto che l'unico possibile stato di spin antisimmetrico che possiamo assemblare è  $|0\ 0\rangle$ .

**PRIMI LIVELLI ECCITATI** Stavolta il problema è leggermente più articolato. Sappiamo che l'autospazio relativo al primo livello energetico eccitato – lo chiamiamo  $V^{(1)}$  – è generato dalla base  $\mathcal{B}$ , definita come

$$\mathcal{B} \equiv \left\{ |1\ 0; 0\ 0\rangle, |0\ 1; 0\ 0\rangle, |0\ 0; 1\ 0\rangle, |0\ 0; 0\ 1\rangle \right\} \quad \text{con} \quad V^{(1)} = \text{Span}\mathcal{B}$$

per cui dovremo lavorare con questi stati. Ora: nessuno di questi stati ha simmetria definita sotto scambio, il che implica che dovremo comporli: potremo fare degli stati orbitali simmetrici o antisimmetrici. Lo scambio deve avvenire coerentemente, cioè considereremo validi solo gli scambi

$$n_x^{(1)} \leftrightarrow n_x^{(2)} \quad n_y^{(1)} \leftrightarrow n_y^{(2)}$$

Quello che vogliamo fare è decomporre lo spazio in parti orbitale simmetrica e antisimmetrica, i.e. operare sulla base  $\mathcal{B}$  in modo da estrarre un set completo e ortonormale di autostati che generi lo stesso autospazio e abbia definite proprietà di simmetria. Componendo poi gli elementi di questo set con gli stati di spin totale a simmetria definita potremo determinare stati globali complessivamente antisimmetrici.

Gli stati orbitali simmetrici (indicati con  $\mathcal{B}^+$ ) e antisimmetrici ( $\mathcal{B}^-$ ) che possiamo costruire si vedono a vista

$$\begin{aligned}\mathcal{B}^+ &\equiv \left\{ |\mathcal{S}_1\rangle \equiv \frac{|10;00\rangle + |00;10\rangle}{\sqrt{2}}, |\mathcal{S}_2\rangle \equiv \frac{|01;00\rangle + |00;01\rangle}{\sqrt{2}} \right\} \\ \mathcal{B}^- &\equiv \left\{ |\mathcal{A}_1\rangle \equiv \frac{|10;00\rangle - |00;10\rangle}{\sqrt{2}}, |\mathcal{A}_2\rangle \equiv \frac{|01;00\rangle - |00;01\rangle}{\sqrt{2}} \right\}\end{aligned}$$

dove si ha chiaramente che

$$\text{Span}\mathcal{B} = \text{Span}\mathcal{B}^+ \oplus \text{Span}\mathcal{B}^-$$

Segue che gli stati possibili sono 8: con un leggero abuso di notazione, possiamo identificarli come

$$\begin{array}{lll}s \otimes a & \left\{ |\mathcal{S}_1\rangle, |\mathcal{S}_2\rangle \right\} & \otimes & |00\rangle \\ a \otimes s & \left\{ |\mathcal{A}_1\rangle, |\mathcal{A}_2\rangle \right\} & \otimes & \left\{ |11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle \right\}\end{array}$$

dove  $a, s$  indicano generici stati (in qualsiasi spazio) rispettivamente antisimmetrici e simmetrici per scambio, e il prodotto tensore tutte le possibili coppie tra le parti orbitali a sinistra e quelle di spin a destra.

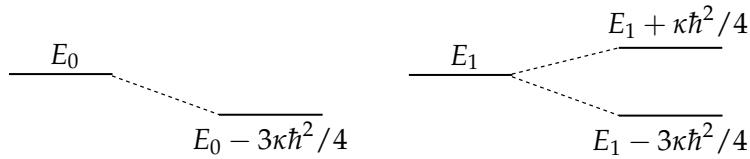
La scrittura di tutte le possibili funzioni d'onda non è particolarmente divertente, anzi è ormai del tutto meccanica: riportiamo a titolo di esempio solamente una di esse, scegliendo arbitrariamente lo stato  $|\zeta\rangle = |\mathcal{A}_1\rangle \otimes |10\rangle$ :

$$\begin{aligned}\Psi_\zeta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{2} \left( \varphi_1(x_1)\varphi_0(y_1)\varphi_0(x_2)\varphi_0(y_2) + \varphi_0(x_1)\varphi_0(y_1)\varphi_1(x_2)\varphi_0(y_2) \right) \\ &\otimes (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)\end{aligned}$$

Tutte le altre funzioni d'onda si scrivono in maniera analoga.

