NOTE DI
MECCANICA QUANTISTICA

Manuel Deodato

Indice

1 Struttura matematica della meccanica quantistica

1.1 Introduzione

Definizione 1.1 — Prodotto scalare.
Per V spazio vettoriale su $\mathbb{C}$ e $\psi, \phi \in V$, si definisce $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{C}$ come:

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

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

$$\|\phi\| \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\langle \phi, \phi \rangle} \tag{1.1.1}$$

Si ricordano le seguenti disuguaglianze:

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

Teorema 1.1 — Teorema di Riesz.
Dato T operatore lineare limitato agente su spazio di Hilbert $\mathcal{H}$, allora $\exists f \in \mathcal{H} : \forall \phi \in \mathcal{H} \Rightarrow T(\phi) \equiv \langle f, \phi \rangle$. Inoltre, $\|T\| = \|f\|$.

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

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

1.1.1 Notazione bra-ket

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

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

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

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

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

$$\langle c\phi| = c^* \langle \phi| \longleftrightarrow |c\phi\rangle = c\,|\phi\rangle \tag{1.1.4}$$

1.1.2 **Operatori**

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

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

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

si nota che

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

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

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

da cui, unendo le uguaglianze:

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

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

$$\langle w| = \langle\phi|\,\hat{A}^\dagger \longleftrightarrow |w\rangle = \hat{A}\,|\phi\rangle \tag{1.1.6}$$

Inoltre

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

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

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

Da questo, segue:

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger;\ (cA)^\dagger = c^* A^\dagger \tag{1.1.9}$$

1.1.3 **Operatori autoaggiunti**

Definizione 1.2 — Operatore autoaggiunto.
Sia $\mathcal{H}$ uno spazio di Hilbert complesso e sia A un operatore lineare definito su un dominio $\mathrm{Dom}(A) \subseteq \mathcal{H}$. L'operatore A si dice **autoaggiunto** se soddisfa le seguenti condizioni:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.1.4 Commutatori

DEFINIZIONE 1.3 — COMMUTATORE.
Siano $\hat{A}, \hat{B}$ due operatori; il commutatore è: $[\hat{A}, \hat{B}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Quindi se $\hat{A}, \hat{B}$ commutano, si ha $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

TEOREMA 1.2 — SPETTRO COMUNE.
Se $\hat{A}, \hat{B}$ sono autoaggiunti e commutano, allora condividono una base di autovettori.

1.2 Prodotto esterno

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

$$\hat{O} = |\psi\rangle \langle \phi| : V \to V \tag{1.2.1}$$

Si nota che:

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

1.2.1 Proiettori

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

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

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

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

$$\sum_{i=1}^{+\infty} |\phi_i\rangle \langle\phi_i| = \mathrm{Id} \tag{1.2.2}$$

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

1.2.3 Cambiamento di base

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

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

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

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

Ora, essendo le due basi ortonormali:

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

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

1.3 Applicazioni per la meccanica quantistica

1.3.1 Rappresentazione delle coordinate

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

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

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

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

[1] Indicato anche con $\hat{X}$.

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

1.3.2 Rappresentazione degli impulsi

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

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\; c(p)\,|p\rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dp\; \widetilde{\psi}(p)\,|p\rangle \tag{1.3.2}$$

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

1.3.3 Misura di un osservabile

Sia $\hat{A}$ operatore lineare autoaggiunto[1] con autovalori a_i e autovettori $|\lambda_i\rangle$. Assumendo che $\langle\lambda_i|\lambda_j\rangle = \delta_{ij}$ formino una base ortonormale[2] e dato un generico $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{+\infty} b_i\,|\lambda_i\rangle$, si nota che :

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

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

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

Questa condizione è verificata dalla normalizzazione di ciascuno stato:

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

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

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(y)\,\langle y|\ dy \int_{-\infty}^{+\infty} f(z)\hat{F}\,|z\rangle\ dz \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} dydz\; f^*(y)f(z)z\,\langle y|z\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} z\,|f(z)|^2\ dz \qquad (1.3.5)\\
\langle\psi|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} |f(z)|^2\ dz \overset{!}{=} 1 \ \textbf{(normalizzazione)}
\end{aligned}$$

1.3.4 Principi della meccanica quantistica

(a). Uno stato fisico $|\psi\rangle$ è un vettore in uno spazio di Hilbert $\mathcal{H}$, ℓ^2 o L^2. Lo stesso stato può essere equivalentemente moltiplicato per una fase: $e^{i\alpha}\,|\psi\rangle$.

