

Quantum Mechanics

4 marzo 2023

Indice

I	Meccanica ondulatoria	4
1	La crisi della fisica classica	4
2	Interferenza e diffrazione delle onde elettromagnetiche	5
2.1	Doppia fenditura	5
2.2	Polarizzazione	7
2.3	de Broglie	7
2.4	Doppia fenditura con elettroni	8
2.5	Principio di indeterminazione	9
II	Introduzione alla meccanica quantistica	9
3	L'equazione di Schrödinger	10
3.1	Costruzione	10
3.2	L'equazione di Schrödinger per un potenziale arbitrario	14
3.3	Conservazione locale della probabilità ed equazione di continuità	15
4	Considerazioni sugli operatori – parte prima	16
4.1	Trasformata di Fourier	17
4.2	Commutatore	19
5	Potenziali indipendenti dal tempo e stati stazionari	20
5.1	Discussione qualitativa delle soluzioni dell'equazione degli stati stazionari in una dimensione	21
5.1.1	Due punti classici di inversione del moto	22
5.1.2	Uno e zero punti di inversione del moto	23
5.1.3	Commenti	24
5.2	Buche e barriere di potenziale	26
5.3	Equazione di Schrödinger in tre dimensioni con potenziale separabile	29
5.4	Equazione di continuità degli stati stazionari	30
5.5	Barriera di potenziale	31
5.5.1	Barriera finita – effetto tunnel	33
5.5.2	Buca finita	35
5.6	Proprietà delle soluzioni in una dimensione	39
5.6.1	Proprietà dello spettro discreto	39
5.6.2	Proprietà dello spettro continuo	41
III	Formulazione generale della meccanica quantistica	41

6	Considerazioni sugli operatori – parte seconda	41
6.1	Postulati della meccanica quantistica	44
7	Richiami sugli spazi di Hilbert	44
7.1	Notazione di Dirac	45
7.2	Basi continue	46
7.3	Richiami sugli operatori	47
7.4	Operazioni sugli operatori	48
7.5	Operatori auto-aggiunti, hermitiani	50
7.6	Ricerca degli autovalori ed autovettori – diagonalizzazione	52
7.6.1	Spazi finiti	52
7.6.2	Rappresentazione sulla base della posizione e sulla base dei momenti . . .	53
8	Oscillatore armonico	55
8.1	Stati stazionari	56
8.2	Rappresentazione matriciale degli operatori creatore, distruttore, posizione e momento	61
8.3	Valori medi e deviazioni standard della posizione e del momento	63
8.4	Oscillatore armonico in tre dimensioni	64
9	Interpretazione fisica	65
9.1	Osservabili compatibili ed osservabili incompatibili	65
9.2	Evoluzione temporale del valor medio di un'osservabile	68
9.3	Limite classico e teorema di Ehrenfest	69
9.4	Relazione di indeterminazione	71
9.5	Operatori unitari	74
9.5.1	Ruolo degli operatori unitari	74
9.6	Operatore di evoluzione temporale	75
9.7	Descrizione di Schrödinger e di Heisenberg	78
IV	Momento angolare, spin e particelle identiche	80
10	Momento angolare	80
10.1	Generatori del gruppo delle rotazioni	80
10.2	Autovalori ed autovettori del momento angolare	83
11	Momento angolare orbitale	88
11.1	Armoniche sferiche	91
11.2	Legame tra momento angolare e momento lineare	92
12	Potenziale centrale e atomi idrogenoidi	93
12.1	Potenziale a simmetria sferica	93
12.2	Due particelle che interagiscono in un potenziale dipendente dalla distanza relativa	97
12.3	Atomi idrogenoidi – prima approssimazione	99
13	Momento angolare di spin	106
13.1	Studio dello spin	108
13.2	Evoluzione di un elettrone localizzato in un campo magnetico uniforme	113
13.3	Risonanza paramagnetica di spin	114
14	Particella carica senza spin in un campo elettromagnetico	117
14.1	Oscillatore armonico in tre dimensioni	119
14.2	Campo magnetico uniforme e costante	122

15 Somma di momenti angolari	126
15.1 Prodotto tensoriale tra spazi di Hilbert	126
15.2 Somma	127
15.3 Somma del momento di spin semi-intero di due particelle	129
15.4 Caso generale	131
15.5 Somma di momento angolare orbitale e momento angolare di spin semi-intero . .	132
15.6 Proprietà dei coefficienti di Glebsch-Gordan	133
16 Particelle identiche	134
16.1 Approssimazione di particelle indipendenti	135
17 Simmetrie e leggi di conservazione	138
17.1 Simmetria	138
17.2 Simmetria e leggi di conservazione	139
17.3 Evoluzione temporale e valori medi	141
V Teoria delle perturbazioni	141
18 Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo	141
18.1 Metodo generale del calcolo perturbativo	142
18.1.1 Perturbazione su stati non degeneri	142
18.1.2 Perturbazione su stati degeneri	145
19 Effetto Stark dell'atomo di idrogeno	146
19.1 Considerazioni sulla simmetria del problema	149
20 Struttura fine degli atomi idrogenoidi	149
20.1 Calcolo delle correzioni	153
21 Effetto Zeeman	157
21.1 Campo magnetico debole	158
21.2 Campo magnetico intenso	160
21.3 Caso generale	161
22 Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo	161
22.1 Perturbazione costante	164
22.2 Perturbazione sinusoidale	164
22.3 Relazione di indeterminazione per il tempo e l'energia	166
22.4 Accoppiamento con gli stati del continuo	167
22.5 Considerazioni sul secondo termine correttivo della perturbazione	168
23 Interazione di un atomo con un'onda elettromagnetica	169
23.1 Hamiltoniana dell'interazione elettromagnetica a basse intensità	170
23.1.1 Hamiltoniana di dipolo elettrico	171
23.1.2 Hamiltoniana di dipolo magnetico e quadrupolo elettrico	173

Lezione 1

mar 27 set
2022 13:30

Parte I

Meccanica ondulatoria

La meccanica quantistica non ha evidenze nella vita di tutti i giorni. Essa è descritta da equazioni differenziali complesse.

1 La crisi della fisica classica

I principi della meccanica quantistica sono contrari all'intuizione comune. Si osserva da cosa è nata la meccanica quantistica. Tra la fine del XIX secolo e l'inizio del XX si osservano concetti incompatibili con la fisica classica:

- meccanica newtoniana
- termodinamica e fisica statistica classica
- elettromagnetismo
- relatività ristretta

La crisi della fisica classica è il fallimento non spiegabile all'interno della relatività né della fisica classica.

Corpo nero. La prima osservazione è la radiazione di corpo nero. Su basi termodinamiche, Kirchhoff dimostra l'universalità della radiazione di corpo nero. Ogni corpo che si comporta come un corpo nero ha lo stesso spettro di emissione. Il problema è spiegare l'universalità da principi primi. Nel 1900, Planck fitta il grafico della radiazione con una funzione (errata):

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Dove $h \approx 6.6 \times 10^{-34}$ J s è un parametro del fit. Esso è la costante di Planck.

Effetto fotoelettrico. Nel 1905, Einstein propone che l'energia di una radiazione a frequenza ν sia un multiplo intero di $h\nu$. Questo spiega l'effetto fotoelettrico. In un grafico, ν vs E_{\min} si ha una retta di pendenza $\frac{h}{e}$ con e carica elementare. Millikan misura esattamente tale pendenza. L'energia viene portata da quanti di radiazione.

Effetto Compton, 1922-23. L'elettromagnetismo si comporta in modo continuo, ma si pensa ancora che solamente nell'interazione con la materia, l'energia viene scambiata in modo discreto. Lo scetticismo riguardo la realtà fisica dei quanti scompare con l'effetto Compton.

Dei raggi X sono inviati ad un materiale. Essi hanno un'energia molto maggiore di quella di legame degli elettroni, i quali si comportano come fossero liberi. Infatti, dal quadri-momento si ha

$$E^2 - p^2 c^2 = m^2 c^4$$

Per una velocità $v = c$ si ha $m = 0$ e $E = pc = h\nu$. Il momento trasportato da un fotone è

$$p = \frac{h\nu}{c}$$

Una radiazione incide contro un elettrone statico. L'elettrone si muove ad un angolo e si misura una deviazione del fotone uscente dall'urto. Si ottiene una lunghezza d'onda in uscita

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

con angolo θ rispetto la direzione di incidenza. La formula è ottenuta trattando il fotone come una particella. Diventa fisico il fatto che la radiazione elettromagnetica si possa trattare come una particella, come un fotone. Nel 1926, Lewis dà il nome di fotone a tali quanti di energia. La lunghezza d'onda di Compton per l'elettrone è la quantità

$$\frac{h}{m_e c} = 2.4 \times 10^{-12} \text{ m}$$

Spettri atomici. Si osserva lo spettro solare e si notano delle lunghezze d'onda particolari. La luce prodotta dal Sole, passa attraverso la fotosfera che assorbe e diffonde nuovamente la luce, diminuendone l'intensità, da cui le righe nello spettro. L'elio venne scoperto in tal modo.

Nel 1897 si scopre l'elettrone. Seguono i modelli atomici. I primi modelli non riescono a spiegare gli spettri atomici. Bohr ipotizza che l'energia sia quantizzata e dunque la frequenza emessa dipende dal salto energetico di un elettrone. La costante di Planck non solo ha dimensioni di energia per tempo, ma anche di momento angolare. Bohr suppone che il momento angolare dell'elettrone è

$$m_e v r = n \hbar$$

In origine, \hbar è un numero dell'ordine di h . Modernamente è diventato

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Bohr non spiega, ma descrive. Tramite Schrödinger si ha una spiegazione ed una predizione, sebbene la sua equazione non è in sé dimostrabile.

2 Interferenza e diffrazione delle onde elettromagnetiche

2.1 Doppia fenditura

La luce è descritta da un fenomeno ondulatorio nell'interferenza e nella diffrazione. Nell'esperimento della doppia fenditura, sullo schermo si osserva un'intensità con un picco centrale e altri picchi minori ai lati. Esso non corrisponde a ciò che si riscontra da un comportamento corpuscolare. L'elettromagnetismo spiega tale discrepanza. L'intensità dell'onda è

$$I = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2$$

Essa è diversa dalla somma dei moduli (cioè come accadrebbe nel comportamento corpuscolare, oppure come considerando una fenditura alla volta e sommare a posteriori le due intensità).

Infatti, si considerino due fenditure e due raggi che incidono su uno stesso punto sullo schermo. I raggi sono (quasi) paralleli con un angolo θ rispetto la perpendicolare allo schermo a distanza molto maggiore della lunghezza d'onda. La differenza di fase dei due fasci è

$$d \sin \theta$$

dove d è la distanza tra le due fenditure. Si ha interferenza distruttiva per

$$d \sin \theta = n \frac{\lambda}{2}$$

con n numero intero dispari. Il primo luogo buio si ha per

$$\theta \approx \frac{1}{2} n \frac{\lambda}{d}$$

Esempio. Si consideri una lampadina da 100 W che emette una radiazione monocromatica a 580 nm. Il numero di fotoni in un secondo ha ordine di grandezza 10^{20} .

La doppia fenditura è ben descritta tramite le equazioni di Maxwell, cioè tramite una descrizione ondulatoria. D'altra parte, si può fare l'esperimento un fotone alla volta. Nel 1981, tramite strumenti sviluppati da Hamamatsu Photonics, sovrapponendo i luoghi di impatto, si osserva una figura di interferenza simile alla trattazione tramite le onde. Rifacendo l'esperimento, i luoghi particolari di impatto cambiano, ma la figura finale di sovrapposizione è la stessa. Tuttavia, bisogna capire con cosa interferisce il fotone e da che fenditura passa. La trattazione dei fenomeni deve avvenire in modo probabilistico: non si può prevedere in modo deterministico il comportamento di un sistema.

Chiudendo una fenditura, la figura di interferenza svanisce, sebbene si usi ancora un fotone alla volta. Ogni tentativo di capire da quale fenditura passa il fotone distrugge la figura di interferenza. La misura su di un sistema microscopico lo disturba in modo significativo. Se la figura svanisce cercando di capire da quale fenditura passa l'elettrone, allora significa che il fotone risente di entrambe le fenditure.

Lezione 2

Questo non è un esperimento di concetto (gedankenexperiment). Nessuno si sarebbe aspettato il risultato ottenuto:

mer 28 set
2022 13:30

- il fotone colpisce lo schermo in un punto preciso depositando tutta l'energia $h\nu$;
- con pochi eventi, lo schermo sembra riempito in modo casuale, ma con il passare del tempo emerge una figura di interferenza (come in un laser, 10^{20} fotoni alla volta).

Non si può più dire con certezza il luogo di impatto. Bisogna parlare di probabilità.

Inoltre, chiudendo una fenditura, scompare la figura di interferenza. Ogni tentativo di capire da quale fessura è passato il fotone distrugge la figura di interferenza.

La misura di un sistema microscopico lo disturba in modo significativo.

Per lunghezze d'onda molto minori della distanza tra le fenditure, i fotoni hanno comunque bisogno di entrambe le fenditure per costruire la figura di interferenza. Inoltre, cade l'idea classica del determinismo: date delle condizioni iniziali, non si può più completamente determinare il moto di una particella. Infatti, i fotoni colpiscono lo schermo in luoghi diversi, sebbene abbiano tutti le stesse condizioni iniziali. Pertanto, si interpreta il risultato: ogni fotone ha una certa probabilità (che corrisponde all'intensità $I(x)$) di colpire una certa zona dello schermo. Questo esperimento evidenzia il dualismo onda-particella: in alcuni casi è più facile usare una trattazione ondulatoria, in altri si usa la trattazione corpuscolare. La "vera" natura è l'elettrodinamica quantistica.

Dunque,

- la radiazione elettromagnetica si comporta come un flusso di particelle;
- le previsioni sul comportamento sono probabilistiche;
- l'informazione di un fotone in un punto \vec{r} dello schermo all'istante t è portata dal campo elettrico $\vec{E}(\vec{r}, t)$ soluzione delle equazioni di Maxwell. Quando la sorgente è debole, il campo elettrico va interpretato come un'ampiezza di probabilità. Mentre la densità di probabilità corrispondente è $|\vec{E}(\vec{r}, t)|^2$.
- Le equazioni di Maxwell sono equazioni lineari nel campo elettrico: questo implica valere il principio di sovrapposizione. Se \vec{E}_1 e \vec{E}_2 sono soluzioni delle equazioni di Maxwell, allora pure $\vec{E} = \lambda_1 \vec{E}_1 + \lambda_2 \vec{E}_2$ è soluzione. Tale principio permette di spiegare la figura di interferenza.

Il fisico Paul Dirac disse che ogni fotone interferisce con se stesso.

2.2 Polarizzazione

La luce è polarizzata. Si consideri un sistema di riferimento ed fascio di luce viaggiante in z positivo. Si posiziona un filtro polarizzante nel piano xy con direzione polarizzata denotata dal versore $\vec{\varepsilon}_p$. Oltre il filtro passa un'intensità I_0 . Successivamente, si pone un altro filtro parallelo al primo con direzione lungo \vec{e}_x . Si ha una intensità finale $I = I_0 \cos^2 \theta$, dove θ è l'angolo di $\vec{\varepsilon}_p$ con l'asse \vec{e}_x .

Si vede l'interpretazione classica. Si consideri un'onda piana

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0 \vec{\varepsilon}_p e^{i(kz - \omega t)}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi\nu, \quad \lambda\nu = c$$

Essa è la soluzione senza alle equazioni di Maxwell senza cariche. Dunque, $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$. Questo implica che

$$\vec{k} \cdot \vec{\varepsilon}_p = 0$$

cioè onde trasverse, perpendicolari alla direzione di propagazione. In questo caso, $\vec{k} \parallel \vec{z}$. Quindi, il vettore di polarizzazione appartiene ad un piano perpendicolare alla direzione di propagazione. Inoltre, l'intensità dopo il primo polarizzatore è $I_0 = |E_0|^2$. Il campo elettrico dopo il secondo polarizzatore è

$$\vec{E}'(\vec{r}, t) = E'_0 \vec{e}_x e^{i(kz - \omega t)}, \quad E'_0 = E_0 \cos \theta$$

L'intensità corrispondente è

$$I = I_0 \cos^2 \theta$$

Ora si utilizza una sorgente che emette un fotone alla volta. Le conseguenze sono

- un rivelatore posto oltre il secondo polarizzatore, o misura il fotone oppure non lo misura;
- tutta l'energia del fotone è misurata;
- il fotone arriva al rivelatore in base all'angolo θ ; se $\theta = 0$, allora il fotone passa sempre; se $\theta = \frac{\pi}{2}$ allora il fotone non passa mai; se θ è arbitrario, allora la probabilità di rilevare il fotone è $\cos^2 \theta$. Il numero di fotoni dopo un certo periodo è $N_{ph} = N_0 \cos^2 \theta$. Si può intendere il fotone come una miscela di due stati. Un fotone nel primo stato ψ_x ha probabilità di passare pari all'unità. Un fotone nell'altro stato ψ_y ha probabilità di passare pari a zero.
- Lo stato del fotone dopo il primo polarizzatore è

$$\psi_p = \psi_x \cos \theta + \psi_y \sin \theta$$

Inoltre, il fotone nello stato ψ_x passa con probabilità $|\cos \theta|^2 = \cos^2 \theta$; il fotone nello stato ψ_y non passa con probabilità $|\sin \theta|^2 = \sin^2 \theta$. Infatti, la probabilità totale è $\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$. Questo è il *principio di decomposizione spettrale*: si proietta lo stato di un sistema su altri stati di cui è noto il comportamento.

- Il secondo polarizzatore compie una misura perché sceglie fotoni con una certa caratteristica. Infatti, ponendo un altro polarizzatore orientato lungo l'asse delle x , esso non blocca altri fotoni: il secondo polarizzatore ha precipitato lo stato del fotone ad essere solo ψ_x . La misura ha disturbato in maniera irreversibile il sistema: essa ha precipitato lo stato da ψ_p a ψ_x .

2.3 de Broglie

Successivamente a Maxwell, la radiazione elettromagnetica è descritta tramite le onde, ma con Einstein e Compton si evidenzia un comportamento corpuscolare. Nel 1923, nella sua tesi di dottorato, De Broglie si chiede se pure la materia, fin'ora intesa come corpuscoli, si possa

descrivere come onde osservando una particella alla volta (in particolare gli elettroni).
L'onda ha comportamento

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t)$$

ed è invariante per trasformazioni di Lorentz: per cui \vec{k} e ω costituiscono un tetra-vettore perché legati rispettivamente alla quantità di moto ed all'energia. Dunque, per un fotone, vale

$$|\vec{p}| = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar|\vec{k}| \implies \lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$$

Pertanto, a qualunque particella è associato un vettore d'onda ed una lunghezza d'onda

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$$

Esempio. Si vede la lunghezza d'onda di de Broglie per l'elettrone. Esso ha massa $m_e = 511 \text{ keV}$ (in unità naturali). Si ha $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ V C}$. Si consideri un elettrone non relativistico. Vale

$$E = \frac{p^2}{2m_e} \implies \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} = \frac{1}{\sqrt{V}} 12.3 \text{ \AA}$$

con V in volt. Un elettrone ha lunghezza d'onda confrontabile con $\lambda \approx 1 \text{ \AA}$, cioè quella dei raggi X e le distanze tra atomi in un cristallo.

Esempio. Si considerino dei neutroni termici, cioè a basse energie cinetiche. Si ha

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_n E}} = \frac{h}{\sqrt{2m_n \frac{3}{2} k_B T}} = \frac{1}{\sqrt{T}} 30 \text{ \AA}$$

dove la temperatura T è in kelvin.

Esempio. Si consideri un granello di polvere. La sua massa è circa 10^{-10} kg ed ha dimensioni $1 \mu\text{m}$. Esso si muove a basse velocità, 1 mm s^{-1} . La lunghezza d'onda corrispondente è

$$\lambda = 6.6 \times 10^{-11} \text{ \AA}$$

Non si ha speranza di osservare l'oscillazione per oggetti macroscopici.

L'evidenza sperimentale della lunghezza d'onda di de Broglie è ottenuta tramite l'esperimento di Davisson-Germer (1927). Un fascio di elettroni incide su di un cristallo di nickel. Gli atomi nella struttura cristallina si comportano come delle sorgenti di onde quando sono colpiti. Si ottiene una figura di interferenza.

2.4 Doppia fenditura con elettroni

Negli anni '50, si esegue l'esperimento della doppia fenditura. Lo stesso esperimento, ma con un singolo elettrone, si compie nel 1974 a Bologna da Merli, Missiroli e Pozzi. Si osserva:

- l'elettrone arriva nella sua completezza e la carica non si diffonde sullo schermo;
- il grande numero di elettroni genera la figura di interferenza;
- l'arrivo sullo schermo è casuale per l'elettrone particolare;
- si interpreta la figura di interferenza come la distribuzione di probabilità degli elettroni;
- chiudendo una fenditura, non si ha più interferenza (l'elettrone interagisce con se stesso);
- cade il concetto di traiettoria, il determinismo.

Lezione 3

gio 29 set
2022 13:30

Per ora, si segue un ragionamento qualitativo. Si consideri l'esperimento della doppia fenditura con gli elettroni. [immagine] Un elettrone ha momento lineare iniziale p_x . Osservando lo schermo, si nota che l'elettrone ha deviato di un angolo θ rispetto la direzione iniziale: ha acquisito un momento verticale

$$p_y = p_x \sin \theta \approx p_x \theta = p_x \frac{\lambda}{d} \approx \frac{h}{d}$$

Il primo zero della figura di diffrazione si ha ad un angolo $\frac{\lambda}{d}$. Per de Broglie vale $\lambda = \frac{h}{p_x}$. Il trasferimento di momento è dato dall'interazione con lo schermo. Non si discutono gli esperimenti che cercano di determinare da quale fessura sia passato l'elettrone.

2.5 Principio di indeterminazione

Si ragiona sul concetto di traiettoria, cioè della posizione e della velocità di una particella. Si considera una ben precisa procedura di misura. Per misurare la traiettoria, si pone uno schermo di fronte una sola fenditura. Si osserva ancora una figura di diffrazione su tale schermo. La posizione del primo minimo si ha ad un angolo

$$\theta = \frac{\lambda}{\Delta y}$$

dove Δy è la dimensione della fenditura. La particella ha acquisito una quantità di moto verticale Δp_y . Il momento acquisito ha ordine di grandezza pari a

$$\Delta p_y \approx p \theta = p \frac{\lambda}{\Delta y} = \frac{h}{\Delta y}$$

con p momento lineare iniziale. Da ciò risulta

$$\boxed{\Delta y \Delta p_y \approx h}$$

Si è limitati nella precisione della misura. Questa è l'essenza del principio di indeterminazione di Heisenberg. Questa relazione incorpora l'effetto della perturbazione causata dallo strumento di misura (lo schermo). La perturbazione ha un ruolo essenziale in meccanica quantistica perché ha ordine di grandezza dei fenomeni misurati.

In tanti testi, l'indeterminazione è sulla precisione della posizione y e del momento p_y nello stesso momento. In questo caso, prima si è misurato il momento, poi la posizione, però la distanza temporale è trascurabile. Il principio di indeterminazione che si ottiene dagli operatori della meccanica quantistica non è la stessa cosa: bisogna prestare attenzione.

Ripetendo l'esperimento, con lo stesso momento iniziale, si hanno posizioni finali diverse: non si riesce più a predire la traiettoria perché lo strumento disturba in modo sostanziale la particella.

Osservazione. Si osserva:

- L'ultimo esperimento svolto sulla doppia fenditura è dell'aprile 2003 da Zeilinger ("Quantum interference experiments with large molecules", cfr. pagina Oleari) utilizzando un fullerene C_{60} a forma di icosaedro troncato, una palla da calcio. Si osserva una figura di diffrazione.
- Per i fotoni sono stati introdotti due stati di polarizzazione, sebbene questa sia una visione classica. L'interpretazione corretta è considerare un momento angolare associato al fotone. Similmente, gli elettroni hanno un momento magnetico intrinseco: lo spin, quantizzato in $\pm \frac{\hbar}{2}$ lungo una certa direzione. Tanti libri (Sakurai, Feynman) presentano la meccanica quantistica partendo dalla quantizzazione del momento magnetico intrinseco dell'elettrone.

Parte II

Introduzione alla meccanica quantistica

3 L'equazione di Schrödinger

Essa descrivere fenomeni quantistici, ma non relativistici. Si ricava l'equazione in modo diverso da come ha fatto Schrödinger. Si utilizzano delle ipotesi plausibili. La nuova teoria deve contenere

- il principio di indeterminazione di Heisenberg, l'incapacità operativa di determinare la posizione e la velocità (la traiettoria) di una particella in un certo istante;
- un corretto limite classico, il principio di corrispondenza;
- un'equazione lineare per far valere il principio di sovrapposizione (come per il campo elettrico), si vuole produrre la figura di interferenza tramite un algoritmo, bisogna avere una somma coerente di due oggetti (l'intensità totale non è la somma delle intensità singole); il quadrato del modulo dell'oggetto che si vuole studiare si intende come densità di probabilità;
- parlando di somma coerente, deve comparire una lunghezza d'onda, così da ritrovare? l'ipotesi di de Broglie;
- per il rasoio di Occam, la somma coerente non è di campi vettoriali, ma campi scalari complessi; infatti, vale ancora che il modulo quadro della somma non è la somma dei moduli quadri. Un singolo campo complesso non è sufficiente per considerare anche lo spin, infatti, Dirac utilizza quattro campi complessi per unificare la meccanica quantistica con la relatività speciale.

3.1 Costruzione

Si vede la costruzione in una dimensione. Si consideri un campo scalare complesso $f(x)$. La probabilità infinitesima di trovare la particella tra x e $x + dx$ è

$$dP = |f(x)|^2 dx$$

Dunque $|f(x)|^2$ è una densità di probabilità. Si applica il vincolo

$$\int_{\mathbb{R}} dP = 1 \implies \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx = 1$$

La funzione $f(x)$ è detta ampiezza di probabilità (poi funzione d'onda, soluzione all'equazione di Schrödinger, funzione di stato, etc). Tale vincolo corrisponde al fatto che una particella, quando cercata su tutto l'asse reale, ha probabilità unitaria di essere presente: questo vale solo nella trattazione non relativistica, la materia non diventa energia.

Una particella si rappresenta come un pacchetto di onde localizzato cioè una combinazione lineare di più onde piane. La trasformata di Fourier risulta naturale per la trattazione.

Trasformata di Fourier. Non si considerano i coefficienti moltiplicativi. La trasformata è

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}} g(k) e^{ikx} dk = \int_{\mathbb{R}} dk g(k) e^{ikx}$$

Si consideri una gaussiana

$$g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}$$

La larghezza ha ordine di grandezza di $\alpha^{-\frac{1}{2}}$. La trasformata è

$$f(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}}, \quad |f(x)|^2 = \frac{\pi}{\alpha} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}$$

la cui larghezza è $\sqrt{\alpha}$. Infatti

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{\mathbb{R}} e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx} dk = \int_{\mathbb{R}} e^{-\alpha t^2} e^{itx} e^{ik_0 x} dt, \quad k - k_0 \equiv t, \quad dk = dt \\ &= e^{ik_0 x} \int_{\mathbb{R}} e^{-\left(\sqrt{\alpha}t - \frac{1}{2\sqrt{\alpha}}ix\right)^2} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} dt, \quad \sqrt{\alpha}t - \frac{1}{2\sqrt{\alpha}}ix \equiv \eta, \quad \sqrt{\alpha} dt = d\eta \\ &= e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\eta^2} \frac{d\eta}{\sqrt{\alpha}} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \end{aligned}$$

Inoltre

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} x f(x) dx, \quad (\Delta x)^2 = \int_{\mathbb{R}} (x - \langle x \rangle)^2 f(x) dx$$

Per la gaussiana si ha

$$\Delta x = \sqrt{\alpha}, \quad \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \implies \Delta x \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

dove Δx è riferito a $|f(x)|^2$. Il valore particolare di $\frac{1}{\sqrt{2}}$ non è importante. Tutti i pacchetti gaussiani hanno tale valore. Per qualunque funzione e la sua trasformata vale

$$\boxed{\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}}$$

Caso limite. Si considera la delta di Dirac

$$f(x) = \delta(x - x_0)$$

La sua trasformata è un'onda piana

$$g(k) = e^{ikx_0} \implies |g(k)|^2 = 1 \implies \Delta k \rightarrow \infty$$

La relazione tra Δx e Δk suggerisce già un principio di indeterminazione qualora si interpreta k come una quantità di moto. Affinché sia valida l'ipotesi di de Broglie, risulta

$$\hbar k = p \implies \Delta x \Delta p \geq \hbar$$

La trasformata di Fourier fornisce informazioni sul momento di una particella.

Tempo. Finora, non si è menzionata un'evoluzione temporale. Si ha una descrizione di una particella libera in un certo istante. Si inserisce il tempo con la condizione che il baricentro del pacchetto di onde soddisfi l'equazione di Newton.

Per un'onda piana

$$e^{i(kx - \omega(k)t)}$$

elettromagnetica nel vuoto vale la relazione di dispersione

$$\omega(k) = 2\pi\nu = 2\pi\frac{c}{\lambda} = kc$$

Dunque, l'onda piana diventa

$$e^{ik(x-ct)}$$

e si muove con una velocità pari a c . Infatti, la soluzione all'equazione di Maxwell nel vuoto è la soluzione all'equazione delle onde

$$f(x, t) = f(x - ct)$$

Il pacchetto di onde diventa

$$f(x, t) = \int_{\mathbb{R}} g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

Si consideri la funzione $g(k)$ piccata intorno ad un numero d'onda k_0 centrale. La maggior parte dei valori di $\omega(k)$ che contribuiscono sono intorno a $\omega(k_0)$. Si espande in serie di Taylor

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) d_k \omega(k_0) + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 d_k^2 \omega(k_0) + \dots$$

Posto $k' = k - k_0$, si ha

$$f(x, t) = e^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]} \int_{\mathbb{R}} g(k') e^{ik'(x - v_g t)} e^{-i\beta t(k')^2 + \dots} dk'$$

dove

$$v_g \equiv d_k \omega(k_0), \quad \beta \equiv \frac{1}{2} d_k^2 \omega(k_0)$$

Il centro del pacchetto si propaga con la velocità di gruppo v_g (che è sempre minore della velocità della luce).

I momenti della particella sono centrati attorno

$$p_0 = \hbar k_0$$

Si impone che il pacchetto si muove secondo l'equazione di Newton. La velocità di gruppo è

$$v_g = d_k \omega(k_0) = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar k_0}{m} \implies \boxed{\omega = \frac{\hbar}{m} \frac{k^2}{2}}$$

cioè si ha la relazione di dispersione della particella libera. Segue

$$\omega = \frac{1}{2m\hbar} p^2$$

Dunque

$$f(x, t) = \int_{\mathbb{R}} g(k) e^{i(kx - \frac{\hbar}{2m} k^2 t)} dk = \frac{1}{\hbar} \int_{\mathbb{R}} g(p) e^{\frac{i}{\hbar} (px - \frac{p^2}{2m} t)} dp$$

Si noti che, nell'ultimo termine, il coefficiente del tempo è l'energia cinetica per una particella libera non relativistica. Quindi

$$f(x, t) = \frac{1}{\hbar} \int_{\mathbb{R}} g(p) e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)} dp, \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

Da ora si utilizza il nome di funzione d'onda

$$\Psi(x, t) = \int_{\mathbb{R}} \phi(p) e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)} dp$$

con la condizione

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d^n x = 1$$

Si cerca l'equazione più semplice soddisfatta dalla funzione d'onda. Si ha

$$\begin{aligned} \partial_t \Psi &= \int_{\mathbb{R}} \phi(p) \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \right) e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)} dp \\ \partial_x \Psi &= \int_{\mathbb{R}} \phi(p) \frac{i}{\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)} dp, \quad \partial_x^2 \Psi = \int_{\mathbb{R}} \phi(p) \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 p^2 e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)} dp \end{aligned}$$

Dalla prima equazione si ha

$$i\hbar \partial_t \Psi = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}} \phi(p) p^2 e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} dp = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi$$

Pertanto, l'equazione di Schrödinger è

$$i\hbar \partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi$$

Lezione 4

Si omette il dominio di integrazione di molti integrali riguardo la funzione d'onda: si intende \mathbb{R} . Questa è l'equazione per una particella libera con energia

lun 03 ott
2022 13:30

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Si sta sviluppando una teoria diversa dalle precedenti e si è interessati alle sue previsioni.

Osservazione. Si osserva:

- l'equazione è lineare in Ψ ;
- essa è un'equazione del secondo ordine nelle derivate spaziali, mentre del primo ordine nella derivata temporale; essa non è un'equazione relativistica, perché il tempo e lo spazio non hanno lo stesso peso;
- essa è un'equazione diversa da quelle reali viste (trasporto, onde, calore, Laplace) perché compare l'unità immaginaria.

Esercizio. Particella libera. La funzione d'onda con i fattori moltiplicativi è

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{\alpha}}{(2\pi)^{\frac{3}{4}}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{\alpha^2}{4}(k-k_0)^2} e^{i[kx - \omega(k)t]} dk, \quad \text{Re}(\alpha^2) > 0$$

Svolgere esplicitamente l'integrale. Il risultato è

$$|\Psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi\alpha^2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 \alpha^4}}} \exp\left[-\frac{2\alpha^2 \left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{\alpha^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}\right]$$

Si verifichi che

$$\int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Osservazione. Si fanno alcuni commenti sui risultati dell'esercizio.

- La particella libera è una gaussiana il cui centro (massimo) si trova in

$$x = \frac{\hbar k_0}{m} t$$

La velocità con cui si sposta è la velocità di gruppo

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m}$$

- La larghezza (intesa come deviazione standard) è

$$\Delta x = \frac{\alpha}{2} \sqrt{1 + \left[\frac{2\hbar t}{\alpha^2 m} \right]^2}$$

Essa aumenta con il tempo. Dunque, il picco si abbassa per conservare l'integrale totale di $|\Psi|^2$. Con il passare del tempo, risulta sempre meno chiaro dove si trovi la particella.

- La distribuzione dei momenti non cambia. Questo implica che, nell'espressione della funzione d'onda, il termine

$$e^{-\frac{\alpha^2}{4}(k-k_0)}$$

rimane lo stesso, compreso il valore centrale del momento $p = \hbar k_0$. Questo perché la particella è libera e non è influenzata da qualcosa che possa cambiarle il momento, cioè sia presente una forza. Il momento lineare è conservato.

- L'allargamento Δx della particella libera *non* è una caratteristica del solo pacchetto gaussiano. Per ogni distribuzione iniziale, facendo passare un tempo sufficientemente lungo (che dipende dalla forma del pacchetto), la larghezza del pacchetto inizia a crescere. Per la particella libera, a tempo negativo il pacchetto è più largo di $t = 0$: la gaussiana si stringe ($t = 0$) poi si allarga $t > 0$.

3.2 L'equazione di Schrödinger per un potenziale arbitrario

Si studia l'equazione di Schrödinger per un potenziale arbitrario $V(x)$. Si utilizza un'ipotesi plausibile. Il pacchetto per una particella libera soddisfa

$$i\hbar \partial_t \Psi = \int \phi(p) E e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} dp$$

così come

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi = \int \phi(p) \frac{p^2}{2m} e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} dp$$

in quanto l'energia della particella libera è

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Ora la particella è vincolata ad un certo potenziale. La forma generale è

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

In meccanica quantistica, V è l'energia potenziale, non il potenziale vero è proprio. Si moltiplica la relazione precedente per

$$\phi(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

e poi si integra in dp da entrambi i lati. Pertanto, l'equazione sopra diventa

$$i\hbar \partial_t \Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) \right] \Psi$$

Questa è l'equazione completa per un potenziale scalare. In tre dimensioni si ha

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

La funzione d'onda deve soddisfare la normalizzazione della probabilità

$$\int_V |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x \equiv 1, \quad \forall t$$

questo perché

$$dP = |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$$

è la probabilità infinitesima di trovare la particella in un volume d^3x all'istante t .

3.3 Conservazione locale della probabilità ed equazione di continuità

Risolvendo l'equazione di Schrödinger in un certo istante, non si è assicurati che la soluzione soddisfi l'integrale di normalizzazione anche all'istante successivo.

Si consideri l'equazione di Schrödinger per un potenziale scalare

$$i\hbar \partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi$$

Il suo complesso coniugato è

$$-i\hbar \partial_t \Psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + V \Psi^*$$

Si nota che V è una funzione reale. Sapendo $|\Psi|^2 = \Psi \Psi^*$, segue

$$\begin{aligned} \partial_t |\Psi|^2 &= (\partial_t \Psi) \Psi^* + \Psi (\partial_t \Psi^*) = \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^* \nabla^2 \Psi + \Psi^* V \Psi + \frac{\hbar^2}{2m} \Psi \nabla^2 \Psi^* - \Psi V \Psi^* \right] \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*] \end{aligned}$$

Si definisce il vettore

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*)$$

La sua divergenza è

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{J} &= \vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*) = \frac{\hbar}{2mi} (\vec{\nabla} \Psi^* \cdot \vec{\nabla} \Psi + \Psi^* \nabla^2 \Psi - \vec{\nabla} \Psi \cdot \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi \nabla^2 \Psi^*) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) \end{aligned}$$

Posto $\rho = |\Psi(\vec{x}, t)|^2$ si ha

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$$

Dunque, ρ è la densità di probabilità, mentre \vec{J} è la densità di corrente di probabilità.