**(10)** L'hamiltoniana complessiva è della forma

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{j=1}^2 \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + \frac{\alpha}{2} \hat{\mathbf{r}}_j^2 \right)}_{\hat{H}_2} + \underbrace{\kappa \hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2}_{\hat{H}_{\text{int}}}$$



**Figura 5.2:** Effetto della perturbazione spin-spin sullo stato fondamentale (sinistra) e sui primi eccitati (destra).

La perturbazione introdotta può essere scritta come:

$$\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 = \frac{1}{2} (\hat{s}^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2) \stackrel{*}{=} \frac{\hat{s}^2}{2} - \frac{3}{4}\hbar^2$$

dove sottintendiamo un'identità nel termine costante e  $\stackrel{*}{=}$  indica il passaggio in cui abbiamo sostituito

$$\hat{s}_1^2, \hat{s}_2^2 \rightarrow \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right) \hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

in quanto le due particelle sono a spin  $1/2$  e di conseguenza l'azione su qualsiasi stato di spin da parte degli operatori  $\hat{s}_1^2, \hat{s}_2^2$  è ben definito: dato un generico stato  $|\psi\rangle$  di spin composto, si ha infatti

$$\hat{s}_1^2 |\psi\rangle = \hat{s}_2^2 |\psi\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\psi\rangle$$

Questa scrittura è comoda: dal punto (9) sappiamo che gli stati accessibili all'hamiltoniana imperturbata per due particelle fermioniche si scrivono proprio in termini degli autostati di  $\hat{s}^2$ , che sono la composizione delle due rappresentazioni di spin  $1/2$ . Possiamo quindi calcolare in maniera esatta la variazione ai livelli energetici introdotta dall'interazione di spin:

**GROUND STATE** Lo stato fondamentale, nella notazione del punto (9), è dato da

$$|GND\rangle = |00;00\rangle \otimes |00\rangle$$

da cui segue che:

$$\begin{aligned} \hat{H} |GND\rangle &= \hat{H}_2 |00;00\rangle \otimes |00\rangle + \hat{H}_{\text{int}} |00;00\rangle \otimes |00\rangle \\ &= E_0 |00;00\rangle \otimes |00\rangle + \kappa \left(0 - \frac{3}{4}\hbar^2\right) |00;00\rangle \otimes |00\rangle \\ &= \left(2\hbar\sqrt{\frac{\alpha}{m}} - \frac{3}{4}\kappa\hbar^2\right) |GND\rangle \end{aligned}$$

per cui concludiamo che l'effetto dell'interazione spin-spin sul ground-state è un abbassamento del livello energetico.

**PRIMI STATI ECCITATI** Sui primi stati eccitati il discorso è sostanzialmente analogo: nella notazione del punto (9) ( $\mathcal{S}/\mathcal{A}$  indica un generico stato simmetrico o antisimmetrico della parte orbitale) si ha

$$\begin{aligned}\hat{H} |\text{EXC}\rangle &= \hat{H}_2 |\mathcal{S}/\mathcal{A}\rangle \otimes |s\sigma\rangle + \hat{H}_{\text{int}} |\mathcal{S}/\mathcal{A}\rangle \otimes |s\sigma\rangle \\ &= E_1 |\mathcal{S}/\mathcal{A}\rangle \otimes |s\sigma\rangle + \kappa \left( \frac{s(s+1)}{2} - \frac{3}{4}\hbar^2 \right) |\mathcal{S}/\mathcal{A}\rangle \otimes |s\sigma\rangle \\ &= \begin{cases} \left( 3\hbar \sqrt{\frac{\alpha}{2m}} - \frac{3}{4}\kappa\hbar^2 \right) |\text{EXC}\rangle & \text{se } s = 0 \\ \left( 3\hbar \sqrt{\frac{\alpha}{2m}} + \frac{1}{4}\kappa\hbar^2 \right) |\text{EXC}\rangle & \text{se } s = 1 \end{cases}\end{aligned}$$

per cui la degenerazione viene parzialmente risolta: l'effetto è illustrato in Fig. 5.2.

