

Fisica Quantistica 2

Prof. S. Forte, a.a. 2024-25

Leonardo Cerasi¹, Lucrezia Bioni

GitHub repository: [LeonardoCerasi/notes](#)

¹leo.cerasi@pm.me

Indice

Indice	ii
Introduzione	1
I Meccanica Quantistica in più Dimensioni	2
1 Sistemi Quantistici Multidimensionali	3
1.1 Spazio prodotto diretto	3
1.2 Sistemi multidimensionali	3
1.2.1 Coordinate cartesiane	4
1.3 Separabilità	5
1.3.1 Problemi separabili in coordinate cartesiane	5
1.3.2 Hamiltoniane separabili	5
1.4 Problema dei due corpi quantistico	7
1.4.1 Trasformazioni lineari di coordinate	8

Introduzione

La fisica quantistica è una teoria stocastica, non probabilistica, poiché permette di prevedere la probabilità che il sistema si trovi in un determinato stato e non le probabilità dei singoli eventi: questi avvengono con la misura, la quale fa cambiare l'informazione sul sistema in modo discontinuo. L'evoluzione temporale dello stato del sistema è data da trasformazioni unitarie che permettono di prevedere lo stato futuro del sistema.

La generalizzazione della meccanica quantistica unidimensionale a sistemi in più dimensioni e con più corpi introduce una notevole complessità nella trattazione che porta a sviluppi formali legati ai principi della fisica quantistica.

La teoria quantistica si sviluppa in direzioni diverse in base a due tipi di sistemi:

- sistemi riducibili, i quali vengono ricondotti a problemi più semplici a bassa dimensionalità (analogamente alla separazione del problema dei due corpi nel problema del baricentro e in quello del moto relativo), introducendo di conseguenza nuove osservabili associate alle trasformazioni possibili del sistema (studio dei gruppi di simmetria del sistema);
- sistemi irriducibili, che invece non possono essere semplificati per via di fenomeni come l'entanglement (*Verschränkung*) che emergono nei sistemi a più corpi.

La trattazione di sistemi complessi può essere semplificata in vari modi:

- limite classico: formulazione completamente diversa della meccanica quantistica introdotta da Feynman e basata sul concetto di integrale di cammino (path integral), permette di capire la relazione tra fisica classica e quantistica;
- metodi perturbativi: permettono di trovare soluzioni approssimate e non esatte; in particolare, si usano due classi di metodi perturbativi in base al sistema considerato:
 - indipendenti dal tempo, importanti per lo studio degli stati legati (es. atomo di elio);
 - dipendenti dal tempo, utilizzati per studiare gli stati del continuo (es. teoria d'urto).

Parte I

Meccanica Quantistica in più Dimensioni

Sistemi Quantistici Multidimensionali

1.1 Spazio prodotto diretto

Per definire formalmente i sistemi quantistici in più dimensioni, è necessario definire prima il prodotto diretto tra spazi di Hilbert.

Definizione 1.1.1. Dati due spazi di Hilbert \mathcal{H} e \mathcal{K} con basi $\{|e_i\rangle\}$ e $\{|\tilde{e}_j\rangle\}$, si definisce il loro prodotto diretto come $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K} := \{|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |e_i\rangle \otimes |\tilde{e}_j\rangle\}$. In questo spazio si definisce il prodotto scalare tra due vettori $|\psi_1\rangle = |e_{i_1}\rangle \otimes |\tilde{e}_{j_1}\rangle$ e $|\psi_2\rangle = |e_{i_2}\rangle \otimes |\tilde{e}_{j_2}\rangle$ come $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle e_{i_1}|e_{i_2}\rangle \langle \tilde{e}_{j_1}|\tilde{e}_{j_2}\rangle$.

Per semplificare la scrittura, si adotta la notazione $|e_i\rangle \otimes |e_j\rangle \equiv |e_i e_j\rangle$ (o si sottintende \otimes).

Si noti che osservabili relative a spazi diversi sono sempre compatibili.