Osservazione. Si osserva:

- la corrente \vec{J} è una quantità reale, $\vec{J} = \vec{J}^*$;
- l'equazione precedente è molto simile all'equazione di continuità della carica elettrica; l'equazione di continuità rappresenta la conservazione locale, ma non globale: se varia la carica, allora c'è un flusso; nulla sparisce, ma le cose fluiscono. Si consideri un volume arbitrario Ω , allora

$$\partial_t \int_{\Omega} \rho(\vec{x}, t) d^3x = - \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{x}, t) d^3x = - \int_{\partial\Omega} \vec{J}(\vec{x}, t) \cdot d\vec{s}$$

dove si è applicato il teorema della divergenza all'ultima equazione. Se Ω è tutto lo spazio, allora, affinché il termine

$$\int_{\Omega} \rho(\vec{x}, t) d^3x = \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$$

sia finito (quindi la derivata temporale sia nulla), allora la corrente deve annullarsi al bordo di Ω cioè ad infinito. Pertanto, l'integrale sopra dev'essere una costante, in particolare l'unità così che $|\Psi|^2$ si possa interpretare come una densità di probabilità.

4 Considerazioni sugli operatori – parte prima

Si studia il legame tra la funzione d'onda ed il limite classico, si studia il principio di corrispondenza.

Si consideri la misura della posizione di una particella. Classicamente, la posizione è, ragionevolmente, la media pesata delle posizioni misurate:

$$x_{cl} \equiv \int x P(x) dx = \int x |\Psi(x, t)|^2 dx$$

dove $P(x)$ è la distribuzione di probabilità delle posizioni. La posizione classica è il valor di aspettazione della posizione

$$x_{cl} \equiv \langle x \rangle = \int \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx$$

L'uso delle parentesi angolate è per ricordare il prodotto scalare tra due quantità (Ψ e $x\Psi$). Infatti, la funzione d'onda e la densità di probabilità $|\Psi|^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle = \Psi^* \Psi$ associata contengono informazioni sul sistema quantistico. Si applicano gli operatori per estrapolare quelle desiderate. Per il momento si ha

$$\langle p \rangle = mv = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = m \int (\partial_t \Psi^*) x \Psi + \Psi^* x (\partial_t \Psi) dx$$

Dall'equazione di Schrödinger per la particella libera si ottiene la derivata $\partial_t \Psi$:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{\hbar}{2i} \int (\partial_x^2 \Psi^*) x \Psi - \Psi^* x (\partial_x^2 \Psi) dx \\ &= \frac{\hbar}{2i} \int -\partial_x \Psi^* \partial_x (x \Psi) + \partial_x (\Psi^* x) \partial_x \Psi dx \\ &= \frac{\hbar}{2i} \int (-\partial_x \Psi^*) \Psi - (\partial_x \Psi^*) x \partial_x \Psi + (\partial_x \Psi^*) x \partial_x \Psi + \Psi^* \partial_x \Psi dx \\ &= \frac{\hbar}{2i} \int \Psi^* \partial_x \Psi - (\partial_x \Psi^*) \Psi dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \int \Psi^* \partial_x \Psi dx = \int \Psi^*(x, t) (-i\hbar \partial_x) \Psi(x, t) dx \end{aligned}$$

Alla seconda e quinta uguaglianze si integra per parti ricordando che i termini sul bordo svaniscono. Questa espressione suggerisce di definire l'operatore quantità di moto come

$$\boxed{\hat{p}_x \equiv -i\hbar \partial_x} \quad \hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

Si noti che questa espressione è la derivata che si è applicata all'onda piana

$$e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

In quest'espressione, p è un numero, non l'operatore. Nella derivata scende il momento a moltiplicare l'onda stessa:

$$\hat{p}_x e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} = p e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

Similmente, il termine cinetico classico di partenza è

$$K = \frac{p^2}{2m}$$

In meccanica quantistica, esso diventa un operatore

$$\frac{1}{2m} \hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2$$

cioè il termine cinetico dell'equazione di Schrödinger.

In generale, classicamente il valore di aspettazione di una qualunque funzione di x è

$$\langle f(x, t) \rangle = \int P(x, t) f(x, t) dx = \int \Psi^*(x, t) f(x, t) \Psi(x, t) dx$$

La seconda uguaglianza è la traduzione in meccanica quantistica. Per una funzione dei momenti si ha

$$\langle g(p) \rangle = \int \Psi^*(x, t) g(-i\hbar \partial_x) \Psi(x, t) dx$$

La quantità

$$\hat{g}(\hat{p}) = g(-i\hbar \partial_x)$$

è diventato un operatore. Per una funzione che dipende sia dalla posizione che dal momento si ha

$$\langle A(x, p) \rangle = \int \Psi^*(x, t) \hat{A}(x, \hat{p}) \Psi(x, t) dx$$

Un esempio è il momento angolare. Tutto quanto riguarda il momento angolare in meccanica quantistica sfrutta la relatività ristretta, ma lo stesso non vale per altre trattazioni. Propriamente, anche la posizione x è un operatore

$$\hat{x} = x$$

In fisica classica, qualunque grandezza fisica è funzione di x e p (si ricordi la meccanica lagrangiana). Si ha un modo per passare alla versione quantistica. Per una funzione qualunque si ha

$$A(x, p) \rightarrow \hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$$

Lezione 5

Ci si chiede se i valor medi sono il modo univoco di rappresentare gli operatori.

mar 04 ott
2022 13:30

4.1 Trasformata di Fourier

Le trasformate di Fourier della funzione d'onda sono

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Phi(p, t) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp, \quad \Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x, t) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx$$

Sia Ψ che Φ contengono le stesse informazioni perché si può ricavare l'una dall'altra. Si mostra che tali scritture sono corrette. Infatti

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x', t) e^{-i\frac{px'}{\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} dx' dp \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \Psi(x', t) \int e^{-i\frac{p}{\hbar}(x'-x)} dp dx', \quad k \equiv \frac{p}{\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \Psi(x', t) \hbar \int e^{-ik(x'-x)} dk dx' \\ &= \int \Psi(x', t) \delta(x' - x) dx' = \Psi(x, t) \end{aligned}$$

nell'ultima uguaglianza si utilizza

$$\int_{\mathbb{R}} e^{ikx} dk = 2\pi\delta(x)$$

Teorema. di Plancherel-Parseval. La tilde denota la trasformata della funzione su cui è presente. Vale

$$\begin{aligned}\int \tilde{\varphi}^*(p) \tilde{\xi}(p) dp &= \int \tilde{\varphi}^*(p) \int \xi(x) e^{-i \frac{px}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} dx dp \\ &= \int \xi(x) \int \tilde{\varphi}^*(p) e^{-i \frac{px}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp dx \\ &= \int \varphi^*(x) \xi(x) dx\end{aligned}$$

L'integrale nello spazio delle posizioni è identico all'integrale nello spazio dei momenti. Qualora $\xi(x) = \varphi(x)$ allora vale

$$\int \tilde{\varphi}^*(p) \tilde{\varphi}(p) dp = \int \varphi^*(x) \varphi(x) dx \iff \int |\tilde{\varphi}(p)|^2 dp = \int |\varphi(x)|^2 dx$$

Pertanto, riprendendo la scrittura della trasformata di Fourier per Ψ e Φ , si ha

$$\int |\Phi(p, t)|^2 dp = \int |\Psi(x, t)|^2 dx \equiv 1$$

Omettendo il tempo, il momento è

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int \Psi^*(x) (-i\hbar \partial_x) \Psi(x) dx = \int \Psi^*(x) (-i\hbar \partial_x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Phi(p) e^{i \frac{px}{\hbar}} dp dx \\ &= \int \Phi(p) p \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi^*(x) e^{i \frac{px}{\hbar}} dx dp = \int \Phi^*(p) p \Phi(p) dp \\ &= \int p |\Phi(p)|^2 dp\end{aligned}$$

cioè la stessa cosa vista per x con Ψ . Combinando questo con la relazione sopra, la trasformata $\Phi(p)$ è la funzione d'onda nello spazio dei momenti. Dunque, $|\Phi(p, t)|^2$ è una densità di probabilità e $|\Phi(p, t)|^2 dp$ è la probabilità infinitesima di trovare la particella con momento tra p e $p + dp$.

Si ha un'interpretazione alla trasformata di Fourier all'interno della meccanica quantistica. Inoltre, rappresentare p come una derivata rispetto lo spazio non è univoco. Si hanno modi diversi per rappresentare le stesse cose usando le stesse informazioni, ma alcune rappresentazioni sono più semplici di altre.

Nella rappresentazione dei momenti, l'operatore momento è

$$\hat{p} = p$$

Mentre la posizione è

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int \Psi^*(x) x \Psi(x) dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \iint \Phi^*(p) e^{-i \frac{px}{\hbar}} dp \int \Phi(p') e^{i \frac{p'x}{\hbar}} x dp' dx \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint \Phi^*(p) e^{-i \frac{px}{\hbar}} dp \int \Phi(p') (-i\hbar \partial_{p'}) e^{i \frac{p'x}{\hbar}} dp' dx \\ &= \frac{i}{2\pi} \int \Phi^*(p) \int \partial_{p'} \Phi(p') \int e^{-i \frac{x}{\hbar} (p-p')} dx dp' dp \\ &= i\hbar \int \Phi^*(p) \int \partial_{p'} \Phi(p') \delta(p-p') dp' dp \\ &= \int \Phi^*(p) (i\hbar \partial_p) \Phi(p) dp\end{aligned}$$

nella terza uguaglianza si è integrato per parti in dp' ricordando che i termini di bordo sono nulli; inoltre, l'ultimo integrale nella terza riga è la delta di Dirac: $2\pi\delta(p-p')\hbar$. Dunque, l'operatore posizione nello spazio dei momenti è

$$\hat{x} = i\hbar \partial_p$$

4.2 Commutatore

Il commutatore $[\hat{x}, \hat{p}]$ non cambia quando si passa da uno spazio all'altro. Il commutatore di due operatori è

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

Si ricorda che l'ordine degli operatori è importante. Il commutatore è un operatore. Dunque, nella rappresentazione delle posizioni, si ha

$$[\hat{x}, \hat{p}]\Psi(x) = -x i\hbar \partial_x \Psi + i\hbar \partial_x (x\Psi) = -i\hbar (x \partial_x \Psi - \Psi - x \partial_x \Psi) = i\hbar \Psi$$

da cui il commutatore è

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Questo commutatore è indipendente dalla rappresentazione. Infatti, nella rappresentazione dei momenti si ha

$$[\hat{x}, \hat{p}]\Phi(p) = i\hbar \partial_p (p\Phi) - p i\hbar \partial_p \Phi = i\hbar \Phi(p) \implies [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Osservazione. Studio della realtà della media del momento \sharp . Il valor medio della posizione è

$$\langle x \rangle = \int |\Psi|^2 x dx$$

Dunque

$$\begin{aligned} \langle p \rangle - \langle p \rangle^* &= \int \Psi^* (-i\hbar) \partial_x \Psi dx - \int \Psi (i\hbar) \partial_x \Psi^* dx \\ &= -i\hbar \int \Psi^* \partial_x \Psi + \Psi \partial_x \Psi^* dx = -i\hbar \int \partial_x (\Psi^* \Psi) dx = 0 \end{aligned}$$

Vale zero per il teorema della divergenza in quanto agli estremi la densità di probabilità si annulla. Il valor medio del momento è una quantità reale.

Osservazione. Commento sugli operatori posizione e momento \sharp . Gli operatori posizione e momento sono hermitiani, auto-aggiunti. L'operatore aggiunto \hat{A}^\dagger di un operatore \hat{A} è tale per cui

$$\int \Psi^* \hat{A} \Phi dx = \int (\hat{A}^\dagger \Psi)^* \Phi dx$$

L'operatore auto-aggiunto è tale per cui $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

Nello spazio delle coordinate si ha

$$\int \Psi^* \hat{x} \Phi dx = \int \Psi^* x \Phi dx = \int (x\Psi)^* \Phi dx \equiv \int (\hat{x}^\dagger \Psi)^* \Phi dx$$

da cui l'operatore aggiunto è

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

pertanto è hermitiano. Per il momento si ha

$$\int \Psi^* (-i\hbar \partial_x) \Phi dx = -(-i\hbar) \int (\partial_x \Psi^*) \Phi dx = \int (-i\hbar \partial_x \Psi)^* \Phi dx$$

alla prima uguaglianza si è integrato per parti. Segue

$$\hat{p}^\dagger = -i\hbar \partial_x = \hat{p}$$

Gli operatori auto-aggiunti hanno autovalori reali che sono fondamentali per descrivere osservabili reali.

5 Potenziali indipendenti dal tempo e stati stazionari

Si considera il caso in cui l'energia potenziale non dipende dal tempo

$$V(\vec{x}, t) = V(\vec{x})$$

Questo non implica che la funzione d'onda non dipenda dal tempo. Se il tempo è un fattore di fase, allora $|\Psi|$ è indipendente dal tempo. Una soluzione all'equazione di Schrödinger si cerca tra le funzioni a variabili separabili

$$\Psi(\vec{x}, t) = \varphi(\vec{x})T(t)$$

L'equazione diventa

$$\begin{aligned} i\hbar\varphi(\vec{x}) \, d_t T &= -\frac{\hbar^2}{2m}T(t)\nabla^2\varphi(\vec{x}) + V(\vec{x})T(t)\varphi(\vec{x}) \\ \frac{i\hbar}{T} \, d_t T &= \frac{1}{\varphi} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi + V\varphi \right] = E = \text{cost.} \end{aligned}$$

Alla seconda riga, il primo membro dipende solo dal tempo, mentre il secondo dipende solo dalla posizione, dunque sono uguali quando sono pari alla stessa costante. Per il primo membro si ha

$$i\hbar \frac{dT}{T} = E \, dt \implies i\hbar \int_{T_i}^{T_f} \frac{dT}{T} = E \int_{t_i}^{t_f} dt \implies \ln T \Big|_{T_i}^{T_f} = \frac{Et}{i\hbar} \Big|_{t_i}^{t_f}$$

Scegliendo $t_i = 0$ e $t_f = t$ si ha

$$T(t) = T(0)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

cioè solamente un fattore di fase. Questo succede anche per l'onda piana ($e^{-i\omega t}$) che è soluzione per $V = 0$. Nelle onde piane si ha

$$\hbar\omega = E$$

cioè l'energia della particella. Similmente, in questo caso si interpreta E come l'energia totale del sistema. Essa è costante. Come in meccanica classica, l'energia totale è costante se pure costante è il potenziale.

Stati stazionari. Le soluzioni a variabili separabili costituiscono gli stati stazionari che dipendono dal tempo solamente per una fase

$$\Psi(\vec{x}, t) = \varphi(\vec{x})e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \implies |\Psi(\vec{x}, t)| = |\varphi(\vec{x})|$$

Il modulo non dipende dal tempo.

Il secondo membro dell'equazione di Schrödinger si deve risolvere conoscendo il potenziale particolare. La soluzione deve soddisfare

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\vec{x}) + V(\vec{x})\varphi(\vec{x}) = E\varphi(\vec{x})}$$

cioè l'equazione di Schrödinger per gli stati stazionari. Da questa equazione, si può giustamente interpretare E come l'energia potenziale, infatti l'equazione corrisponde a

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

cioè la somma tra l'energia cinetica e l'energia potenziale detta hamiltoniana del sistema.

Hamiltoniana. Si introduce l'operatore hamiltoniano

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

Esso è hermitiano perché pure \hat{p} e \hat{x} lo sono.

L'equazione di Schrödinger per gli stati stazionari diventa

$$\hat{H}\varphi = E\varphi$$

Questa è un'equazione agli autovalori:

$$\hat{A}f = af$$

L'operatore \hat{A} è lineare, la funzione f è un'auto-funzione (o autovettore) di \hat{A} , il numero a è l'autovalore associato. L'operatore hamiltoniano seleziona particolari funzioni φ e valori di E . Lo spettro è l'insieme degli autovalori.

Osservazione. Continuità della funzione d'onda \sharp . Si studiano le proprietà di φ . In una dimensione si ha

$$d_x^2\varphi = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\varphi$$

La derivata seconda della funzione d'onda ha la stessa classe di continuità del potenziale $V(x)$. Se $V \rightarrow \infty$ allora l'equazione è soddisfatta per $\varphi \equiv 0$.

Si studia la derivata prima quando $V(x)$ non è una funzione continua. Sia x_0 un punto singolare: $V(x_0)$ è un salto oppure una delta. Dunque

$$\begin{aligned} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} d_x^2\varphi \, dx &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} (V - E)\varphi \, dx \\ \varphi'(x_0 + \varepsilon) - \varphi'(x_0 - \varepsilon) &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} (V - E)\varphi(x) \, dx \end{aligned}$$

Lezione 6

Se V fosse una funzione continua, allora l'integrale tenderebbe a zero e la derivata di φ sarebbe continua. Se $V(x_0)$ è un salto finito, allora l'integrale tende a zero e $\varphi \in C^1$. La funzione d'onda non ha salti anche se il potenziale ne ha.

Sia $V = V_0\delta(x - x_0)$ una delta. L'integrale diventa

$$\varphi'(x_0 + \varepsilon) - \varphi'(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} V_0\varphi(x_0)$$

Eccetto il caso in cui $\varphi(x_0) = 0$, in generale, la derivata prima ha una discontinuità di salto e dunque una cuspidè nella funzione d'onda la quale è continua.

5.1 Discussione qualitativa delle soluzioni dell'equazione degli stati stazionari in una dimensione

Si vuole studiare l'equazione degli stati stazionari

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

Sia

$$\alpha^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]$$

mer 05 ott
2022 13:30

quindi

$$d_x^2 \psi + \alpha^2 \psi = 0$$

Nell'intorno di un punto x_0 della soluzione (escluso il caso della delta), la funzione α ha un certo valore approssimabile a costante: o perché V è costante oppure proprio perché si è all'interno di un piccolo intorno. Si studiano i due casi $\alpha^2 > 0$ e $\alpha^2 < 0$ che corrispondono a $E > V$ e $E < V$.

Primo caso. Si studia il caso $\alpha^2 > 0$. Intorno al punto x_0 , la soluzione è quella dell'oscillatore armonico

$$\psi \sim c_1 \sin(\alpha x) + c_2 \cos(\alpha x)$$

si hanno soluzioni oscillatorie. Il valore di α cambia in base alla posizione, ma la soluzione è sempre costituita da sinusoidi, sebbene cambi la pulsazione. La frequenza delle oscillazioni è data dall'energia cinetica classica

$$E - V(x) = K$$

La concavità della soluzione segue da

$$\psi'' = -\alpha^2 \psi$$

cioè dal segno della soluzione. Se $\psi > 0$ allora $\psi'' < 0$, cioè la funzione è concava, e viceversa.

Secondo caso. Si studia il caso $\alpha^2 = -\beta^2 < 0$ con $\beta^2 > 0$. La soluzione va come

$$\psi \sim c_1 e^{\beta x} + c_2 e^{-\beta x}$$

Le soluzioni dei due casi fanno parte della stessa famiglia (esponenziali), ma fisicamente hanno significati diversi. La convessità si ricava dall'equazione differenziale

$$\psi'' = \beta^2 \psi$$

Se $\psi > 0$ allora $\psi'' > 0$ e la funzione è convessa, e viceversa. Nella regione in cui $E - V(x) < 0$ la soluzione è esponenziale e si allontana dall'asse x . Questo implica che l'energia cinetica sia negativa. Sono regioni in cui la particella classica non potrebbe entrare, ma quella quantistica può.

La regione in cui $\alpha^2 > 0$ è detta regione classicamente permessa. Quella per cui $\alpha^2 < 0$ si dice regione classicamente proibita.

5.1.1 Due punti classici di inversione del moto

Si consideri un potenziale monodimensionale con una forma convessa (come una parabola, Figura 1). Si consideri un'energia totale positiva. Sono presenti tre regioni. Sinistra, dentro e

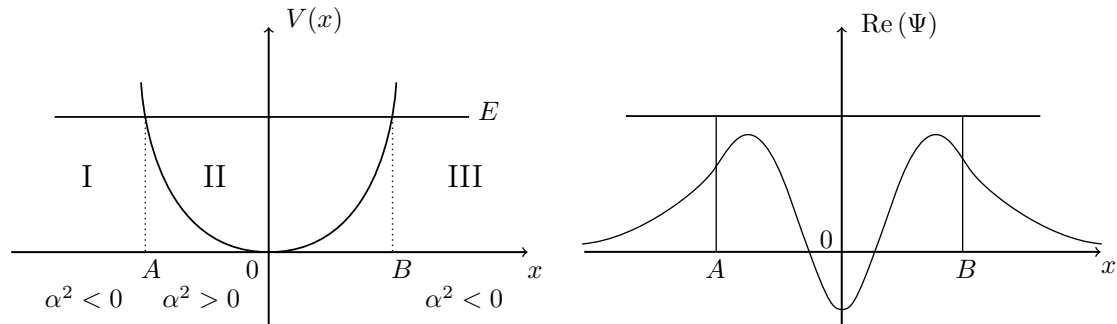


Figura 1: Due punti di inversione.

destra rispetto il potenziale.

Nella prima regione e nella terza si ha $E - V(x) < 0$ e $\alpha^2 < 0$. Nella seconda regione si ha $\alpha^2 > 0$. I punti di intersezione del potenziale con l'energia totale sono i punti classici di inversione del moto.

Si studia la funzione d'onda per questo problema. I punti critici, di inversione sono A e B . Per $x < A$, la funzione d'onda è, localmente, un esponenziale (reale), ma non deve essere presente il termine $e^{-\beta x}$, in quanto per $x \rightarrow -\infty$ si ha $e^{-\beta x} \rightarrow \infty$ che non ha senso fisico perché ψ deve tendere a zero per essere quadrato integrabile. Similmente, per $x > B$, non deve essere presente il termine $e^{\beta x}$.

Per la seconda regione, $A < x < B$, la soluzione ha derivata continua ed essa stessa è continua in A , ma deve cambiare concavità: la soluzione è oscillatoria in tale regione. Più aumenta la differenza in energia, più aumenta la frequenza di oscillazione. In B , la soluzione si deve ancora raccordare con la terza regione. Come arriva la soluzione in B dipende dalla differenza $E - V(x)$. Questo implica che solo alcuni valori di energia sono permessi per ottenere il raccordo: i livelli energetici sono quantizzati, lo spettro di energia è discreto.

Potenziale simmetrico pari. Si utilizza un potenziale simmetrico (Figura 1) per sfruttare la parità, ma il discorso è generale. Esiste un livello più piccolo di energia permesso (stato fondamentale). Tale stato dev'essere quello per cui si ha il numero minore di oscillazioni: una sola. Con una sola oscillazione, $E - V$ dev'essere la minore, portando allo stato fondamentale, livello 0. Al livello successivo, l'energia E aumenta, così pure α^2 : si hanno più oscillazioni, due

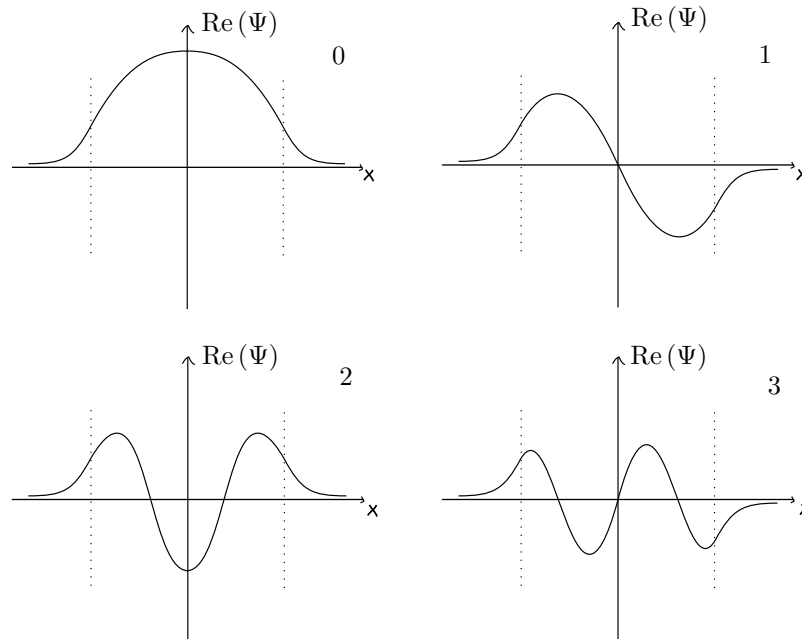


Figura 2: Livelli energetici.

anse e un nodo. Si ricorda che il significato fisico è dato dal modulo quadro. Per un potenziale simmetrico, si hanno soluzioni ψ pari e dispari, ma $|\psi|^2$ è comunque pari.

Al livello 2, si hanno tre anse con due nodi. La soluzione ritorna ad essere pari. Al livello 3, si hanno quattro anse con tre nodi. La soluzione è dispari.

5.1.2 Uno e zero punti di inversione del moto

Si consideri un potenziale simile ad un gradino, ma continuo. Il caso con un punto di inversione del moto è quello per cui l'energia totale è minore del gradino. Il caso con zero punti di inversione è quello con l'energia maggiore del gradino.

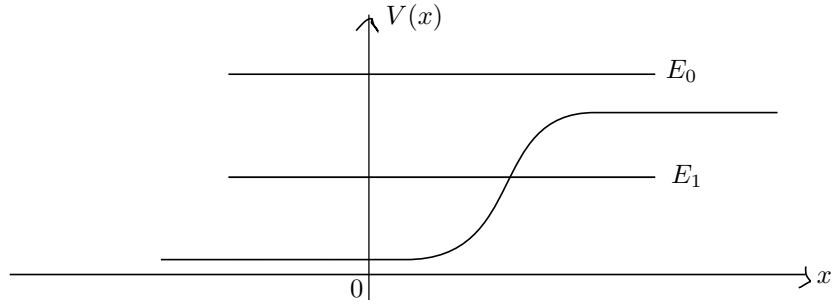


Figura 3: Energie necessarie per un punto di inversione e per nessun punto.

Un punto di inversione. Si hanno due regioni, prima e dopo il punto. Nella seconda regione, quella classicamente proibita, la funzione d'onda è localmente un esponenziale senza il termine $e^{\beta x}$. Nella prima regione, quella permessa, la funzione d'onda è oscillatoria, ma si deve raccordare solamente con la seconda regione. Qualunque valore di energia è permesso, lo spettro energetico è continuo.

Zero punti di inversione. La funzione d'onda è costituita da sinusoidi. Non si hanno raccordi e qualunque livello energetico è permesso.

Questi ultimi due casi implicano una funzione d'onda non quadrato integrabile. Tali seni e coseni (cioè onde piane) diventano gli strumenti per costruire i pacchetti di onde, le particelle (in quanto costituiscono un sistema ortonormale completo, la base di Fourier) tramite loro combinazioni lineari. [r]

Esempio. Per un potenziale generico, si possono avere regioni con spettro continuo ed altre con spettro discreto.

5.1.3 Commenti

Primo commento. In fisica classica, lo stato fondamentale è quello ad energia nulla, in fondo alla buca di potenziale senza energia cinetica. In meccanica quantistica, questo non è possibile, bisogna che la funzione d'onda si raccordi. Inoltre, bisogna rispettare il principio di indeterminazione di Heisenberg: nel caso classico si ha posizione e momento definiti. Si confina una particella all'interno di una buca rettangolare di lunghezza a . Si ha

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar \implies \Delta p \sim \frac{\hbar}{a}$$

Il suo momento è

$$|p| = \frac{\hbar}{2a}$$

perché il momento a destra ed a sinistra è lo stesso ed implicano $\Delta p = \frac{\hbar}{a}$. L'energia cinetica è

$$K \approx \frac{p^2}{2m} = \frac{(\Delta p)^2}{8m} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \implies K \approx \frac{\hbar^2}{ma^2} \propto \frac{1}{a^2}$$

Una particella acquista energia quando si diminuisce la regione in cui è confinata. Ad un certo punto, l'energia per confinare la particella è uguale all'energia della particella stessa e non si può procedere oltre. Questa è la reazione al confinamento.

In meccanica quantistica, l'energia dello stato fondamentale è anche detta energia di punto zero. Questo è anche il motivo per cui l'elettrone non cade sul nucleo. Il potenziale elettrico va come $\frac{1}{r}$ mentre la reazione di resistenza va come $\frac{1}{r^2}$.

Esercizio. [r] Per descrivere questo problema partendo dall'equazione di Schrödinger si ha bisogno delle grandezze a , m e \hbar . La lunghezza è ricavata dalla lunghezza caratteristica del potenziale, cioè lo spazio in cui si ha $E > V$. Dimensionalmente, si vuole costruire un'energia tramite queste quantità

$$E \propto a^\alpha m^\beta \hbar^\gamma$$

Tramite l'analisi dimensionale si costruiscono le grandezze necessarie. Tuttavia, manca il coefficiente numerico. La differenza con la meccanica classica è costituita dalla presenza della costante di Planck, \hbar .

Secondo commento. In meccanica quantistica, esistono regioni di energia cinetica negativa (intesa in senso classico), ma la particella può comunque essere presente, sebbene la probabilità decada esponenzialmente. Quando si trova la particella, la si trova tutta intera con una certa velocità.

Terzo commento. Esistono dei punti nella regione classica (i nodi della funzione d'onda) in cui una particella non è mai presente. Questo non succede in meccanica classica dove si ha un continuo di possibili posizioni.

Teorema. L'energia dev'essere $E > V_{\min}$.

Dimostrazione. Dall'equazione di Schrödinger si ha

$$\begin{aligned} E\varphi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + V\varphi \\ E &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int \varphi^* \varphi'' dx + \int V|\varphi|^2 dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int |\varphi'|^2 dx + \int V|\varphi|^2 dx > \int V|\varphi|^2 dx \\ &\geq \int V_{\min}|\varphi|^2 dx = V_{\min} \int |\varphi|^2 dx = V_{\min} \end{aligned}$$

alla seconda riga si è moltiplicato per φ^* e integrato in dx ; alla terza riga si è integrato per parti il primo integrale.

Quarto commento. Effetto tunnel. Si consideri un potenziale con profilo sinusoidale che si approssima ad un'onda quadra. Si consideri una particella di energia E minore del potenziale massimo.

Nelle regioni $E - V < 0$ si ha soluzione ad esponenziale reale e si hanno entrambi i termini $e^{\pm\beta x}$. Al di fuori si ha una sinusoide pura. Alla salita del potenziale, esiste una probabilità di essere all'interno ed una probabilità di trovarsi al di là.

Inviando una particella contro una barriera, oltre di essa, la funzione d'onda è minore di quella incidente, ma non nulla.

Lezione 7

Sfruttando l'effetto tunnel si costruiscono

- microscopio ad effetto tunnel, binning;
- maser tramite ammoniaca; il maser è un laser ma con microonde;
- diodo ad effetto tunnel;

tutti e tre premi nobel.

gio 06 ott
2022 13:30

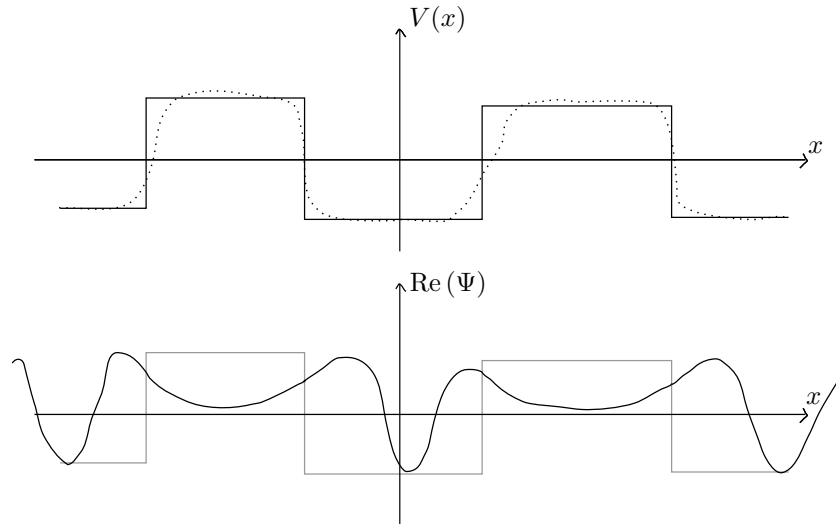


Figura 4: Effetto tunnel.

5.2 Buche e barriere di potenziale

Particella in una scatola con potenziale infinito. Si confina una particella in una regione di spazio tramite dei potenziali infiniti. Si ha

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & \text{altrove} \end{cases}$$

L'unica soluzione per $V(x) = \infty$ è $\varphi \equiv 0$ all'equazione di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 \varphi = (E - V)\varphi$$

Mentre per $0 < x < a$ si ha

$$\varphi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi = 0$$

In questa regione, non si ha alcun livello energetico minore del potenziale: pertanto $E > 0$. La derivata prima della funzione d'onda è discontinua (perché si ha un infinito nel potenziale), ma la funzione d'onda stessa è continua. Pertanto, ai bordi, la soluzione si deve raccordare:

$$\varphi(0) = \varphi(a) = 0$$

Sia

$$\frac{2mE}{\hbar^2} \equiv k^2 > 0$$

pertanto

$$\varphi'' + k^2 \varphi = 0 \implies \varphi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

La soluzione deve soddisfare le condizioni al bordo, ma anche la normalizzazione. Dunque

$$\varphi(0) = B = 0, \quad \varphi(a) = A \sin(ka) = 0$$

pertanto

$$A \neq 0, \quad k = \frac{n\pi}{a}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

da cui

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$$

L'energia è quantizzata, si hanno valori discreti.

Osservazione. Si osserva:

- l'energia minima è maggiore di zero;
- si è già trovata la dipendenza $E \propto \frac{1}{a^2}$, ma ora si sa anche il coefficiente numerico;

Gli auto-stati (le auto-funzioni) dell'equazione degli stati stazionari sono

$$\varphi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Per trovare la costante A si deve applicare la normalizzazione

$$\int \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) dx = 1$$

da cui le auto-funzioni sono

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

I livelli energetici crescono come n^2 .

Osservazione. Si nota:

- i livelli energetici E_n sono reali;
- vale

$$\int_0^a \varphi_n^*(x) \varphi_m(x) dx = \delta_{mn}$$

cioè le φ_n sono funzioni ortonormali;

- le funzioni d'onda $\varphi_n(x)$ sono funzioni reali;
- per ogni valore di E_n , esiste una sola funzione d'onda φ_n ; l'indice identifica univocamente l'energia e la funzione d'onda corrispondente: non c'è degenerazione. Si ha degenerazione quando ad uno stesso livello energetico corrispondono funzioni d'onda con caratteristiche diverse.
- Le funzioni d'onda φ_n sono un sistema ortonormale completo, cioè la base di Fourier, nell'intervallo $[0, a]$ per funzioni con condizioni al bordo $f(0) = f(a) = 0$. Infatti

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x)$$

i coefficienti si trovano come

$$\int_0^a \varphi_m^*(x) f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_0^a \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m$$

Al tempo $t = 0$, si supponga di inserire nella buca una particella con funzione d'onda $f(x) = \psi(x, 0)$ arbitraria consentita. Si ha

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x)$$

Si studia il comportamento della base. Ogni elemento $\varphi_n(x)$ è soluzione dell'equazione degli stati stazionari. Dunque, la loro evoluzione temporale è data da un puro fattore di fase

$$\psi_n(x, t) = \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$$

Pertanto, l'evoluzione temporale della funzione d'onda arbitraria è

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$$

che non è più uno stato stazionario (perché il modulo dipende dal tempo). Essa è la soluzione generale (non solo per la buca, ma ogni qual volta è presente un potenziale indipendente dal tempo e quindi si può separare la funzione d'onda la quale presenta stati stazionari). Si verifica che quanto scritto sia giusto. Infatti

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x) = f(x)$$

Inoltre, essa soddisfa l'equazione di Schrödinger. La parte temporale è

$$i\hbar \partial_t \psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n i\hbar \left(-i \frac{E_n}{\hbar} \right) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \varphi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n E_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \varphi_n(x)$$

la parte spaziale è

$$\hat{H}\psi \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \hat{H}\varphi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} E_n \varphi_n(x)$$

in quanto

$$\hat{H}\varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x)$$

Le due espressioni sono identiche.

Osservazione. Si consideri una particella nell'auto-stato $\varphi_n(x)$. Si trova il valor di aspettazione dell'hamiltoniana, dell'energia:

$$\langle \hat{H} \rangle_n = \int \varphi_n^*(x) \hat{H} \varphi_n(x) dx = \int \varphi_n^*(x) E_n \varphi_n(x) dx = E_n, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2$$

come ci si aspetta, perché lo stato ha energia definita. Ogni volta che si fa una misura, si trova uno dei valori energetici permessi. Si vuole trovare l'energia per una particella con funzione d'onda arbitraria. Allora

$$\langle \hat{H} \rangle_{\psi}(t) = \int \psi^*(x, t) \hat{H} \psi(x, t) dx$$

Si nota che

$$\hat{H}\psi(x, t) = \hat{H} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n E_n \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$$

Pertanto

$$\langle \hat{H} \rangle_{\psi}(t) = \int \sum_{k=1}^{\infty} c_k^* \varphi_k^*(x) e^{i \frac{E_k t}{\hbar}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n E_n \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} dx = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n$$

ricordando che $\int \varphi_k^* \varphi_n dx = \delta_{kn}$. Bisogna misurare più volte l'energia ripartendo sempre dallo stato iniziale: non si può misurare più volte consecutivamente perché la misura disturba il sistema quantistico. Pertanto, il valore di aspettazione dell'hamiltoniana è una media pesata da $|c_n|^2$ degli stati energetici.