## 5.4 BUCA INFINITA

Si consideri il problema in cui una particella di spin 1/2 si trovi confinata in una dimensione spaziale,  $x$ , soggetta ad una buca infinita di potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } |x| > a \\ \infty & \text{se } |x| \leq a \end{cases}$$

in assenza di dipendenza esplicita dell'hamiltoniana  $\hat{H}_0$  dallo spin.

- (1) Si scriva lo spettro dell'hamiltoniana e le relative funzioni d'onda.
- (2) Si calcolino i valori medi sullo stato fondamentale, nel caso in cui lo stato di spin sia  $s_z = \hbar/2$ , delle seguenti quantità:  $x, p_x, S_x$ .
- (3) Verificare che il principio di indeterminazione di Heisenberg è rispettato nello stato fondamentale. Può essere utile l'integrale

$$\int_{-\pi}^{\pi} y^2 \cos^2 \frac{y}{2} dy = \frac{\pi}{3}(\pi^2 - 6)$$

- (4) Supponiamo che il sistema sia soggetto ad un campo magnetico esterno  $\mathbf{B} = (B, 0, 0)$  e che esso determini un termine aggiuntivo nell'hamiltoniana

$$\hat{H}_1 = \mu_0 \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}$$

Calcolare il nuovo spettro di  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ .

- (5) Verificare il risultato del punto precedente con la teoria perturbativa al primo ordine.
- (6) Supponiamo che a  $t < 0$  il sistema sia nello stato fondamentale, con lo spin  $s_z = \hbar/2$ , in assenza di campo magnetico. A  $t = 0$  viene acceso  $\mathbf{B}$ , e dunque l'hamiltoniana diventa  $\hat{H}$ . Calcolare l'evoluzione successiva dello stato.
- (7) Nelle ipotesi del punto precedente, calcolare  $\langle S_z \rangle$  in funzione del tempo  $t > 0$ .
- (8) Nelle condizioni del punto precedente, calcolare la probabilità che, misurando la posizione, la particella si trovi nella regione  $x \in [0, a]$ .
- (9) Poniamo adesso  $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ , e consideriamo due particelle (non identiche) nella buca infinita di potenziale. Calcolare le energie del sistema.
- (10) Dire cosa cambia se le particelle sono identiche e fermioniche.

### SOLUZIONE

(1) L'operatore hamiltoniano è

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x})$$

Per  $|x| \leq a$  l'equazione alle energie,  $\hat{H}_0\psi(x) = E\psi(x)$ , è quella di particella libera:

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

che si integra immediatamente come

$$\psi(x) = A \sin(kx + \phi) \quad \text{con} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

dove  $A$  e  $\phi$  sono costanti arbitrarie di integrazione. Poiché il potenziale è infinito ai bordi, richiediamo  $\psi(-a) = \psi(a) = 0$ . Ponendo  $\psi(-a) = 0$  osserviamo che si può scegliere  $\phi = ka$  in modo da annullare l'argomento del seno:

$$\psi(x) = A \sin[k(x + a)]$$

a questo punto la condizione  $\psi(a) = 0$  impone delle condizioni sui valori possibili di  $k$ , che devono corrispondere ad onde stazionarie nell'intervallo:

$$A \sin(2ka) = 0 \implies 2ka = n\pi \implies k_n = \frac{n\pi}{2a} \quad n \in \mathbb{Z}$$

pertanto lo spettro è

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} n^2 \quad n \in \mathbb{N}$$

Le relative autofunzioni sono allora

$$\psi_n(x) = A \sin \left[ \frac{n\pi}{2a}(x + a) \right] = A \sin \left[ \frac{n\pi}{2a}x + \frac{n\pi}{2} \right]$$

la normalizzazione si ottiene imponendo

$$\int_{-a}^a |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \implies A = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

mentre prendendosi cura del termine di fase costante si può scrivere

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \left( \frac{n\pi}{2a}x \right) & n \text{ dispari} \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \left( \frac{n\pi}{2a}x \right) & n \text{ pari} \end{cases}$$

dove abbiamo trascurato una fase (un eventuale segno meno) irrilevante.

La parte orbitale allora è non degenere, mentre ogni energia diventa doppiamente degenere considerando l'arbitrarietà dello spin.