In generale, il generico $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ non è scrivibile come prodotto diretto $|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\tilde{\phi}\rangle$, con $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ e $|\tilde{\phi}\rangle \in \mathcal{K}$, poiché in generale non è detto che c_{ij} sia fattorizzabile in α_i e $\tilde{\alpha}_j$: in questo caso si dice che lo stato è entangled.

Definizione 1.1.2. Uno stato $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ si dice entangled se non è fattorizzabile.

Esempio 1.1.1. Dati due qubit, uno stato entangled è $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$, dato che il generico stato fattorizzabile è $(a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle) = ac|00\rangle + ad|01\rangle + bc|10\rangle + bd|11\rangle$.

La probabilità $P_{ij} = |c_{ij}|^2$ è detta probabilità congiunta: in generale essa non è il prodotto delle probabilità dei singoli eventi per i fenomeni di interferenza quantistica, i quali rendono tale probabilità dipendente dallo stato dell'intero sistema.

1.2 Sistemi multidimensionali

Per generalizzare la meccanica quantistica in d dimensioni, si introduce l'operatore posizione $\hat{\mathbf{x}}$:

$$\hat{\mathbf{x}} := \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \vdots \\ \hat{x}_d \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

Ciascuna componente di questo vettore è un operatore hermitiano che agisce su uno spazio di Hilbert, mentre il vettore $\hat{\mathbf{x}}$ agisce sul loro prodotto diretto $\mathcal{H} := \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_d$. Su ciascuno spazio \mathcal{H}_j viene definita la base delle posizioni da $\hat{x}_j |x_j\rangle = x_j |x_j\rangle$, dunque la base delle posizioni in \mathcal{H} sarà $|\mathbf{x}\rangle := |x_1\rangle \otimes \cdots \otimes |x_d\rangle$: data $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, la sua rappresentazione sulla base delle posizioni è

$\langle \mathbf{x} | \psi \rangle \equiv \psi(\mathbf{x})$, con $\psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$, il cui modulo quadro dà una densità di probabilità d -dimensionale $dP_{\mathbf{x}} = |\psi(\mathbf{x})|^2 d^d \mathbf{x}$.

In questo caso, l'entanglement consiste nel fatto che, in generale, $\psi(\mathbf{x}) \neq \psi_1(x_1) \dots \psi_d(x_d)$.

Tale formalismo è generalizzabile al caso di n corpi in d dimensioni, nel qual caso si ha uno spazio prodotto diretto di nd spazi di Hilbert.

Esempio 1.2.1. Nel caso di 2 corpi in 3 dimensioni, si ha:

$$\hat{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \hat{x}_{1,1} \\ \hat{x}_{1,2} \\ \hat{x}_{1,3} \\ \hat{x}_{2,1} \\ \hat{x}_{2,2} \\ \hat{x}_{2,3} \end{pmatrix}$$

In questo sistema, la funzione d'onda è $\langle \mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$.

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle = \delta^{(d)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (1.2)$$

La $\delta^{(d)}$ è il prodotto di d delte di Dirac ed è definita da $\int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x} \delta^{(d)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}')$ come distribuzione.

1.2.1 Coordinate cartesiane

Analogamente al caso monodimensionale, per definire l'operatore impulso si considera una traslazione spaziale; le componenti del vettore operatore impulso $\hat{\mathbf{p}}$ sulla base delle posizioni sono definite da:

$$\langle \mathbf{x} | \hat{p}_j | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(\mathbf{x}) \quad (1.3)$$

In forma vettoriale, è possibile scrivere:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla \quad (1.4)$$

A questo punto, è facile definire le autofunzioni dell'impulso tali per cui $\hat{\mathbf{p}} |\mathbf{k}\rangle = \hbar \mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle$:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \equiv \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (1.5)$$

Il fatto che operatori su spazi diversi commutino tra loro implica che:

$$[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0 \quad \forall j, k = 1, \dots, d \quad (1.6)$$

Dal punto di vista matematico, questo è ovvio per il lemma di Schwarz (assumendo una well-behaved ψ), mentre da quello fisico ciò esprime il fatto che traslazioni lungo assi diversi commutano tra loro: ciò non è scontato, infatti ad esempio le rotazioni rispetto ad assi diversi non commutano (dunque le componenti del momento angolare non commuteranno).