Osservazione. Si è già dimostrato che l'evoluzione temporale della funzione d'onda non ne cambia il modulo quadro. I coefficienti $|c_n|^2$ si interpretano come probabilità degli stati E_n . Infatti:

$$1 = \int \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx = \int \sum_{k=1}^{\infty} c_k^* \varphi_k^*(x) e^{i \frac{E_k t}{\hbar}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} dx = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2$$

5.3 Equazione di Schrödinger in tre dimensioni con potenziale separabile

L'equazione di Schrödinger diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi + V(x, y, z)\varphi = E\varphi$$

Il potenziale è ancora stazionario. Se il potenziale si può scrivere come

$$V(x, y, z) = W(x) + U(y) + S(z)$$

allora esso è detto separabile. Si cercano soluzioni come

$$\varphi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

L'equazione di Schrödinger diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(X''YZ + XY''Z + XYZ'') + [W(x) + U(y) + S(z)]XYZ = EXYZ$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X''(x)}{X(x)} + W(x)\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y''(y)}{Y(y)} + U(y)\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Z''(z)}{Z(z)} + S(z)\right] = E$$

alla seconda riga si è diviso per XYZ . Inoltre, affinché la somma di tre termini dipendenti da variabili diverse sia una costante, si necessita ogni addendo essere una costante. Dunque

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}X'' + WX = E_1X \\ -\frac{\hbar^2}{2m}Y'' + UY = E_2Y \\ -\frac{\hbar^2}{2m}Z'' + SZ = E_3Z \end{cases}$$

Si è semplificato il problema tridimensionale in tre problemi monodimensionale.

Buca tridimensionale con pareti a potenziale infinito. Il potenziale è nullo nella regione

$$[0, a] \times [0, b] \times [0, c]$$

e infinito altrove. L'energia di una particella in tale buca è

$$E_{n_1n_2n_3} = E_1 + E_2 + E_3 = n_1^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + n_2^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} + n_3^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mc^2}$$

e dipende da tre indici, ciascuno dal problema monodimensionale associato. La funzione d'onda soluzione è

$$\varphi_{n_1n_2n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right) \sin\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right)$$

Gli indici n_i sono detti numeri quantici.

Se a , b e c sono incommensurabili, cioè numeri reali con rapporti irrazionali, allora si hanno dei problemi perché non si hanno simmetrie (questo dovuto al quadrato nell'energia, perché se sono commensurabili, allora, ad esempio, un termine in b può bilanciare un termine in a : si può porre $b = 2a$, $n_2 = 2n_1$). Si sfruttano le simmetrie affinché si possano avere delle leggi di conservazioni. Si impone

$$a = b = c$$

L'energia diventa

$$E_{n_1n_2n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

L'energia e la funzione d'onda dello stato fondamentale sono

$$E_{111} = 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad \varphi_{111} = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin^3\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

Il primo stato eccitato in questo caso deve essere 112 o 121 o 211. In ogni caso, l'energia è

$$E = 6 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Ma si ha degenerazione dei livelli energetici. In particolare, tale stato è tre volte degenerare perché esistono tre auto-funzioni corrispondenti.

5.4 Equazione di continuità degli stati stazionari

Si ritorna in una dimensione. Lo stato stazionario è del tipo

$$\psi(x, t) = \varphi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

L'equazione di continuità è

$$\partial_t |\psi(x, t)|^2 + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$$

Per stati stazionari, essa diventa

$$\partial_t |\psi(x, t)|^2 = \partial_t |\varphi(x)|^2 = 0 = -\partial_x \vec{J} \implies J_x(x) = \text{cost}$$

Dunque, la corrente di densità di probabilità è costante. Essa è

$$J_x(x) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* (\partial_x \psi) - (\partial_x \psi^*) \psi] = \frac{\hbar}{2mi} [\varphi^* \partial_x \varphi - (\partial_x \varphi^*) \varphi]$$

Lezione 8

Per una particella libera si ha $V(x) = 0$. L'equazione di Schrödinger corrispondente per gli stati stazionari è

lun 10 ott
2022 13:30

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi'' = E \varphi$$

Non si hanno soluzioni per energia negativa, $E < 0$. Dunque, l'equazione diventa

$$\varphi'' + k^2 \varphi = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Le soluzioni sono

$$\varphi_p(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} = A \varphi_{p+} + B \varphi_{p-}$$

Inoltre si ha

$$p = \hbar k, \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

L'indice k è continuo: non ci sono i due punti di inversione del moto che vincolano i valori dell'energia. Si ha uno spettro continuo.

Osservazione. Vale

$$\hat{p}\varphi_{p+}(x) = \hat{p}e^{ikx} = -(i\hbar\partial_x)e^{ikx} = \hbar k\varphi_{p+}(x) = p\varphi_{p+}(x)$$

Lo stesso per φ_{p-} . Applicare l'operatore momento significa moltiplicare per il momento della funzione.

Si ha un problema per lo spettro continuo. La funzione non è normalizzabile. Infatti

$$\int_{\mathbb{R}} |\varphi_{p+}|^2 dx \rightarrow \infty$$

essa diverge. Questo perché gli addendi di φ_p sono delle onde piane, ma esse non esistono in natura. Ciò che esiste sono le combinazioni lineari che rimangono quadrato-integrabili. Si definisce la funzione

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$$

Il fattore di normalizzazione è motivato dall'integrale

$$\int u_{p'}^*(x) u_p(x) dx = \delta(p - p')$$

Le funzioni u_p sono ortonormali e riguardano il continuo: al discreto l'integrale presenta una delta di Kronecker. Le funzioni u_p costituiscono una base per $L^2(\mathbb{R})$:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Phi(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp = \int \Phi(p) u_p dp$$

ed equivalentemente

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x) \left(e^{i\frac{p}{\hbar}x} \right)^* dx = \int \Psi(x) u_p^* dx$$

La funzione $\Phi(p)$ descrive quanto momento p si trova in $\Psi(x)$.

Si studia cosa φ_p descrive. Si consideri $A\varphi_{p+}$. La densità di probabilità e la sua corrente sono

$$\rho = |A|^2, \quad J(x) = \frac{p}{m} |A|^2 = v\rho(x)$$

Questo è identico a considerare un fluido oppure delle cariche elettriche: un insieme di particelle, non una singola. [r] In un intervallo Δt , tutte le particelle in un cilindro alto $v\Delta t$ passano attraverso un'area A perpendicolare alla direzione del moto. La φ_p descrive due flussi di particelle: un flusso verso destra, φ_{p+} , ed un flusso verso sinistra, φ_{p-} .

Entrambe le onde hanno energia

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Dunque, si hanno due soluzioni indipendenti con medesima energia. Nel caso monodimensionale della buca, si è vista una energia con una funzione; nel caso tridimensionale, si ha un valore di energia e più funzioni d'onda. In questo caso, si ha un'energia e due funzioni d'onda: si ha ancora degenerazione perché lo spettro è continuo e non discreto.

5.5 Barriera di potenziale

Si consideri un potenziale a gradino. Sia $x_0 = 0$ il punto di salto e $V_0 > 0$ il salto medesimo. Il potenziale è

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

Si stanno sempre considerando gli stati stazionari. L'equazione di Schrödinger per gli stati stazionari è

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + V(x)\varphi = E\varphi \implies \varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\varphi = 0$$

Si hanno due casi di energia: $E > V_0$ e $V_0 > E > 0$. Inoltre, $E > 0$ per il teorema riguardo l'energia e il minimo del potenziale. Si conosce già l'andamento qualitativo. Si consideri una particella ad energia $V_0 > E > 0$. Classicamente, una particella che arriva da sinistra urta in modo elastico contro la parete di potenziale e torna indietro. Per $E > V_0$, classicamente, la particella rallenta al gradino.

Si studia la descrizione quantistica. Siano

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

Primo caso. Sia $E > V_0$. Si ha $q^2 > 0$. Il problema è diviso in due regioni: $x < 0$ e $x > 0$. Si consideri la regione $x < 0$. La soluzione all'equazione è

$$\varphi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Si consideri la regione $x > 0$. La soluzione è

$$\varphi_{II} = Ce^{iqx} + De^{-iqx}$$

Tali soluzioni non si possono normalizzare. Si studia a cosa esse corrispondono. Si studia il flusso. Per $x < 0$ si ha

$$J_I = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 - \frac{\hbar k}{m}|B|^2 = J_{\text{onda incidente}} - J_{\text{onda riflessa}}$$

Per $x > 0$ si ha

$$J_{II} = \frac{\hbar q}{m}|C|^2 - \frac{\hbar q}{m}|D|^2 = J_{\text{onda trasmessa}} - J_{\text{onda da } +\infty}$$

In quanto si vuole che il problema descriva la fisica, non deve comparire la corrente da $+\infty$. Dunque $D = 0$. Questo perché si vuole descrivere un flusso che si sta inviando da sinistra. Si determinano gli altri tre coefficienti. La funzione d'onda attraversa un gradino di potenziale finito: la derivata prima è continua e pure la funzione d'onda stessa. Quindi

$$\varphi'_I = ik(Ae^{ikx} - Be^{ikx}), \quad \varphi'_{II} = iqCe^{iqx}$$

Nel punto di discontinuità $x_0 = 0$ si ha

$$\varphi_I(0^-) = \varphi_{II}(0^+), \quad \varphi'_I(0^-) = \varphi'_{II}(0^+)$$

Da esse risulta

$$A + B = C, \quad ik(A - B) = iqC$$

Da questo punto è solamente matematica. La condizione è data in $x_0 = 0$ perché conveniente, per farlo in un altro punto basta traslare

$$\varphi_I = Ae^{ik(x-x_0)} + Be^{ik(x-x_0)}$$

Le due equazioni precedenti presentano tre incognite, la terza equazione è la normalizzazione, ma in questo caso non è possibile, dunque tali due equazioni si scrivono in termini di A :

$$B = \frac{k-q}{k+q}A, \quad C = \frac{2k}{k+q}A$$

Si ritorna al problema fisico. Per J_I si ha un'onda incidente, ma anche un'onda riflessa, sebbene si abbia più energia di quella del salto. Esiste una possibilità non nulla di tornare indietro: non si ha alcun corrispettivo classico. Si definiscono i coefficienti di trasmissione e di riflessione:

$$T \equiv \left| \frac{J_{\text{onda trasmessa}}}{J_{\text{onda incidente}}} \right|, \quad R \equiv \left| \frac{J_{\text{onda riflessa}}}{J_{\text{onda incidente}}} \right|$$

Normalizzare rispetto $J_{\text{incidente}}$ porta a numeri finiti. Dunque

$$T = \frac{q|C|^2}{k|A|^2} = \frac{4kq}{(k+q)^2}, \quad R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2}$$

Vale

$$T + R = 1$$

Nel complemento J_I del Cohen c'è la derivazione completa di una gaussiana ad un salto di potenziale. [immagine] L'equazione del campo elettrico tra due materiali dielettrici è identica a questo caso.

Osservazione. I coefficienti

$$\frac{B}{A}, \quad \frac{C}{A}$$

sono reali. Quando essi diventano complessi, si hanno dei ritardi tra l'onda riflessa e l'onda trasmessa.

L'unico modo per controllare che tali formule abbiano senso è considerare i casi limite. Per $E \gg V_0$ si ha $k \approx q$ per cui $R = 0$.

Secondo caso. Sia $V_0 > E > 0$. Si ha $q^2 = -\rho^2 < 0$ e $q = i\rho$. L'equazione diventa

$$\varphi'' - \rho^2 \varphi = 0$$

Le soluzioni sono

$$\varphi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \varphi_{II} = Ee^{-\rho x}$$

La corrente nella seconda regione è $J_{II} = 0$ in quanto φ_{II} è reale. Non si ha flusso trasmesso. Infatti

$$R = \left| \frac{k-q}{k+q} \right|^2 = \left| \frac{k-i\rho}{k+i\rho} \right|^2 = 1$$

Si ha riflessione totale. L'onda nella seconda regione è detta evanescente perché decade esponenzialmente con larghezza di $\frac{1}{\rho}$. Esiste una probabilità non nulla di trovare la particella in una regione in cui, classicamente, avrebbe energia cinetica negativa. Prima o poi, la barriera riflette completamente la particella, però esiste un tempo τ in cui la particella si trova all'interno della barriera stessa. Il coefficiente

$$\frac{B}{A}$$

è un numero complesso, sebbene abbia modulo unitario.

Analogia ottica. L'effetto di riflessione totale è lo stesso che si ha nell'elettromagnetismo oltre un certo angolo. Si ha un'onda evanescente oltre la barriera di riflessione.

5.5.1 Barriera finita – effetto tunnel

La particella ha una probabilità di trovarsi al di là della barriera. Lo stesso avviene anche per le onde elettromagnetiche. [immagine] Si hanno tre regioni.

Primo caso. Sia $E > V_0$. Questo caso vale anche per una buca di potenziale finita ad energia $-V_0 < 0$. Siano

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad q^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

Le soluzioni sono

$$\varphi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \varphi_{II}(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx}, \quad \varphi_{III} = Ee^{ikx} + Fe^{-ikx}$$

Ancora per ragioni fisiche si ha $F = 0$. Si impongono le condizioni di continuità della funzione e della derivata nei punti di salto del potenziale:

$$\begin{cases} \varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \\ \varphi'_I(0) = \varphi'_{II}(0) \end{cases}, \quad \begin{cases} \varphi_{II}(l) = \varphi_{III}(l) \\ \varphi'_{II}(l) = \varphi'_{III}(l) \end{cases}$$

I coefficienti di riflessione e trasmissione sono

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(ql)}{4k^2q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2(ql)}, \quad T = \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2(ql)}$$

sempre con $R + T = 1$. Si ha ancora un flusso riflesso. Il coefficiente di riflessione dipende dal seno di ql . Pertanto, esistono valori particolari per cui non si ha riflessione:

$$\sin(ql) = 0 \implies ql = n\pi, \quad R = 0, \quad T = 1$$

Si parla di scattering (diffusione) in risonanza. Per certi valori dell'energia (che si trova nel termine q) si hanno valori grandi del coefficiente di trasmissione. Sapendo l'energia q delle particelle, si può misurare la dimensione l . Ciò è stato confermando nell'esperimento di Ramsauer-Townsend.

Si invia un pacchetto gaussiano. Alla barriera, una parte viene riflessa ed un'altra continua all'interno del gradino. Quella che continua risente del gradino in discesa. Una parte è trasmessa ed un'altra è riflessa. Quella riflessa urta contro la discontinuità iniziale e l'onda si divide, e così via. Bisogna immaginare il fenomeno con un flusso continuo, non con una sola particella. La riflessione sparisce nel momento in cui tutti i pacchetti che tornano indietro interferiscono in modo distruttivo.

Secondo caso. Sia $E < V_0$. Si vede l'effetto tunnel. La soluzione nelle due regioni estreme è come precedentemente. Nella seconda regione si definisce

$$\rho^2 = -q^2, \quad q = i\rho$$

[immagine] Nella prima regione, la funzione d'onda è una sinusoide. Nella terza regione, si ha ancora una sinusoide con stessa frequenza, ma l'ampiezza è minore. Nella seconda regione, si ha un esponenziale (che si può immaginare come seno e coseno iperbolici). In tale regione, la soluzione è

$$\varphi_{II}(x) = Ce^{-\rho x} + De^{\rho x}$$

Bisogna raccordare le funzioni d'onda. I coefficienti diventano

$$T = \frac{4k^2\rho^2}{4k^2\rho^2 + (k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho l)}, \quad R = 1 - T$$

Questo è l'effetto tunnel: esiste una probabilità di oltrepassare una barriera sebbene non si abbia energia sufficiente. Il coefficiente di trasmissione dipende dal reciproco del seno iperbolico, cioè dal reciproco di un esponenziale. Se $\rho l \gg 1$ allora si ha una decrescita esponenziale

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho l} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\frac{l}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Lezione 9

Nota: si disegnano i grafici $V(x)$ vs x sovrapposti a quelli Ψ vs x e si prende l'energia E (rappresentata nel grafico V vs x) come asse x per Ψ .

mar 11 ott
2022 13:30

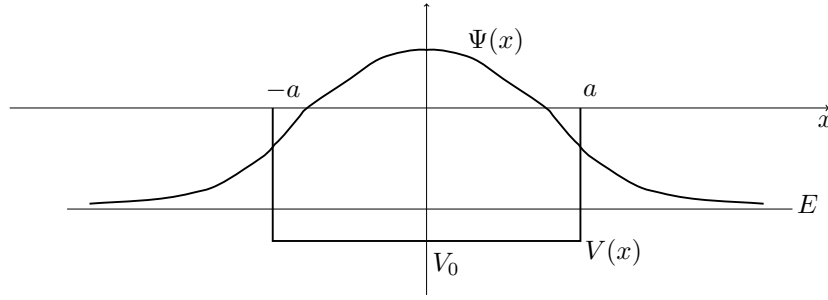


Figura 5: Buca finita e stato fondamentale.

5.5.2 Buca finita

Si consideri una buca di profondità finita $-V_0$ tra $-a$ e a . Il caso per $E > 0$ è lo stesso per il primo caso della barriera finita. Sia $-V_0 < E < 0$. Nella buca si ha una sinusoide. All'esterno della buca si hanno esponenziali reali che decadono (Figura 5). Il livello energetico successivo a quello fondamentale potrebbe non essere presente perché la buca potrebbe non essere profonda abbastanza.

L'equazione degli stati stazionari è

$$\varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V]\varphi = 0$$

Al di fuori della buca, si pone

$$-k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} < 0, \quad k^2 > 0$$

All'interno

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|) > 0$$

Si divide lo spazio in tre regioni. Nella prima regione, la soluzione è

$$\varphi_I(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}$$

Nella seconda regione si ha

$$\varphi_{II}(x) = C'e^{iqx} + D'e^{-iqx} = C \cos(qx) + D \sin(qx), \quad -a < x < a$$

Nella terza regione si ha

$$\varphi_{III}(x) = Ee^{-kx} + Fe^{kx}$$

Tali soluzioni devono essere quadrato-integrabili $\varphi \in L^2(\mathbb{R})$, per cui $A = F = 0$. Si ha

$$\begin{cases} \varphi_I(x) = Be^{kx} \\ \varphi_{II}(x) = C \cos(qx) + D \sin(qx) \\ \varphi_{III}(x) = Ee^{-kx} \end{cases}, \quad \begin{cases} \varphi'_I = Bke^{kx} \\ \varphi'_{II} = -Cq \sin(qx) + Dq \cos(qx) \\ \varphi'_{III} = -Eke^{-kx} \end{cases}$$

In $x = -a$ le condizioni di continuità implicano

$$\begin{cases} Be^{-ka} = C \cos(qa) - D \sin(qa) \\ Bke^{-ka} = Cq \sin(qa) + Dq \cos(qa) \end{cases}$$

In $x = a$, esse implicano

$$\begin{cases} C \cos(qa) + D \sin(qa) = Ee^{-ka} \\ -Cq \sin(qa) + Dq \cos(qa) = -Eke^{-ka} \end{cases}$$

Ci sono cinque incognite in quattro equazioni. Si noti che, non solo i parametri, ma pure l'energia (contenuta in k e q) è un'incognita. Ora inizia la matematica. Dividendo la terza equazione per la prima si ha

$$k = q \frac{C \sin(qa) + D \cos(qa)}{C \cos(qa) - D \sin(qa)}$$

Dividendo la quarta per la seconda si ha

$$k = -q \frac{-C \sin(qa) + D \cos(qa)}{C \cos(qa) + D \sin(qa)}$$

Da queste due si ha

$$(C \sin(qa) + D \cos(qa))(C \cos(qa) + D \sin(qa)) = (C \cos(qa) - D \sin(qa))(C \sin(qa) - D \cos(qa))$$

che implicano

$$CD = 0$$

Si hanno due casi: $C = 0$ o $D = 0$. In base al coefficiente si seleziona la classe di funzioni pari o dispari, perché si seleziona il coseno od il seno nella soluzione φ_{II} .

Sia $C = 0$. Dalle equazioni per k si ha

$$k = -\frac{q}{\tan(qa)}$$

Per $D = 0$ si ottiene

$$k = q \tan(qa)$$

Queste due equazioni danno i valori di energia. Quindi

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 - k^2 \iff q^2 a^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 - k^2 a^2 \iff y^2 = \lambda - k^2 a^2$$

Si ottiene

$$ka = \sqrt{\lambda - y^2} > 0$$

Soluzioni pari. Si vedono le soluzioni pari, $D = 0$. Dalla relazione per k si ottiene

$$\tan y = \frac{1}{y} \sqrt{\lambda - y^2} > 0$$

Questa equazione si risolve numericamente per y (Figura 6). Per $\sqrt{\lambda}$ crescente si hanno sempre

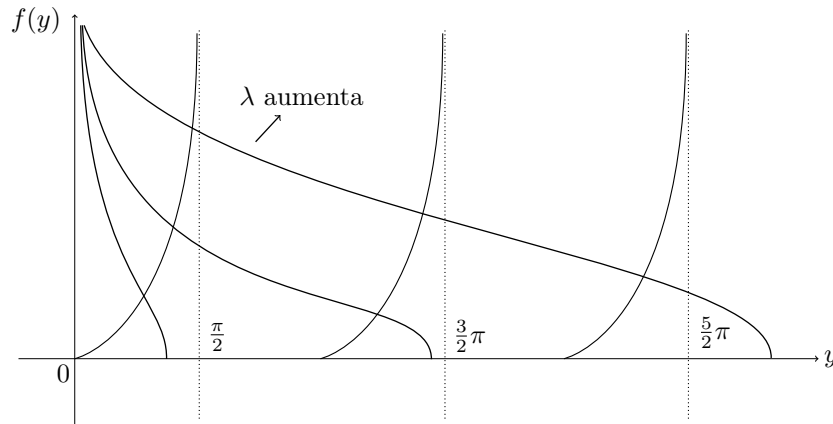


Figura 6: Soluzione grafica all'equazione.

più soluzioni.

Osservazione.

- Per qualunque valore di λ , si ha almeno una intersezione, soluzione: esiste sempre lo stato fondamentale.
- Il parametro λ è connesso con la profondità V_0 della buca. Nel caso limite si ha la buca infinita di potenziale. Più λ cresce e il numero di soluzioni cresce.
- Per $\lambda \rightarrow \infty$, le intersezioni si avvicinano a $y = (n + \frac{1}{2})\pi$ con $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Sostituendo questi valori nell'equazione sopra ($ka = \sqrt{\lambda - y^2} = y$ accorgendosi di rimuovere l'infinito portato da λ) si trovano i livelli energetici della buca infinita (fare attenzione che quelli calcolati in precedenza sono per una buca infinita in $0 < x < a$, mentre in questo caso si sono calcolati i valori per $-a < x < a$).

Soluzioni dispari. Sia $C = 0$. L'espressione per k diventa

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = -\frac{1}{\tan y} = -\frac{\cos y}{\sin y} = -\frac{\sin(\frac{\pi}{2} + y)}{-\cos(\frac{\pi}{2} + y)} = \tan\left(\frac{\pi}{2} + y\right)$$

Essa si risolve ancora numericamente (Figura 7). Per $\sqrt{\lambda}$ piccolo non si hanno soluzioni.

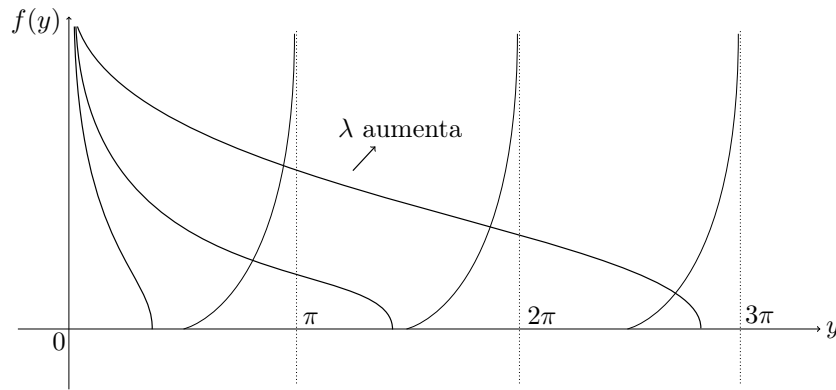


Figura 7: Soluzione grafica all'equazione.

Osservazione.

- Non si ha alcuna soluzione dispari qualora $\sqrt{\lambda} < \frac{\pi}{2}$. Questo significa che non esistono soluzioni dispari per

$$V_0 < \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^2$$

- Per $\lambda \rightarrow \infty$, le intersezioni si hanno per $n\pi$ con $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$. Questi valori sono i livelli di energia della buca infinita.

Per procedere oltre, si considera y che soddisfi l'equazione della tangente e si ricavano le costanti B , C , D ed E in funzione di B che si ottiene normalizzando la funzione d'onda. Le soluzioni sono uno spettro discreto e si alternano tra pari e dispari. La parità (parity) è definita quando le funzioni o sono pari o sono dispari. La parità è un numero quantico che descrive le funzioni d'onda. Essa si conserva nel tempo.

Osservazione. Il potenziale dell'atomo di idrogeno si può schematizzare come quello in figura. Questo problema ha le stesse equazioni del precedente, ma cambia solamente che $\varphi(0) = 0$. Le soluzioni dispari per $x > 0$ sono le soluzioni del potenziale dell'atomo di idrogeno.

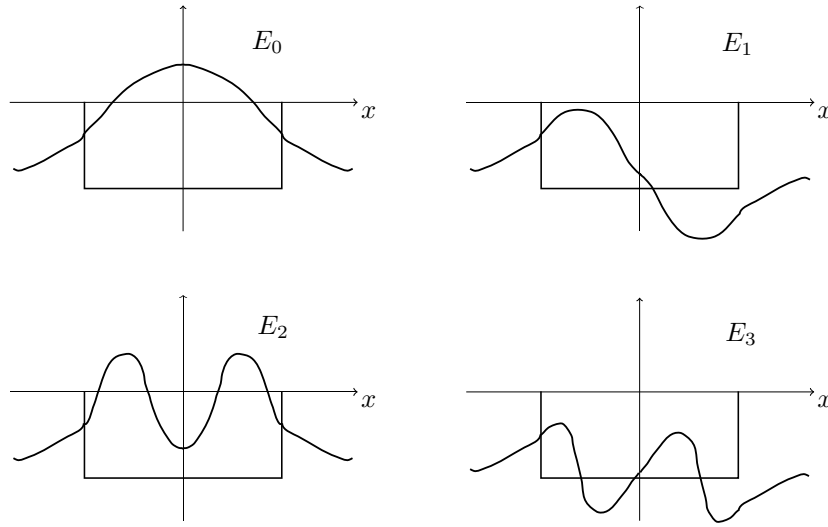


Figura 8: I primi quattro stati stazionari: due pari e due dispari.

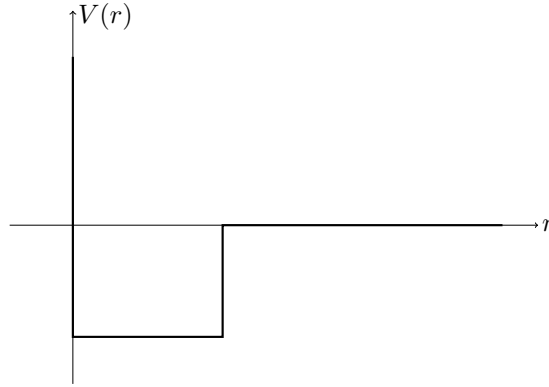


Figura 9: Schema del potenziale dell'atomo di idrogeno.

Evoluto temporale. Si trova l'evoluto temporale $\Psi(x, t)$ dalla funzione iniziale $\Psi(x, 0)$. Si sa risolvere l'equazione per gli auto-stati

$$\hat{H}\varphi = E\varphi$$

da cui si ottiene $\Psi(x, 0)$. Gli auto-stati formano una base di $L^2(\mathbb{R})$: essi sono auto-funzioni dell'operatore hermitiano \hat{H} . Pertanto, si può scomporre una funzione su tale base

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n^{\text{discr}}(x) + \int c(k) \varphi_k^{\text{cont}}(x) dk$$

L'energia E_n è discreta, quella E_k è continua. Al continuo si ha l'integrale, per un segmento (al discreto) si ha la serie.

Si supponga che la base sia ortonormale:

$$\begin{aligned} \int \varphi_n^*(x) \varphi_m(x) dx &= \delta_{nm}, & \text{discreto} \\ \int \varphi_k^*(x) \varphi_{k'}(x) dx &= \delta(k - k'), & \text{continuo} \end{aligned}$$

I coefficienti sono

$$c_n = \int \varphi_n^* \Psi(x, 0) dx, \quad c_k = \int \varphi_k^*(x) \Psi(x, 0) dx$$

Si afferma che l'evoluto temporale, che non è uno stato stazionario, è

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} + \int c(k) \varphi_k(x) e^{-i \frac{E_k}{\hbar} t} dk$$

ed essa è la soluzione generale all'equazione di Schrödinger. Si verifica:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \Psi &= i\hbar \left[\sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n \left(-i \frac{E_n}{\hbar} \right) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} + \int c(k) \left(-i \frac{E_k}{\hbar} \right) \varphi_k(x) e^{-i \frac{E_k}{\hbar} t} dk \right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{H} \varphi_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} + \int c(k) \hat{H} \varphi_k e^{-i \frac{E_k}{\hbar} t} dk \\ &= \hat{H} \left[\sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} + \int c(k) \varphi_k e^{-i \frac{E_k}{\hbar} t} dk \right] \\ &= \hat{H} \Psi(x, t) \end{aligned}$$

cioè l'equazione di Schrödinger generale.

5.6 Proprietà delle soluzioni in una dimensione

Gli stati stazionari soddisfano

$$\hat{H}\varphi = E\varphi \iff -\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 \varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x), \quad \varphi(x) \in L^2(\mathbb{R})$$

L'hamiltoniana è un operatore auto-aggiunto. Il prodotto scalare di L^2 è

$$(g, f) = \int_{\mathbb{R}} g^* f dx$$

5.6.1 Proprietà dello spettro discreto

Proposizione. I valori di energia E_n sono reali.

Dimostrazione. Infatti

$$E\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi'' + V\varphi, \quad E^* \varphi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} (\varphi^*)'' + V\varphi^*$$

Si fa la differenza tra le due e si integra

$$\begin{aligned} (E - E^*) \int |\varphi|^2 dx &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int (\varphi'' \varphi^* - (\varphi^*)'' \varphi) dx \\ (E - E^*) &= \frac{\hbar^2}{2m} \int (\varphi' (\varphi^*)' - (\varphi^*)' \varphi') dx = 0 \end{aligned}$$

alla seconda riga si è integrato per parti, ricordando che l'integrando si annulla ad infinito. Questa dimostrazione vale anche per lo spettro continuo con alcuni caveat sul bordo.

Proposizione. Le auto-funzioni corrispondenti ad autovalori di energia diversi tra loro sono ortogonali:

$$\varphi_1, \varphi_2, \quad E_1 \neq E_2 \implies \int \varphi_1^* \varphi_2 dx = 0$$

Dimostrazione. Le auto-funzioni soddisfano

$$E\varphi_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_i'' + V\varphi_i, \quad i = 1, 2$$

Si moltiplichi la prima per φ_2^* e la seconda coniugata per φ_1 . Ne si fa la differenza, poi si integra:

$$(E_1 - E_2) \int \varphi_1^* \varphi_2 \, dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int (\varphi_2^* \varphi_1'' - (\varphi_2^*)'' \varphi_1) \, dx = 0$$

In quanto $E_1 \neq E_2$ si ha

$$\int \varphi_1^* \varphi_2 \, dx = 0$$

La dimostrazione vale anche per lo spettro continuo.

Proposizione. L'equazione

$$\hat{H}\varphi = E\varphi$$

ha un'unica soluzione per ogni valore permesso di E . Gli stati dello spettro discreto non sono degeneri.

Dimostrazione. Si considerino due soluzioni φ_1 e φ_2 corrispondenti allo stesso autovalore E . Allora, le soluzioni soddisfano

$$\varphi_i'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\varphi_i \implies \frac{\varphi_i''}{\varphi_i} = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)$$

Pertanto

$$\frac{\varphi_1''}{\varphi_1} = \frac{\varphi_2''}{\varphi_2} \implies \varphi_1''\varphi_2 - \varphi_1\varphi_2'' = 0 \implies d_x(\varphi_1'\varphi_2 - \varphi_1\varphi_2') = 0 \implies \varphi_1'\varphi_2 - \varphi_1\varphi_2' = \text{cost} = 0$$

In quanto sia φ che φ' sono quadrato-integrabili, allora esse devono decrescere velocemente, per cui la costante è nulla. Pertanto

$$\varphi_1'\varphi_2 = \varphi_1\varphi_2' \implies \frac{\varphi_1'}{\varphi_1} = \frac{\varphi_2'}{\varphi_2} \implies d_x(\ln \varphi_1) = d_x(\ln \varphi_2) \implies d_x \ln \frac{\varphi_1}{\varphi_2} = 0$$

Dunque

$$\ln \frac{\varphi_1}{\varphi_2} = \text{cost} \implies \frac{\varphi_1}{\varphi_2} = c \implies \varphi_1 = c\varphi_2$$

Grazie alla normalizzazione si ha $c = 1$. Le due funzioni sono identiche.

Lezione 10

Proposizione. Le auto-funzioni φ_n dello spazio discreto sono funzioni reali.

mer 12 ott
2022 13:30

Dimostrazione. L'equazione di partenza è

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_n'' + V\varphi_n = E_n\varphi_n$$

Prendendo il complesso coniugato delle due espressioni si nota che il complesso coniugato della soluzione è ancora soluzione. Tuttavia, in una dimensione, la soluzione dev'essere unica per ogni valore di energia. Allora

$$\varphi_n^* = \lambda\varphi_n$$

Dunque

$$(\varphi_n^*)^* = \lambda^*\varphi_n^* \implies \varphi_n = \lambda^*\lambda\varphi_n = |\lambda|^2\varphi_n \implies |\lambda|^2 = 1$$

dunque λ è un fattore di fase, ma la fisica è nel modulo quadro.

Proposizione. L'auto-funzione φ_n corrispondente al livello energetico n si azzera per n punti finiti di x ($n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, dove E_0 è lo stato fondamentale).

Proposizione. Se $V(x)$ è una funzione pari ($V(-x) = V(x)$), allora gli stati stazionari $\varphi_n(x)$ sono o funzioni pari o funzioni dispari. Se esiste una simmetria, allora esiste un'altra caratteristica delle soluzioni.

Dimostrazione. Sia φ_n soluzione di

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 + V(x) \right] \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x)$$

Si cambia parità $x \rightarrow -x$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 + V(-x) \right] \varphi_n(-x) = E_n \varphi_n(-x)$$

dove $d_{-x}^2 = d_x^2$. Pertanto

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 + V(x) \right] \varphi_n(-x) = E_n \varphi_n(-x)$$

cioè pure $\varphi(-x)$ è soluzione della stessa equazione di Schrödinger con la stessa energia E_n . Per unicità, segue

$$\varphi_n(-x) = c \varphi_n(x)$$

trasformando ancora $x \rightarrow -x$ si ha

$$\varphi_n(x) = c \varphi_n(-x)$$

Combinando queste due equazioni si ha

$$\varphi_n(-x) = c \varphi_n(x) = c^2 \varphi_n(-x) \implies c = \pm 1 \implies \varphi_n(-x) = \pm \varphi_n(x)$$

cioè gli auto-stati sono funzioni o pari o dispari.

Lezione 11

5.6.2 Proprietà dello spettro continuo

gio 13 ott
2022 13:30

Le auto-funzioni non sono quadrato-integrabili, ma possono costituire soluzioni fisiche tramite combinazioni lineari. Tali auto-funzioni soddisfano

$$\hat{H} \varphi_E = E \varphi_E$$

ed i pacchetti che si costruiscono, che sono una loro combinazione lineare, sono quadrato-integrabili

$$\int_{E-\Delta E}^{E+\Delta E} c(E) \varphi_E(x) dx \in L^2(\mathbb{R})$$

dove $c(E)$ è una funzione limitata (e quadrato-integrabile?).

Parte III

Formulazione generale della meccanica quantistica

6 Considerazioni sugli operatori – parte seconda

Finora si sono visti due operatori: posizione e momento. Si consideri l'osservabile classica $A(\vec{x}, \vec{p})$. Si promuove un'osservabile ad un oggetto quantistico per mezzo degli operatori:

$\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$. Tuttavia, i due operatori posizione e momento non commutano:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \neq 0$$

Si ha un problema. Sia A tale che contenga un termine come xp . Se a livello classico vale non si ha preferenza nell'ordine di x e p , allora, per promuovere tale osservabile ad operatore, bisogna scrivere

$$\frac{xp + px}{2} \rightarrow \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2}$$

Il primo termine equivale a xp a livello classico. Si è interessati ad operatori hermitiani, ma $\hat{x}\hat{p}$ non è hermitiano:

$$(\hat{x}\hat{p})^\dagger = \hat{p}^\dagger \hat{x}^\dagger = \hat{p}\hat{x} \neq \hat{x}\hat{p}$$

Invece, utilizzando la definizione sopra si ha

$$\left(\frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2}\right)^\dagger = \frac{\hat{p}^\dagger \hat{x}^\dagger + \hat{x}^\dagger \hat{p}^\dagger}{2} = \frac{\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p}}{2} = \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2}$$

Si è costruito anche l'operatore hamiltoniano

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

Si supponga di misurare $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$ di un certo sistema. L'ipotesi della meccanica quantistica è che ogni sistema si può descrivere per mezzo di una funzione d'onda. Si conosce $\psi(\vec{x})$ e la sua trasformata $\tilde{\psi}(\vec{p})$.