(2) Osserviamo che il potenziale  $V(x)$  è pari, pertanto se  $\hat{\mathcal{P}}$  è l'operatore parità allora  $[\hat{H}_0, \hat{\mathcal{P}}] = 0$ . D'altronde lo spettro di  $\hat{H}_0$  è non degenere (nello spazio di Hilbert orbitale), pertanto le autofunzioni hanno parità definita. Questo è infatti quello che abbiamo trovato.

Ma allora i valori medi di  $x$  e  $p_x$ , che sono dispari sotto parità, è nullo nello stato fondamentale  $|\psi_{1,\uparrow}\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\uparrow\rangle$ :

$$\langle\psi_{1,\uparrow}|\hat{x}|\psi_{1,\uparrow}\rangle = -\langle\psi_{1,\uparrow}|\mathcal{P}\hat{x}\mathcal{P}|\psi_{1,\uparrow}\rangle = -\langle\psi_{1,\uparrow}|\hat{x}|\psi_{1,\uparrow}\rangle$$

e analogamente per  $p_x$ , pertanto

$$\langle x \rangle = \langle p_x \rangle = 0$$

Il valore atteso di  $S_x = \hbar\sigma_x/2$  è anch'esso nullo, poiché

$$\langle\psi_{1,\uparrow}|\hat{\sigma}_x|\psi_{1,\uparrow}\rangle = \langle\psi_1|\psi_1\rangle \langle\uparrow|\sigma_x|\uparrow\rangle = 1 \times 0 = 0$$

(3) Occorre calcolare

$$\Delta_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle \quad \Delta_p^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2 = \langle p_x^2 \rangle$$

e verificare che  $\Delta_x^2 \Delta_p^2 \geq \hbar^2/4$ . La varianza di  $p_x$  si trova immediatamente: poiché gli autostati di  $\hat{H}$  sono anche autostati di  $\hat{p}^2$  nell'intervallo, allora

$$\Delta_p^2 = \langle p_x^2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{p}_x^2 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | 2m\hat{H}_0 | \psi_1 \rangle = 2mE_1$$

Mentre per la posizione si può calcolare

$$\Delta_x^2 = \langle x^2 \rangle = \int_{-a}^a x^2 |\psi_1(x)|^2 dx = \frac{1}{a} \int_{-a}^a x^2 \cos^2\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) dx$$

con il cambio di variabile  $y = \pi x/a$  risulta

$$\Delta_x^2 = \frac{a^2}{\pi^3} \int_{-\pi}^{\pi} y^2 \cos^2 \frac{y}{2} dy = \frac{a^2}{\pi^3} \frac{\pi}{3} (\pi^2 - 6) = \frac{a^2}{3\pi^2} (\pi^2 - 6)$$

Allora

$$\Delta_x^2 \Delta_p^2 = \frac{a^2}{3\pi^2} (\pi^2 - 6) \cdot 2m \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} = \frac{\hbar^2}{12} (\pi^2 - 6)$$

che usando l'ardita diseguaglianza  $\pi > 3$  si verifica che

$$\Delta_x^2 \Delta_p^2 > \frac{\hbar^2}{4}$$

come atteso.

(4) L'hamiltoniana è adesso

$$\hat{H} = \frac{p_x^2}{2m} + V(x) + \mu_0 \sigma_x B$$

Il problema è formalmente disaccoppiato tra lo spazio di Hilbert orbitale finora considerato e quello di spin,  $[\hat{H}_0, \hat{H}_1] = 0$ . Gli autostati della parte dipendente dallo spin sono gli autostati di  $\sigma_x$

$$|+\rangle = \frac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad |-\rangle = \frac{|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

relativi alle energie  $\pm\mu_0B$ , poiché  $\sigma_x|\pm\rangle=\pm 1$ , e pertanto uno stato prodotto del tipo

$$|\psi_{n,\pm}\rangle=|\psi_n\rangle\otimes|\pm\rangle$$

è un autostato di  $\hat{H}$  relativo all'energia

$$E_{n,\pm}=E_n\pm\mu_0B$$

Le funzioni d'onda corrispondenti sono

$$\psi_{n,\pm}(x)=\langle x|\psi_{n,\pm}\rangle=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\left[\frac{n\pi}{2a}+\frac{n\pi}{2}\right]\otimes|\pm\rangle$$