È facile vedere che $\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \nabla^2$, dunque è possibile definire l'Hamiltoniana del sistema (e con essa la sua evoluzione temporale):

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \quad (1.7)$$

Ricordando che $\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, si ottiene l'equazione di Schrödinger sulla base delle coordinate:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (1.8)$$

1.3 Separabilità

Nel caso di sistemi non-entangled, è possibile separare il problema multidimensionale in d problemi monodimensionali e scrivere la soluzione come prodotto delle soluzioni dei problemi ridotti.

1.3.1 Problemi separabili in coordinate cartesiane

Proposizione 1.3.1. *In coordinate cartesiane, condizione sufficiente affinché il problema sia separabile è che:*

$$V(\mathbf{x}) = V_1(x_1) + \dots + V_d(x_d) \quad (1.9)$$

In tal caso, l'Hamiltoniana del sistema è somma di d sotto-Hamiltoniane (e di conseguenza lo è anche l'evoluzione temporale):

$$\mathcal{H}_j = \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}_j) \quad (1.10)$$

dunque la determinazione dello spettro dell'Hamiltoniana si riduce a d problemi unidimensionali.

Proposizione 1.3.2. *Data un'Hamiltoniana separabile \mathcal{H} , detti $\langle x_j|\psi_{k_j}\rangle = \psi_{k_j}(x_j)$ gli autostati della j -esima sotto-Hamiltoniana $\mathcal{H}_j|\psi_{k_j}\rangle = E_{k_j}|\psi_{k_j}\rangle$, sono autostati di \mathcal{H} gli stati prodotto:*

$$\langle \mathbf{x}|\psi_{k_1\dots k_d}\rangle = \psi_{k_1\dots k_d}(\mathbf{x}) \equiv \psi_{k_1}(x_1) \dots \psi_{k_d}(x_d) \quad (1.11)$$

Dimostrazione. Si vede facilmente che:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}|\mathcal{H}|\psi_{k_1\dots k_d}\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{k_1}(x_1)}{\partial x_1^2} \psi_{k_2}(x_2) \dots \psi_{k_d}(x_d) + V_1(x_1) \psi_{k_1}(x_1) \psi_{k_2}(x_2) \dots \psi_{k_d}(x_d) + \\ &\quad \vdots \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{k_d}(x_d)}{\partial x_d^2} \psi_{k_1}(x_1) \dots \psi_{k_{d-1}}(x_{d-1}) + V_d(x_d) \psi_{k_d}(x_d) \psi_{k_1}(x_1) \dots \psi_{k_{d-1}}(x_{d-1}) \\ &= E_{k_1} \psi_{k_1}(x_1) \dots \psi_{k_d}(x_d) + \dots + E_{k_d} \psi_{k_1}(x_1) \dots \psi_{k_d}(x_d) \\ &= E_{k_1\dots k_d} \psi_{k_1\dots k_d}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

dove è stata definita $E_{k_1\dots k_d} \equiv E_{k_1} + \dots + E_{k_d}$. □

1.3.2 Hamiltoniane separabili

Si può vedere che, per un'Hamiltoniana separabile, le autofunzioni 1.11 sono le più generali. Innanzitutto, il commutatore canonico in d dimensioni si generalizza come:

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk} \quad [\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0 \quad [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0 \quad (1.12)$$

Da ciò segue che le Hamiltoniane 1.10 commutano tra loro, dunque sono diagonalizzabili simultaneamente e gli autovalori della loro somma sono la somma dei loro autovalori: di conseguenza, gli autostati di dell'Hamiltoniana del sistema sono tutti e soli quelli trovati nella Prop. 1.3.2.