(b). Per ogni sistema, ogni stato deve essere tale che $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

(c). Gli osservabili sono operatori lineari autoaggiunti che agiscono su $\mathcal{H}$.

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

[2] Possono essere sempre costruiti in modo che siano ortonormali.

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

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

1.3.5 Spazio di Hilbert proiettivo, sistemi puri e misti

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

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

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

$$\rho = \sum_i p_i \, |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \tag{1.3.6}$$

1.3.6 Proiettore per sistemi puri

La condizione di normalizzazione è:

$$\operatorname{Tr}\rho = 1 \tag{1.3.7}$$

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

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr}\rho &\overset{\text{def}}{=} \sum_{m=1}^{+\infty}\sum_{n=1}^{+\infty} \langle\phi_m|\rho|\phi_n\rangle\,\delta_{mn} = \sum_{n=1}^{+\infty}\langle\phi_n|\rho|\phi_n\rangle = \sum_{n=1}^{+\infty}\langle\phi_n|\psi\rangle\langle\psi|\phi_n\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{+\infty} |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\psi\rangle \end{aligned} \tag{1.3.8}$$

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

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

Dimostrazione. Per conto diretto:

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

■

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

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

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \mathrm{Tr}\,\rho\hat{A} \tag{1.3.10}$$

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

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

■

1.3.7 Flusso di probabilità ed equazione di continuità

Sistema composto da particella in 3D sotto potenziale $V(x)$. Sia $\psi(\mathbf{x},t)$ funzione d'onda per stato $|\psi(t)\rangle$. La probabilità di trovare particella in una regione Γ dello spazio è[1]:

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

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

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

Definendo **flusso di probabilità**:

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

si ha:

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

da cui si ottiene equazione di continuità:

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

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

2 Introduzione alla meccanica quantistica

2.1 Evoluzione temporale

2.1.1 Equazione di Shrödinger per gli stati

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

(a). l'evoluzione sia univocamente determinata da uno stato iniziale $\Rightarrow$ si richiede che nell'equazione compaia al massimo il primo ordine di derivazione $\partial_t |\psi(t)\rangle$;

(b). sperimentalmente, si verifica il principio di sovrapposizione, quindi l'equazione differenziale deve essere lineare.

L'equazione risultante è:

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

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

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

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

∎

Questo candida $\hat{H}$ come osservabile

2.1.2 Soluzione dell'equazione

La soluzione è:

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

dove

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

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

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

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

2.1.3 Equazione di Shrödinger per la funzione d'onda

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

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

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

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

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

Per la soluzione dell'equazione:

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

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

2.1.4 Equazione di Shrödinger per il proiettore

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

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

2.2 Evoluzione temporale per gli operatori

Ci sono tre quadri per vedere il problema:

(a). **quadro di Shrödinger:** solo gli stati dipendono dal tempo, mentre gli operatori no;

(b). **quadro di Heisenberg:** solo gli operatori dipendono dal tempo;

(c). **quadro misto (o di interazione):** l'hamiltoniano si divide in $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I$, dove il primo evolve gli operatori e il secondo evolve gli stati.