(5) Se consideriamo  $\hat{H}_1$  come perturbazione, essa agisce soltanto sullo spazio di spin. Ogni autostato dell'hamiltoniana imperturbata è doppiamente degenero: in particolare in ciascun autospazio bidimensionale la perturbazione ha matrice, nella base di autostati di  $\sigma_z$ ,  $\{|\psi_{n,\uparrow}\rangle, |\psi_{n,\downarrow}\rangle\}$ :

$$[H_1]=\begin{bmatrix} 0 & \mu_0\sigma \\ \mu_0\sigma & 0 \end{bmatrix}$$

ma è ovviamente diagonale nella base che diagonalizza  $\sigma_x$  nel sottospazio degenero,  $\{|\psi_{n,+}\rangle, |\psi_{n,-}\rangle\}$ : in particolare

$$[H_1]=\begin{bmatrix} \mu_0\sigma & 0 \\ 0 & -\mu_0\sigma \end{bmatrix}$$

Pertanto

$$\begin{aligned} E_{n,+}^{(1)} &= \langle\psi_{n,+}|\hat{H}_1|\psi_{n,+}\rangle = \mu_0\sigma \\ E_{n,-}^{(1)} &= \langle\psi_{n,+}|\hat{H}_1|\psi_{n,+}\rangle = -\mu_0\sigma \end{aligned}$$

In questo caso la teoria perturbativa al primo ordine dà un risultato esatto: questo può essere spiegato dal fatto che la perturbazione è lineare nel parametro dell'espansione,  $B$ , quindi la serie perturbativa è esatta e contiene solo i termini di ordine 0 ed 1.

(6) Occorre ricordare la forma dell'operatore di evoluzione temporale, che poiché gli operatori hamiltoniani non dipendono dal tempo è

$$\hat{U}(t)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

Per  $t < 0$  lo stato si trova in un autostato dell'hamiltoniano del problema  $\hat{H}_0$ , pertanto evolve semplicemente con una fase

$$\psi(x,t)=e^{-iE_1t/\hbar}\psi_1(x)\otimes|\uparrow\rangle$$

In particolare

$$\psi(x,0)=\psi_1(x)\otimes|\uparrow\rangle$$

All'accensione del campo magnetico a  $t = 0$  l'operatore di evoluzione temporale diventa il seguente:

$$\hat{U}(t)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}=e^{-i\hat{H}_0t/\hbar}e^{-i\hat{H}_1t/\hbar}$$

dove la fattorizzazione è legittimata dalla commutatività tra  $\hat{H}_0$  e  $\hat{H}_1$ . D’altro canto  $\hat{H}_0$  agisce solo sulla parte orbitale,  $\hat{H}_1$  solo su quella di spin e allora

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(0)\rangle e^{-i\hat{H}_1 t/\hbar} |\uparrow\rangle \\ &= e^{-iE_1 t/\hbar} |\psi(0)\rangle e^{-i\mu_0 B t \sigma_x / \hbar} |\uparrow\rangle \end{aligned}$$

Ricordando la formula per l’esponenziale delle matrici di Pauli

$$e^{-i\theta\sigma_x} = \mathbb{1} \cos(\theta) - i\sigma_x \sin(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -i \sin \theta \\ -i \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

si ottiene

$$e^{-i\mu_0 B t \sigma_x / \hbar} |\uparrow\rangle = \cos\left(-\frac{i\mu_0 B t}{\hbar}\right) |\uparrow\rangle - i \sin\left(-\frac{i\mu_0 B t}{\hbar}\right) |\downarrow\rangle$$

Da cui infine

$$\psi(x, t) = e^{-iE_1 t / \hbar} \psi_1(x) \otimes \left[ \cos\left(-\frac{i\mu_0 B t}{\hbar}\right) |\uparrow\rangle - i \sin\left(-\frac{i\mu_0 B t}{\hbar}\right) |\downarrow\rangle \right]$$

(7) Occorre calcolare

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \hat{\sigma}_z | \psi(t) | \hat{\sigma}_z \rangle$$

D’altronde l’operatore agisce solo sulla parte di spin, “passando attraverso” la parte orbitale che non contribuisce per via della normalizzazione, e pertanto risulta