Si considerino tanti sistemi nel medesimo stato $\psi(\vec{x})$. Si misura \hat{A} . Non si ha la stessa misura a per ogni sistema a prescindere dagli errori di misura (perché i valori di misura sono molto più distanti rispetto la grandezza degli errori). Il valore di aspettazione della misura è

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^*(x) \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) \psi(x) dx$$

Ci si aspetta che il valor medio classico corrisponda a

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N a_n \sim \langle \hat{A} \rangle$$

Un'altra quantità importante è la varianza

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \implies (\Delta \hat{A})^2 = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2$$

L'equivalente quantistico dello scarto quadratico medio risulta essere

$$\text{SQM} = \int \psi^* (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi dx$$

Ci si chiede se esistono dei casi particolari in cui uno stato ψ fornisce sempre la stessa misura. Questo significa che lo scarto quadratico medio è nullo $\text{SQM} = 0$. Affinché l'integrale sopra sia nullo, escludendo casi patologici, allora è sufficiente che

$$\hat{A} = \langle \hat{A} \rangle$$

Formalmente si avrebbe che \hat{A} è hermitiano e allora si ha

$$\text{SQM} = \int |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi|^2 dx = 0 \implies |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi| = 0$$

Per tali stati particolari $\bar{\psi}$ si ha

$$(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \bar{\psi} = 0$$

Se esistono tali stati, allora

$$\hat{A} \bar{\psi} = \langle \hat{A} \rangle \bar{\psi}, \quad \langle \hat{A} \rangle = a$$

La misura a di \hat{A} è sempre la stessa. Lo stato particolare soddisfa un'equazione agli autovalori

$$\hat{A} \psi_a = a \psi_a$$

Non si è detto che i valori possibili di a siano gli unici valori dati dalla misura.

Esempio. Se l'energia potenziale non dipende dal tempo, allora classicamente si conserva l'energia. Similmente, in meccanica quantistica, esistono degli stati φ_E che soddisfano

$$\hat{H}\varphi_E = E\varphi_E$$

Si consideri uno stato generico ψ . Si compie una misura due volte sullo stesso sistema in rapida successione. Si compie la prima misura a t e la seconda a $t + \Delta t$ con Δt piccolo. Ci si aspetta di ottenere due volte lo stesso risultato perché il sistema non ha abbastanza tempo per evolvere (questo fenomeno è detto “riproducibilità in piccolo”). Questa è una ipotesi ragionevole. Si supponga che la misura su di uno stato ψ sia a_j . All'istante successivo, ci si aspetta di misurare ancora lo stesso a_j . Questo significa che, dopo la prima misura, lo stato è diventato ψ_{a_j} per cui la misura su tale oggetto fornisce sempre a_j . Questo implica che la prima misura deve trasformare il sistema proiettandolo su uno degli auto-stati ψ_a (si noti che la proiezione avviene immediatamente perché non si considera la relatività). Quindi, *gli unici risultati possibili di una misura sono gli autovalori dell'osservabile misurata.*

Osservazione. Se ψ è un'auto-funzione di A ($\psi = \psi_{a_j}$) allora la prima misura dà a_j . Se ψ non è un'auto-funzione di A , allora essa deve precipitare su ψ_{a_j} dopo la prima misura.

Osservazione. *Le osservabili sono rappresentate da operatori i cui autovalori sono soli e tutti i valori di una misura dell'osservabile. All'atto della misura, si precipita la funzione d'onda sull'auto-funzione corrispondente all'autovalore misurato.*

Dopo la misura, si precipita in maniera imprevedibile su di un auto-stato. A priori non si sa su quale auto-stato si precipita. Si può soltanto ottenere un valore a_j . Tuttavia, si può prevedere con quale probabilità si può misurare un certo auto-valore. Si considerino tanti sistemi nello stesso stato ψ . Si costruisce una distribuzione dei valori misurati. Risolvendo l'equazione agli autovalori, si conoscono a priori gli auto-stati. Se lo stato ψ coincide con ψ_{a_j} allora la probabilità di ottenere a_j è 1. Se $\psi \approx \psi_{a_j}$, allora non si ottiene a_j con certezza, ma altri a_k hanno probabilità ε_k .

Proposizione. Sembra ragionevole congetturare che le probabilità di misurare gli autovalori sono proporzionali ai coefficienti dello sviluppo in serie di Fourier della ψ sugli auto-stati. Deve valere il principio di sovrapposizione delle ampiezze scrivendo

$$\psi = \sum_{n=1}^N c_n \psi_{a_n}$$

Si mantiene l'interpretazione probabilistica

$$\int \psi^* \psi \, dx = 1$$

Se gli autovettori sono ortogonali, allora

$$\int \psi^* \psi \, dx = \sum_i \sum_j \int c_i^* \psi_{a_i}^* c_j \psi_{a_j} \, dx = \sum_i \sum_j c_i^* c_j \delta_{a_i a_j} = \sum_i |c_i|^2 = 1$$

Allora si interpretano $|c_i|^2$ come le probabilità di ottenere l'autovalore a_i .

Si consideri uno stato generico

$$\psi = \sum_i c_i \psi_{a_i}$$

Allora

$$\int \psi_{a_j}^* \psi \, dx = \int \sum_i c_i \psi_{a_j}^* \psi_{a_i} \, dx = c_j$$

Proposizione. Gli autovalori a_i devono essere reali. Gli autovettori corrispondenti sono ortogonali. Pertanto

$$\sum_i |c_i|^2 = 1$$

Per questo, si utilizzano operatori auto-aggiunti in spazi di Hilbert.

6.1 Postulati della meccanica quantistica

Le congetture fatte finora sono talvolta presentate come postulati.

Proposizione. Primo postulato. Lo stato di un sistema quantistico è definito da un vettore di stato (ket) $|\psi\rangle$ in spazi di Hilbert.

Osservazione. Il prodotto scalare in uno spazio di Hilbert è lineare ed induce una norma.

Proposizione. Secondo postulato. Ad ogni quantità misurabile A è associato un operatore \hat{A} che agisce nello spazio di Hilbert. Tale operatore è auto-aggiunto ed è chiamato osservabile.

Proposizione. Terzo postulato. I soli possibili risultati di una misura della quantità fisica A sono gli autovalori dell'osservabile \hat{A} .

Proposizione. Quarto postulato. Si consideri uno spettro discreto e non degenere. Quando si misura l'osservabile A di un sistema in uno stato normalizzato $|\psi\rangle$, la probabilità di ottenere a_n è

$$P(a_n) = |\langle \psi_{a_n} | \psi \rangle|^2 = \int \psi_{a_n}^* \psi \, dx$$

dove $|\psi_{a_n}\rangle$ è l'autovettore normalizzato associato all'autovalore a_n dell'operatore \hat{A} .

Proposizione. Quinto postulato. Se la misura di una osservabile A di uno stato $|\psi\rangle$ dà risultato a_n , allora lo stato del sistema subito dopo la misura è lo stato $|\psi_{a_n}\rangle$ corrispondente all'autovalore a_n .

Proposizione. Sesto postulato. Lo stato $|\psi(t)\rangle$ soddisfa

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

dove l'operatore hamiltoniano $\hat{H}(t)$ è l'osservabile associato all'energia totale del sistema.

Lezione 12

7 Richiami sugli spazi di Hilbert

Uno spazio di Hilbert \mathcal{H} è uno spazio vettoriale normato e completo. La norma è indotta dal prodotto scalare. Si utilizzano gli spazi di Hilbert per vari motivi:

- per linearità affinché le sovrapposizioni lineari di funzioni d'onda siano ancora funzioni d'onda

$$\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H} \implies \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \in \mathcal{H}, \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$$

- risulta definito un prodotto scalare

$$(\varphi, \psi) = \langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \, d^3x \in \mathbb{C}$$

lun 17 ott
2022 13:30

si è interessati all'insieme $L^2(\mathbb{R})$ delle funzioni complesse quadrato-integrabili:

$$\psi \in L^2(\mathbb{R}) \iff \int_{\mathbb{R}} |\psi(\vec{x})|^2 d^3x < \infty$$

Le proprietà del prodotto scalare sono

- ◇ simmetria coniugata

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

- ◇ linearità del secondo argomento

$$\langle \varphi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle$$

- ◇ anti-linearità del primo argomento

$$\langle \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle$$

- ◇ la norma indotta è

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int |\psi(\vec{x})|^2 d^3x = \|\psi\|^2 \in \mathbb{R}_0^+$$

inoltre

$$\|\psi\| = 0 \iff \psi \equiv 0$$

- Si possono definire delle basi ortonormali

- ◇ Se i vettori della base sono numerabili allora si indicano come $|n\rangle$, $n \in \mathbb{N}$ per cui $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$;
- ◇ esistono basi improprie, continue, costituite da un numero infinito di elementi come la base di Fourier, i polinomi di Hermite, etc.

- La completezza garantisce

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |n\rangle, \quad \psi_n = \langle n | \psi \rangle \in \mathbb{C}$$

Un generico elemento di tale spazio è

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n |n\rangle$$

Il prodotto scalare diventa

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_{n,m} \psi_n^* \varphi_m \langle n | m \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n^* \varphi_n$$

7.1 Notazione di Dirac

Si ha bisogno di una notazione astratta per descrivere lo stato di una particella. Lo spin di una particella non ha a che fare con i gradi di libertà delle coordinate spaziali, ma è una proprietà intrinseca della particella: lo spin non è un momento angolare orbitale. Il vettore ψ esiste indipendentemente dal sistema di coordinate con cui lo si sta descrivendo: cambiano le coordinate, ma il vettore è il medesimo. Bisogna identificare tale vettore.

La funzione d'onda e la sua trasformata di Fourier portano le stesse informazioni. Esse appartengono allo spazio delle coordinate spaziali ed allo spazio delle coordinate dei momenti rispettivamente. Con la notazione $|\psi\rangle$ (ket) si indica il vettore ψ senza riferimento alla base e alle coordinate particolari, essa indica uno stato della funzione d'onda.

Allo spazio dei ket si associa uno spazio duale costituito dai bra $\langle \varphi |$. Essi sono i funzionali lineari nello spazio di Hilbert in quanto permettono l'associazione

$$\langle \varphi | : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad |\psi\rangle \mapsto \langle \varphi | \psi \rangle$$

Il prodotto scalare è detto bracket (bra + ket) perché scritto tra parentesi.

Duale. Si vede come passare al duale

$$|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle$$

I duali corrispondi ai due membri sono

$$\langle \lambda_1\psi + \lambda_2\psi_2 | = \lambda_1^* \langle \psi_1 | + \lambda_2^* \langle \psi_2 |$$

Infatti

$$\begin{aligned} \langle \lambda_1\psi + \lambda_2\psi_2 | \varphi \rangle &= (\langle \varphi | \lambda_1\psi + \lambda_2\psi_2 \rangle)^* = (\lambda_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle)^* = \lambda_1^* \langle \varphi | \psi_1 \rangle^* + \lambda_2^* \langle \varphi | \psi_2 \rangle^* \\ &= \lambda_1^* \langle \psi_1 | \varphi \rangle + \lambda_2^* \langle \psi_2 | \varphi \rangle = (\lambda_1^* \langle \psi_1 | + \lambda_2^* \langle \psi_2 |) | \varphi \rangle \end{aligned}$$

Dunque, il bra è anti-lineare.

Si considerino due vettori

$$|\varphi\rangle = \sum_n \varphi_n |n\rangle, \quad |\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle,$$

Allora il loro prodotto scalare è

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_n \psi_n^* \varphi_n = (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \dots) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Pertanto, data una base, si può rappresentare il ket $|\varphi\rangle$ tramite i suoi coefficienti ed essi si scrivono in un vettore colonna. Similmente per il bra $\langle \psi|$, si scrivono i suoi coefficienti in un vettore riga. Dunque, per passare dal ket al bra bisogna trasporre e coniugare

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \langle \psi| = (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \dots)$$

e viceversa. Successivamente, si vede come questa procedura sia l'aggiunzione degli operatori.

Operatore identità. Si consideri

$$|\varphi\rangle = \sum_n \varphi_n |n\rangle, \quad \varphi_n = \langle n | \varphi \rangle \in \mathbb{C}$$

Segue

$$|\varphi\rangle = \sum_n \langle n | \varphi \rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \varphi \rangle$$

Da ciò, si ricava la relazione di completezza (o chiusura)

$$I = \sum_n |n\rangle \langle n|$$

Si noti che esso non è un numero, ma l'operatore identità.

7.2 Basi continue

Le basi continue non appartengono a $L^2(\mathbb{R})$ (come la base di Fourier, anche se, con le dovute considerazioni, è utile). Una funzione si può scrivere come

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\varphi}(p) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp$$

Si definisce la base

$$|p\rangle \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}$$

Dunque, l'espressione precedente diventa

$$|\varphi\rangle = \int \tilde{\varphi}(p) |p\rangle dp$$

Osservazione. Si osserva:

- Si studia il prodotto scalare tra due elementi della base:

$$\langle p'|p\rangle = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}p'x} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx = \delta(p-p')$$

con un indice continuo, il prodotto scalare tra due elementi della base è la delta di Dirac.

- La trasformata della funzione è

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

essa deriva dall'espressione $\langle p'|\varphi\rangle$ utilizzando $|\varphi\rangle$ come scritto prima delle osservazioni.

- La base $|p\rangle$ non è costituita da elementi di $L^2(\mathbb{R})$. Tuttavia, vale

$$\int c(p) |p\rangle dp \in L^2(\mathbb{R})$$

con $c(p)$ limitati. Pertanto, l'insieme dei ket $|p\rangle$ è una base continua (o generalizzata). Una base generalizzata è un insieme di funzioni (o funzionali) $|\lambda\rangle$ con indice continuo che non appartengono allo spazio di Hilbert, ma le cui funzioni sono normalizzate:

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

Su tale base si possono scrivere funzioni $L^2(\mathbb{R})$:

$$|\varphi\rangle = \int \varphi(\lambda) |\lambda\rangle d\lambda$$

La cui rappresentazione su tale base è

$$\langle \lambda|\varphi\rangle = \int \varphi(\lambda') \langle \lambda|\lambda'\rangle d\lambda' = \int \varphi(\lambda') \delta(\lambda - \lambda') d\lambda' = \varphi(\lambda)$$

7.3 Richiami sugli operatori

Operatori lineari. Un operatore lineare

$$\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad |\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle \equiv \hat{A}|\psi\rangle \equiv |\hat{A}\psi\rangle$$

è tale per cui

$$\hat{A}(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \hat{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2 \hat{A}|\psi_2\rangle$$

Esempio. Si sono visti vari operatori lineari. La posizione

$$\hat{x} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}), \quad \psi(x) \mapsto x\psi(x)$$

Il momento

$$\hat{p} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}), \quad \psi(x) \mapsto -i\hbar \partial_x \psi(x)$$

L'hamiltoniana

$$\hat{H} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}), \quad \psi(x) \mapsto -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) + V\psi$$

Definizione. Il prodotto tra due operatori lineari \hat{A} e \hat{B} è

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) = \hat{A}|\psi'\rangle$$

Definizione. Dati due ket $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$, l'elemento di matrice di \hat{A} tra i due ket è

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle \in \mathbb{C}$$

Esso dipende linearmente da $|\psi\rangle$ e anti-linearmente da $\langle\varphi|$.

Rappresentazione. Data una base $|n\rangle$, il ket $|\psi\rangle$ è rappresentato da un vettore colonna. Si cerca una rappresentazione simile per un operatore. Si utilizza la relazione di completezza

$$\hat{A} = \sum_n |n\rangle\langle n| \hat{A} \sum_m |m\rangle\langle m| = \sum_{n,m} |n\rangle \langle n|\hat{A}|m\rangle \langle m| = \sum_{n,m} \langle n|\hat{A}|m\rangle |n\rangle\langle m|$$

La rappresentazione dell'operatore \hat{A} sulla base $|n\rangle$ risulta essere una matrice

$$\hat{A} \doteq (A_{nm}) = \langle n|\hat{A}|m\rangle$$

Il simbolo \doteq indica che l'uguaglianza vale scegliendo una base (come fatto da Sakurai). Similmente, per un ket, si ha

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\varphi\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle 1|\varphi\rangle \\ \langle 2|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Dunque, la rappresentazione è un vettore colonna (ma il ket non è il vettore colonna). Un vettore non è le proprie coordinate. Per un bra si ha

$$\langle\psi| = \sum_n \langle\psi|n\rangle \langle n| = \sum_n \langle n|\psi\rangle^* \langle n| \doteq (\langle 1|\psi\rangle^* \quad \langle 2|\psi\rangle^* \quad \dots)$$

la sua rappresentazione è un vettore riga. In questo modo, il prodotto scalare diventa un prodotto righe per colonne. Infatti

$$\begin{aligned} \langle\psi|\varphi\rangle &= \langle\psi| \sum_n |n\rangle\langle n| |\varphi\rangle = \sum_n \langle\psi|n\rangle \langle n|\varphi\rangle \\ &= \sum_n \langle n|\psi\rangle^* \langle n|\varphi\rangle = (\langle 1|\psi\rangle^* \quad \langle 2|\psi\rangle^* \quad \dots) \begin{pmatrix} \langle 1|\varphi\rangle \\ \langle 2|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Si consideri il vettore $|\psi\rangle = \hat{A}|\varphi\rangle$. Le sue componenti sono

$$\langle m|\psi\rangle = \langle m|\hat{A}|\varphi\rangle = \sum_n \langle m|\hat{A}|n\rangle \langle n|\varphi\rangle = \sum_n A_{mn} \varphi_n$$

cioè il prodotto matrice-vettore colonna:

$$\begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{A}|1\rangle & \langle 1|\hat{A}|2\rangle & \dots \\ \langle 2|\hat{A}|1\rangle & \langle 2|\hat{A}|2\rangle & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1|\varphi\rangle \\ \langle 2|\varphi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

7.4 Operazioni sugli operatori

Somma. La somma è

$$(\hat{A}_1 + \hat{A}_2)|\psi\rangle = \hat{A}_1|\psi\rangle + \hat{A}_2|\psi\rangle$$

Moltiplicazione. La moltiplicazione è

$$\hat{A}_1\hat{A}_2|\psi\rangle = \hat{A}_1(\hat{A}_2|\psi\rangle) = \hat{A}_1|\psi'\rangle$$

Costruire delle funzioni. Si vogliono costruire delle funzioni di operatori. Tali funzioni devono avere espansioni in serie di Taylor: questo perché le uniche operazioni che si fanno sono l'addizione e la moltiplicazione. Si può fare l'esponenziale con una matrice, ma non si può fare la radice quadrata.

Commutatore. Gli operatori non commutano

$$\hat{x}\hat{p} \neq \hat{p}\hat{x}$$

Si può definire il commutatore

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

Per la posizione ed il momento si ha

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Proposizione. Si vedono alcune proprietà. Vale

$$[AC, B] = ACB - BAC = ACB - ABC + ABC - BAC = A[C, B] + [A, B]C$$

Similmente

$$[A, BC] = -[BC, A] = [A, B]C + B[A, C]$$

Esempio. Si vedono alcuni esempi:

$$[\hat{x}^2, \hat{p}] = \hat{x}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{x} = 2i\hbar\hat{x}$$

Così come

$$[\hat{x}^3, \hat{p}] = \hat{x}[\hat{x}^2, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{x}^2 = 3i\hbar\hat{x}^2$$

Dunque

$$[\hat{x}^n, \hat{p}] = i\hbar n\hat{x}^{n-1}$$

Per una funzione con espansione in serie di potenze

$$f(\hat{x}) = \sum_n f_n \hat{x}^n, \quad f'(\hat{x}) = \sum_n f_n n \hat{x}^{n-1}$$

il suo commutatore è

$$[f(\hat{x}), \hat{p}] = \sum_n f_n [\hat{x}^n, \hat{p}] = \sum_n f_n (i\hbar n \hat{x}^{n-1}) = i\hbar f'(\hat{x})$$

Aggiunzione. Si consideri

$$|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle = |\hat{A}\psi\rangle$$

Il suo duale è

$$\langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A} \equiv \langle\psi|\hat{A}^\dagger$$

Osservazione. Per il prodotto scalare vale

$$\langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^* \iff \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^*$$

Pertanto, in forma matriciale si ha

$$(A^\dagger) = (A^\top)^*$$

Proposizione. Vale

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$$

Dimostrazione. Infatti

$$\langle \psi | (\hat{A}^\dagger)^\dagger | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle^* = \left(\langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle^* \right)^* = \langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle$$

Proposizione. Vale

$$(\lambda \hat{A})^\dagger = \lambda^* \hat{A}^\dagger$$

Dimostrazione. Infatti

$$\langle \psi | (\lambda \hat{A})^\dagger | \varphi \rangle = \langle \varphi | \lambda \hat{A} | \psi \rangle^* = \lambda^* \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \lambda^* \langle \varphi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle$$

Proposizione. Vale

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$$

Dimostrazione. Infatti

$$\langle \psi | (\hat{A}\hat{B})^\dagger | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hat{A}\hat{B} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{B}^\dagger | \varphi' \rangle = \langle \psi | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger | \varphi \rangle$$

dove $\langle \varphi' | \equiv \langle \varphi | \hat{A}$.

Proposizione. La rappresentazione matriciale dell'operatore \hat{A}^\dagger è

$$\hat{A}^\dagger = (A^\top)^*$$

Dimostrazione. Infatti

$$A_{mn}^\dagger = \langle m | \hat{A}^\dagger | n \rangle = \langle n | \hat{A} | m \rangle^* = A_{nm}^*$$

Lezione 13

7.5 Operatori auto-aggiunti, hermitiani

mar 18 ott
2022 13:30

Un operatore auto-aggiunto è un operatore tale per cui

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}, \quad \langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle^*$$

La rappresentazione matriciale è

$$A_{nm} = \langle n | \hat{A} | m \rangle = \langle m | \hat{A} | n \rangle^* = A_{mn}^*$$

Osservazione. Da questo si nota:

- gli elementi della diagonale devono essere reali $A_{nn} = A_{nn}^*$;
- gli elementi del triangolo superiore sono i complessi coniugati degli elementi del triangolo inferiore riflessi rispetto la diagonale principale.

Esempio. L'operatore posizione \hat{x} è auto-aggiunto:

$$\langle \varphi | \hat{x} | \psi \rangle = \int \varphi(x)^* x \psi(x) dx = \int (x \varphi)^* \psi dx = \langle \hat{x} \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{x}^\dagger | \psi \rangle \implies \hat{x}^\dagger = \hat{x}$$

Esempio. L'operatore momento \hat{p} è auto-aggiunto:

$$\begin{aligned}\langle \varphi | \hat{p} | \psi \rangle &= -i\hbar \int \varphi^* \partial_x \psi \, dx = -i\hbar \left[\varphi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int \psi (\varphi^*)' \, dx \right] \\ &= \int (-i\hbar \partial_x \varphi)^* \psi \, dx = \langle \varphi | \hat{p}^\dagger | \psi \rangle\end{aligned}$$

si è integrato per parti. Risulta

$$\hat{p}^\dagger = -i\hbar \partial_x = \hat{p}$$

Teorema. Si consideri un operatore auto-aggiunto \hat{A} . Allora

- gli autovalori sono reali;
- gli autovettori corrispondenti ad autovalori diversi sono ortogonali.

Dimostrazione. L'equazione agli autovalori dell'operatore è

$$\hat{A} |a'\rangle = a' |a'\rangle$$

Si noti che si dà lo stesso nome sia al ket che all'autovalore corrispondente. Vale l'equazione coniugata

$$\langle a'' | \hat{A}^\dagger = (a'')^* \langle a'' |$$

Poiché \hat{A} è hermitiano, allora vale

$$\langle a'' | \hat{A} = (a'')^* \langle a'' |$$

Combinando la prima espressione con $\langle a'' |$ e combinando l'espressione sopra con $|a'\rangle$ si ottiene

$$\langle a'' | \hat{A} | a' \rangle = a' \langle a'' | a' \rangle, \quad \langle a'' | \hat{A} | a' \rangle = (a'')^* \langle a'' | a' \rangle$$

Facendo la differenza tra le due, si ha

$$0 = [a' - (a'')^*] \langle a'' | a' \rangle$$

Prima tesi. Sia $a' = a''$. Allora

$$[a' - (a')^*] \langle a' | a' \rangle = 0$$

Il vettore $|a'\rangle$ non può essere nullo (si noti che $\langle a' | a' \rangle = \|a'\|^2$) perché altrimenti non sarebbe un auto-vettore. Pertanto

$$a' = (a')^*$$

cioè gli autovalori sono reali. Seconda tesi. Sia $a' \neq a''$. Allora

$$(a' - a'') \langle a'' | a' \rangle = 0 \implies \langle a'' | a' \rangle = 0$$

cioè gli autovettori sono ortogonali tra loro.

Osservazione. In quanto tali vettori sono ortogonali, si possono normalizzare affinché

$$\langle a'' | a' \rangle = \delta_{a'', a'}$$

Teorema. spettrale. Gli autovettori di un operatore auto-aggiunto costituiscono una base dello spazio di Hilbert. Un operatore può avere spettro discreto

$$\hat{A} |\varphi_n\rangle = a_n |\varphi_n\rangle, \quad |\varphi_n\rangle \in \mathcal{H}, \quad n \in \mathbb{N}$$

oppure spettro continuo

$$\hat{A} |\varphi_a\rangle = a |\varphi_a\rangle, \quad |\varphi_a\rangle \notin \mathcal{H}, \quad a \in \mathbb{R}$$

Proposizione. Così si ha

$$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad \langle \varphi_a | \varphi_{a'} \rangle = \delta(a - a'), \quad \langle \varphi_a | \varphi_n \rangle = 0$$

Ogni vettore $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ si può decomporre sulla base continua e sulla base discreta

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle + \int c(a) |\varphi_a\rangle da, \quad c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle, \quad c(a) = \langle \varphi_a | \psi \rangle$$

Osservazione. Gli operatori associati a delle osservabili fisiche devono essere hermitiani affinché

- le misure siano dei numeri reali;
- gli autovettori (auto-funzioni) formino una base.

Osservazione. Si scrive solamente la somma discreta, ma risulta chiaro che sommatoria ed integrale dipendono dalla natura dell'indice: discreta o continua.

Proposizione. Una funzione d'onda si scrive come

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$$

In quanto si vuole interpretare la funzione d'onda come una ampiezza di probabilità, segue

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2$$

Si interpreta ogni $|c_n|^2$ come probabilità.

Osservazione. Nella meccanica quantistica, l'indeterminazione si manifesta nel fatto di non poter sapere a priori quale misura particolare si ottiene, ma si può solo sapere con quale probabilità si può ottenere.

7.6 Ricerca degli autovalori ed autovettori – diagonalizzazione

7.6.1 Spazi finiti

Si consideri l'equazione agli autovalori

$$\hat{A} |a\rangle = a |a\rangle$$

Si vogliono calcolare gli autovalori a e gli autovettori $|a\rangle$ dato l'operatore \hat{A} . Gli autovettori costituiscono una base, ma non la si conosce. Si supponga di conoscere un'altra base $|j\rangle$ con $j = 1, \dots, n$. Si vogliono trovare gli autovalori: si trasforma il problema in uno di algebra lineare. Nell'equazione sopra, si inserisce la relazione di completezza e si moltiplica per $\langle j|$:

$$\sum_i \langle j | \hat{A} | i \rangle \langle i | a \rangle = a \langle j | a \rangle \iff \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & & A_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ A_{n1} & & \dots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

L'equazione da risolvere è

$$(A_M - aI)v = 0$$

dove A_M è la matrice che rappresenta \hat{A} e il vettore v ha componenti $\langle i | a \rangle$. Bisogna diagonalizzare la matrice A_M per poter trovare gli autovalori e gli autovettori. Si impone

$$\det(A_M - aI) = 0$$

In generale, si trovano n autovalori (magari non tutti distinti) e si trovano n autovettori.

7.6.2 Rappresentazione sulla base della posizione e sulla base dei momenti

La funzione d'onda è

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp, \quad \psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int \tilde{\psi}(\vec{p}) e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}} d^3p$$

e la sua trasformata è

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx$$

Nello spazio delle coordinate, si studia come è fatta la funzione d'onda di una particella che si trova esattamente in \vec{x}_0 :

$$\xi_{\vec{x}_0}(\vec{x}) = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}_0)$$

La funzione d'onda con momento esattamente \vec{p}_0 è

$$\mu_{\vec{p}_0}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}_0\cdot\vec{x}}{\hbar}}$$

Infatti, la sua trasformata di Fourier è $\delta^3(\vec{p} - \vec{p}_0)$ nello spazio dei momenti. Dalla funzione d'onda $\psi(x)$ si è passati all'oggetto astratto $|\psi\rangle$ che rappresenta lo stato (si pensi a come le componenti non siano il vettore in sé). Similmente, si costituiscono le associazioni

$$\xi_{\vec{x}_0}(\vec{x}) \rightarrow |\vec{x}_0\rangle, \quad \mu_{\vec{p}_0}(\vec{x}) \rightarrow |\vec{p}_0\rangle$$

Pertanto, associare $|\psi\rangle$ a $\psi(x)$ o $\tilde{\psi}(p)$ non è lontano da considerare $|\vec{x}\rangle$ e $|\vec{p}\rangle$ come base. Infatti, si consideri

$$\psi(\vec{x}) = \int \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \psi(\vec{x}') d^3x'$$

la base è costituita dalla delta, mentre i coefficienti (le componenti dello stato $|\psi\rangle$) sono $\psi(\vec{x}')$. La stessa cosa si fa con la trasformata di Fourier:

$$\psi(\vec{x}) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}} \tilde{\psi}(p) d^3p$$

i coefficienti sono $\tilde{\psi}(p)$ e la base è costituita dagli esponenziali con il fattore numerico.

Si vede l'effetto degli operatori posizione e momento sui ket $|x'\rangle$ e $|p'\rangle$. La posizione di una particella che si trova nel luogo x' è

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

I ket posizione sono gli auto-stati dell'operatore posizione. Similmente per il momento

$$\hat{p} |p'\rangle = p' |p'\rangle$$

Il fatto che x e p siano una base è ciò che le due espressioni sopra con gli integrali affermano.

In quanto x e p sono una base, si può scrivere la relazione di ortonormalità e quella di completezza. Il prodotto scalare è

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int \varphi^*(x) \psi(x) d^3x$$

Si enuncia l'ortonormalità:

$$\langle\vec{x}'|\vec{x}''\rangle = \int \xi_{\vec{x}'}^*(\vec{x}) \xi_{\vec{x}''}(\vec{x}) d^3x = \delta^3(\vec{x}' - \vec{x}'')$$

$$\langle\vec{p}'|\vec{p}''\rangle = \int \mu_{\vec{p}'}^*(\vec{x}) \mu_{\vec{p}''}(\vec{x}) d^3x = \delta^3(\vec{p}' - \vec{p}'')$$

Si enuncia la completezza:

$$\int |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| d^3x = I, \quad \int |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| d^3p = I$$

Dunque

$$|\psi\rangle = I|\psi\rangle = \int |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'|\psi\rangle d^3x' = \int |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}|\psi\rangle d^3p$$

dove, moltiplicando per $|\vec{x}\rangle$, si ha

$$\begin{aligned}\langle \vec{x}|\psi\rangle &= \int \xi_{\vec{x}}^*(\vec{x}')\psi(\vec{x}') d^3x' = \psi(\vec{x}) \\ \langle \vec{p}|\psi\rangle &= \int \mu_{\vec{p}}^*(\vec{x}')\psi(\vec{x}') d^3x' = \tilde{\psi}(\vec{p})\end{aligned}$$

cioè le funzioni d'onda: esse non sono gli oggetti fondamentali, ma sono i coefficienti dello stato $|\psi\rangle$ sulle basi $|\vec{x}\rangle$ e $|\vec{p}\rangle$. Si può anche espandere lo stato su una base di autovettori di un operatore

$$|\psi\rangle = \sum_a \psi_a |a\rangle$$

Rappresentazione di uno stato. Si consideri uno stato $|\psi\rangle$. Sulla base delle coordinate $|\vec{x}\rangle$, i coefficienti, le componenti sono

$$\psi(\vec{x}) \equiv \langle \vec{x}|\psi\rangle$$

dove $|\psi|^2$ è la densità di probabilità di trovare la particella in posizione \vec{x} . Sulla base dei momenti $|\vec{p}\rangle$, i coefficienti sono

$$\langle \vec{p}|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p)$$

dove $|\tilde{\psi}(p)|^2$ è la densità di probabilità di trovare la particella con momento \vec{p} . Si calcola $\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle$. Considerando la relazione di completezza

$$|\psi\rangle = \int |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}|\psi\rangle d^3x = \int \psi(\vec{x}) |\vec{x}\rangle d^3x$$

segue

$$\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x}|\psi\rangle = \int \langle \vec{x}|\vec{p}\rangle \langle \vec{p}|\psi\rangle d^3p, \quad \langle \vec{p}|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p) = \int \langle \vec{p}|\vec{x}\rangle \psi(\vec{x}) d^3x$$

Confrontando l'espressione con la trasformata di Fourier si ottiene

$$\boxed{\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}}$$

Riassunto. Uno stato $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ si può rappresentare sulla base degli autovettori di un'osservabile. Si risolve

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$$

Gli autovettori costituiscono una base e quindi

$$|\psi\rangle = \sum c_a |a\rangle, \quad c_a = \langle a|\psi\rangle$$

Esempio. Si vedono alcuni esempi di rappresentazione di uno stato $|\psi\rangle$:

- sulla base $|a\rangle$ di un operatore si danno i coefficienti $\langle a|\psi\rangle$;
- sulla base $|\vec{x}\rangle$ si danno i coefficienti $\langle \vec{x}|\psi\rangle = \psi(\vec{x})$;
- sulla base $|\vec{p}\rangle$ si danno i coefficienti $\langle \vec{p}|\psi\rangle = \tilde{\psi}(\vec{p})$;
- sulla base generica $|n\rangle$ si danno i coefficienti $\langle n|\psi\rangle$.

Esempio. In tre dimensioni, l'equazione agli autovalori della posizione è

$$\hat{x} |\vec{x}\rangle = x |\vec{x}\rangle, \quad \vec{x} = (x, y, z)$$

per il momento si ha

$$\hat{p}_x |\vec{p}\rangle = p_x |\vec{p}\rangle$$

Si studia cosa sia $\hat{x} |\psi\rangle$:

- nella rappresentazione delle coordinate si ha

$$\langle \vec{x} | \hat{x} | \psi \rangle = x \langle \vec{x} | \psi \rangle = x \psi(x, y, z)$$

- nella rappresentazione dei momenti si ha

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | \hat{x} | \psi \rangle &= \int \langle \vec{p} | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \hat{x} | \psi \rangle d^3 x' = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}'}{\hbar}} x' \psi(\vec{x}') d^3 x' \\ &= \frac{i\hbar}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int (\partial_{p_x} e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}'}{\hbar}}) \psi(\vec{x}') d^3 x' \\ &= i\hbar \partial_{p_x} \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}'}{\hbar}} \psi(\vec{x}') d^3 x' = i\hbar \partial_{p_x} \tilde{\psi}(\vec{p}) \end{aligned}$$

Si studia cosa sia $\hat{p}_x |\psi\rangle$:

- nella rappresentazione dei momenti si ha

$$\langle \vec{p} | \hat{p}_x | \psi \rangle = p_x \langle \vec{p} | \psi \rangle = p_x \tilde{\psi}(\vec{p})$$

- nella rappresentazione delle coordinate si ha

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \hat{p}_x | \psi \rangle &= \int \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \hat{p}_x | \psi \rangle d^3 p = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}} p_x \tilde{\psi}(\vec{p}) d^3 p \\ &= -\frac{i\hbar}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int (\partial_x e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}) \tilde{\psi}(\vec{p}) d^3 p \\ &= -i\hbar \partial_x \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}} \tilde{\psi}(\vec{p}) d^3 p = -i\hbar \partial_x \psi(\vec{x}) \end{aligned}$$

Lezione 14

8 Oscillatore armonico

mer 19 ott
2022 13:30

L'hamiltoniana dell'oscillatore armonico è la seguente

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad m \omega^2 \equiv k$$

dove k è la costante di un'ipotetica molla. L'oscillatore armonico è importante perché è la prima approssimazione attorno ad un minimo energetico utilizzabile in vari problemi. L'approssimazione segue dall'espansione in serie di Taylor attorno ad un minimo

$$V(x) = V(x_0) + \cancel{V'(x_0)}(x - x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0)(x - x_0)^2 + o((x - x_0)^2)$$

cioè il potenziale è una parabola. Molte situazioni si possono descrivere come un oscillatore armonico:

- la vibrazione degli atomi in una molecola attorno ad una posizione media;

- le oscillazione degli atomi in un reticolo cristallino attorno al punto di equilibrio, esse sono quantizzate e si ha il concetto di fononi;
- la quantizzazione del campo elettromagnetico, esso viene decomposto in tanti oscillatori e si passa all'elettrodinamica quantistica quantizzando tali oscillatori; in questo modo si ottiene il concetto di fotone;

In meccanica classica, la soluzione all'equazione del moto è data da

$$x(t) = x_M \cos(\omega t + \varphi)$$

dove ω è una pulsazione, frequenza e φ è una fase.