2.2.1 Il quadro di Shrödinger

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

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

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

2.2.2 Il quadro di Heisenberg

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

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

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

2.2.3 Evoluzione delle misure

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

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

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

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

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

2.3 Simmetrie e operatore impulso

2.3.1 Traslazioni

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

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

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

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

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

$$\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle \Rightarrow \hat{U}^\dagger\hat{U} = \mathrm{Id} \tag{2.3.3}$$

Su generico operatore $\hat{A}$ come sopra:

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

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

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

2.3.2 L'operatore impulso

Visto $\hat{U}$ unitario, si prende $\hat{U}(s) = e^{is\hat{K}}$ per parametrizzare la traslazione con parametro continuo s. Si mostra che $\hat{K}$ è autoaggiunto[1]. Sviluppando attorno a $s = 0$:

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

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

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

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

Si introduce operatore **impulso**[2] come $\hat{K} = -\frac{1}{\hbar}\hat{p}$, da cui $\hat{U}(s) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}s\hat{p}\right)$. Si ricava la sua rappresentazione nello spazio delle posizioni. Sviluppando[3]:

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

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

2.3.3 Funzione d'onda degli impulsi

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

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

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

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

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

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

[1] Quindi sarà un possibile osservabile.

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

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

Quindi spazi di posizioni e momenti sono legati da una trasformata di Fourier[1]:

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

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

$$\hat{X}\widetilde{\psi}(p) = i\hbar\partial_p\widetilde{\psi}(p) \tag{2.3.12}$$

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

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

2.3.4 Simmetrie per stati che evolvono temporalmente

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

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

Dall'imposizione dell'invarianza per traslazioni, risulta $\hat{U}(s)\hat{O}(t,t_0)\hat{U}^{-1}(s) = \hat{O}(t,t_0)$. Vista la struttura dell'operatore di evoluzione temporale[2], si ricava $[\hat{H},\hat{U}(s)] = 0$.

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

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

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

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

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

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

---

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

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

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

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

Alternativamente, si sarebbe potuto notare che

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

implica:

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

2.4 Il principio di indeterminazione

2.4.1 Introduzione

Si usa funzione d'onda[1] tridimensionale[2] $\psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle$, dove $|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}(x_1,x_2,x_3)\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes |x_3\rangle$. Questa definizione è necessaria per far sì che l'azione di un operatore posizione legato alla singola coordinata restituisca $\hat{X}_1\,|\mathbf{r}\rangle = x_1\,|\mathbf{r}\rangle$ per esempio[3]. Allora $|\psi(\mathbf{r})|^2 = |\langle\mathbf{r}|\psi\rangle|^2$ è densità di probabilità di trovare la particella in un certo intervallo $d\mathbf{r}$. Il valore di aspettazione si esprime come:

$$\mathbf{E}\left[\mathbf{r}\right] = \langle\psi|\hat{\mathbf{R}}|\psi\rangle \equiv \overline{\mathbf{R}} = \iiint dxdydz\;\mathbf{r}\,|\psi(\mathbf{r})|^2 = \begin{pmatrix} \overline{R}_{x_1} \\ \overline{R}_{x_2} \\ \overline{R}_{x_3} \end{pmatrix} \tag{2.4.1}$$

La varianza è data da $\mathbf{E}\left[(\mathbf{r}-\overline{\mathbf{R}})^2\right] = \iiint dxdydz\;(\mathbf{r}-\overline{\mathbf{R}})^2\,|\psi(x,y,z)|$, quindi si definisce:

$$\Delta_r^2 \overset{\text{def}}{=} \langle\psi|\hat{\mathbf{R}}_S^2|\psi\rangle = \iiint dxdydz\;(\mathbf{r}-\overline{\mathbf{R}})^2\,|\psi(\mathbf{r})|^2 \equiv \mathbf{E}\left[(\mathbf{r}-\overline{\mathbf{R}})^2\right] \tag{2.4.2}$$

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

$$\begin{aligned} \overline{p} &= \langle\psi|\hat{\mathbf{P}}|\psi\rangle \\ \Delta_p^2 &= \langle\psi|\hat{\mathbf{P}}_S^2|\psi\rangle \end{aligned} \tag{2.4.3}$$