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} [\cos \theta \langle \uparrow | + i \sin \theta \langle \downarrow |] \hat{\sigma}_z [\cos \theta |\uparrow\rangle - i \sin \theta |\downarrow\rangle] \\ &= \frac{\hbar}{2} (\cos \theta \langle \uparrow | + i \sin \theta \langle \downarrow |) (\cos \theta |\uparrow\rangle + i \sin \theta |\downarrow\rangle) \\ &= \frac{\hbar}{2} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \\ &= \frac{\hbar}{2} \cos(2\theta) \end{aligned}$$

dove  $\theta = \mu_0 B t / \hbar$ , ed abbiamo applicato per prima cosa  $\sigma_z$  sui suoi autovettori ricordando i relativi autovalori. Concludiamo che

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos\left(\frac{2\mu_0 B t}{\hbar}\right)$$

(8) Questa volta è la parte di spin a non contribuire al calcolo, in quanto essa opera su uno spazio diverso e non influenza le misure di posizione. D’altro canto la parte orbitale evolve con una semplice fase, e pertanto la probabilità richiesta è indipendente dal tempo e risulta

$$P = \int_0^a |\psi_1(x)|^2 dx = \frac{1}{2} \underbrace{\int_{-a}^a |\psi_1(x)|^2 dx}_1 = \frac{1}{2}$$

dove abbiamo usato il fatto che la funzione d’onda dello stato fondamentale è pari, pertanto a maggior ragione l’integrando è pari.

**(9)** In assenza di interazioni tra le due particelle, l'operatore hamiltoniano sarà dato dalla somma seguente

$$\hat{H}_{2p} = \frac{\hat{p}_{x,1}^2}{2m} + V(\hat{x}_1) + \frac{\hat{p}_{x,2}^2}{2m} + V(\hat{x}_2)$$

Anche in questo caso si tratta della somma di due hamiltoniane indipendenti e commutanti, pertanto il problema risulta disaccoppiato e uno stato prodotto di autostati delle due hamiltoniane è un autostato di  $\hat{H}_{2p}$  relativo all'energia data dalla somma delle energie

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}(n_1^2 + n_2^2)$$

Lo spettro risulta degenere, sia a causa dello spin (si tratta di due particelle, quindi la degenerazione di spin è 4), sia perché  $E_{n_1,n_2} = E_{n_2,n_1}$ , sia a causa della possibilità che il numero intero  $n = n_1^2 + n_2^2$  si possa scrivere come somma di quadrati in due modi diversi. Per fare un esempio

$$50 = 7^2 + 1^2 = 5^2 + 5^2$$

pertanto  $E_{7,1} = E_{1,7} = E_{5,5}$ . Similmente per alcuni  $n$  maggiori ci sono altre degenerazioni oltre a quelle di spin e quelle per scambio.

**(10)** Le particelle devono occupare uno stato globalmente antisimmetrico sotto scambio. Per esempio lo stato fondamentale  $|GS\rangle$  è simmetrico nella parte orbitale, pertanto dovrà essere antisimmetrico nella parte di spin:

$$\langle \mathbf{x}|GS\rangle = \psi_1(x_1)\psi_1(x_2) \otimes \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

## NOTE

1. Ciò emerge dall'Equazione di Dirac, che estende la teoria quantistica classica con argomenti di tipo relativistico. La formulazione relativistica della Meccanica Quantistica è argomento di corsi della Laurea Magistrale.