8.1 Stati stazionari

In meccanica quantistica, l'hamiltoniana diventa

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

L'equazione per gli stati stazionari è

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} d_x^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E \varphi(x)$$

Il potenziale è una parabola: si sa già che lo spettro è discreto perché ci sono due punti di inversione. Il potenziale è una funzione pari: gli autovettori si distinguono in funzioni pari e funzioni dispari. Infatti, la parità viene conservata.

Si risolve il problema in due modi diversi: risolvendo l'equazione differenziale e un approccio utilizzato da Dirac.

Risoluzione dell'equazione differenziale. Si rende l'espressione adimensionale. A destra si ha un'energia. Si nota che pure $\hbar\omega$ è un'energia. Dunque, moltiplicando per $\frac{2}{\hbar\omega}$, l'equazione diventa

$$\left[-\frac{\hbar}{m\omega} d_x^2 + \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \right] \varphi - \mathcal{E} \varphi = 0$$

dove

$$\mathcal{E} = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

è adimensionale. Pertanto, pure gli addendi in parentesi sono adimensionali. Si pone

$$y^2 = \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \implies d_x y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Tramite la regola della catena, si trasforma la derivata seconda:

$$d_y = d_y x d_x \implies d_y^2 = d_y x d_x (d_y x d_x) = (d_y x)^2 d_x^2 = \frac{\hbar}{m\omega} d_x^2$$

L'equazione degli stati stazionari diventa

$$d_y^2 \varphi + (\mathcal{E} - y^2) \varphi = 0$$

Ai bordi del dominio, la funzione deve decrescere a zero: localmente è un esponenziale, ma non globalmente. Si studia il comportamento all'infinito. Per $y \rightarrow \infty$, il termine \mathcal{E} è trascurabile e l'equazione diventa

$$\varphi'' - y^2 \varphi \sim 0$$

L'andamento della soluzione dev'essere come

$$\varphi \propto e^{-ay^2}$$

Infatti, sostituendola nell'equazione, si ottiene

$$[-2a + (4a^2 - 1)y^2]e^{-ay^2} \sim 0$$

Si sopprime il termine quadratico:

$$4a^2 - 1 = 0 \implies a = \pm \frac{1}{2}$$

Solamente a positivo è accettabile. Quindi, la soluzione e l'equazione degli stati stazionari sono

$$\varphi(y) = e^{-\frac{1}{2}y^2} h(y) \implies d_y^2 h(y) - 2y d_y h(y) + (\mathcal{E} - 1)h(y) = 0$$

Si studia il comportamento della soluzione al finito $y \ll \infty$. Si cerca una soluzione del tipo

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m$$

Nell'equazione, il termine y^m ha coefficienti

$$(m+1)(m+2)a_{m+2} = (2m - \mathcal{E} + 1)a_m$$

Dato a_0 si ha una serie di soli termini pari. Dato a_1 si ha una serie di soli termini dispari. Questo è in accordo con quanto atteso riguardo la parità. Per studiare il comportamento della serie, si osserva il comportamento dei coefficienti per $m \rightarrow \infty$. Sia $m > N$, allora

$$a_{m+2} \sim \frac{2m}{m^2} a_m \sim \frac{2}{m} a_m$$

Quindi, fino ad N si ha un comportamento polinomiale. Oltre tale punto, si ha

$$\begin{aligned} h(y) &= \dots + a_N y^N + a_{N+2} y^{N+2} + a_{N+4} y^{N+4} + \dots \\ &= \dots + a_N y^N + \frac{2}{N} a_N y^{N+2} + \frac{2^2}{(N+2)N} a_N y^{N+4} + \dots \end{aligned}$$

Si può raccogliere il termine a_N . Dunque,

$$\begin{aligned} h(y) &= \dots + a_N y^2 \left(\frac{N}{2} - 1 \right)! \left[\frac{(y^2)^{\frac{N}{2}-1}}{\left(\frac{N}{2}-1\right)!} + \frac{(y^2)^{\frac{N}{2}}}{\left(\frac{N}{2}\right)!} + \frac{(y^2)^{\frac{N}{2}+1}}{\left(\frac{N}{2}+1\right)!} + \dots \right] \\ &= \text{cost} \cdot y^2 \left[e^{y^2} - P(y) \right] \sim y^2 e^{y^2} + Q(y) \end{aligned}$$

dove $P(y)$ è un polinomio formato dai primi $\frac{N}{2} - 1$ termini dell'espansione di e^{y^2} . Pertanto

$$\varphi(y) \sim e^{-\frac{1}{2}y^2} y^2 e^{y^2} \sim y^2 e^{\frac{1}{2}y^2}$$

che diverge a $y \rightarrow \infty$. La serie diverge più velocemente dell'esponenziale che descrive il comportamento all'infinito della soluzione. Bisogna impedire alla serie di costruire un esponenziale facendo in modo che oltre un certo indice, i coefficienti siano nulli. Questo succede qualora esista un $n \in \mathbb{N}$ tale per cui

$$2n - \mathcal{E} + 1 = 0 \implies \mathcal{E} = 2n + 1$$

Infatti, fino a tale indice si hanno solamente termini polinomiali che vengono sopraffatti da $e^{-\frac{1}{2}y^2}$ per $y \rightarrow \infty$. Si ottiene la quantizzazione dell'energia

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$$

Osservazione. Si osserva:

- l'energia dell'oscillatore armonico è quantizzata in termini di $\hbar\omega$;
- esiste uno stato di energia minima: $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, cioè l'energia di punto zero in accordo con il principio di Heisenberg;
- considerando l'energia quantizzata, si ha un'equazione per h pari a

$$d_y^2 h - 2y d_y h + 2nh = 0$$

Questa è l'equazione dei polinomi di Hermite. Dunque, φ si comporta come un polinomio al finito ed un esponenziale decrescente all'infinito.

Metodo algebrico. Questo metodo è dovuto a Dirac. L'hamiltoniana è

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega\hat{x}^2, \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Si risolve l'equazione degli stati stazionari

$$\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$$

Si costruiscono delle quantità adimensionali

$$\hat{\tilde{x}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \quad \hat{\tilde{p}} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\hat{p}, \quad [\hat{\tilde{x}}, \hat{\tilde{p}}] = i, \quad \hat{H} = \hbar\omega\hat{\tilde{H}}, \quad \hat{\tilde{H}} = \frac{1}{2}(\hat{\tilde{x}}^2 + \hat{\tilde{p}}^2)$$

Pertanto, l'hamiltoniana adimensionale è

$$\hat{\tilde{H}} = \frac{1}{2}(\hat{\tilde{x}}^2 + \hat{\tilde{p}}^2) = \frac{\hat{\tilde{x}} + i\hat{\tilde{p}}}{\sqrt{2}} \frac{\hat{\tilde{x}} - i\hat{\tilde{p}}}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2}$$

La presenza dell'addendo $-\frac{1}{2}$ è giustificata dal fatto che gli operatori non commutano. Si introduce l'operatore distruttore e l'operatore creatore

$$\hat{a} \equiv \frac{\hat{\tilde{x}} + i\hat{\tilde{p}}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{a}^\dagger \equiv \frac{\hat{\tilde{x}} - i\hat{\tilde{p}}}{\sqrt{2}}$$

Essi non sono auto-aggiunti. Si invertono le relazioni

$$\hat{\tilde{x}} = \frac{\hat{a}^\dagger + \hat{a}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{\tilde{p}} = i\frac{\hat{a}^\dagger - \hat{a}}{\sqrt{2}}$$

La relazione di commutazione è

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

L'hamiltoniana risulta essere

$$\hat{\tilde{H}} = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}$$

Si definisce l'operatore numero

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$$

Esso è auto-aggiunto

$$\hat{N}^\dagger = (\hat{a}^\dagger\hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger)^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{N}$$

L'hamiltoniana diventa

$$\hat{\tilde{H}} = \hat{N} + \frac{1}{2}$$

Cercare gli autovalori di $\hat{\tilde{H}}$ equivale a cercare gli autovalori di \hat{N} . Si studia tale operatore. Le relazioni di commutazione sono

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a}$$

così come

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]\hat{a} = \hat{a}^\dagger$$

Spettro dell'operatore numero. Tale operatore è auto-aggiunto. L'equazione agli autovalori è

$$\hat{N} |\nu\rangle = \nu |\nu\rangle, \quad \langle \nu | \nu \rangle = 1, \quad \nu \in \mathbb{R}$$

Si può passare all'hamiltoniana tramite

$$\hat{\tilde{H}} |\nu\rangle = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) |\nu\rangle$$

Si calcola

$$\hat{N} \hat{a} |\nu\rangle = \hat{a} \hat{N} |\nu\rangle + [\hat{N}, \hat{a}] |\nu\rangle = \hat{a} \hat{N} |\nu\rangle - \hat{a} |\nu\rangle = (\nu - 1) \hat{a} |\nu\rangle$$

Pure $\hat{a} |\nu\rangle$ è un autovettore di \hat{N} con autovalore $\nu - 1$. Si calcola

$$\hat{N} \hat{a}^\dagger |\nu\rangle = \hat{a}^\dagger \hat{N} |\nu\rangle + [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] |\nu\rangle = (\nu + 1) \hat{a}^\dagger |\nu\rangle$$

Anch'esso è un autovettore con autovalore $\nu + 1$. Dall'autovalore ν si ricava l'autovalore $\nu \pm 1$. Da ciò si capisce l'origine dei nomi: \hat{a}^\dagger aggiunge a ν , mentre \hat{a} toglie a ν .

Nello spazio di Hilbert, la norma è non negativa ed è nulla sse lo è il vettore. Dunque

$$0 \leq \|\hat{a} |\nu\rangle\|^2 = \langle \nu | \hat{a}^\dagger \hat{a} |\nu\rangle = \nu \langle \nu | \nu \rangle = \nu$$

Gli autovalori sono non negativi.

Osservazione.

- L'autovalore più piccolo è $\nu = 0$ a cui corrisponde lo stato $|0\rangle$. Dunque, per la relazione precedente, si ha un vettore nullo

$$\hat{a} |0\rangle = \vec{0}$$

Questo è lo stato fondamentale. Lo stato $|0\rangle$ è annichilato dal distruttore. Si noti che $|0\rangle$ è un vettore non nullo.

- Sia $\nu > 0$. Per ora si sa che $\nu \in \mathbb{R}$. Il ket corrispondente all'autovalore ν dell'operatore \hat{N} è $|\nu\rangle$. Si applica ripetutamente l'operatore di distruzione e si finisce sul ket $|\nu'\rangle$ con numero più piccolo, come mostrato dall'operatore numero

$$\hat{N} |\nu'\rangle = \hat{N} (\hat{a} |\nu\rangle) = (\nu - 1) (\hat{a} |\nu\rangle) = (\nu - 1) |\nu'\rangle$$

Si arriva ad un punto in cui si ottiene un autovettore con numero negativo: ciò non è possibile. L'unico modo che questo non avvenga è che $\nu \in \mathbb{N}$. Gli autovalori dell'operatore numero \hat{N} sono numeri naturali.

Dunque, i possibili valori dell'energia sono

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}_0$$

L'indice n descrive i quanti di energia scambiati in pacchetti di $\hbar\omega$.

Costruzione degli stati. Per quanto visto riguardo l'effetto dell'operatore creazione, si ha

$$\hat{a}^\dagger |0\rangle \propto |1\rangle$$

Infatti, l'operatore creazione implica

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = c_n |n+1\rangle$$

Si trovano i coefficienti c_n . La norma del primo membro è

$$\|\hat{a}^\dagger |n\rangle\|^2 = \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger |n\rangle = \langle n | (1 + \hat{a}^\dagger \hat{a}) |n\rangle = (n+1) \langle n | n \rangle = n+1$$

ricordando che $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$. La norma del secondo membro è

$$\|\hat{a}^\dagger |n\rangle\|^2 = |c_n|^2 \langle n+1|n+1\rangle = |c_n|^2$$

Pertanto

$$|c_n|^2 = n+1 \implies c_n = \sqrt{n+1}$$

Dunque, la relazione diventa

$$\boxed{\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle}$$

Similmente si ha

$$\|\hat{a} |n\rangle\|^2 = \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = \langle n|\hat{N} |n\rangle = n \langle n|n\rangle = n \implies \boxed{\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle}$$

Mandando $n \rightarrow n-1$, l'equazione del creatore si può scrivere come

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle$$

La si applica ripetutamente:

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

Lezione 15

gio 20 ott
2022 13:30

Tutta la teoria dei campi utilizza gli operatori di creazione e di distruzione: dallo stato vuoto di Fock si creano delle particelle. Il formalismo astratto intrapreso tramite notazione di Dirac permette di descrivere il momento angolare e lo spettro dell'atomo di idrogeno. Si trova una rappresentazione degli stati $|n\rangle$. Conoscendo lo stato fondamentale, si possono costruire tutti gli altri stati. Per lo stato fondamentale vale

$$\hat{a} |0\rangle = \vec{0} \implies \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right] |0\rangle = \vec{0}$$

Si cercano gli stati come funzioni d'onda nella rappresentazione delle coordinate. Sulla base delle coordinate si sa

$$\hat{x} |x'\rangle = x' |x'\rangle, \quad \langle x| \hat{p} = -i\hbar d_x \langle x|$$

Dunque, l'espressione sopra diventa

$$\langle x| \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right] |0\rangle = 0 \implies \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} (-i\hbar d_x) \right] \langle x|0\rangle = 0$$

Si pone $\langle x|0\rangle \equiv \varphi_0(x)$. Pertanto, l'equazione diventa

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + d_x \right) \varphi_0(x) = 0 \implies \frac{d\varphi_0}{\varphi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} x dx \implies \ln \varphi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + C$$

da cui la soluzione è

$$\varphi_0(x) = N e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

La costante si calcola tramite la normalizzazione

$$1 \equiv \int |\varphi_0(x)|^2 dx = N^2 \int e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = N^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

La funzione d'onda dello stato fondamentale è

$$\boxed{\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}}$$

Si trovano gli stati eccitati sulla base delle coordinate

$$\langle x|n\rangle \equiv \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} d_x \right)^n \varphi_0(x)$$

Si costruiscono le auto-funzioni senza risolvere equazioni differenziali non banali. Si definisce una grandezza adimensionale

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

Dunque

$$\varphi_n(\xi) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{H_n(\xi)}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

dove $H_n(\xi)$ sono i polinomi di Hermite

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} d_\xi^n e^{-\xi^2}$$

I primi polinomi sono

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2\xi, \quad H_2 = 4\xi^2 - 2, \quad H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$$

8.2 Rappresentazione matriciale degli operatori creatore, distruttore, posizione e momento

Si ricorda

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

così come

$$\hat{x} |n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) |n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} |n+1\rangle + \sqrt{n} |n-1\rangle]$$

similmente

$$\hat{p} |n\rangle = \sqrt{m\hbar\omega} \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) |n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [\sqrt{n+1} |n+1\rangle - \sqrt{n} |n-1\rangle]$$

Si calcolano gli elementi matriciali:

$$\langle n'|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}, \quad \langle n'|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}$$

pure

$$\langle n'|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1}]$$

come

$$\langle n'|\hat{p}|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} - \sqrt{n}\delta_{n',n-1}]$$

similmente

$$\langle n'|\hat{N}|n\rangle = n\langle n'|n\rangle = n\delta_{n',n}$$

Sulla base $|n\rangle$, l'operatore distruttore è rappresentato da

$$\hat{a} \doteq \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Similmente, l'operatore creatore è rappresentato da

$$\hat{a}^\dagger \doteq \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Inoltre, la rappresentazione dell'operatore numero è

$$\langle n | \hat{N} | n' \rangle = \sum_m \langle n | \hat{a}^\dagger | m \rangle \langle m | \hat{a} | n' \rangle = \sum_m \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1} \sqrt{n'} \delta_{m,n'-1} = n \delta_{n,n'}$$

Ci si aspetta che la matrice sia diagonale in quanto $|n\rangle$ è la base dell'operatore \hat{N} . Dunque

$$\hat{N} \doteq \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Dalla rappresentazione per \hat{a} e \hat{a}^\dagger segue

$$\hat{x} \doteq \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

e pure

$$\hat{p} \doteq \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Osservazione. Si osserva

$$\begin{aligned} \varphi_0(x) &\propto e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}, & \text{pari} \\ \varphi_1(x) &\propto x e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}, & \text{dispari} \\ \varphi_2(x) &\propto \left(2 \frac{m\omega}{\hbar} x^2 - 1\right) e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}, & \text{pari} \\ &\vdots \end{aligned}$$

L'oscillatore armonico aumenta in energia sempre dello stesso valore $\hbar\omega$ questo è contrapposto alla buca infinita dove l'energia aumenta come n^2 . Per il primo stato eccitato, esiste un punto in cui si ha probabilità nulla di trovare la particella (Figura 10). All'aumentare dell'energia si ha un aumento degli zeri della funzione d'onda.

Principio di corrispondenza. Per grandi energie, ci si aspetta il comportamento classico. L'oscillatore rimane intrinsecamente quantistico perché esistono punti in cui la densità di probabilità di trovare la particella è esattamente zero. Tuttavia, la sensibilità classica non è abbastanza per poter risolvere tali punti e si vede una media.

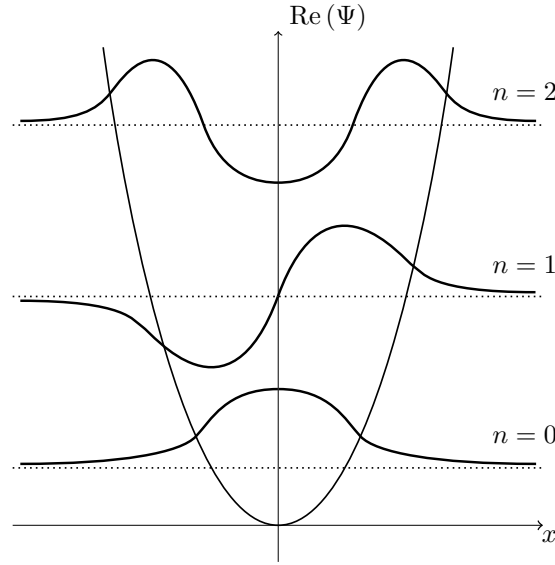


Figura 10: Stati stazionari dell'oscillatore armonico sovrapposti al potenziale.

La probabilità di trovare una particella nell'intorno di un certo punto è proporzionale al tempo che la particella passa nell'intorno di tale punto:

$$\Delta t \propto \frac{\Delta x}{v} \sim \frac{1}{v}$$

Per un moto armonico si ha

$$x = x_0 \cos(\omega t), \quad \dot{x} = -x_0 \omega \sin(\omega t) = -x_0 \omega \sqrt{1 - \left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$$

Pertanto

$$\Delta t \sim \frac{1}{v} \propto \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{x}{x_0}\right)^2}}$$

Questa curva è la media delle oscillazioni della funzione d'onda. In questo senso si ritrova il principio di corrispondenza.

8.3 Valori medi e deviazioni standard della posizione e del momento

Per un operatore \hat{A} si ha

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$$

Quindi, i valori medi della posizione e del momento sono

$$\langle n | \hat{x} | n \rangle = 0, \quad \langle n | \hat{p} | n \rangle = 0$$

ricordando le rappresentazioni matriciali, cioè i valori di aspettazione per uno stato stazionario sono zero (in quanto la funzione è simmetrica). Si calcolano i valori quadratici medi. I quadrati sono

$$\begin{aligned} \hat{x}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) = \frac{\hbar}{2m\omega} [(\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2] \\ \hat{p}^2 &= -\frac{m\hbar\omega}{2} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) = -\frac{m\hbar\omega}{2} [(\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2] \end{aligned}$$

Tramite il commutatore, si trasforma $\hat{a}\hat{a}^\dagger$ in $\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{N}$. Infatti

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 \implies \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} = 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$$

Si calcola

$$\langle n|\hat{x}^2|n\rangle = \langle n|(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger)|n\rangle = \langle n|(2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|n\rangle = 2n + 1$$

si nota che gli operatori \hat{a}^2 e $(\hat{a}^\dagger)^2$ danno zero. Dunque

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle = \langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Similmente per \hat{p} si ha

$$\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Da cui

$$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2 \implies \Delta\hat{x} \Delta\hat{p} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

ricordando che

$$\Delta\hat{x} = \sqrt{\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle}, \quad \Delta\hat{p} = \sqrt{\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle}$$

8.4 Oscillatore armonico in tre dimensioni

L'hamiltoniana dell'oscillatore armonico in tre dimensioni è

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m[\omega_1^2x^2 + \omega_2^2y^2 + \omega_3^2z^2]$$

Nella rappresentazione delle coordinate si ha

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m[\omega_1^2x^2 + \omega_2^2y^2 + \omega_3^2z^2]$$

Si riconduce il problema a quello monodimensionale

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z, \quad \hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{x_i}^2 + \frac{1}{2}m\omega_i^2x_i^2$$

Si cercano gli stati stazionari risolvendo l'equazione associata

$$\hat{H}\varphi(x, y, z) = E\varphi(x, y, z)$$

Si ipotizzano soluzioni separabili

$$\varphi(x, y, z) = \varphi_{n_1}^{\omega_1}(x)\varphi_{n_2}^{\omega_2}(y)\varphi_{n_3}^{\omega_3}(z)$$

Nella rappresentazione $|n\rangle$, il generico stato è

$$|n_1n_2n_3\rangle \equiv |n_1\rangle_{\omega_1} \otimes |n_2\rangle_{\omega_2} \otimes |n_3\rangle_{\omega_3} = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!n_3!}}(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}(\hat{a}_3^\dagger)^{n_3}|000\rangle$$

L'energia dell'oscillatore è la somma delle tre energie

$$E_{n_1n_2n_3} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_3 \left(n_3 + \frac{1}{2}\right), \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}_0$$

Degenerazione dell'energia. Ad uno stesso valore di energia, si contano quanti stati corrispondono e pertanto il grado di degenerazione. Se $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ sono numeri incommensurabili, allora non esiste sequenza degli n_1, n_2, n_3 che possa dare alcuna combinazione di altri n_i . Dunque, si ha degenerazione per due casi: numeri ω_i commensurabili oppure si aumenta la simmetria. Si sceglie la simmetria massima

$$\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 \equiv \omega$$

La situazione è sfero-simmetrica. L'hamiltoniana è

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2$$

Il potenziale diventa

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 = V(r)$$

In meccanica classica, il momento angolare ed il momento angolare proiettato lungo qualsiasi asse sono conservati. Lo sono anche in meccanica quantistica. L'energia diventa

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

Si studia la degenerazione. Per $n_1 = n_2 = n_3 = 0$ l'energia è $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$. Per un solo indice pari all'unità si hanno tre combinazioni che corrispondono all'energia $E = \frac{5}{2}\hbar\omega$: il problema è tre volte degenerare. Per i tre indici la cui somma è due si hanno sei combinazioni e quindi sei gradi di generazione. Il numero di gradi di generazione va come

$$n_{\text{deg}} = \frac{1}{2}(n+1)(n+2), \quad n = n_1 + n_2 + n_3$$

La formula generale in k dimensioni è

$$n_{\text{deg}} = \binom{n+k-1}{k-1} = \frac{(n+k-1)!}{n!(k-1)!}$$

cioè distribuire n oggetti identici in k contenitori distinti (le divisioni tra i contenitori sono $k-1$, dunque si possono disporre $n+k-1$ oggetti totali; essi possono essere disposti in $(n+k-1)!$ modi, ma bisogna rimuovere gli eventuali scambi tra gli stessi n oggetti e le stesse $k-1$ divisioni).

Lezione 16

9 Interpretazione fisica

lun 24 ott
2022 13:30

9.1 Osservabili compatibili ed osservabili incompatibili

Una misura su di un sistema proietta lo stato di tale sistema sull'auto-stato misurato. Facendo una misura, ci si chiede quali altre misure si possono fare senza perturbare irreparabilmente tale sistema: si cercano delle osservabili compatibili. Questo argomento si ricollega alle costanti del moto ed alla ricostruzione esatta di uno stato del sistema.

Si supponga che due operatori abbiamo le medesime auto-funzioni:

$$\hat{A}|e_i\rangle = a_i|e_i\rangle, \quad \hat{B}|e_i\rangle = b_i|e_i\rangle$$

Si supponga che un sistema si trovi nell'auto-stato particolare $|e_i\rangle$. Si compie una misura di \hat{A} su tale sistema: con certezza si ottiene l'autovalore a_i corrispondente. Dopo la misura, lo stato è ancora $|e_i\rangle$ perché auto-stato. Misurando \hat{B} , si ottiene l'autovalore b_i corrispondente: dopo la misura, lo stato è ancora una volta $|e_i\rangle$. Da questo si capisce che, per particolari stati, le misure successive di due osservabili danno risultati univoci a patto che lo stato del sistema sia

un auto-stato di entrambe le osservabili.

Si può anche invertire l'ordine delle misure, ma si ottengono gli stessi autovalori e il sistema rimane nello stesso (auto-)stato. Infatti

$$\hat{B}\hat{A}|e_i\rangle = \hat{B}a_i|e_i\rangle = a_i\hat{B}|e_i\rangle = a_ib_i|e_i\rangle$$

risulta essere identico a

$$\hat{A}\hat{B}|e_i\rangle = \hat{A}b_i|e_i\rangle = b_i\hat{A}|e_i\rangle = b_ia_i|e_i\rangle$$

Il commutatore è

$$[\hat{A}, \hat{B}]|e_i\rangle = 0, \quad \forall |e_i\rangle$$

Si consideri il caso in cui i due operatori non abbiano gli stessi auto-stati

$$\hat{A}|e_i\rangle = a_i|e_i\rangle, \quad \hat{B}|e'_i\rangle = b_i|e'_i\rangle, \quad |e_i\rangle \neq |e'_i\rangle$$

Si supponga che il sistema si trovi nello stato $|e_i\rangle$. La misura di \hat{A} produce l'autovalore a_i e lo stato del sistema è ancora $|e_i\rangle$. Ora si misura \hat{B} : si proietta lo stato sugli autovettori dell'operatore e si studiano i pesi della decomposizione per ottenere la probabilità di misura. Dunque

$$|e_i\rangle = \sum_k |e'_k\rangle \langle e'_k|e_i\rangle$$

i pesi risultano essere $\langle e'_k|e_i\rangle$. Nello stato $|e_i\rangle$ sono presenti tanti auto-stati $|e'_k\rangle$, ma con diversi pesi. Dunque, si ottiene la misura, l'autovalore b_k con probabilità

$$P(b_k) = |\langle e'_k|e_i\rangle|^2$$

Dopo la misura, la funzione d'onda è diventata l'auto-stato $|e'_k\rangle$ corrispondente a b_k . Ora si misura nuovamente \hat{A} . Come prima, bisogna scomporre lo stato

$$|e'_k\rangle = \sum_j |e_j\rangle \langle e_j|e'_k\rangle$$

A priori, non si sa più cosa si ottiene: si misura l'autovalore a_j con probabilità $|\langle e_j|e'_k\rangle|^2$ e così via alternando la misura delle due osservabili. Questo è diverso dal primo caso in cui si sa già cosa si ottiene.

Teorema. Due operatori hermitiani hanno una base in comune se e solo se essi commutano.

Dimostrazione. Si dimostra la condizione necessaria. Per ipotesi, i due operatori hanno una base in comune:

$$\hat{A}|e_i\rangle = a_i|e_i\rangle, \quad \hat{B}|e_i\rangle = b_i|e_i\rangle$$

Dunque

$$\langle e_j|[\hat{A}, \hat{B}]|e_i\rangle = \langle e_j|(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|e_i\rangle = (a_jb_j - b_ia_i)\langle e_j|e_i\rangle = 0$$

dove $\langle e_j|e_i\rangle = \delta_{ij}$ e si è fatto uso della qualità di hermiticità:

$$\langle e_j|\hat{A}^\dagger = a_j^*\langle e_j| \iff \langle e_j|\hat{A} = a_j\langle e_j|, \quad \hat{A} = \hat{A}^\dagger, \quad a_j = a_j^*$$

Pertanto

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0, \quad \forall |e_i\rangle$$

Si dimostra la condizione sufficiente. Si distingue il caso non degenere dal caso degenere. Sia $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Si consideri il caso non degenere:

$$a_i \neq a_j, \quad b_i \neq b_j, \quad \forall i \neq j$$

Si consideri la base di \hat{A} :

$$\hat{A} |e_i\rangle = a_i |e_i\rangle$$

Quindi

$$0 = \langle e_i | [\hat{A}, \hat{B}] |e_k\rangle = \langle e_i | (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) |e_k\rangle = (a_i - a_k) \langle e_i | \hat{B} |e_k\rangle$$

segue

$$\langle e_i | \hat{B} |e_k\rangle = 0, \quad i \neq k \implies \langle e_i | \hat{B} |e_k\rangle = \delta_{ik} B_{ii}$$

cioè \hat{B} è diagonale su tale base: essa è la base di \hat{B} . Dunque, si può scrivere

$$\hat{B} = \sum_i B_{ii} |e_i\rangle \langle e_i|$$

Si consideri il caso degenere. La base di \hat{A} è ancora

$$\hat{A} |e_i\rangle = a_i |e_i\rangle$$

In questo caso, esiste un sottospazio di ket $|e_i^r\rangle$ con stesso autovalore a_i . Dunque

$$\hat{A} |e_i^r\rangle = a_i |e_i^r\rangle, \quad r = 1, \dots, p_i$$

Come prima

$$0 = \langle e_i^r | [\hat{A}, \hat{B}] |e_j\rangle = (a_i - a_j) \langle e_i^r | \hat{B} |e_j\rangle$$

Se $a_i \neq a_j$ allora si ritorna al caso precedente. Se $a_i = a_j$ allora

$$0 = \langle e_i^r | [\hat{A}, \hat{B}] |e_i^{r'}\rangle = (a_i - a_i) \langle e_i^r | \hat{B} |e_i^{r'}\rangle$$

ma $a_i - a_i = 0$. Gli auto-stati di \hat{A} non sono (necessariamente) auto-stati di \hat{B} in quanto $\langle e_i^r | \hat{B} |e_i^{r'}\rangle$ potrebbe non essere diagonale. Ci si pone nel sottospazio degli autovettori degeneri e si diagonalizza \hat{B} : i suoi autovettori $|e_i^r\rangle$ sono combinazioni lineari degli auto-stati $|e_i^r\rangle$. Si noti che qualunque combinazione lineare di $|e_i^r\rangle$ mantiene \hat{A} diagonale. Quindi, si considerino gli auto-stati

$$|e_i^r\rangle, \quad r = 1, \dots, p$$

Si costruisce la matrice $p \times p$ i cui elementi sono $\langle e_i^r | \hat{B} |e_i^{r'}\rangle$ con $r, r' = 1, \dots, p$. Si diagonalizza tale matrice (questo è sempre possibile farlo perché \hat{B} è un operatore hermitiano). I nuovi autovettori trovati sono tali per cui

$$\hat{B} |e_i^{r'}\rangle = b_j |e_i^{r'}\rangle$$

Pertanto, si è trovata una base che diagonalizza contemporaneamente sia \hat{A} che \hat{B} .

Visualizzazione matriciale. Si consideri il caso non degenere. Si ha

$$\hat{A} \doteq \begin{bmatrix} a_1 & & & \\ & a_2 & & \\ & & a_3 & \\ & & & \ddots \end{bmatrix}, \quad \hat{B} \doteq \begin{bmatrix} b_1 & & & \\ & b_2 & & \\ & & b_3 & \\ & & & \ddots \end{bmatrix}$$

Si consideri il caso degenere. Si ha

$$\hat{A} \doteq \begin{bmatrix} a_1 & & & & & \\ & a_2 & & & & \\ & & a_3 & & & \\ & & & a_3 & & \\ & & & & a_3 & \\ & & & & & a_4 \\ & & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

mentre la matrice di \hat{B} è

$$\hat{B} \doteq \begin{bmatrix} b_1 & & & & & & & & \\ & b_2 & & & & & & & \\ & & x_1 & x_2 & x_3 & & & & \\ & & x_4 & x_5 & x_6 & & & & \\ & & x_7 & x_8 & x_9 & & & & \\ & & & & & b_4 & & & \\ & & & & & & & \ddots & \end{bmatrix}$$

Si diagonalizza la sotto-matrice 3×3 in

$$B_3 \doteq \begin{bmatrix} b_3^1 & & \\ & b_3^2 & \\ & & b_3^3 \end{bmatrix}$$

Notazione. Si considerino due operatori che hanno una base in comune e dunque commutino. La base loro corrispondente si scrive come $|a_i b_j\rangle$. Per cui si ha

$$\hat{A}|a_i b_j\rangle = a_i |a_i b_j\rangle, \quad \hat{B}|a_i b_j\rangle = b_j |a_i b_j\rangle$$

Osservazione. Se gli autovalori b_j non sono diversi tra loro, allora si è nella situazione degenera precedente: bisogna cercare un operatore \hat{C} che commuti sia con \hat{A} che con \hat{B}

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0, \quad [\hat{A}, \hat{C}] = 0, \quad [\hat{B}, \hat{C}] = 0$$

Se esistono b_j uguali, allora si ripercorre quanto fatto mandando $\hat{B} \rightarrow \hat{A}$ e $\hat{C} \rightarrow \hat{B}$. Dunque, gli stati finali sono

$$|a_i b_j c_k\rangle$$

Bisogna arrivare ad un punto in cui ogni auto-stato sia univocamente definito dagli autovalori corrispondenti. Si sono risolte le degenerazioni quando si identificano tutti gli auto-stati (tuttavia, questo non significa che le degenerazioni sono state rimosse). In questo modo, tutti gli operatori compatibili sono diagonali contemporaneamente sulla base $|a_i b_j c_k\rangle$. Ad esempio, nell'oscillatore armonico si può univocamente determinare un auto-stato tramite le misure dell'energia, del momento angolare totale e del momento angolare proiettato lungo un asse.

Si ricerca l'insieme completo di osservabili che commutano (complete set of commuting observables, CSCO) in modo tale da etichettare univocamente tutti gli stati. L'insieme è completo quando, aggiungendo una osservabile che commuta con tutte quelle presenti, tale osservabile è funzione di quelle già presenti. Una descrizione completa di un sistema, ovvero la massima informazione possibile, richiede la determinazione del numero massimo di osservabili indipendenti tra loro che commutano: così si può caratterizzare univocamente lo stato di un sistema. Questo insieme si dice anche osservazione massima: su di un auto-stato degli operatori di questo insieme, ogni misura delle osservabili in qualsiasi ordine fornisce sempre con certezza gli autovalori corrispondenti. La ricerca dell'insieme massimo avviene attraverso l'hamiltoniana, le simmetrie e la teoria dei gruppi.

9.2 Evoluzione temporale del valor medio di un'osservabile

Si consideri l'osservabile

$$\hat{A}(\hat{x}, \hat{p}, t)$$

Il valor medio su di uno stato generico è

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \int \psi^*(\vec{x}, t) \hat{A}(\vec{x}, -i\hbar \vec{\nabla}, t) \psi(\vec{x}, t) d^3x$$

Esso è una quantità che dipende dal tempo: una parte dall'operatore e un'altra dall'evoluzione della funzione d'onda. Dunque

$$\langle \hat{A} \rangle(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle$$

La derivata temporale è

$$d_t \langle \hat{A} \rangle = (d_t \langle \psi(t) |) \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | (\partial_t \hat{A}) | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} (d_t | \psi(t) \rangle)$$

Si sa

$$i\hbar d_t | \psi \rangle = \hat{H} | \psi \rangle, \quad -i\hbar d_t \langle \psi | = \langle \psi | \hat{H}$$

da cui segue

$$d_t \langle \hat{A} \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \left[\hat{A}(t) \hat{H}(t) - \hat{H}(t) \hat{A}(t) \right] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \partial_t \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

dunque

$$d_t \langle \hat{A} \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \langle \partial_t \hat{A} \rangle$$

9.3 Limite classico e teorema di Ehrenfest

Si consideri una particella senza spin in un potenziale stazionario $V(\vec{x})$. L'hamiltoniana è

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

Essa non dipende esplicitamente dal tempo. Si applica l'equazione di evoluzione del valor medio all'operatore posizione ed all'operatore momento:

$$d_t \langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] \right\rangle = \frac{1}{2im\hbar} \langle \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p} \rangle$$

Noto

$$[x_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}$$

Si ottiene

$$d_t \langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

Questo ricorda la meccanica classica. Il valore di aspettazione del momento risulta essere

$$d_t \langle \hat{p} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, V(\hat{x})]$$

Sapendo

$$[\hat{p}, f(\hat{x})] = -i\hbar f'(\hat{x})$$

si ottiene

$$d_t \langle \hat{p} \rangle = -\langle \vec{\nabla} V(\hat{x}) \rangle$$

Le due equazioni riquadrate costituiscono la tesi del teorema di Ehrenfest.