2.4.2 Algebra degli operatori sottratti

Siano $\hat{A},\hat{B}$ autoaggiunti tali che $[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C}$, con $\hat{C}$ autoaggiunto[4]; se $\hat{A}_s,\hat{B}_s$ sono i sottratti, allora è ancora $[\hat{A}_S,\hat{B}_S] = i\hat{C}$:

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

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

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

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

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

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

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

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

quindi:

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

Vale $\forall\omega \Rightarrow$ si cerca ω_0 che la rende più piccola possibile[1]; si ottiene, per $\omega = \omega_0$:

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

2.4.3 Il principio di indeterminazione

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

$$\Delta_{x_i}\Delta_{p_i} \geq \frac{\hbar}{2} \tag{2.4.5}$$

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

2.5.1 Sistema di due corpi

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

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

con[2] $[\hat{r}_{ij},\hat{p}_{kl}] = i\hbar\delta_{ik}\delta_{jl}$. Si definiscono:

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

con $[\hat{X}_i,\hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ e $[\hat{x}_i,\hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$. In questo modo[3]:

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

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

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

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

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

Da eq. 2.5.1, passando in rappresentazione delle coordinate:

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

Si è separato $\hat{H}$ in parte dipendente da $\hat{\mathbf{X}}$ e parte dipendente solo da $\hat{\mathbf{x}}$. Per risolvere l'equazione di Shrödinger[1] si usa la separazione delle variabili: $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{X}) = A(\mathbf{X})B(\mathbf{x})$:

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

2.5.2 Particella in campo esterno

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

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

L'equazione di Shrödinger è:

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

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

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

In rappresentazione degli impulsi, invece:

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

2.6 L'oscillatore armonico

2.6.1 Operatori di creazione e distruzione

Si prende un hamiltoniano analogo al caso classico:

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

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

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

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

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

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

Prendendo base di autostati di $\hat{N}$ tali che $\hat{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$ e definendo $\hat{a}|\nu\rangle = |w\rangle$, si ha[2]:

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

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

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

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

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

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

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

Dovendo avere autostati normalizzati:

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

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

2.6.2 Funzione d'onda per l'oscillatore armonico

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.7 Operatore parità e sistemi unidimensionali

2.7.1 Operatore parità

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

$$\begin{gathered}\hat{P}_a\hat{x}\hat{P}_a^{-1} = -\hat{x};\ \ \hat{P}_a\hat{p}\hat{P}_a = -\hat{p}\\ \hat{P}_a^2 = \mathrm{Id} \Rightarrow \hat{P}_a = \hat{P}_a^{-1}\end{gathered} \tag{2.7.1}$$

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

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

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

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

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

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

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

2.7.2 Alcuni teoremi per sistemi unidimensionali

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

Teorema 2.1.
In 1D, $\hat{H}$ ha spettro non-degenere.

Teorema 2.2.
Gli stati fondamentali dello spettro non hanno zeri.

Teorema 2.3.
Gli stati non-fondamentali dello spettro hanno degli zeri e l'n-esimo ne ha n.

Teorema 2.4.
Uno spettro discreto di $\hat{H}$ corrisponde ad un moto limitato nello spazio.

2.7.3 Moto di una particella sotto potenziale

Si considera sistema 1D composto da particella soggetta a

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

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

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

L'equazione di Shrödinger è data da:

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

- **Caso** $E > V_0$.
  Se $x < 0$, si ha $\partial_x^2\psi + k^2\psi = 0$ con $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$[1], quindi:
$$\psi_-(x) = A_1e^{ikx} + A_2e^{-ikx} \tag{2.7.2}$$
  Se $x > 0$, invece, si ha, per $q = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$, $\partial_x^2\psi + q^2\psi = 0$, da cui:
$$\psi_+(x) = B_1e^{iqx} + B_2e^{-ikx} \tag{2.7.3}$$
  Si impone raccordo in $x = 0$ tra le soluzioni:
$$\begin{cases} A_1 + A_2 = B_1 + B_2 & \text{continuità di } \psi \\ ik(A_1 - A_2) = iq(B_1 - B_2) & \text{continuità di } \psi' \end{cases}$$
  Per altre condizioni, si usa flusso di probabilità $J = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\partial_x\psi - \psi\partial_x\psi^*\right)$; andando a inserire ψ_- nella definizione di J, si ha $J = \frac{\hbar k}{m}\left(|A_1|^2 - |A_2|^2\right) \equiv J_{\text{inc}} + J_{\text{rif}}$. Si assume assenza di onda riflessa, per cui $B_2 = 0$[2]; similmente, si prende anche $A_2 = 0$ perché non si è interessati ad un'onda che si propaga via dalla barriera.