Parte III  
APPENDICI



# A | CLEBSCH-GORDAN

$j_1 \times j_2$	$J$	$J$	$\dots$
$m_1$	$M$	$M$	$\dots$
$m_1$	$m_2$		Coefficients
$\vdots$	$\vdots$		
$2 \times 1/2$	$5/2$	$5/2$	$3/2$
$2$	$1/2$	$1$	$3/2$
$1$	$1/2$	$1/2$	$1/2$
$2$	$-1/2$	$1/5$	$4/5$
$1$	$1/2$	$4/5$	$-1/5$
$0$	$1/2$	$3/5$	$-2/5$
$-1$	$1/2$	$2/5$	$-3/5$
$-2$	$1/2$	$1/5$	$-4/5$
$-3$	$-1/2$	$1/2$	$1/2$
$1/2 \times 1/2$	$1$	$1$	$0$
$1/2$	$1/2$	$1$	$0$
$1/2$	$-1/2$	$1/2$	$1/2$
$-1/2$	$1/2$	$1/2$	$-1/2$
$-1/2$	$-1/2$	$1$	$1$
$3/2 \times 1/2$	$2$	$2$	$1$
$3/2$	$1/2$	$1$	$1$
$3/2$	$-1/2$	$1/4$	$3/4$
$1/2$	$1/2$	$3/4$	$-1/4$
$1/2$	$-1/2$	$1/2$	$1/2$
$-1/2$	$1/2$	$1/2$	$-1/2$
$1 \times 1/2$	$3/2$	$3/2$	$1/2$
$1$	$1/2$	$1$	$1/2$
$1$	$-1/2$	$1/3$	$2/3$
$0$	$1/2$	$2/3$	$-1/3$
$-1$	$1/2$	$1/3$	$1$
$2 \times 1$	$3$	$3$	$2$
$2$	$1$	$1$	$2$
$2$	$0$	$1/3$	$2/3$
$1$	$1$	$2/3$	$-1/3$
$2$	$-1$	$1/15$	$1/3$
$1$	$0$	$8/15$	$1/6$
$0$	$1$	$6/15$	$-3/10$
$3/2 \times 1$	$5/2$	$5/2$	$3/2$
$3/2$	$1$	$1$	$3/2$
$3/2$	$0$	$2/5$	$3/5$
$1/2$	$1$	$3/5$	$-2/5$
$1/2$	$-1$	$1/10$	$2/5$
$1/2$	$0$	$3/5$	$1/15$
$-1/2$	$1$	$3/10$	$-8/15$
$3$	$2$	$1$	$1/2$
$3$	$-1$	$1/5$	$1/2$
$0$	$0$	$3/5$	$-2/5$
$-1$	$1$	$1/5$	$-1/2$
$1 \times 1$	$2$	$2$	$1$
$1$	$1$	$1$	$1$
$1$	$0$	$1/2$	$1/2$
$0$	$1$	$1/2$	$-1/2$
$1$	$-1$	$1/6$	$1/2$
$0$	$0$	$2/3$	$-1/3$
$-1$	$1$	$1/6$	$-1/2$
$2$	$1$	$2$	$1$
$2$	$-1$	$1/2$	$1/2$
$0$	$0$	$1/2$	$-1/2$
$-1$	$0$	$1/2$	$2$
$3$	$2$	$1$	$-1$
$3$	$-1$	$6/15$	$1/2$
$-1$	$0$	$8/15$	$-1/6$
$-2$	$1$	$1/15$	$-1/3$
$3$	$2$	$1$	$3/5$
$-2$	$-1$	$2/3$	$1/3$
$-2$	$0$	$1/3$	$-2/3$
$-2$	$-1$	$1$	$3$

**Figura A.1:** Coefficienti di Clebsch-Gordan. Su ogni coefficiente deve essere posto un segno di radice quadrata, lasciando l'eventuale segno – all'esterno.  
Per esempio,  $-1/3$  significa  $-\sqrt{1/3}$ .

# B | ALCUNE FUNZIONI NOTEVOLI

## Armoniche sferiche

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$$

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \quad Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

## Polinomi di Hermite

$$H_0(x) = 1 \quad H_1(x) = 2x \quad H_2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H_n(x) = e^{x^2/2} \left( x - \frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2/2}$$

## Autofunzioni atomo di idrogeno

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} e^{-r/r_B}$$

$$\psi_{200}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{8\pi r_B^3}} \left( 1 - \frac{r}{2r_B} \right) e^{-r/(2r_B)}$$

$$\psi_{210}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{32\pi r_B^3}} \frac{r}{r_B} e^{-r/(2r_B)} \cos \theta$$

$$\psi_{21\pm 1}(r, \theta, \phi) = \mp \frac{1}{\sqrt{64\pi r_B^3}} \frac{r}{r_B} e^{-r/(2r_B)} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

## Autofunzioni oscillatore armonico 1D

$$l_\omega = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad p_\omega = \sqrt{\hbar m \omega}$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{(\pi l_\omega^2)^{1/4}} e^{-x^2/(2l_\omega^2)} \quad \psi_2(x) = \frac{1}{(\pi l_\omega^2)^{1/4}} \frac{x}{l_\omega} e^{-x^2/(2l_\omega^2)}$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{(\pi l_\omega^2)^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left( \frac{x}{l_\omega} \right) e^{-x^2/(2l_\omega^2)}$$