Esse si possono combinare in

$$m d_t^2 \langle \hat{x} \rangle = -\langle \vec{\nabla} V(\hat{x}) \rangle$$

che ricorda il caso classico:

$$\begin{cases} d_t \vec{x}_{cl} = \frac{1}{m} \vec{p}_{cl} \\ d_t \vec{p}_{cl} = -\vec{\nabla} V(\vec{x}_{cl}) \end{cases} \implies m d_t^2 \vec{x}_{cl} = -\vec{\nabla} V(\vec{x}_{cl})$$

Osservazione. Le equazioni del teorema di Ehrenfest e la loro combinazione non sono equazioni banali. Si è ricavata l'equazione di Schrödinger per una particella libera e si è proseguito fin tanto che le cose sono in accordo con le osservazioni. Risulta rassicurante ottenere delle equazioni che ricordano il caso classico. Tuttavia, non sono identiche al caso classico. La posizione classica è il baricentro della funzione d'onda

$$\vec{x}_{cl} = \langle \hat{x} \rangle$$

In una dimensione, l'equazione combinata diventa

$$m d_t^2 \langle \hat{x} \rangle = -\langle d_{\hat{x}} V(\hat{x}) \rangle$$

mentre l'equazione classica è

$$m d_t^2 \langle \hat{x} \rangle = -\frac{dV(\langle \hat{x} \rangle)}{d\langle \hat{x} \rangle}$$

si faccia attenzione di quale termine si considera il valor medio: nel primo caso si ha la media di una funzione, nel secondo si calcola il valore di una funzione nel punto medio. Posta la forza

$$F(x) \equiv -d_x V(x)$$

le due equazioni precedenti sono identiche qualora

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle)$$

Si studia se tale equazione sussiste. Per Taylor nel valore centrale

$$F(x) = F(\langle x \rangle) + (x - \langle x \rangle)F'(\langle x \rangle) + \frac{1}{2}(x - \langle x \rangle)^2 F''(\langle x \rangle)$$

Affinché valga l'equazione, bisogna trascurare le derivate di ordine strettamente maggiore della prima. Infatti

$$\langle F(x) \rangle = \langle F(\langle x \rangle) \rangle + \langle (x - \langle x \rangle) \rangle F'(\langle x \rangle) = F(\langle x \rangle)$$

In tale caso, il limite classico della meccanica quantistica coincide con la meccanica classica. Si possono trascurare le derivate successive quando l'incremento della forza F risulta trascurabile rispetto al valore della forza calcolato nel punto medio $\langle x \rangle$. Le equazioni del teorema di Ehrenfest soddisfano il limite classico per forze lentamente variabili sulle dimensioni del pacchetto d'onda.

Lezione 17

Forze lentamente variabili. Si ha

mar 25 ott
2022 13:30

$$\langle F(x) \rangle = \int \psi^*(x, t) F(x) \psi(x, t) dx = \int F(x) |\psi|^2 dx$$

Per forze lentamente variabili sulle distanze del pacchetto d'onda (si ricordi che F dipende dalla posizione), la forza risulta pressoché costante:

$$\langle F(x) \rangle \approx F(\langle x \rangle) \int |\psi|^2 dx = F(\langle x \rangle)$$

Pertanto, il teorema di Ehrenfest coincide con le equazioni classiche. Se le forze, il potenziale, variano rapidamente rispetto le dimensioni del pacchetto d'onda, allora l'integrale non è ben approssimabile da un rettangolo e dunque il teorema di Ehrenfest non coincide con le equazioni classiche (si ricordi che il limite classico della meccanica quantistica è il teorema di Ehrenfest).

Riassunto. Se una particella è descritta da un pacchetto d'onda e i potenziali variano rapidamente rispetto alle dimensioni del pacchetto, allora il sistema è puramente quantistico. Il limite classico è il teorema di Ehrenfest che non coincide con la meccanica classica. Se i potenziali sono lentamente variabili sulle dimensioni del pacchetto, allora il limite classico del teorema di Ehrenfest coincide con la meccanica classica.

Definizione. Un sistema è *classico* se non possiede alcuna struttura che varia sulle distanze tipiche della meccanica quantistica, cioè le lunghezze d'onda di de Broglie.

9.4 Relazione di indeterminazione

Si definisca l'operatore

$$\Delta A \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$$

Si consideri il suo quadrato

$$(\Delta A)^2 = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 = \hat{A}^2 - 2\langle \hat{A} \rangle \hat{A} + \langle \hat{A} \rangle^2$$

La dispersione è lo scarto quadratico medio (la deviazione standard) il cui quadrato è

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \equiv (\Delta A)^2$$

Lemma. primo. Disuguaglianza di Schwarz. Vale

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2$$

Dimostrazione. Infatti, si consideri $|\alpha\rangle + \lambda |\beta\rangle$ con $\lambda \in \mathbb{C}$. La sua norma è

$$\| |\alpha\rangle + \lambda |\beta\rangle \|^2 = (\langle \alpha | + \lambda^* \langle \beta |)(|\alpha\rangle + \lambda |\beta\rangle) \geq 0$$

Sia

$$\lambda = -\frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle}$$

Dunque

$$\| |\alpha\rangle + \lambda |\beta\rangle \|^2 = \langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \langle \alpha | \beta \rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle^*}{\langle \beta | \beta \rangle} \langle \beta | \alpha \rangle + \frac{\langle \beta | \alpha \rangle \langle \beta | \alpha \rangle^*}{\langle \beta | \beta \rangle} \geq 0$$

Pertanto

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq \langle \beta | \alpha \rangle \langle \alpha | \beta \rangle = |\langle \alpha | \beta \rangle|^2$$

Lemma secondo. Il valore di aspettazione di un operatore C anti-hermitiano è puramente immaginario. Un operatore è anti-hermitiano qualora

$$C^\dagger = -C$$

Dimostrazione. Si calcola il valore di aspettazione

$$\langle \psi | C | \psi \rangle = -\langle \psi | C^\dagger | \psi \rangle = -\langle \psi | C | \psi \rangle^*$$

Prima si utilizza l'anti-hermiticità $C = -C^\dagger$ e poi si applica $\langle \varphi | A^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | A | \varphi \rangle^*$. Sia $x + iy = \langle \psi | C | \psi \rangle$. La relazione trovata implica

$$x + iy = -(x + iy)^* = -x + iy \implies x = 0, \quad y = y$$

Pertanto $\langle C \rangle \in i\mathbb{R}$. Questo lemma è la controparte di un operatore hermitiano con valore di aspettazione reale.

Relazione di indeterminazione. Si considerino due operatori \hat{A} e \hat{B} hermitiani. Si costruiscono gli stati

$$|\alpha\rangle = \hat{\Delta}A |\rangle, \quad |\beta\rangle = \hat{\Delta}B |\rangle$$

dove $|\rangle$ è uno stato generico. Si applica il primo lemma. Dunque

$$\langle(\hat{\Delta}A)^2\rangle\langle(\hat{\Delta}B)^2\rangle \geq \left|\langle\hat{\Delta}A\hat{\Delta}B\rangle\right|^2$$

Si studia il secondo membro

$$\hat{A}\hat{A}\hat{\Delta}B = \frac{1}{2}\hat{\Delta}A\hat{\Delta}B - \frac{1}{2}\hat{\Delta}B\hat{\Delta}A + \frac{1}{2}\hat{\Delta}A\hat{\Delta}B + \frac{1}{2}\hat{\Delta}B\hat{\Delta}A = \frac{1}{2}[\hat{\Delta}A, \hat{\Delta}B] + \frac{1}{2}\{\hat{\Delta}A, \hat{\Delta}B\}$$

dove $\{\hat{\Delta}A, \hat{\Delta}B\}$ è l'anti-commutatore. Il commutatore è

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

in quanto $\langle\hat{A}\rangle$ e $\langle\hat{B}\rangle$ sono dei numeri. Il suo aggiunto è

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}]$$

cioè il commutatore di due operatori hermitiani è anti-hermitiano. L'anti-commutatore è

$$\{\hat{\Delta}A, \hat{\Delta}B\}^\dagger = (\hat{\Delta}A\hat{\Delta}B + \hat{\Delta}B\hat{\Delta}A)^\dagger = \hat{\Delta}B\hat{\Delta}A + \hat{\Delta}A\hat{\Delta}B = \{\hat{\Delta}A, \hat{\Delta}B\}$$

cioè esso è hermitiano. Quindi

$$\langle\hat{\Delta}A\hat{\Delta}B\rangle = \frac{1}{2}\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle + \frac{1}{2}\langle\{\hat{\Delta}A, \hat{\Delta}B\}\rangle$$

Il primo addendo è puramente immaginario, il secondo è puramente reale. Pertanto

$$\left|\langle\hat{\Delta}A\hat{\Delta}B\rangle\right|^2 = \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|^2 + \frac{1}{4}\left|\langle\{\hat{\Delta}A, \hat{\Delta}B\}\rangle\right|^2$$

Si ottiene la relazione di indeterminazione

$$\boxed{\langle(\hat{\Delta}A)^2\rangle\langle(\hat{\Delta}B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|^2}$$

Osservazione. La relazione vale per ogni stato $|\psi\rangle$ ed il valore particolare che essa assume dipende dallo stato particolare su cui si fa la misura. Se $\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle \neq 0$ allora, misurando più volte, non si possono ottenere gli stessi risultati partendo dallo stesso stato: la dispersione di ciascun operatore non è nulla. Se i due operatori commutano (ma in verità basta che il valor di aspettazione del commutatore sia nullo), allora la disuguaglianza parte da zero. Tuttavia, questo non implica che esistano degli stati per cui

$$\langle\varphi|(\hat{\Delta}A)^2|\varphi\rangle = 0 \quad \vee \quad \langle\varphi|(\hat{\Delta}B)^2|\varphi\rangle = 0$$

D'altra parte, possono esistere casi per cui il commutatore sia un operatore a sua volta, il cui valore di aspettazione sia nullo su uno stato particolare, così come le dispersioni. Infatti, i momenti angolari hanno una regola di commutazione pari a

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$$

Pertanto, in generale

$$\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle\hat{J}_z\rangle|$$

In questo caso esistono degli stati che annullano le dispersioni: applicando la relazione sopra ad uno stato per cui $\hat{J}^2 = 0$, si ottiene $\langle\hat{J}_z\rangle = 0$ e nella relazione di indeterminazione vale l'uguale. Il momento angolare orbitale è \hat{L} , il momento angolare di spin è \hat{S} e il momento angolare totale è $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$.

Applicazione della relazione di indeterminazione agli operatori posizione e momento.

Il commutatore degli operatori posizione e momento è

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Dunque, la relazione di indeterminazione diventa

$$\langle (\hat{\Delta}x)^2 \rangle \langle (\hat{\Delta}p)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \hbar^2 \implies \boxed{\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

cioè la relazione di indeterminazione di Heisenberg. Si ricorda che $\langle (\hat{\Delta}x)^2 \rangle \equiv (\Delta x)^2$.

Osservazione. Questi Δx e Δp non sono le quantità viste negli esperimenti di fisica ondulatoria. In un esperimento di singola fenditura, essi sono la precisione con cui si misura la posizione della particella e l'incertezza del suo momento misurato sullo schermo. Nella relazione sopra, le due quantità sono lo scarto quadratico medio. Si parte da uno stato $|\psi\rangle$ e si misura ripetutamente la posizione ed il momento con la massima accuratezza (anche infinita). Di tutte tali misure si fa la media e la dispersione: proprio questa dispersione risulta essere la quantità Δx . A queste misure poi si aggiungono le incertezze sperimentali. Questi due Δx e Δp dipendono dallo stato $|\psi\rangle$, ma non dal metodo di misura utilizzato. Tale metodo, a sua volta, introduce altre incertezze.

Relazione di indeterminazione tra energia e tempo. In meccanica quantistica, il tempo è un parametro: non esiste un operatore che restituisce il tempo. Non esiste una indeterminazione dell'istante (Δt) in cui si valuta la funzione d'onda. Tuttavia, si può dar senso alla relazione

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

Si consideri un'osservabile \hat{A} che non dipende esplicitamente dal tempo. Si ottiene la relazione

$$d_t \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle$$

Si consideri l'hamiltoniana \hat{H} che non dipende esplicitamente dal tempo, cioè il potenziale è stazionario. Siano

$$\langle (\hat{\Delta}A)^2 \rangle = (\Delta A)^2, \quad \langle (\hat{\Delta}H)^2 \rangle = (\Delta E)^2$$

La relazione di indeterminazione diventa

$$\Delta A \Delta E \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \right| = \frac{1}{2} \hbar \left| d_t \langle \hat{A} \rangle \right|$$

Quindi

$$\frac{\Delta A}{\left| d_t \langle \hat{A} \rangle \right|} \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \iff \Delta t_A \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

Bisogna interpretare

$$\Delta t_A \equiv \frac{\Delta A}{\left| d_t \langle \hat{A} \rangle \right|}$$

Il valore centrale della misura è $\langle \hat{A} \rangle$, mentre ΔA è la dispersione attorno il valore centrale. Pertanto, $d_t \langle \hat{A} \rangle$ è la velocità con cui il valore centrale cambia nel tempo. Dunque, Δt_A è il tempo necessario al valore centrale per muoversi di una quantità ΔA . In questo modo si ha un'idea del tempo necessario affinché la distribuzione statistica dei valori di \hat{A} si modifichi sensibilmente. Si ha un tempo caratteristico dell'osservabile \hat{A} . Si hanno dei tempi con cui \hat{A} evolve.

Un sistema è descritto da varie osservabili, ognuna con il proprio tempo caratteristico. Si consideri Δt come il più breve. Tale quantità è l'intervallo di tempo caratteristico dell'evoluzione del

sistema. Al di sotto di tale tempo non si ha un'osservabile che cambi sensibilmente al fine di poter trarre delle conclusioni.

Con questa interpretazione, si può scrivere

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

Si controlla che quanto sviluppato abbia senso. Per uno stato stazionario si ha

$$d_t \langle \hat{A} \rangle = 0 \implies \Delta t \rightarrow \infty$$

cioè, per uno stato stazionario, le caratteristiche di un sistema non cambiano (proprio perché stazionario). I tempi caratteristici del sistema sono infiniti. Inoltre si ha $\Delta E \rightarrow 0$.

9.5 Operatori unitari

Un operatore unitario è tale per cui

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

Si considerino due stati $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$. Siano

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

Il loro prodotto scalare è

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

Gli operatori unitari preservano il prodotto scalare. Qualunque operatore unitario si può scrivere come

$$\hat{U} = e^{i\alpha \hat{A}}, \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

dove \hat{A} è un operatore hermitiano. Infatti

$$\hat{U} = e^{i\alpha \hat{A}} = I + (i\alpha \hat{A}) + \frac{1}{2!}(i\alpha \hat{A})^2 + \frac{1}{3!}(i\alpha \hat{A})^3 + \dots$$

il cui aggiunto è

$$\hat{U}^\dagger = (e^{i\alpha \hat{A}})^\dagger = I + (-i\alpha \hat{A}^\dagger) + \frac{1}{2!}(-i\alpha \hat{A}^\dagger)^2 + \frac{1}{3!}(-i\alpha \hat{A}^\dagger)^3 + \dots = e^{-i\alpha \hat{A}^\dagger}$$

Si verifica l'unitarietà

$$\begin{aligned} \hat{U} \hat{U}^\dagger &= [I + (i\alpha \hat{A}) + \frac{1}{2}(i\alpha \hat{A})^2 + \dots][I + (-i\alpha \hat{A}^\dagger) + \frac{1}{2}(-i\alpha \hat{A}^\dagger)^2 + \dots] \\ &= I + i\alpha(\hat{A} - \hat{A}^\dagger) + \dots = I \end{aligned}$$

ricordando $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. Pertanto

$$\boxed{\hat{U}^\dagger = e^{-i\alpha \hat{A}} = \hat{U}^{-1}}$$

L'operatore \hat{A} è detto generatore.

9.5.1 Ruolo degli operatori unitari

Si esegua un esperimento. Si ripeta l'esperimento in luoghi diversi. Ci si aspetta che il risultato sia identico, ma la funzione d'onda non è la stessa nei due casi. Si supponga che lo stato iniziale sia $|\psi\rangle$. Si studia come cambi la funzione d'onda dopo una rotazione. Lo stato finale è

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

Allo stesso modo, si consideri un secondo esperimento per cui

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi'\rangle = \hat{U} |\varphi\rangle$$

Dopo la rotazione la fisica non cambia. Ci si aspetta che i prodotti scalari siano invariati a seguito della rotazione

$$\langle\psi'|\varphi'\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle$$

questo perché i prodotti scalari si interpretano come ampiezze di probabilità ed esse non possono cambiare se la fisica non cambia. Dunque

$$\langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle \implies \hat{U}^\dagger\hat{U} = I$$

cioè l'operatore di trasformazione (di traslazione o rotazione) è l'operatore unitario.

Teorema. di Wigner. In verità, è sufficiente conservare il modulo quadro del prodotto scalare, cioè la probabilità, e non l'ampiezza di probabilità. Dunque, la relazione da implementare è

$$|\langle\psi'|\varphi'\rangle| = |\langle\psi|\varphi\rangle|$$

Si hanno due casi

- $\langle\psi'|\varphi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle$
- $\langle\psi'|\varphi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|\psi\rangle$

Nel primo caso, l'operatore \hat{U} è unitario. Nel secondo caso, l'operatore \hat{U} è anti-unitario.

Definizione. Un operatore anti-unitario $\hat{\tilde{U}}$ è un operatore lineare tale per cui

- $\langle\hat{\tilde{U}}\varphi|\hat{\tilde{U}}\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle$
- $\hat{\tilde{U}}[|\psi\rangle + |\varphi\rangle] = \hat{\tilde{U}}|\psi\rangle + \hat{\tilde{U}}|\varphi\rangle$
- $\hat{\tilde{U}}(c|\psi\rangle) = c^*\hat{\tilde{U}}|\psi\rangle$ con $c \in \mathbb{C}$

La notazione di Dirac non è adatta agli operatori anti-unitari. L'operatore time reversal è anti-unitario. Le leggi della fisica sono simmetriche per trasformazioni CPT (charge, parity, time). Prendendone al massimo due (CP, CT, PT), non si ha più simmetria.

Lezione 18

9.6 Operatore di evoluzione temporale

Si osservi l'equazione di Schrödinger

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

Essa è del primo ordine nella derivata temporale: da una condizione iniziale $|\psi(t_0)\rangle$ si può ricavare $|\psi(t)\rangle$. Essa è anche lineare: combinazioni lineari di soluzioni sono ancora soluzioni. Si può ipotizzare l'esistenza di un operatore $\hat{U}(t, t_0)$ che fornisca la funzione d'onda all'istante t successivo a quello dato t_0 :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

mer 02 nov
2022 13:30

Proposizione. Alcune proprietà sono:

- Vale $\hat{U}(t_0, t_0) = I$;

- La relazione

$$i\hbar \partial_t [\hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle] = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

deve valere per qualunque stato iniziale $|\psi(t_0)\rangle$. Pertanto, essa è un'equazione agli operatori

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0)$$

- L'operatore preserva la norma:

$$1 = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi(t_0) \rangle$$

per ogni stato iniziale $|\psi(t_0)\rangle$. Pertanto

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = I$$

Da questa proprietà segue che \hat{U} è un operatore unitario.

Per ogni equazione integro-differenziale si può applicare il seguente metodo. Si può riscrivere l'equazione agli operatori come

$$d\hat{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) dt$$

Essa si può manipolare in varie forme:

- Si ponga $t = t_0 + dt$, segue

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) - \hat{U}(t_0, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_0) \hat{U}(t_0, t_0) dt$$

In quanto dt è già presente nel secondo membro, si possono ignorare nello sviluppo i termini dt negli argomenti di \hat{H} e \hat{U} . Ponendo $t_0 = t$ un tempo generico, si ha

$$\hat{U}(t + dt, t) = I - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) dt$$

Questa è l'equazione agli operatori scritta per un tempo infinitesimo.

- Si considerano intervalli finiti. Si integra l'equazione

$$\int_{t_0}^t d\hat{U}(t_1, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0) dt_1$$

dove t_0 è considerato come parametro. Dunque

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) - \hat{U}(t_0, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0) dt_1 \\ \hat{U}(t, t_0) &= I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0) dt_1 \end{aligned}$$

Si sostituisce l'equazione in se stessa:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &= I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t_1) \left[I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}(t_2) \hat{U}(t_2, t_0) dt_2 \right] dt_1 \\ &= I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t_1) dt_1 + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \hat{U}(t_2, t_0) dt_2 dt_1 \\ &= I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t_1) dt_1 + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) dt_2 dt_1 \\ &\quad + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^3 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \int_{t_0}^{t_2} \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \hat{H}(t_3) \hat{U}(t_3, t_0) dt_3 dt_2 dt_1 \end{aligned}$$

Dunque, la soluzione diventa

$$\hat{U}(t, t_0) = I + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n) dt_n \cdots dt_2 dt_1$$

Questa è la soluzione formale dell'equazione di Schrödinger. In teoria dei campi, tramite l'operatore (anche se in verità non è un operatore) time-ordering \mathcal{T} si può riscrivere l'espressione in modo compatto in un esponenziale.

Caso semplice. Si consideri l'hamiltoniana che non dipende dal tempo

$$\hat{H}(t) = \hat{H}$$

L'operatore evoluzione temporale diventa

$$\hat{U}(t, t_0) = I + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \hat{H}^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \cdots dt_2 dt_1$$

Gli integrali diventano

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt_1 &= t - t_0 \\ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} dt_2 dt_1 &= \int_{t_0}^t (t_1 - t_0) dt_1 = \frac{1}{2} (t - t_0)^2 \\ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \int_{t_0}^{t_2} dt_3 dt_2 dt_1 &= \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} (t_2 - t_0) dt_2 dt_1 = \frac{1}{3!} (t - t_0)^3 \\ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \cdots dt_2 dt_1 &= \frac{1}{n!} (t - t_0)^n \end{aligned}$$

Pertanto

$$\hat{U}(t, t_0) = I + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \hat{H}^n \frac{1}{n!} (t - t_0)^n = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0)}$$

Quest'equazione si può anche ottenere dall'equazione agli operatori ponendo $\hat{H}(t) = \hat{H}$. In questa espressione, l'hamiltoniana \hat{H} è il generatore delle traslazioni temporali.

Osservazione. Uno stato stazionario $|E, t_0\rangle$ con energia E al tempo t_0 evolve come

$$|E, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E (t - t_0)} |E, t_0\rangle$$

Dall'equazione del caso semplice precedente, si può ottenere

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

Questa scrittura vale sempre qualora l'hamiltoniana \hat{H} non dipenda dal tempo, mentre l'equazione precedente vale per uno stato stazionario. L'esponenziale risulta essere

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0)} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n (t - t_0)^n \frac{1}{n!} \hat{H}^n$$

L'hamiltoniana del secondo termine della somma applicata ad uno stato stazionario implica

$$\hat{H} |E, t_0\rangle = E |E, t_0\rangle \implies \hat{H}^n |E, t_0\rangle = E^n |E, t_0\rangle$$

Dunque, l'evoluto di un generico auto-stato dell'hamiltoniana è

$$|E, t\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n (t - t_0)^n \frac{1}{n!} E^n |E, t_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E (t - t_0)} |E, t_0\rangle$$

cioè la formula all'inizio dell'osservazione già trovata in precedenza separando la soluzione all'equazione di Schrödinger.

9.7 Descrizione di Schrödinger e di Heisenberg

In inglese: “Schrödinger and Heisenberg pictures”. La descrizione di Schrödinger è quella vista finora: gli operatori studiati, come la posizione, il momento, l’energia cinetica, etc, non dipendono dal tempo mentre lo stato $|\psi(t)\rangle$ ne dipende. Tale visione non è unica. Ciò che interessa è che i valori medi degli operatori siano gli stessi qualunque sia la descrizione della meccanica quantistica. Il prodotto scalare $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$ dev’essere invariante quando si cambia la descrizione. Nella descrizione di Schrödinger si applica un operatore di evoluzione

$$|\psi_s(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_s(t_0)\rangle$$

così si calcolano i valori medi degli operatori

$$\langle\hat{A}\rangle(t) = \langle\psi_s(t)|\hat{A}_s(t)|\psi_s(t)\rangle$$

La scrittura $\hat{A}_s(t)$ indica la dipendenza esplicita dell’operatore dal tempo (che finora non si è incontrata). Il valor medio diventa

$$\langle\hat{A}\rangle(t) = \langle\psi_s(t_0)|\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}_s(t)\hat{U}(t, t_0)|\psi_s(t_0)\rangle$$

Da questa scrittura si può intravedere come per calcolare il valor medio dell’operatore si possa calcolare il prodotto scalare tra due stati che non evolvono, ma far evolve l’operatore stesso. Nella descrizione di Heisenberg l’operatore si scrive come

$$\boxed{\hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}_s(t)\hat{U}(t, t_0)}$$

Si fanno evolvere gli operatori e si mantengono gli stati non evoluti. Si hanno due descrizioni della meccanica quantistica. Il valore di aspettazione si può calcolare come

$$\langle\hat{A}(t)\rangle = \begin{cases} \langle\hat{U}\psi(t_0)|\hat{A}_s|U\psi(t_0)\rangle, & \text{descrizione di Schrödinger} \\ \langle\psi(t_0)|\hat{U}^\dagger\hat{A}_s\hat{U}|\psi(t_0)\rangle, & \text{descrizione di Heisenberg} \end{cases}$$

I risultati sono gli stessi, ma le descrizioni differiscono.

Osservazione. Si nota:

- Se \hat{H}_s non dipende dal tempo allora l’operatore di evoluzione temporale è

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

e \hat{H}_s e \hat{U} commutano perché \hat{H}_s commuta con se stesso (in quanto \hat{U} è una serie in termini di \hat{H}). Per i sistemi conservativi, cioè questo caso, la descrizione di Heisenberg coincide con la descrizione di Schrödinger

$$\hat{H}_H(t) = \hat{U}^\dagger\hat{H}_s\hat{U} = \hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{H}_s = \hat{H}_s \equiv \hat{H}$$

- Se $\hat{A}_s(t)$ non dipende esplicitamente dal tempo e commuta con l’hamiltoniana \hat{H}_s (quindi l’hamiltoniana non dipende dal tempo) allora

$$\hat{A}_H(t) = \hat{A}_S \equiv \hat{A}$$

L’operatore nella descrizione di Heisenberg soddisfa

$$\begin{aligned} d_t\hat{A}_H(t) &= (d_t\hat{U}^\dagger)\hat{A}_S\hat{U} + \hat{U}^\dagger(\partial_t\hat{A}_S)\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{A}_S(d_t\hat{U}) \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{H}_s(t)\hat{A}_S\hat{U}(t, t_0) + \hat{U}^\dagger(t, t_0)(\partial_t\hat{A}_S(t))\hat{U}(t, t_0) \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}_S(t)\hat{H}_s(t)\hat{U}(t, t_0) \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\hat{H}_H(t)\hat{A}_H(t) + \frac{1}{i\hbar}\hat{A}_H(t)\hat{H}_H(t) + \hat{U}^\dagger(t, t_0)(\partial_t\hat{A}_S(t))\hat{U}(t, t_0) \end{aligned}$$

Nella seconda uguaglianza si è usata l'equazione agli operatori. Nella terza uguaglianza si sono inseriti $\hat{U}\hat{U}^\dagger$ tra l'hamiltoniana e l'operatore \hat{A}_S . L'equazione differenziale soddisfatta dagli operatori nella descrizione di Heisenberg è

$$i\hbar d_t \hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)] + i\hbar (\partial_t \hat{A}_S)_H$$

Essa è l'equazione del moto di Heisenberg con condizione iniziale

$$\hat{A}_H(t_0) = \hat{A}_S(t_0)$$

Osservazione. L'equazione del caso generale del teorema di Ehrenfest è simile a questa equazione, però riguarda i valori di aspettazione. In questo caso, tale equazione coinvolge gli operatori.

Esempio. Si consideri una particella di massa m in una dimensione con un potenziale stazionario $V = V(\hat{x}_S)$. L'hamiltoniana è

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

Nella descrizione di Heisenberg essa è

$$\hat{H}_H(t) = \hat{U}^\dagger \hat{H}_S \hat{U} = \frac{\hat{p}_H^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}_H)$$

dove si ha

$$\hat{U}^\dagger \hat{p}_S^2 \hat{U} = \hat{U}^\dagger \hat{p}_S \hat{p}_S \hat{U} = \hat{U}^\dagger \hat{p}_S \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{p}_S \hat{U} = \hat{p}_H^2$$

Similmente, il potenziale può essere espanso in serie di potenze e su ogni potenza agiscono \hat{U}^\dagger e \hat{U} avendo l'accortezza di aggiungere termini $\hat{U}\hat{U}^\dagger$ dove necessario

$$\hat{U}^\dagger V(\hat{x}_S) \hat{U} = \hat{U}^\dagger \left[\sum_n a_n \hat{x}_S^n \right] \hat{U}$$

Sapendo

$$\hat{x}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{x}_S \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{p}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{p}_S \hat{U}(t, t_0)$$

Il commutatore è

$$[\hat{x}_S, \hat{p}_S] = i\hbar = \hat{x}_S \hat{p}_S - \hat{p}_S \hat{x}_S$$

Nella descrizione di Heisenberg, esso diventa

$$\hat{U}^\dagger [\hat{x}_S, \hat{p}_S] \hat{U} = \hat{U}^\dagger i\hbar \hat{U} = \hat{U}^\dagger (\hat{x}_S \hat{p}_S - \hat{p}_S \hat{x}_S) \hat{U}$$

inserendo $\hat{U}\hat{U}^\dagger$ tra \hat{x}_S e \hat{p}_S si ottiene

$$i\hbar = \hat{U}^\dagger i\hbar \hat{U} = \hat{x}_H \hat{p}_H - \hat{p}_H \hat{x}_H = [\hat{x}_H, \hat{p}_H]$$

L'equazione del moto per l'operatore posizione è

$$i\hbar d_t \hat{x}_H(t) = \frac{1}{2m} 2i\hbar \hat{p}_H(t) = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_H(t)$$

per l'operatore momento si ottiene

$$i\hbar d_t \hat{p}_H(t) = -i\hbar d_{\hat{x}_H} V(\hat{x}_H)$$

Nella descrizione di Heisenberg, le equazioni del moto degli operatori posizione e momento sono

$$\begin{cases} d_t \hat{x}_H(t) = \frac{1}{m} \hat{p}_H(t) \\ d_t \hat{p}_H(t) = -\partial_{\hat{x}_H} V(\hat{x}_H) \end{cases}$$

Questa è la generalizzazione del teorema di Ehrenfest fatto sui valori medi: in questo caso si ha una identità tra operatori. Queste equazioni sono simili a quelle della meccanica classica, ma $x(t)$ e $p(t)$ della meccanica classica indicano una traiettoria che, in meccanica quantistica, non sono più presenti.

Descrizione intermedia di Dirac. Le descrizioni di Schrödinger e di Heisenberg sono i due estremi di descrizioni intermedie dette di Dirac. In esse, si divide l'hamiltoniana in due parti

$$H = H_1 + H_2$$

così come l'operatore di evoluzione

$$U = U_a U_b$$

Una parte dell'hamiltoniana evolve gli stati e l'altra evolve gli operatori.

Parte IV

Momento angolare, spin e particelle identiche

10 Momento angolare

10.1 Generatori del gruppo delle rotazioni

Si studiano le proprietà delle rotazioni. Una rotazione attorno all'asse z di un angolo φ risulta essere

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

La rotazione infinitesima di un angolo ε infinitesimo è

$$R_z(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2 + \dots & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2 + \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

La rotazione attorno all'asse x è

$$R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2 \end{pmatrix}$$

La rotazione attorno all'asse y è

$$R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2 \end{pmatrix}$$

Le rotazioni non commutano:

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\varepsilon^2) - I$$

Si vuole studiare come cambia la funzione d'onda quando si ruota un sistema. Tutti gli operatori calcolati prima e dopo devono essere gli stessi, così come i valori di aspettazione: ci si aspetta che una rotazione sia descritta da un operatore unitario così da mantenere i prodotti scalari. Le rotazioni R nello spazio tridimensionale corrispondono a tre operatori unitari di rotazione nello spazio di Hilbert

$$\hat{U}_x(\theta), \quad \hat{U}_y(\theta), \quad \hat{U}_z(\theta)$$

Si studiano le proprietà di tali operatori. Deve essere presente una corrispondenza tra le rotazioni R ed U .

Identità. La rotazione identità

$$RI = R$$

deve corrispondere a

$$\hat{U}(R)I = \hat{U}(R)$$

Chiusura. Due rotazioni arbitrarie

$$R_1 R_2 = R_3$$

costituiscono un'altra rotazione perché le rotazioni formano un gruppo. Similmente, si vuole

$$\hat{U}(R_1)\hat{U}(R_2) = \hat{U}(R_3)$$

Angolo infinitesimo. Una rotazione infinitesima lungo l'asse “ x ” risulta essere

$$\hat{U}_x(\varepsilon) = I - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_x$$

In quanto \hbar ha le dimensioni di un momento angolare, allora pure \hat{J}_x ha dimensioni di un momento angolare. Da questo risulta

$$\hat{U}_x(0) = I$$

Lezione 19

L'operatore \hat{J}_x è il generatore delle rotazioni attorno all'asse x . Esso è hermitiano. Si consideri una rotazione finita di un angolo θ attorno all'asse x . L'operatore che implementa la rotazione di un angolo finito è

$$\hat{U}_x(\theta) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\theta}{n} \hat{J}_x\right) \cdots \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\theta}{n} \hat{J}_x\right) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\theta}{n} \hat{J}_x\right) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\theta}{n} \hat{J}_x\right)^n$$

dove n indica le divisioni dell'angolo θ in angoli $\frac{\theta}{n}$. Nel limite $n \rightarrow \infty$ si ha

$$\hat{U}_x(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta \hat{J}_x}$$

In quanto \hat{U}_x è unitario, allora \hat{J}_x è hermitiano e, per questa scrittura, esso è il generatore delle rotazioni. Similmente, il momento è il generatore delle traslazioni spaziali. Il momento angolare ha componenti su tutti e tre gli assi cartesiani, pertanto si utilizza la scrittura \hat{J}_k . I generatori delle rotazioni su ogni asse definiscono il momento angolare, come in meccanica classica.

Affinché gli operatori \hat{U} comunichino con le rotazioni R , devono valere le proprietà precedentemente elencate per le rotazioni R . In particolare, deve valere la relazione di commutazione trovata:

$$\hat{U}_x(\varepsilon)\hat{U}_y(\varepsilon) - \hat{U}_y(\varepsilon)\hat{U}_x(\varepsilon) = \hat{U}_z(\varepsilon^2) - I$$

Espandendo in serie di Taylor si ottiene

$$\hat{U}_k(\varepsilon) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_k} = 1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_k - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \hat{J}_k^2 + o(\varepsilon^2)$$

Pertanto, la relazione di commutazione diventa

$$\begin{aligned} & \left[1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_x - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \hat{J}_x^2 + o(\varepsilon^2)\right] \left[1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_y - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \hat{J}_y^2 + o(\varepsilon^2)\right] \\ & - \left[1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_y - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \hat{J}_y^2 + o(\varepsilon^2)\right] \left[1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_x - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \hat{J}_x^2 + o(\varepsilon^2)\right] = 1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon^2 \hat{J}_z - I \end{aligned}$$

I termini in ε svaniscono e, considerando i termini al secondo ordine, rimane

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z$$

In generale, la relazione fondamentale di commutazione dei momenti angolari è

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkh} \hat{J}_h$$

dove ε_{ijk} è il simbolo di Levi-Civita. Talvolta, si scrive un vettore operatore $\hat{\vec{J}}$. Il modulo quadro del momento angolare è ancora un operatore

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

Proposizione. Vale

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_j] = 0 \iff [\hat{J}^2, \hat{\vec{J}}] = 0$$

Dimostrazione. Sia $j = x$. Segue

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2, \hat{J}_x] &= 0 + \hat{J}_y[\hat{J}_y, \hat{J}_x] + [\hat{J}_y, \hat{J}_x]\hat{J}_y + \hat{J}_z[\hat{J}_z, \hat{J}_x] + [\hat{J}_z, \hat{J}_x]\hat{J}_z \\ &= -i\hbar \hat{J}_y \hat{J}_z - i\hbar \hat{J}_z \hat{J}_y + i\hbar \hat{J}_z \hat{J}_y + i\hbar \hat{J}_y \hat{J}_z = 0 \end{aligned}$$

Verifica del generatore delle rotazioni per una particella senza spin. Si ruota un sistema attorno all'asse z di un angolo ε . Inizialmente, il sistema possiede una funzione d'onda $\psi(x, y, z)$. Si studia tale funzione d'onda dopo la rotazione ψ' . Il valore della funzione in un punto prima della rotazione corrisponde al valore della funzione d'onda nel punto ruotato corrispondente. Per ritornare alla posizione iniziale bisogna ruotare secondo

$$R_z(-\varepsilon) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon & 0 \\ -\varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + \varepsilon y \\ y - \varepsilon x \\ z \end{pmatrix}$$

Il valore della funzione d'onda in un punto di coordinate (x, y, z) dopo la rotazione è

$$\begin{aligned} \psi'(x, y, z) &\approx \psi(x + \varepsilon y, y - \varepsilon x, z) \approx \psi(x, y, z) + [\partial_x \psi(x, y, z)]\varepsilon y + [\partial_y \psi(x, y, z)](-\varepsilon x) \\ &= [1 - \varepsilon(x \partial_y - y \partial_x)] \psi(x, y, z) \end{aligned}$$

Ora si calcola la rotazione nel formalismo astratto sviluppato. L'operatore unitario di rotazione attorno all'asse z è

$$\hat{U}_z(\varepsilon) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J}_z}$$

In quanto non è presente lo spin, l'unico momento angolare presente è quello orbitale

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} = \vec{r} \times \vec{p}$$

In meccanica quantistica, la relazione corrispondente per il momento angolare orbitale nella rappresentazione delle coordinate è

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} = \hat{\vec{x}} \times (-i\hbar \vec{\nabla}) = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \end{vmatrix}$$

In questo caso, si ha

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z$$

in quanto si ha solamente il momento angolare orbitale. Infatti, nel momento angolare totale si considera il momento angolare orbitale ed il momento angolare di spin (cioè il momento angolare intrinseco). L'operatore unitario diventa

$$\hat{U}_z(\varepsilon) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{L}_z} = 1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{L}_z + o(\varepsilon) \approx 1 + \frac{i}{\hbar} \varepsilon i\hbar (x \partial_y - y \partial_x) = 1 - \varepsilon (x \partial_y - y \partial_x)$$

La funzione d'onda ruotata diventa

$$\psi'(x, y, z) = \hat{U}_z(\varepsilon)\psi(x, y, z) = [1 - \varepsilon(x\partial_y - y\partial_x)]\psi(x, y, z)$$

cioè esattamente quanto già trovato per una rotazione nello spazio \mathbb{R}^3 a patto di interpretare \hat{J} come momento angolare orbitale.