  Per normalizzazione di ψ_-[3], si prende $|J| = 1$; avendo interpretato A_1e^{ikx} come onda incidente e A_2e^{-ikx} come onda riflessa, si deve normalizzare a 1 J_{inc}, quindi $A_1 = 1/\sqrt{\hbar k/m} \equiv 1/\sqrt{v}$[4].

  Se $J_{\text{tr}} = \frac{\hbar q}{m}|B_1|^2$ come flusso trasmesso, si possono definire anche
$$T \overset{\text{def}}{=} \frac{J_{\text{tr}}}{J_{\text{inc}}} = \frac{q}{k}\frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}; \quad R \overset{\text{def}}{=} \frac{J_{\text{rif}}}{J_{\text{inc}}} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} \tag{2.7.4}$$
  da cui deve risultare anche $T + R = 1$. Risolvendo le condizioni imposte, si trova:
$$\begin{cases} R = 1 - \dfrac{4kq}{(k+q)^2} \\ T = \dfrac{4kq}{(k+q)^2} \end{cases}$$
  Per $E/V_0 \to \infty$, deve risultare $T \to 1$, quindi $k \sim q$.

- **Caso** $E < V_0$.
  In $x < 0$, $\partial_x^2\psi + k^2\psi = 0$ con $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ e si ha stessa soluzione di prima. In $x > 0$ vale $\partial_x^2\psi - \beta^2\psi = 0$ con $\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$, quindi
$$\psi_+(x) = B_1e^{-\beta x} + B_2e^{\beta x} \tag{2.7.5}$$
  Per il resto, si richiede ancora $B_2 = 0$ e si impongono le stesse condizioni di raccordo.

[1] Essendo che in $x < 0$ $U(x) = 0$.
[2] Si richiede questo perché è il coefficiente dell'onda che da $x > 0$ va verso $x < 0$.
[3] È comune utilizzare un tipo di normalizzazione alternativa quando si ha a che fare con particelle non confinate in una regione spaziale.
[4] Si identifica $\hbar k/m$ come la velocità di propagazione dell'onda.

2.7.4 Particella contro barriera di potenziale

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

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

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

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

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

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

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

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

2.8 Descrizione di più sistemi

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

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

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

2.8.1 Operatori per sistemi non-interagenti

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

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

Da questo, risulta

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

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

$$\hat{A} |\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} \big(\hat{A} |a_n\rangle\big) \otimes |b_m\rangle = a_n |\psi\rangle$$

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

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

2.8.2 La matrice densità

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

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

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

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

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

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

$$\mathrm{tr}^{(1)}\left(\rho^{(1)}\right)^2 \leq 1 \tag{2.8.1}$$

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

2.8.3 Hamiltoniano del sistema risultante

In generale, l'hamiltoniano risultante è $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_{12}$. Se $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, l'evoluzione temporale è data da:

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|\,e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\rho(0)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{2.8.2}$$

L'evoluzione del singolo sottosistema si immagina indipendente da interazione, quindi si fanno evolvere separatamente come $\rho^{(1)}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_1 t}\rho^{(1)}(t=0)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_1 t}$.

Se $\hat{O}$ è un osservabile agente su $\mathcal{H}$, il suo valore di aspettazione su 1 è dato da $\mathrm{tr}^{(1)}\,\rho^{(1)}\hat{O}$.

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