Questo argomento è facilmente generalizzabile: si consideri un'Hamiltoniana generica \mathcal{H} che è possibile separare come somma di Hamiltoniane commutanti tra loro:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \cdots + \mathcal{H}_d \quad [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] = 0 \quad (1.13)$$

Le \mathcal{H}_j sono allora diagonalizzabili simultaneamente:

$$\mathcal{H}_j |k_j\rangle = E_{k_j} |k_j\rangle \quad (1.14)$$

e tali autostati formano una base per gli autostati di \mathcal{H} :

$$|k_1 \dots k_d\rangle = |k_1\rangle \otimes \cdots \otimes |k_d\rangle \quad (1.15)$$

mentre i suoi autostati sono:

$$E_{k_1 \dots k_d} = E_{k_1} + \cdots + E_{k_d} \quad (1.16)$$

Esempio 1.3.1. Un esempio tipico di problema tridimensionale separabile è la buca parallelepipedale di potenziale:

$$V_j(x_j) = \begin{cases} 0 & |x_j| < a_j \\ \infty & |x_j| \geq a_j \end{cases}$$

Ricordando la forma esplicita delle autofunzioni:

$$\langle x_j | \psi_{n_j} \rangle = \begin{cases} A_{n_j} \cos(k_{n_j} x_j) & n_j = 2n + 1 \\ B_{n_j} \sin(k_{n_j} x_j) & n_j = 2n \end{cases} \quad k_{n_j} = \frac{n_j \pi}{2a_j}$$

è facile ricavare lo spettro dell'Hamiltoniana:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_{n_1}^2 + k_{n_2}^2 + k_{n_3}^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{a_1^2} + \frac{n_2^2}{a_2^2} + \frac{n_3^2}{a_3^2} \right)$$

Se i valori degli a_j sono commensurabili, è possibile che lo spettro presenti delle degenerazioni: ad esempio, se si considerano $a_1 = a_2 = a_3 \equiv a$, lo stato fondamentale E_{111} non presenta degenerazioni, ma già il primo stato eccitato è triplamente degenere: $E_{211} = E_{121} = E_{112}$.

Esempio 1.3.2. Un esempio di particolare importanza è l'oscillatore armonico tridimensionale: con lo stesso ragionamento di prima, si trova lo spettro:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \left(n_1 \omega_1 + n_2 \omega_2 + n_3 \omega_3 + \frac{1}{2} (\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) \right)$$

Nel caso in cui $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 \equiv \omega$, si ha un potenziale a simmetria sferica $\hat{V}(\hat{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{\mathbf{x}}^2$ e lo spettro diventa:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \equiv \hbar \omega \left(N + \frac{3}{2} \right)$$

È possibile calcolare la degenerazione dell' N -esimo stato eccitato: n_1 può essere scelto in $N + 1$ modi, quindi n_2 può essere scelto in $N + 1 - n_1$ e, una volta scelti n_1 ed n_2 , n_3 è fissato, dunque la degenerazione $d(N)$ è:

$$d(N) = \sum_{n_1=0}^N (N + 1 - n_1) = (N + 1)^2 - \frac{1}{2}N(N + 1) = \frac{1}{2}(N + 1)(N + 2)$$

1.4 Problema dei due corpi quantistico

Il problema dei due corpi è un sistema in cui due corpi interagiscono tramite un potenziale che dipende solo dalla loro separazione:

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + \hat{V}(\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2) \quad (1.17)$$

Le variabili canoniche soddisfano la relazione di commutazione:

$$[\hat{x}_{j,a}, \hat{p}_{k,b}] = i\hbar\delta_{jk}\delta_{ab} \quad [\hat{x}_{j,a}, \hat{x}_{k,b}] = 0 \quad [\hat{p}_{j,a}, \hat{p}_{k,b}] = 0 \quad (1.18)$$

dove $a, b = 1, 2$ e $j, k = 1, 2, 3$.