Introduzione al momento angolare orbitale in letteratura. Si vede come viene trattato il momento angolare in molti testi. Dalle relazioni classiche si può ricavare l'operatore del momento angolare orbitale

$$\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p} = \hat{x} \times (-i\hbar \vec{\nabla}) = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \end{vmatrix}$$

I tre operatori del momento angolare sugli assi sono

$$\hat{L}_h = \varepsilon_{jkh}\hat{x}_j\hat{p}_k, \quad [\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$$

Si studiano le regole di commutazione. Si ha

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] \\ &= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y = i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar\hat{L}_z \end{aligned}$$

Similmente per gli altri

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkh}\hat{L}_h$$

Essa è la stessa relazione trovata per il momento angolare in modo astratto. Da ciò seguono

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_j] = 0$$

Il momento angolare orbitale ha le stesse proprietà del momento angolare astratto. Si ritorna ad usare \hat{J} per indicare un momento angolare generico.

10.2 Autovalori ed autovettori del momento angolare

Tutta la teoria si trova nella relazione

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkh}\hat{J}_h$$

Inoltre, si è visto che

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_j] = 0$$

Si vuole trovare una base su cui diagonalizzare il momento angolare, ma non si possono prendere tutte e tre le componenti perché esse non commutano. Nella relazione precedente, si può scegliere una qualsiasi componente del momento angolare: per semplicità di calcoli in coordinate sferiche si sceglie \hat{J}_z perché una rotazione attorno all'asse z si può scrivere solamente in termini di φ . Tale componente commuta con \hat{J}^2 , dunque i due operatori presentano una base in comune. Si indica la base come $|j, m\rangle$. Vale

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad j(j+1) = \lambda \in \mathbb{R}$$

così come

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle, \quad m \in \mathbb{R}$$

Si scrive l'autovalore di \hat{J}^2 come

$$j(j+1) = \lambda$$

e si considera la soluzione $j \geq 0$. Questo perché

$$\langle \psi | \hat{J}^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{J}_x^2 | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{J}_y^2 | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{J}_z^2 | \psi \rangle = \left\| \hat{J}_x | \psi \rangle \right\|^2 + \left\| \hat{J}_y | \psi \rangle \right\|^2 + \left\| \hat{J}_z | \psi \rangle \right\|^2 \geq 0$$

La relazione vale per qualunque stato $|\psi\rangle$. In particolare, per uno stato della base $|\psi\rangle = |j, m\rangle$ si ha

$$\langle j, m | \hat{J}^2 | j, m \rangle = \hbar^2 \lambda \geq 0 \implies \lambda \geq 0$$

Definendo λ in termini di j come sopra e risolvendo l'equazione in termini di j , si mostra esistere un unico valore non negativo di j che identifica ogni valore di λ dato.

A questo punto bisogna manipolare le due restanti componenti del momento angolare, \hat{J}_x e \hat{J}_y . Dall'espressione di \hat{J}^2 si ha la somma dei quadrati delle componenti. Come per l'oscillatore armonico si sono costruiti gli operatori di creazione e di distruzione dalla somma $\hat{x}^2 + \hat{p}^2$, così qua si procede in maniera analoga. Si definiscono due operatori scaletta (ladder operators) non più hermitiani

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$$

Infatti, l'uno è l'aggiunto dell'altro. Le loro regole di commutazione sono

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] = [\hat{J}_z, \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_y \pm \hbar\hat{J}_x = \hbar\hat{J}_{\pm}$$

il cui aggiunto è

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_{\mp}] = -\hbar\hat{J}_{\mp}$$

Similmente

$$[\hat{J}_{\pm}, \hat{J}_{\mp}] = 2\hbar\hat{J}_z$$

Inoltre

$$\hat{J}_{+}\hat{J}_{-} = (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hbar\hat{J}_z = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z$$

pure

$$\hat{J}_{-}\hat{J}_{+} = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z$$

sommando queste due equazioni, si ottiene

$$\hat{J}^2 = \frac{1}{2}(\hat{J}_{+}\hat{J}_{-} + \hat{J}_{-}\hat{J}_{+}) + \hat{J}_z^2$$

Lemma. primo. Vale

$$\begin{aligned} 0 \leq \left\| \hat{J}_{+} |j, m\rangle \right\|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_{-}\hat{J}_{+} |j, m\rangle = \langle j, m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z) |j, m\rangle \\ &= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m] = \hbar^2 (j-m)(j+m+1) \end{aligned}$$

Similmente

$$\begin{aligned} 0 \leq \left\| \hat{J}_{-} |j, m\rangle \right\|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_{+}\hat{J}_{-} |j, m\rangle = \langle j, m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z) |j, m\rangle \\ &= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 + m] = \hbar^2 (j-m+1)(j+m) \end{aligned}$$

Da queste disequazioni

$$(j-m)(j+m+1) \geq 0, \quad (j-m+1)(j+m) \geq 0$$

si ha

$$-(j+1) \leq m \leq j, \quad -j \leq m \leq j+1 \implies \boxed{-j \leq m \leq j}$$

in quanto $j \geq 0$. Questa relazione pare ragionevole: il modulo di una componente, cioè \hat{J}_z , è minore o uguale del modulo del momento angolare totale \hat{J} .

Lemma. secondo. Si vede una proprietà dello stato $\hat{J}_- |j, m\rangle$. Esso è un auto-stato di \hat{J}^2 e \hat{J}_z con autovalori

$$\hbar^2 j(j+1), \quad \hbar(m-1)$$

Il momento angolare totale è lo stesso, ma il momento angolare sull'asse z è diminuito. Sia $m = -j$. Si studia lo stato $|j, -j\rangle$. Vale

$$\left\| \hat{J}_- |j, -j\rangle \right\|^2 = \hbar^2(j-m+1)(j+m)|_{m=-j} = 0$$

Questo implica che

$$\boxed{\hat{J}_- |j, -j\rangle = \vec{0}}$$

come visto per l'oscillatore armonico con l'operatore distruttore. Viceversa,

$$\hat{J}_- |j, m\rangle = 0 \implies m = -j$$

Dimostrazione. Si dimostra la proprietà dello stato $\hat{J}_- |j, m\rangle$. Infatti

$$\hat{J}^2(\hat{J}_- |j, m\rangle) = \hat{J}_- \hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar j(j+1)(\hat{J}_- |j, m\rangle)$$

Inoltre

$$\hat{J}_z(\hat{J}_- |j, m\rangle) = (\hat{J}_- \hat{J}_z - \hbar \hat{J}_-) |j, m\rangle = \hat{J}_- \hbar m |j, m\rangle - \hbar \hat{J}_- |j, m\rangle = \hbar(m-1)(\hat{J}_- |j, m\rangle)$$

Si dimostra il viceversa sopraccennato

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

L'unica soluzione compatibile con i valori permessi di m risulta essere $m = -j$.

Lemma. terzo. Si vede una proprietà dello stato $\hat{J}_+ |j, m\rangle$. Esso è un auto-stato di \hat{J}^2 e \hat{J}_z con autovalori

$$\hbar^2 j(j+1), \quad \hbar(m+1)$$

Il momento angolare totale è lo stesso, ma il momento angolare sull'asse z è aumentato. Sia $m = j$. Si studia lo stato $|j, j\rangle$. Vale

$$\left\| \hat{J}_+ |j, j\rangle \right\|^2 = 0 \implies \boxed{\hat{J}_+ |j, j\rangle = \vec{0}}$$

Viceversa,

$$\hat{J}_+ |j, m\rangle = 0 \implies m = j$$

Si ha un'analogia tra \hat{J}_\pm e gli operatori \hat{a} e \hat{a}^\dagger : essi cambiano il valore della proiezione del momento angolare sull'asse z .

Lezione 20

Spettro del momento angolare. Dai lemmi precedenti, vale

$$\hat{J}_- |j, m\rangle \propto |j, m-1\rangle, \quad \hat{J}_+ |j, m\rangle \propto |j, m+1\rangle$$

Come per l'oscillatore armonico, affinché si possa applicare \hat{J}_- ripetutamente a $|j, m\rangle$ arrivando al massimo a $|j, -j\rangle$ e non oltre, si rende necessario che $m+j = n_1 \in \mathbb{N}_0$. Allo stesso modo, per applicare ripetutamente \hat{J}_+ a $|j, m\rangle$ arrivando al massimo a $|j, j\rangle$ e non oltre, bisogna avere $j-m = n_2 \in \mathbb{N}_0$. Da queste due relazioni si ottiene

$$2j = n_1 + n_2 \equiv n \in \mathbb{N}_0$$

ven 04 nov
2022 08:30

Gli unici valori permessi del momento angolare sono

$$j = \frac{1}{2}n, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

Tale indice assume valori interi e semi-interi. A j fissato, il numero di possibili valori di m sono $2j + 1$:

$$m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$$

Sono presenti $2j + 1$ stati tra $|j, j\rangle$ e $|j, -j\rangle$ compresi. Si passa da uno stato all'altro applicando \hat{J}_\pm . I valori di momento angolare sono quantizzati.

Normalizzazione dell'azione degli operatori del momento angolare. Si trovano i coefficienti di proporzionalità tra uno stato ed il successivo. La base degli operatori del momento angolare è normalizzata

$$\langle j, m | j', m' \rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}$$

Dunque

$$\hat{J}_\pm |j, m\rangle = c_\pm |j, m \pm 1\rangle$$

Si trovano i coefficienti. La loro norma è

$$\hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)] = \langle j, m | \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm |j, m\rangle = |c_\pm|^2 \langle j, m \pm 1 | j, m \pm 1 \rangle = |c_\pm|^2$$

La prima uguaglianza sussiste per il primo lemma, la terza uguaglianza è l'applicazione della formula precedente. Pertanto

$$\hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle$$

Quindi, le altre due componenti del momento angolare sono

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \quad \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$$

Per valori semi-interi di j non si ha una rappresentazione sugli assi perché si considera un grado di libertà in più: lo spin.

Rappresentazione matriciale degli operatori del momento angolare. Dalla relazione

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

e da quelle precedenti si ottengono le rappresentazioni matriciali. La rappresentazione matriciale dell'operatore \hat{J}_z è data da

$$\langle j, m | \hat{J}_z |j', m'\rangle = m' \hbar \langle j, m | j', m'\rangle = \hbar m \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}$$

La rappresentazione matriciale degli operatori \hat{J}_\pm è data da

$$\langle j, m | \hat{J}_\pm |j', m'\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m'(m' \pm 1)} \delta_{j,j'} \delta_{m,m' \pm 1}$$

Si ricorda che i ket corrispondono alle colonne mentre i bra corrispondono alle righe. Si trovano dei valori particolari.

- Se $j = 0$, allora $m = 0$. Il ket corrispondente è $|0, 0\rangle$. Le matrici degli operatori sono nulle.

- Se $j = \frac{1}{2}$, allora $m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. I ket corrispondenti sono $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$. Le matrici di rappresentazione sono 2×2 . Infatti

$$(\hat{J}_z)^{(\frac{1}{2})} \doteq \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

I valori di m sono decrescenti andando verso destra e verso il basso (la seconda colonna corrisponde al ket $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$, la seconda riga corrisponde al bra $\langle\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}|$). La matrice è ortogonale e hermitiana. Inoltre

$$(\hat{J}_+)^{(\frac{1}{2})} \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Questa non è una matrice hermitiana: l'operatore non è auto-aggiunto. Similmente

$$(\hat{J}_-)^{(\frac{1}{2})} \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Pertanto, le componenti restanti del momento angolare sono

$$(\hat{J}_x)^{(\frac{1}{2})} \doteq \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\hat{J}_y)^{(\frac{1}{2})} \doteq \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Esse sono hermitiane, hanno autovalori reali, ma non sono diagonali in quanto non commutano con \hat{J}_z . Infine, il momento angolare totale è

$$(\hat{J}^2)^{(\frac{1}{2})} \doteq \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ricordando

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle$$

Le rappresentazioni dei vettori della base sono

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- Se $j = 1$, allora $m = -1, 0, 1$. Le matrici sono 3×3 in quanto i ket della base corrispondenti sono

$$|1, 1\rangle, \quad |1, 0\rangle, \quad |1, -1\rangle$$

Dunque

$$(\hat{J}_z)^{(1)} \doteq \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\hat{J}_x)^{(1)} \doteq \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

così pure

$$(\hat{J}_y)^{(1)} \doteq \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad (\hat{J}^2)^{(1)} \doteq 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

inoltre

$$(\hat{J}_+)^{(1)} \doteq \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\hat{J}_-)^{(1)} \doteq \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

Esercizio. Trovare autovalori ed autovettori delle matrici \hat{J}_x e \hat{J}_y per i valori $j = \frac{1}{2}$ e $j = 1$ ed esprimere gli autovettori in termini della base $|j, m\rangle$.

Indeterminazione del momento angolare sugli assi x e y . A differenza della meccanica classica, in meccanica quantistica non si può più proiettare il momento angolare sugli altri assi a causa dell'indeterminazione. Si nota che

$$\langle j, m | \hat{J}_x | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_y | j, m \rangle = 0$$

Si calcolano i valori quadratici medi

$$\begin{aligned} \langle j, m | \hat{J}_x^2 | j, m \rangle &= \frac{1}{4} \langle j, m | (\hat{J}_+^2 + \hat{J}_-^2 + \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) | j, m \rangle = \frac{1}{2} \langle j, m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2) | j, m \rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 [j(j+1) - m^2] = \langle j, m | \hat{J}_y^2 | j, m \rangle \end{aligned}$$

Si calcola la dispersione sui vettori della base è

$$\Delta J_x = \sqrt{\langle (\Delta J_x)^2 \rangle} = \sqrt{\langle \hat{J}_x^2 \rangle - \langle \hat{J}_x \rangle^2} = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} [j(j+1) - m^2]} = \Delta J_y$$

11 Momento angolare orbitale

Si passa dal momento angolare astratto \vec{J} al momento angolare orbitale

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \rightarrow \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times (-i\hbar \vec{\nabla})$$

Esso ha regole di commutazione identiche al momento angolare astratto

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkh} \hat{L}_h$$

Si calcolano gli operatori lungo i tre assi in termini delle coordinate sferiche

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta$$

con $r \geq 0$, $\theta \in [0, \pi]$ e $\varphi \in [0, 2\pi)$. L'elemento infinitesimo di volume è

$$dV = dx dy dz = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = r^2 dr d\Omega, \quad d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$$

Esercizio. Ricavare le componenti \hat{L}_k da $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times (-i\hbar \vec{\nabla})$ in coordinate sferiche. Si ha

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \theta = \arccos \frac{z}{r} = \arctan \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}, \quad \varphi = \arctan \frac{y}{x}$$

Si utilizzi la regola della catena

$$\partial_x f(r, \theta, \varphi) = \partial_x r \partial_r f + \partial_x \theta \partial_\theta f + \partial_x \varphi \partial_\varphi f$$

Soluzione. Le componenti sono date da

$$\hat{L}_j = i\hbar \varepsilon_{jkh} \hat{x}_k \partial_h = i\hbar \varepsilon_{jkh} \hat{x}_k J_{mh} \partial_m$$

La matrice jacobiana J corrispondente alla trasformazione dalle coordinate cartesiane alle coordinate sferiche è

$$\frac{\partial(r, \theta, \varphi)}{\partial(x, y, z)} = \begin{bmatrix} \frac{x}{r} & \frac{y}{r} & -\frac{z}{r^2} \\ \frac{xz}{r^2 \sqrt{x^2 + y^2}} & \frac{yz}{r^2 \sqrt{x^2 + y^2}} & 0 \\ -\frac{y}{x^2 + y^2} & \frac{x}{x^2 + y^2} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \varphi & \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \\ \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi & \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi & -\frac{1}{r} \sin \theta \\ -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} & \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} & 0 \end{bmatrix}$$

Essa si può calcolare in modo semplice invertendo la matrice jacobiana J^{-1} del cambio di coordinate opposto

$$\frac{\partial(x, y, z)}{\partial(r, \theta, \varphi)} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \varphi & r \cos \theta \cos \varphi & -r \sin \theta \sin \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi & r \cos \theta \sin \varphi & r \sin \theta \cos \varphi \\ \cos \theta & -r \sin \theta & 0 \end{bmatrix}$$

La prima componente del momento angolare risulta essere

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= i\hbar \varepsilon_{1hk} \hat{x}_k \partial_h = i\hbar (\hat{z} \partial_y - \hat{y} \partial_z) = i\hbar \varepsilon_{1hk} \hat{x}_k J_{mh} \partial_m \\ &= i\hbar [\hat{z}(\partial_y r \partial_r + \partial_y \theta \partial_\theta + \partial_y \varphi \partial_\varphi) - \hat{y}(\partial_z r \partial_r + \partial_z \theta \partial_\theta + \partial_z \varphi \partial_\varphi)] \\ &= i\hbar \left[r \cos \theta \sin \theta \sin \varphi \partial_r + \cos^2 \theta \sin \varphi \partial_\theta + \frac{\cos \varphi}{\tan \theta} \partial_\varphi - (r \cos \theta \sin \theta \sin \varphi \partial_r - \sin^2 \theta \sin \varphi \partial_\theta) \right] \\ &= i\hbar \left[\sin \varphi \partial_\theta + \frac{\cos \varphi}{\tan \theta} \partial_\varphi \right] \end{aligned}$$

Similmente per le altre componenti

$$\hat{L}_y = i\hbar (\hat{x} \partial_z - \hat{z} \partial_x) = i\hbar \left[-\cos \varphi \partial_\theta + \frac{\sin \varphi}{\tan \theta} \partial_\varphi \right], \quad \hat{L}_z = i\hbar (\hat{y} \partial_x - \hat{x} \partial_y) = -i\hbar \partial_\varphi$$

Si noti che non si può operare direttamente il cambio di coordinate tramite la jacobiana in quanto la trasformazione non è lineare, bensì bisogna integrare. Attraverso la jacobiana si possono solamente trovare le trasformazioni delle derivate.

Le componenti del momento angolare sono

$$\hat{L}_x = i\hbar \left[\sin \varphi \partial_\theta + \frac{\cos \varphi}{\tan \theta} \partial_\varphi \right], \quad \hat{L}_y = i\hbar \left[-\cos \varphi \partial_\theta + \frac{\sin \varphi}{\tan \theta} \partial_\varphi \right], \quad \hat{L}_z = -i\hbar \partial_\varphi$$

Inoltre, si ha

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\partial_\theta^2 + \frac{1}{\tan \theta} \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right]$$

Gli operatori alzatore ed abbassatore sono

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hbar e^{\pm i\varphi} \left[\pm \partial_\theta + i \frac{1}{\tan \theta} \partial_\varphi \right]$$

Si noti che non è presente il raggio. Le auto-funzioni $Y_l^m(\theta, \varphi)$ degli operatori \hat{L}_z e \hat{L}^2 devono contenere solamente gli angoli: esse sono le armoniche sferiche. Gli autovalori corrispondenti sono m ed l . Infatti

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad \hat{L}_z Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Osservazione. La funzione d'onda $\psi(x)$ vista all'inizio del corso rappresenta le coordinate del vettore $|\psi\rangle$ sulla base della posizione:

$$|\psi\rangle = \int |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx = \int |p\rangle \langle p|\psi\rangle dp, \quad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle, \quad \tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$$

Allo stesso modo

$$|\psi\rangle = \int r^2 \sin \theta |r\theta\varphi\rangle \langle r\theta\varphi|\psi\rangle d\theta d\varphi dr, \quad \psi(r, \theta, \varphi) = \langle r\theta\varphi|\psi\rangle$$

Dunque, le armoniche sferiche sono le coordinate dello stato astratto $|l, m\rangle$ sulla base $|\theta\varphi\rangle$

$$|l, m\rangle = \int \sin \theta |\theta\varphi\rangle \langle \theta\varphi|l, m\rangle d\theta d\varphi, \quad Y_l^m(\theta, \varphi) = \langle \theta\varphi|l, m\rangle$$

A questo punto, si risolve l'equazione per \hat{L}_z . Usando l'espressione in coordinate sferiche, segue

$$\hbar m Y_l^m(\theta, \varphi) = \hat{L}_z Y_l^m(\theta, \varphi) = -i\hbar \partial_\varphi Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Pertanto

$$\frac{dY_l^m}{Y_l^m} = im d\varphi \implies Y_l^m = c(\theta) e^{im\varphi} \implies Y_l^m(\theta, \varphi) = F_l^m(\theta) e^{im\varphi}$$

Un'armonica sferica dipende dall'angolo φ solamente come fase. Si impone la continuità ogni 2π :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi + 2\pi n), \quad n \in \mathbb{Z}$$

Dunque

$$e^{im\varphi} = e^{im(\varphi+2\pi n)} \implies 1 = e^{2i\pi n m} \implies nm \in \mathbb{Z} \implies m \in \mathbb{Z}$$

Per il momento angolare orbitale, il numero quantico

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

è intero e pertanto pure l è intero. Questo è diverso da quanto visto per il momento angolare astratto: non si hanno i valori semi-interi. Quindi

$$l \in \mathbb{N}_0, \quad m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

Da ciò si comprende come il momento angolare semi-intero non possa essere imputabile ad un momento angolare orbitale: la causa risiede nello spin.

Si risolve l'equazione per \hat{L}^2 . Si sostituisce quanto trovato in essa:

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + l(l+1) \right] F_l^m(\theta) = 0$$

Ponendo $x = \cos \theta$, si ottiene l'equazione generalizzata di Legendre. Non la si risolve, ma si prende un'altra strada. Noto

$$\hat{L}_+ |l, l\rangle = \vec{0}$$

Sostituendo l'espressione per \hat{L}_+ si ha

$$\hbar e^{i\varphi} \left(\partial_\theta + i \frac{1}{\tan \theta} \partial_\varphi \right) F_l^l(\theta) e^{il\varphi} = 0 \implies d_\theta F_l^l(\theta) - \frac{l}{\tan \theta} F_l^l(\theta) = 0$$

Per separazione, si ottiene

$$\frac{dF_l^l}{F_l^l} = \frac{l}{\tan \theta} d\theta \implies F_l^l \propto (\sin \theta)^l$$

Il coefficiente si ottiene dalla normalizzazione

$$\int Y_l^m(\theta, \varphi)^* Y_l^m(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

Pertanto

$$Y_l^l(\theta, \varphi) \propto (\sin \theta)^l e^{il\varphi}$$

Tramite l'applicazione di \hat{L}_- si ottengono le altre armoniche sferiche

$$Y_l^{l-1}, Y_l^{l-2}, \dots, Y_l^{-l}$$

Lezione 21

lun 07 nov
2022 13:30

11.1 Armoniche sferiche

Pertanto, l'armonica sferica generica è

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \propto (\hat{L}_-)^{l-m} (\sin \theta)^l e^{il\varphi}$$

La sua espressione è

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\varphi} (\sin \theta)^{-m} d_{\cos \theta}^{l-m} (\sin \theta)^{2l}, \quad m \geq 0$$

Per valori negativi di m si ha

$$Y_l^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \varphi)]^*$$

Si noti che esse sono normalizzate quando integrate su di una superficie:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_l^m(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

In quanto auto-stati di un operatore hermitiano, esse costituiscono una base dello spazio costituito dalla sfera unitaria

$$(\theta, \varphi), \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi$$

Pertanto, ogni funzione sulla sfera si può scrivere come

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm} Y_l^m(\theta, \varphi), \quad c_{lm} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_l^m(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$$

Ogni coefficiente c_{lm} descrive quali componenti di momento angolare sono presenti e con quale intensità.

Valori particolari. Si ha

- Onda “sharp”, $l = 0$:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

- Onde “principal”, $l = 1$:

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

- Onde “diffuse”, $l = 2$:

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}, \quad Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}, \quad Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

Il nome delle onde nasce dalla spettroscopia.

Parità. Uno cambio di parità è $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$. In coordinate sferiche esso è

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \pi + \varphi$$

Vale

$$Y_l^m(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Se l è pari, allora la parità è pari. Se l è dispari, allora la parità è dispari. Le armoniche sferiche sono funzioni con parità definita.

Armoniche sferiche ed i polinomi di Legendre. Alcune proprietà delle armoniche sferiche si comprendono risolvendo la loro equazione differenziale. I polinomi di Legendre sono

$$P_l(u) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} d_u^l (1-u^2)^l, \quad -1 \leq u \leq 1$$

La funzione associata di Legendre è

$$P_l^m(u) = \sqrt{(1-u^2)^m} d_u^m P_l(u), \quad -1 \leq u \leq 1$$

Dai polinomi e dalla funzione associata si ricavano le armoniche sferiche:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad m \geq 0$$

così come

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} P_l^{-m}(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad m < 0$$

Lezione 22

11.2 Legame tra momento angolare e momento lineare

mer 09 nov
2022 13:30

Il momento angolare orbitale quadro è

$$\hat{L}^2 = (\hat{x} \times \hat{p})^2 = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k \varepsilon^{ils} \hat{x}_l \hat{p}_s = (\delta_j^l \delta_k^s - \delta_j^s \delta_k^l) \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_l \hat{p}_s = \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_j \hat{p}_k - \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_k \hat{p}_j$$

si utilizza la convenzione di Einstein per gli indici ripetuti. Ricordando

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon^{ils} = \begin{vmatrix} \delta_j^l & \delta_j^s \\ \delta_k^l & \delta_k^s \end{vmatrix} = \delta_j^l \delta_k^s - \delta_j^s \delta_k^l$$

Quindi, utilizzando

$$[\hat{x}_a, \hat{p}_b] = i\hbar \delta_{ab}, \quad \hat{x}_a \hat{p}_b = \hat{p}_b \hat{x}_a + i\hbar \delta_{ab}$$

si ottiene

$$\hat{L}^2 = \hat{x}_j (\hat{x}_j \hat{p}_k - i\hbar \delta_{jk}) \hat{p}_k - \hat{x}_j \hat{p}_k (\hat{p}_j \hat{x}_k + i\hbar \delta_{jk}) = \hat{x}^2 \hat{p}^2 - i\hbar \hat{x} \cdot \hat{p} - (\hat{x} \cdot \hat{p})(\hat{p} \cdot \hat{x}) - i\hbar \hat{x} \cdot \hat{p}$$

Notando

$$\hat{p} \cdot \hat{x} = \hat{p}_k \hat{x}_k = \hat{x}_k \hat{p}_k - i\hbar \delta_k^k = \hat{x}_k \hat{p}_k - 3i\hbar$$

segue

$$\boxed{\hat{L}^2 = \hat{x}^2 \hat{p}^2 - (\hat{x} \cdot \hat{p})^2 + i\hbar \hat{x} \cdot \hat{p}}$$

Rappresentazione nella base delle coordinate. Il prodotto scalare nella rappresentazione della base delle coordinate è

$$\hat{x} \cdot \hat{p} = \hat{x}_j \hat{p}_j = -i\hbar \hat{x}_j \partial_{x_j}$$

Si utilizza il momento angolare quando è presente una simmetria sferica. Si passa alle coordinate sferiche

$$x_i \partial_{x_i} = x_i (\partial_{x_i} r) \partial_r = x_i \frac{x_i}{r} \partial_r$$

dove $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ e si ha $x_i \partial_{x_i} \theta = x_i \partial_{x_i} \varphi = 0$. Pertanto

$$\hat{x} \cdot \hat{p} = -i\hbar \sum_j \hat{x}_j \frac{\hat{x}_j}{r} \partial_r = -i\hbar r \partial_r$$

Dunque, il momento angolare diventa

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 &= r^2 \hat{p}^2 - (-i\hbar r \partial_r) (-i\hbar r \partial_r) + i\hbar (-i\hbar r \partial_r) = r^2 \hat{p}^2 + \hbar^2 [r \partial_r + r^2 \partial_r^2] + \hbar^2 r \partial_r \\ &= r^2 \hat{p}^2 + \hbar^2 [2r \partial_r + r^2 \partial_r^2] = r^2 \hat{p}^2 + \hbar^2 r \partial_r^2(r[\cdot])\end{aligned}$$

Pertanto

$$\hat{p}^2 = \frac{\hat{L}^2}{r^2} - \frac{\hbar^2}{r} \partial_r^2(r[\cdot])$$

Per chiarezza, il simbolo $[\cdot]$ indica che in quella posizione va posto lo stato su cui agisce l'operatore derivata. Questa relazione si può ricavare anche dal laplaciano: si cambiano le coordinate e si riconosce la parte in θ e φ come un termine in \hat{L}^2 ed il resto è la derivata nel raggio.

Rotatore. Un rotatore in tre dimensioni è un oggetto vincolato a muoversi sulla superficie di una sfera: il raggio non varia. Pertanto, nell'hamiltoniana si ha

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \rightarrow \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

Lezione 23

gio 10 nov
2022 13:30

12 Potenziale centrale e atomi idrogenoidi

12.1 Potenziale a simmetria sferica

Si studia l'equazione di Schrödinger in tre dimensioni con un potenziale centrale, a simmetria sferica. La simmetria implica

$$V(\vec{r}) = V(r), \quad \vec{r} = (r, \theta, \varphi)$$

Si ipotizza che l'hamiltoniana non dipenda dal tempo. L'equazione per gli stati stazionari è

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \right] \Phi(r, \theta, \varphi) = E \Phi(r, \theta, \varphi)$$

Si utilizza l'equazione del momento lineari in termini del momento angolare per scrivere

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \partial_r^2(r[\cdot]) + \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} \hat{L}^2 + V(r) \right] \Phi(r, \theta, \varphi) = E \Phi(r, \theta, \varphi)$$

Gli operatori \hat{L}^2 e \hat{L}_j dipendono solamente dagli angoli θ e φ . Inoltre

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = 0$$

A causa della dipendenza esclusiva del potenziale $V(r)$ dal raggio, si ha

$$[\hat{H}, \hat{L}_j] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

Tutti questi operatori presentano una base comune. Si diagonalizzano simultaneamente \hat{H} , \hat{L} e \hat{L}_z . Non si può aggiungere \hat{L}_x oppure \hat{L}_y perché essi non commutano con quelli già presenti. Dunque, le coordinate ξ di un vettore della base comune soddisfano

$$\hat{H}\xi(\vec{r}) = E\xi(\vec{r}), \quad \hat{L}^2\xi(\vec{r}) = \hbar^2 l(l+1)\xi(\vec{r}), \quad \hat{L}_z\xi(\vec{r}) = m\hbar\xi(\vec{r})$$

Si cerca la soluzione separando le variabili

$$\xi(\vec{r}) = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$$

In questo modo, essa è già soluzione delle equazioni per \hat{L}^2 e \hat{L}_z . La si inserisce nell'equazione dell'hamiltoniana:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \partial_r^2 (r[\cdot]) + \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} \hbar^2 l(l+1) + V(r) \right] R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = E R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \partial_r^2 (r[\cdot]) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r)$$

Il problema è diventato monodimensionale. Inoltre, deve valere la condizione

$$1 \equiv \int |\xi(\vec{r})|^2 d^3x = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |R(r)|^2 |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta d\varphi d\theta dr = \int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr$$

Ma questo non è propriamente un problema monodimensionale. Per renderlo tale si pone

$$u(r) \equiv rR(r)$$

da cui la condizione di normalizzazione è

$$\int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1$$

mentre l'equazione dell'hamiltoniana diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u(r) = E u(r), \quad u(r) \in L^2[0, \infty)$$

Osservazione. Si nota:

- Un problema a simmetria sferica, $V(r)$, implica la conservazione del modulo quadro e di una componente del momento angolare orbitale. Essi sono costanti del moto: come già visto, per operatori che commutano, una misura sugli stati della base comune fornisce sempre lo stesso valore. Ad una simmetria corrisponde una quantità conservata (teorema di Noether). Per questo motivo \hat{H} , \hat{L}^2 e \hat{L}_z commutano tra loro.
- Il problema tridimensionale è ridotto ad un problema monodimensionale. Tuttavia, si passa ad un potenziale efficace (effective potential):

$$V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$$

Il termine aggiunto è non negativo. Qualunque sia $V(r)$, il potenziale aggiunto tende ad allontanare la particella dall'origine. Per questo motivo, il potenziale è detto centrifugo o barriera centrifuga.

Esempio. Si consideri il potenziale $V(r)$ dell'atomo di idrogeno (Figura 9) cioè una buca finita di potenziale che sia sferica. Escluso $l = 0$, il potenziale aggiunto è un ramo di iperbole equilatera. Pertanto, bisogna considerare la somma tra i due (Figura 11.a). Una particella che si trova nella buca presenta una probabilità di oltrepassare la barriera a destra. Esistono stati legati ad energia positiva con probabilità di oltrepassare la barriera: si ha una disintegrazione. In questo modo si può descrivere una emissione alfa. Stati di questo tipo sono detti meta-stabili.

Esempio. Si consideri un potenziale

$$V(r) \propto -\frac{1}{r}$$

Bisogna utilizzare il potenziale efficace per risolvere il problema monodimensionale (Figura 11.b).

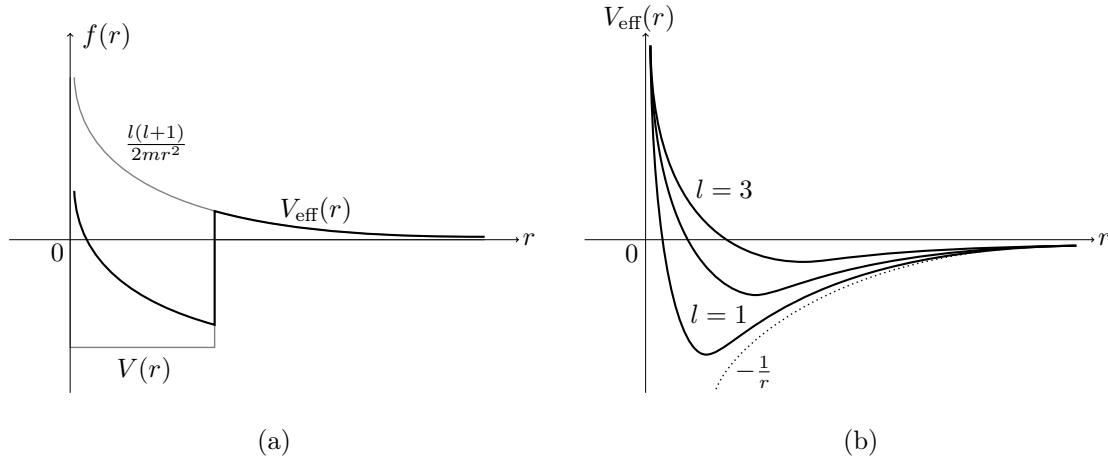


Figura 11: Potenziale efficace per due situazioni di $V(r)$: (a) schema dell'atomo di idrogeno, (b) potenziale Coulombiano.

Osservazione. La soluzione $R(r)$ deve essere finita per $r \rightarrow 0^+$. Quindi

$$u(r) = rR(r) \implies \lim_{r \rightarrow 0^+} u(r) = 0$$

Si può immaginare che per $r < 0$ sia presente una barriera infinita di potenziale: fisicamente, il raggio è non negativo. Così facendo, sussiste la condizione di continuità $u(0) = 0$.

Osservazione. La soluzione radiale $R(r)$ fornisce i livelli di energia E e dipende dal numero quantico orbitale l . Si è interessati agli stati legati: lo spettro è discreto in quanto sono presenti due punti di inversioni del moto. Pertanto, solamente alcuni livelli di energia sono possibili: essi sono indicizzati dal numero quantico principale n . Dunque, i livelli di energia $E_{n,l}$ sono funzioni sia di n che di l : da n perché sono stati legati e da l perché ricavati da $R(r)$. Inoltre, ci si aspetta che l'energia non dipenda dal numero quantico m (si osservi l'equazione riquadrata precedentemente).

Simmetria sferica per potenziale arbitrario. L'energia è indipendente dal numero quantico magnetico m . Dunque, ogni valore di energia è $2l+1$ volte degenerare: per ogni livello di energia, esistono $2l+1$ funzioni diverse con lo stesso valore di energia. Questa è la degenerazione essenziale (contrapposta alla degenerazione accidentale). Dunque

$$u_{n,l}(r) = rR_{n,l}(r)$$

Osservazione. La parte angolare, cioè le armoniche sferiche, non dipendono da n .

Riassunto. I numeri quantici n, l, m identificano univocamente una soluzione dell'equazione di Schrödinger. Quindi gli operatori \hat{H} , \hat{L}^2 e \hat{L}_z costituiscono un insieme completo di osservabili che commutano (CSCO).

Teorema. delle degenerazioni. Si consideri una hamiltoniana \hat{H} e due operatori con essa commutanti

$$[\hat{H}, \hat{A}] = [\hat{H}, \hat{B}] = 0, \quad [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$$

Per qualunque problema a simmetria sferica si ha questo caso. Allora lo spettro di \hat{H} è degenerare (diverse auto-funzioni hanno lo stesso autovalore).