Il problema è separabile definendo le coordinate relative e quelle del baricentro:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} &:= \hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2 \\ \hat{\mathbf{R}} &:= \frac{m_1\hat{\mathbf{x}}_1 + m_2\hat{\mathbf{x}}_2}{m_1 + m_2} \end{aligned} \quad (1.19)$$

A queste vanno associate i rispettivi impulsi congiunti:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} &:= \frac{m_2\hat{\mathbf{p}}_1 - m_1\hat{\mathbf{p}}_2}{m_1 + m_2} \\ \hat{\mathbf{P}} &:= \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 \end{aligned} \quad (1.20)$$

È pura algebra verificare che le variabili così definite soddisfino le relazioni di commutazione canoniche.

È altrettanto facile verificare che l'Hamiltoniana si può scrivere come:

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.21)$$

dove sono state definite la massa totale $M \equiv m_1 + m_2$ e quella ridotta $\mu^{-1} = m_1^{-1} + m_2^{-1}$. Questa Hamiltoniana è manifestamente separabile come $\mathcal{H} = \mathcal{H}_B(\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}) + \mathcal{H}_r(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_B(\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}) &= \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} \\ \mathcal{H}_r(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad [\mathcal{H}_B, \mathcal{H}_r] = 0 \quad (1.22)$$

Lo spettro è facilmente determinabile poiché sono due problemi unidimensionali.

È importante capire che la scelta di variabili canoniche trasformate non è casuale, ma dettata dalla separabilità del termine potenziale, che fissa $\hat{\mathbf{r}}$, dalle relazioni di commutazione, che per ogni scelta di $\hat{\mathbf{R}}$ fissano gli impulsi coniugati, e dalla separabilità del termine cinetico che va a fissare di conseguenza $\hat{\mathbf{R}}$ poiché rende univoca la scelta degli impulsi.

1.4.1 Trasformazioni lineari di coordinate

È possibile definire una generica trasformazione lineare di coordinate tramite una matrice di trasformazione $M \in \mathbb{R}^{d \times d}$:

$$\hat{\mathbf{x}}' = M\hat{\mathbf{x}} \quad (1.23)$$

ovvero in componenti $\hat{x}'_j = \sum_{k=1}^d M_{jk} \hat{x}_k$.

Proposizione 1.4.1. *Data una trasformazione lineare di coordinate M , gli impulsi coniugati trasformano secondo:*

$$\hat{\mathbf{p}}'^\top = \hat{\mathbf{p}}^\top M^{-1} \quad (1.24)$$

Dimostrazione. Considerando $\hat{\mathbf{p}}'^\top = \hat{\mathbf{p}}^\top N$, in componenti $\hat{p}'_j = \sum_{k=1}^d \hat{p}_k N_{kj}$, dalle relazioni di commutazione canoniche si ha:

$$[\hat{x}'_j, \hat{p}'_k] = \sum_{m=1}^d \sum_{n=1}^d M_{jm} N_{nk} \underbrace{[\hat{x}_m, \hat{p}_n]}_{=i\hbar\delta_{mn}} = i\hbar \sum_{n=1}^d M_{jn} N_{nk} = i\hbar \delta_{jk} \iff MN = I_d$$

□

È possibile ricavare la trasformazione 1.24 anche partendo dai principi, costruendo gli impulsi coniugati come generatori di traslazioni spaziali. Nella rappresentazione delle coordinate:

$$\langle \hat{\mathbf{x}} | \hat{\mathbf{p}} | \hat{\mathbf{x}}' \rangle = -i\hbar \nabla_{\mathbf{x}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (1.25)$$

Con abuso di notazione si può scrivere $\hat{p}_j = -i\hbar \partial_j$, dunque la relazione di trasformazione è data dalla derivata composta:

$$\hat{p}'_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'_j} = -i\hbar \sum_{k=1}^d \frac{\partial x_k}{\partial x'_j} \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (1.26)$$

Dall'Eq. 1.23 si ha $\frac{\partial x'_j}{\partial x_k} = M_{jk}$, dunque $\frac{\partial x_k}{\partial x'_j} = M_{kj}^{-1}$, ovvero l'Eq. 1.24.