Dimostrazione. La condizione necessaria e sufficiente affinché due operatori hermitiani commutano è che abbiano una base in comune. Per ipotesi, si ha

$$\begin{cases} \hat{A} |\varphi_a\rangle = a |\varphi_a\rangle \\ \hat{H} |\varphi_a\rangle = E_a |\varphi_a\rangle \end{cases}, \quad \begin{cases} \hat{B} |\psi_b\rangle = b |\psi_b\rangle \\ \hat{H} |\psi_b\rangle = E_b |\psi_b\rangle \end{cases}$$

Tuttavia $\{|\varphi_a\rangle\} \neq \{|\psi_b\rangle\}$ in quanto \hat{A} e \hat{B} non commutano. Si fa agire \hat{B}

$$\hat{B}\hat{H} |\varphi_a\rangle = E_a \hat{B} |\varphi_a\rangle \implies \hat{H}(\hat{B} |\varphi_a\rangle) = E_a(\hat{B} |\varphi_a\rangle)$$

Questo implica che $\hat{B} |\varphi_a\rangle$ è auto-stato dell'hamiltoniana con stessa energia di $|\varphi_a\rangle$. Ciò potrebbe essere possibile se $\hat{B} |\varphi_a\rangle \propto |\varphi_a\rangle$. Tuttavia, per ipotesi $|\varphi_a\rangle$ non è auto-stato di \hat{B} e quindi $\hat{B} |\varphi_a\rangle$ non è proporzionale a $|\varphi_a\rangle$. Pertanto, esso è un autovettore indipendente da $|\varphi_a\rangle$, ma con stesso autovalore.

In questo modo si possono trovare stati indipendenti a stessa energia.

Applicazione al caso sfero-simmetrico. Il caso sfero-simmetrico presenta

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{L}_j] = 0, \quad [\hat{L}_j, \hat{L}_k] \neq 0$$

Gli auto-stati del problema sono identificati da tre numeri $|nlm\rangle$. Nel discorso seguente, si sottintendono i numeri n ed l in quanto solamente m riguarda la degenerazione. Si mostra come l'energia non dipenda dal numero quantico magnetico. Sia E_m l'energia dello stato $|m\rangle$. Questo significa che

$$\hat{H} |m\rangle = E_m |m\rangle$$

Si applica \hat{L}_x

$$\hat{L}_x \hat{H} |m\rangle = E_m \hat{L}_x |m\rangle \implies \hat{H}(\hat{L}_x |m\rangle) = E_m(\hat{L}_x |m\rangle)$$

Sapendo che

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$$

si ottiene

$$\hat{L}_x |m\rangle = \frac{1}{2} \hbar [\alpha |m+1\rangle + \beta |m-1\rangle], \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}$$

Pertanto

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{L}_x |m\rangle) &= \frac{1}{2} \hbar [\alpha E_{m+1} |m+1\rangle + \beta E_{m-1} |m-1\rangle] \\ &= E_m(\hat{L}_x |m\rangle) = E_m \frac{1}{2} \hbar [\alpha |m+1\rangle + \beta |m-1\rangle] \end{aligned}$$

Facendo il prodotto scalare con $\langle m+1|$ si ottiene

$$E_{m+1} = E_m$$

Facendo il prodotto con $\langle m-1|$ si ottiene

$$E_{m-1} = E_m$$

Pertanto

$$E_m = E_{m+1} = E_{m-1}, \quad \forall m$$

Senza modificare l , si hanno $2l+1$ valori di energia uguali tra loro (si ricorda che m assume $2l+1$ valori diversi).

Osservazione. Questo risultato pare ragionevole: per un problema sfero-simmetrico, non c'è una direzione privilegiata in cui porre l'asse z . Per questo, l'energia non dipende dall'asse scelto.

12.2 Due particelle che interagiscono in un potenziale dipendente dalla distanza relativa

Meccanica classica. Si considerino due particelle soggette ad un potenziale che dipende dalla loro distanza relativa. La lagrangiana è

$$L(\vec{r}_1, \dot{\vec{r}}_1, \vec{r}_2, \dot{\vec{r}}_2) = \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^2 - V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

I momenti coniugati sono

$$\vec{p}_j \equiv \partial_{\dot{\vec{r}}_j} L = m_j \dot{\vec{r}}_j$$

La posizione del centro di massa e la posizione relativa sono

$$\vec{r}_{\text{CM}} = \frac{1}{M}(m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2), \quad M = m_1 + m_2, \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

La lagrangiana diventa

$$L(\vec{r}_{\text{CM}}, \dot{\vec{r}}_{\text{CM}}, \vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2}M\dot{\vec{r}}_{\text{CM}}^2 + \frac{1}{2}\mu\dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}), \quad \mu = \frac{m_1m_2}{M}$$

I momenti coniugati sono

$$\vec{p}_{\text{CM}} \equiv \partial_{\dot{\vec{r}}_{\text{CM}}} L = M\dot{\vec{r}}_{\text{CM}} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

così come

$$\vec{p} \equiv \partial_{\dot{\vec{r}}} L = \mu\dot{\vec{r}} = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2} \left(\frac{\vec{p}_1}{m_1} - \frac{\vec{p}_2}{m_2} \right) = \frac{1}{M} (m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2)$$

L'hamiltoniana è

$$H(\vec{r}_{\text{CM}}, \vec{p}_{\text{CM}}, \vec{r}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}_{\text{CM}}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r})$$

Si ha una particella libera di massa M ed una particella di massa ridotta μ sottoposta al potenziale $V(\vec{r})$.

Meccanica quantistica. Si promuovono le grandezze fisiche ad operatori

$$\hat{\vec{r}}_j = (\hat{x}_j, \hat{y}_j, \hat{z}_j), \quad \hat{\vec{p}}_j = (\hat{p}_{jx}, \hat{p}_{jy}, \hat{p}_{jz})$$

Tali operatori hanno la solita regola di commutazione. Per la stessa particella si ha

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$$

Per particelle diverse, tutti gli operatori commutano. Quindi

$$\hat{\vec{r}}_{\text{CM}} = \frac{1}{M}(m_1\hat{\vec{r}}_1 + m_2\hat{\vec{r}}_2), \quad \hat{\vec{r}} = \hat{\vec{r}}_1 - \hat{\vec{r}}_2$$

pure

$$\hat{\vec{p}}_{\text{CM}} = \hat{\vec{p}}_1 + \hat{\vec{p}}_2, \quad \hat{\vec{p}} = \frac{1}{M}(m_2\hat{\vec{p}}_1 - m_1\hat{\vec{p}}_2)$$

Esercizio. Si verifichi

$$[\hat{x}_{j,\text{CM}}, \hat{p}_{k,\text{CM}}] = i\hbar\delta_{jk} = [\hat{x}_j, \hat{p}_k]$$

Inoltre, si verifichi che i commutatori combinati sono nulli.

Dunque, ogni osservabile costruita da $\hat{\vec{r}}$ e $\hat{\vec{p}}$ commuta con $\hat{\vec{r}}_{\text{CM}}$ e $\hat{\vec{p}}_{\text{CM}}$. Quindi $\hat{\vec{r}}$ e $\hat{\vec{p}}$ sono le coordinate di una particella fittizia di massa μ , mentre $\hat{\vec{r}}_{\text{CM}}$ e $\hat{\vec{p}}_{\text{CM}}$ sono le coordinate di una particella fittizia di massa M .

Hamiltoniana. Dall'hamiltoniana delle particelle iniziali

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(\hat{r}_1 - \hat{r}_2)$$

si ha per sostituzione

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_{\text{CM}}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{r}) = \hat{H}_{\text{CM}} + \hat{H}_r, \quad [\hat{H}_{\text{CM}}, \hat{H}_r] = 0$$

Lezione 24

In quanto le due hamiltoniane commutano, si può trovare una loro base comune. Essa soddisfa

lun 14 nov
2022 13:30

$$\hat{H}_{\text{CM}} |\varphi\rangle = E_{\text{CM}} |\varphi\rangle, \quad \hat{H}_r |\varphi\rangle = E_r |\varphi\rangle, \quad \hat{H} |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle, \quad E = E_{\text{CM}} + E_r$$

Nella rappresentazione delle coordinate, si cerca la soluzione nella forma

$$\Phi(\vec{r}_{\text{CM}}, \vec{r}) = \varphi_{\text{CM}}(\vec{r}_{\text{CM}}) \varphi(\vec{r})$$

L'equazione da risolvere diventa

$$\begin{aligned} (\hat{H}_{\text{CM}} + \hat{H}_r) \varphi_{\text{CM}}(\vec{r}_{\text{CM}}) \varphi(\vec{r}) &= E \varphi_{\text{CM}}(\vec{r}_{\text{CM}}) \varphi(\vec{r}) \\ \varphi(\vec{r}) \hat{H}_{\text{CM}} \varphi_{\text{CM}}(\vec{r}_{\text{CM}}) + \varphi_{\text{CM}}(\vec{r}_{\text{CM}}) \hat{H}_r \varphi(\vec{r}) &= E \varphi_{\text{CM}} \varphi \\ \frac{1}{\varphi_{\text{CM}}} \hat{H}_{\text{CM}} \varphi_{\text{CM}}(\vec{r}_{\text{CM}}) + \frac{1}{\varphi} \hat{H}_r \varphi(\vec{r}) &= E \end{aligned}$$

alla terza riga si è diviso per $\varphi_{\text{CM}} \varphi$. Il primo addendo dipende solo da \vec{r}_{CM} , il secondo dipende solo da \vec{r} , mentre il secondo membro dell'equazione è una costante. Allora i due addendi devono essere essi stessi costanti. Pertanto

$$\hat{H}_{\text{CM}} \varphi_{\text{CM}}(\vec{r}_{\text{CM}}) = E_{\text{CM}} \varphi_{\text{CM}}(\vec{r}_{\text{CM}}), \quad \hat{H}_r \varphi(\vec{r}) = E_r \varphi(\vec{r})$$

Si consideri l'equazione per il centro di massa. Nella rappresentazione delle coordinate si ha

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\text{CM}}^2 \varphi_{\text{CM}} = E_{\text{CM}} \varphi_{\text{CM}}$$

Da questa equazione si nota che il centro di massa si muove come una particella libera. La soluzione è l'onda piana

$$\varphi_{\text{CM}}(\vec{r}_{\text{CM}}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}_{\text{CM}} \cdot \vec{r}_{\text{CM}}\right), \quad E_{\text{CM}} = \frac{p_{\text{CM}}^2}{2M} \geq 0$$

Dinamica interna. Interessa la dinamica interna del sistema. L'equazione di Schrödinger nella rappresentazione delle coordinate risulta essere

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \varphi + V(\vec{r}) \varphi = E_r \varphi$$

Il problema è stato ridotto alla discussione del problema tridimensionale di una particella fittizia con massa μ e posizione \vec{r} . D'ora in poi si omette il pedice r perché interessa solamente la dinamica interna.

Momento angolare. Se le particelle non presentano spin, allora l'unico momento angolare presente è quello orbitale. Pertanto, il momento angolare totale è

$$\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2, \quad \vec{L}_j = \vec{r}_j \times \vec{p}_j, \quad j = 1, 2$$

Esprimendo le grandezze in termini delle particelle fittizie per mezzo di un cambio di variabili si ottiene

$$\vec{J} = \vec{L}_{\text{CM}} + \vec{L}_r, \quad \vec{L}_{\text{CM}} = \vec{r}_{\text{CM}} \times \vec{p}_{\text{CM}}, \quad \vec{L}_r = \vec{r} \times \vec{p}$$

Gli operatori provenienti dalla promozione di questi vettori soddisfano la relazione di commutazione del momento angolare. Inoltre, vale

$$[\hat{L}_{\text{CM}}, \hat{L}_r] = 0$$

Per questo, le variabili non comunicano tra loro: ci si può concentrare solamente sulle coordinate interne.

Esercizio. Dimostrare le relazioni per il centro di massa di \vec{J} , \vec{L}_{CM} e \vec{L}_r , le relazioni di commutazione del momento angolare ed il commutatore precedente.

12.3 Atomi idrogenoidi – prima approssimazione

Gli atomi idrogenoidi sono atomi con un singolo elettrone. Si eseguono le approssimazioni:

- il nucleo atomico è puntiforme;
- si trascura lo spin;
- si trascurano gli effetti relativistici;
- l'interazione tra il nucleo e l'elettrone è unicamente coulombiana.

L'interazione è mediata dal potenziale

$$V(r) = -\frac{q^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{r}, \quad e^2 \equiv \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} = \hbar\alpha c$$

dove Z è il numero atomico. La seconda scrittura del potenziale è la medesima espressione utilizzata quando si lavora in unità gaussiane. In quanto $m_p \approx 1836m_e$ si ha una massa ridotta pari a

$$\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_p}} = m_e \left[1 - \frac{m_e}{m_p} + o\left(\frac{m_e}{m_p}\right) \right] \approx m_e$$

L'hamiltoniana risulta essere

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}$$

L'equazione di Schrödinger diventa

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \right] \varphi(r, \theta, \phi) = E \varphi(r, \theta, \phi)$$

In quanto il potenziale V è sfero-simmetrico, segue

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{L}_j, \hat{H}] = 0$$

Si sceglie l'insieme completo di osservabili che commutano composto da \hat{L}^2 , \hat{L}_z e \hat{H} . Per quanto visto in precedenza, la soluzione all'equazione di Schrödinger è

$$\varphi = \frac{1}{r} u(r) Y_l^m(\theta, \phi), \quad \int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1, \quad u(0) = 0$$

L'equazione diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u'' + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] u = Eu$$

dove il termine tra parentesi è il potenziale efficace.

Modello di Bohr. Si utilizza il modello di Bohr per eseguire dei ragionamenti dimensionali. L'energia è

$$E = \frac{1}{2}\mu v^2 - \frac{Ze^2}{r}$$

La forza è

$$F = \mu a \implies \mu \frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$$

Nel modello di Bohr, il moto è circolare uniforme. L'ipotesi di Bohr per spiegare lo spettro discreto è la quantizzazione del momento angolare

$$L = \mu v r = n\hbar, \quad n \in \mathbb{N}$$

Da queste formule si ottiene

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{\mu Z e}, \quad v_n = \frac{n\hbar}{\mu r} = Z \frac{e^2}{n\hbar}, \quad E_n = -\frac{1}{2} Z^2 \frac{\mu e^4}{n^2 \hbar^2}$$

Nell'equazione di Schrödinger compaiono le quantità e^2 , μ e \hbar . Da esse bisogna costruire una lunghezza, una energia ed una velocità. Per l'energia si ha

$$E = (e^2)^\alpha \mu^\beta \hbar^\gamma \implies \text{ML}^2\text{T}^{-2} = (\text{ML}^2\text{T}^{-2}\text{L})^\alpha \text{M}^\beta (\text{ML}^2\text{T}^{-2}\text{T})^\gamma$$

da cui si ottiene

$$E \propto \frac{\mu e^4}{\hbar^2}$$

Una lunghezza ed una velocità sono rappresentate da

$$r \propto \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \quad v \propto \frac{e^2}{\hbar}$$

Nel modello di Bohr, si definisce l'energia

$$E_0 \equiv \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \approx 13.6 \text{ eV} \implies E_n = -\frac{Z^2}{n^2} E_0$$

Similmente per la lunghezza, si definisce il raggio di Bohr

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \approx 0.52 \text{ Å} \implies r_n = \frac{n^2}{Z} a_0$$

Per la velocità si ha

$$v_0 \equiv \frac{e^2}{\hbar} \implies v_n = \frac{Z}{n} v_0$$

Osservazione. Le quantità fondamentali definite (quelle marcate da un pedice 0) indicano l'ordine di grandezza delle quantità fisiche di un atomo idrogenoide. Nel Modello Standard compare il problema della naturalezza: in alcuni casi, il valore teorico fondamentale di un parametro fisico (le costanti di accoppiamento o le masse) è molto diverso da quello misurato che è tipicamente più piccolo.

Equazione di Schrödinger. Si costruiscono delle quantità adimensionali:

$$\rho \equiv \frac{r}{a_0} Z, \quad \lambda \equiv \sqrt{-\frac{E}{E_0 Z^2}}$$

L'energia E è negativa perché si è interessati agli stati legati, allo spettro discreto. L'equazione di Schrödinger diventa

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda^2 \right] u(\rho) = 0, \quad u(0) = 0, \quad \rho \geq 0$$

Si studia il comportamento asintotico per $\rho \rightarrow \infty$. L'equazione diventa

$$(d_\rho^2 - \lambda^2)u \approx 0$$

Essa ha soluzioni $e^{\pm\lambda\rho}$. La soluzione $e^{\lambda\rho}$ diverge a $+\infty$: si cerca una soluzione $L^2[0, \infty)$. Si utilizza il cambio di variabili

$$u(\rho) = e^{-\lambda\rho}y(\rho)$$

In questo modo si isola la soluzione con il segno negativo, tuttavia bisogna fare attenzione di non ottenere

$$y \sim e^{2\lambda\rho}$$

ma si cerca un polinomio così che all'infinito domini l'esponenziale decrescente. L'equazione di Schrödinger diventa

$$y'' - 2\lambda y' + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] y = 0, \quad y(0) = 0$$

Si cerca la soluzione come serie di potenze

$$y(\rho) = \rho^s \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k, \quad c_0 \neq 0, \quad s > 0, \quad y(0) = 0$$

Il termine c_0 deve non nullo perché altrimenti si può fattorizzare ρ , passare da s a $s+1$ e ritornare all'espressione iniziale. Inoltre, la condizione su s è posta a seguito di $y(0) = 0$. Le derivate sono

$$y' = \sum_{k=0}^{\infty} (s+k) c_k \rho^{k+s-1}, \quad y'' = \sum_{k=0}^{\infty} (s+k)(k+s-1) c_k \rho^{k+s-2}$$

L'equazione differenziale diventa

$$\sum_{k=0}^{\infty} (s+k)(s+k-1) c_k \rho^{k+s-2} - 2\lambda \sum_{k=0}^{\infty} (s+k) c_k \rho^{k+s-1} + 2c_k \rho^{k+s-1} - l(l+1) c_k \rho^{k+s-2} = 0$$

Per $k=0$, il termine di potenza minore è ρ^{s-2} . Essa ha coefficiente

$$[s(s-1) - l(l+1)]c_0 = 0 \implies s(s-1) = l(l+1) \implies s = -l \vee \boxed{s = l+1}$$

La prima soluzione non è accettabile perché s dev'essere positivo. La sommatoria è nulla se ogni coefficiente è nullo. Si annulla il coefficiente del termine ρ^{k+s-1} per $k > 0$:

$$c_{k+1}(k+1)(k+1+2l+1) = 2c_k[\lambda(l+k+1) - 1]$$

Pertanto

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = \frac{2[\lambda(l+k+1) - 1]}{(k+1)(k+2+2l)}$$

A partire da c_0 , tutti i coefficienti sono noti. Nel limite $k \rightarrow \infty$ si ha

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} \sim \frac{2\lambda k}{k(k+1)} = \frac{2\lambda}{k+1} \implies c_k \sim \frac{(2\lambda)^k}{k!}, \quad k \rightarrow \infty$$

Dunque, all'infinito, la serie si comporta come

$$y(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k \sim \rho^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\lambda\rho)^k}{k!} = \rho^{l+1} e^{2\lambda\rho}$$

La serie sta costruendo un esponenziale che fa divergere la soluzione $u(\rho)$: per evitare che ciò avvenga, bisogna troncare la serie. Dopo un certo indice \bar{k} , tutti i coefficienti devono annullarsi:

$$c_{\bar{k}+1} = 0 \implies \lambda(l + \bar{k} + 1) - 1 = 0 \implies \lambda = \frac{1}{l + \bar{k} + 1} = \frac{1}{n}, \quad n \in \mathbb{N}$$

Si ricorda che $\bar{k} \in \mathbb{N}_0$, mentre $l \in \mathbb{N}_0$ è il momento angolare. Dunque

$$\lambda = \sqrt{-\frac{E}{E_0 Z^2}} = \frac{1}{n} \implies E_n = -\frac{E_0 Z^2}{n^2} = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n \in \mathbb{N}$$

Questi sono i livelli energetici dell'atomo idrogenoide. Si può riscrivere l'energia in un altro modo

$$E_n = -\frac{1}{2}\mu c^2 \left(\frac{e^2}{c\hbar}\right)^2 \frac{Z^2}{n^2}$$

dove si ha $\mu c^2 \sim 511 \text{ keV}$ cioè l'unità naturale dell'energia. La parentesi è la costante (in verità, non è costante perché non lo è la carica dell'elettrone) di accoppiamento elettromagnetico (la costante di struttura fine):

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{c\hbar} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 c\hbar} \approx \frac{1}{137}$$

A basse energie vale l'approssimazione: la carica dell'elettrone cambia in base all'energia a cui è sondata. Pertanto, si ottiene

$$E_n = -\frac{1}{2}\mu(\alpha c)^2 \frac{Z^2}{n^2}$$

Tanto più è alta la potenza di α e minore è la quantità in termini dell'unità naturale (in questo caso di energia μc^2).

Esercizio. Si esprimano le quantità fondamentali definite in precedenza in termini delle quantità μ , \hbar , α e c .

Soluzione. Dalla definizione della costante di struttura fine si ha

$$E_0 = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = \frac{1}{2}\mu(\alpha c)^2, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{\hbar}{\mu\alpha c}, \quad v_0 = \frac{e^2}{\hbar} = \alpha c$$

Il numero quantico n è detto principale. Si unisce quanto trovato. La soluzione all'equazione di Schrödinger diventa

$$u_{n,l}(\rho) = N e^{-\frac{\rho}{n}} \rho^{l+1} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

Dove $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ sono i polinomi associati di Laguerre. Essi sono polinomi di grado

$$\bar{k} = n - l - 1 \geq 0 \implies l \leq n - 1$$

Questa condizione è ragionevole: fissata l'energia, il momento angolare ha un massimo. Il momento angolare è limitato a parità di energia.

Polinomi associati di Laguerre. Essi sono definiti da

$$L_n^m(x) = \frac{n!}{(n-m)!} e^x d_x^n (e^{-x} x^{n-m})$$

Se $m = 0$, allora si ottengono i polinomi di Laguerre

$$L_n(x) = e^x d_x^n (e^{-x} x^n)$$

Se moltiplicati con $e^{-\frac{x}{2}}$, allora si può costruire una base di $L^2[0, \infty)$.

Nell'equazione di Schrödinger, la soluzione radiale è data da

$$R_{n,l}(r) = \frac{u_{n,l}(r)}{r}$$

Per i primi valori di n ed l si ha

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right] \\ R_{20}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) \exp \left[-\frac{Zr}{2a_0} \right] \\ R_{21}(r) &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_0} \exp \left[-\frac{Zr}{2a_0} \right] \end{aligned}$$

Si noti che le dimensioni (di lunghezza) sono portate da

$$\dim \left[\left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] = \mathbf{L}^{-\frac{3}{2}} = \dim \varphi$$

come ci si aspetta dalla normalizzazione

$$1 \equiv \int |\varphi|^2 d^3x \implies 1 = [\dim \varphi]^2 \mathbf{L}^3 \implies \dim \varphi = \mathbf{L}^{-\frac{3}{2}}$$

Lezione 25

Altri valori sono

mar 15 nov
2022 13:30

$$\begin{aligned} R_{30}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left[1 - 2\frac{Zr}{3a_0} + \frac{2}{3} \left(\frac{Zr}{3a_0} \right)^2 \right] \exp \left[-\frac{Zr}{3a_0} \right] \\ R_{31}(r) &= \frac{4\sqrt{2}}{9} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{Zr}{3a_0} \right] \frac{Zr}{a_0} \exp \left[-\frac{Zr}{3a_0} \right] \\ R_{32}(r) &= \frac{4}{3\sqrt{10}} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{Zr}{3a_0} \right]^2 \exp \left[-\frac{Zr}{3a_0} \right] \end{aligned}$$

Osservazione. Si noti che la componente radiale ha andamento

$$R_{nl}(r) \sim r^l, \quad r \rightarrow 0$$

Degenerazione dell'energia. I livelli energetici sono descritti da

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2}$$

Si ha una degenerazione (e simmetria) accidentale: lo stesso livello energetico n ha vari momenti angolari l . Se il potenziale va come

$$V \propto \frac{1}{r}$$

esiste un'altra quantità conservata. Classicamente, per orbite ellittiche, il semi-asse maggiore è costante cioè il vettore Lagrange-Runge-Lenz:

$$\vec{M} = \frac{1}{m} \vec{p} \times \vec{L} - \frac{\vec{r}}{r} e^2 Z, \quad d_t \vec{M} = 0$$

In meccanica classica, tale vettore è una costante del moto: per energie negative, l'orbita è chiusa e non precede. Promuovendolo ad operatore, esso commuta con l'hamiltoniana e quindi è una costante del moto pure in meccanica quantistica

$$[\hat{\vec{M}}, \hat{H}] = 0$$

In modo algebrico, si può ricavare lo spettro dell'energia considerando tale operatore senza dover risolvere equazioni differenziali (vedere Sakurai e $SO(4)$ Weinberg). Il vettore di Lagrange-Runge-Lenz permette di passare dalla simmetria di rotazione $SO(3)$ alla simmetria $SO(4)$ che, localmente, è data da $SO(3) \times SO(3)$. Si veda la teoria dei gruppi. Tuttavia, questo discorso vale solamente per potenziali proporzionali a $\frac{1}{r}$: appena si considerano effetti di spin e di spin-orbita si ottiene nuovamente la dipendenza dell'energia dal numero quantico orbitale l . I numeri quantici rispettano le relazioni

$$0 \leq l \leq n-1, \quad -l \leq m \leq l$$

Ad l fissato, sono presenti $2l+1$ valori di m , cioè $2l+1$ degenerazioni. Quindi il grado di degenerazione dell'energia è data da

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2$$

Ad esempio, per $n=3$ si ha $l=0, 1, 2$ corrispondenti agli orbitali $3s$, $3p$ e $3d$ con degenerazioni 1, 3 e 5 rispettivamente.

Nomenclatura. Il numero quantico principale n indica il livello energetico di shell. Il numero quantico orbitale l è il momento angolare e indica la subshell. Il numero quantico magnetico m indica la proiezione del momento angolare.

I valori di momento angolare presentano nomi diversi in base alla spettroscopia:

l	lettera	nome
0	s	sharp
1	p	principal
2	d	diffuse
3	f	fundamental
4	g	
5	h	

Da $l=4$ le lettere seguono l'ordine alfabetico.

Osservazione. I risultati finora trovati sono una prima approssimazione degli atomi idrogenoidi.

Osservazione. Una interpretazione ingenua dello spettro discreto è affermare che esso è causato dal salto energetico di un elettrone ad uno stato ad energia minore. Tuttavia, alcune transizioni non possono avvenire: il fotone emesso ha momento intrinseco non nullo. Si deve avere la conservazione dei numeri quantici.

Stati dell'atomo di idrogeno. Si consideri la rappresentazione $\langle r\theta\phi | nlm \rangle$. Sia $Z=1$. Allora, l'orbitale $1s$ è

$$\varphi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Per $2s$ si ha

$$\varphi_{200}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

Per $2p$ si ha

$$\varphi_{21\pm 1} = \mp \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{\pm i\phi}, \quad \varphi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta$$

Parte angolare. La parte angolare $|Y_l^m|^2$ è indipendente da ϕ : si può visualizzare come un solido di rotazione attorno a z . La prima armonica ha modulo costante $|Y_0^0| = \text{cost.}$ Per le altre si ha

$$|Y_1^0|^2 \propto \cos^2 \theta, \quad |Y_1^{\pm 1}|^2 \propto \sin^2 \theta$$

[immagine] Cohen cap. VII - C

Parte radiale. [immagine] La probabilità infinitesima di trovare l'elettrone in un punto dello spazio è

$$dP = |\psi|^2 d^3x$$

La probabilità infinitesima di trovarlo a raggio r è

$$dP = \int_{\Omega} |R_{nl}|^2 |Y_l^m|^2 r^2 d\Omega dr = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$$

All'origine la probabilità deve almeno partire come r^2 . La potenza più bassa corrisponde agli orbitali s (cioè $l = 0$). Solamente gli elettroni in tale subshell sono quelli che hanno maggiore probabilità di trovarsi vicino all'origine. Questi elettroni sono quelli che passano una quantità considerevole di tempo nel nucleo (quando si considerano le dimensioni finite del nucleo).

Grandi valori di momento angolare. Sia $l = n - 1$. Il grado \bar{k} del polinomio di Laguerre è nullo. Pertanto

$$R(\rho) = \frac{u(\rho)}{\rho} \propto \left(\frac{r}{a_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}}$$

da cui la densità di probabilità è proporzionale

$$|R|^2 r^2 \propto \left(\frac{r}{a_0}\right)^{2n} e^{-\frac{2r}{na_0}}$$

il cui massimo si trova a

$$r = n^2 a_0 \implies r = n^2 \frac{a_0}{Z}$$

cioè il raggio di Bohr corrispondente all'energia E_n . Si trova ancora il principio di corrispondenza: a grandi livelli di momento angolare, si ottiene la trattazione classica di Bohr.

Osservazione. Si osservi che, in natura, l'idrogeno si trova come molecola H_2 e non come atomo singolo.

Stima delle grandezze di un atomo idrogenoide. Si consideri lo stato fondamentale $|100\rangle$. Si ha

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \psi^*(r, \theta, \phi) r \psi(r, \theta, \phi) r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr$$

Nella rappresentazione delle coordinate, si ha

$$\psi_{100} = \langle r\theta\phi|100 \rangle = 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} Y_0^0(\theta, \phi)$$

Quindi

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \int_0^\infty 4 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 r^3 \exp\left[-\frac{2Zr}{a_0}\right] dr, \quad x \equiv \frac{2Zr}{a_0} \\ &= \frac{a_0}{4Z} \int_0^\infty x^3 e^{-x} dx = \frac{a_0}{4Z} \Gamma(4) = \frac{3}{2} \frac{a_0}{Z} \end{aligned}$$

Si stima il momento lineare di un elettrone di un atomo idrogenoide

$$\langle \hat{p} \rangle = \langle 100 | \hat{p} | 100 \rangle = \vec{0}$$

Nella rappresentazione delle coordinate, il momento è una derivata: la derivata di una funzione pari è una funzione dispari e viceversa. Dunque l'integrale è nullo. Questo vale perché le funzioni d'onda di un atomo idrogenoide hanno parità definita secondo $(-1)^l$.

Esercizio. Calcolare $\langle r^n \rangle$.

Esercizio. Calcolare $\langle p_x^2 \rangle$ nella rappresentazione delle coordinate. Per simmetria si ha

$$\langle p^2 \rangle = 3\langle p_x^2 \rangle$$

Si calcola $\langle \hat{p}^2 \rangle$ tramite la relazione del momento lineare ed il momento angolare

$$\hat{p}^2 = \frac{\hat{L}^2}{r^2} - \frac{\hbar^2}{r} \partial_r^2(r[\cdot])$$

Si nota

$$\hat{L}^2 |nlm\rangle = \hat{L}^2 |100\rangle = \vec{0}$$

Il valor quadratico medio del momento lineare risulta essere

$$\begin{aligned} \langle 100 | \hat{p}^2 | 100 \rangle &= -\hbar^2 \int_0^\infty 4 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \frac{1}{r} \partial_r^2 (r e^{-\frac{Zr}{a_0}}) r^2 dr \int_\Omega |Y_0^0|^2 d\Omega \\ &= \cancel{f(r)g(r)} \Big|_0^\infty + 4\hbar^2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \int_0^\infty \left[d_r (r e^{-\frac{Zr}{a_0}}) \right]^2 dr \\ &= 4\hbar^2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \int_0^\infty \left[1 - r \frac{Z}{a_0} \right]^2 e^{-\frac{2Zr}{a_0}} dr, \quad x \equiv \frac{2Zr}{a_0} \\ &= 4\hbar^2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \frac{a_0}{2Z} \int_0^\infty \left(1 - \frac{1}{2}x \right) e^{-x} dx = 4\hbar^2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \frac{a_0}{2Z} \frac{1}{2} \\ &= \left(\frac{Z\hbar}{a_0} \right)^2 = \left[\frac{Z}{\hbar} \mu e^2 \right]^2 = (\mu\alpha c)^2 Z^2 \end{aligned}$$

alla seconda riga si è integrato per parti. In questo modo si stima la velocità come

$$(\mu v)^2 \sim (\mu\alpha c)^2 Z^2 \implies \boxed{\frac{v}{c} \sim \alpha Z}$$

La velocità di un elettrone in un atomo idrogenoide è dell'ordine di un centesimo della velocità della luce.

Lezione 26

13 Momento angolare di spin

mer 16 nov
2022 13:30

Dalla chimica, ci si aspetta che gli elementi del primo gruppo della tavola periodica siano ben descritti dal modello degli atomi idrogenoidi. Tuttavia, gli spettri teorici non coincidono con le osservazioni. Ci si aspetta che lo spettro dipenda dai numeri quantici n ed l , ma non da m . Tuttavia, le osservazioni mostrano righe di emissione sdoppiate: tali righe appartengono a stati con $l \neq 0$. Pauli propose l'esistenza di un altro numero quantico che potesse assumere due valori per gli stati con $l \neq 0$. Il significato di ciò rimase ignoto. Nel 1925 i fisici Goudsmit e Uhlenbeck ipotizzarono la presenza di un momento angolare intrinseco (lo spin) le cui componenti lungo la direzioni del momento angolare \vec{L} possono assumere solamente due valori. L'elettrone,

essendo carico, ruotando su sé genera una corrente ed esso si può interpretare come un magnete con momento magnetico $\vec{\mu}$. Nel riferimento dell'elettrone, il protone si muove creando un campo magnetico (perché il protone è carico) proporzionale al momento angolare. L'elettrone risente di un potenziale

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Il momento magnetico è proporzionale allo spin. All'inizio questa idea venne rifiutata. Nel 1926 autori, tra cui Heisenberg, mostrarono che l'accoppiamento tra il momento magnetico ed il momento angolare orbitale (proporzionale al campo magnetico) può spiegare la struttura fine dell'atomo di idrogeno.

La trattazione del momento angolare \vec{J} come generatore delle rotazioni ha già fornito valori semi-interi, ma storicamente non si è seguita tale strada perché si è studiato solamente il momento magnetico orbitale \vec{L} che è intero. Ad oggi, l'elettrone ha momento angolare di spin pari a

$$s = \frac{1}{2}, \quad -s \leq m \leq s \implies m = \pm \frac{1}{2}$$

Dove $j = s$ in quanto si considera solo la presenza dello spin (e non quella del momento angolare orbitale). Tutte le particelle hanno spin, tranne il bosone di Higgs. L'elettrone, il protone ed il neutrone si comportano come calamite perché presentano momento magnetico. Lo spin è fondamentale nella decisione della statistica delle particelle. I fermioni sono le particelle con spin semi-intero. I bosoni sono le particelle con spin intero.

Osservazione. Si consideri una carica q in moto circolare uniforme con velocità v costante a distanza r . Il momento angolare è

$$L = mrv = mr\omega r = m\omega r^2, \quad \omega = \frac{2\pi}{\tau}, \quad \mu = AI = \pi r^2 \frac{q}{\tau} = \pi r^2 \frac{q}{2\pi} \omega = \frac{q}{2m} L$$

In meccanica classica, questo momento magnetico è un momento angolare orbitale. In meccanica quantistica, si ha

$$\vec{\mu} = g \frac{e}{2m} \vec{S}, \quad e < 0$$

dove g è il rapporto giromagnetico. La meccanica quantistica non permette di calcolare il suo valore. La teoria di Dirac, che unisce la meccanica quantistica e la relatività speciale, predice $g = 2$. Per ottenere il valore preciso bisogna utilizzare la teoria quantistica dei campi e l'elettrodinamica quantistica. Il valore sperimentale è

$$a_{\text{exper}} \equiv \frac{g-2}{2} = 0.001\,159\,652\,180\,73(28)$$

Il valore teorico è

$$a_{\text{theor}} = 0.001\,159\,652\,181\,643(764)$$

La prima correzione per l'elettrone è

$$a_e = \frac{\alpha}{2\pi} = 0.001\,161\,4$$

trovata da Schwinger nel 1948. Poi Feynman, Tomonaga e Schwinger hanno ricevuto il nobel nel 1964 per l'elettrodinamica quantistica.

La maggior parte dei problemi in teoria quantistica dei campi (QFT) si possono calcolare in espansione perturbativa della costante di struttura fine α :

$$a_e = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \alpha^n \implies g = 2 + \frac{\alpha}{\pi} + \dots$$

Per calcolare i coefficienti bisogna utilizzare i diagrammi di Feynman.

Esperimento di Stern e Gerlach (1922). Si consideri un forno in cui si scalda dell'argento. Tale forno ha un piccolo foro da cui possono fuoriuscire dei vapori di argento. Il fascio che esce viene collimato e passa attraverso due magneti con forma particolare che creano un gradiente di campo magnetico [immagine]

$$\partial_z B_z \neq 0$$

Si nota:

- gli atomi di argento sono neutri. Per questo, essi non sono soggetti alla forza di Lorentz.
- Gli atomi di argento presentano un momento magnetico \vec{M} . Nell'istante in cui entrano nel campo magnetico, si può associare loro una certa energia

$$E = -\vec{M} \cdot \vec{B}$$

Ad essa corrisponde una forza

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} E = \vec{\nabla} (\vec{M} \cdot \vec{B}) \implies F_z = M_z \partial_z B_z$$

Classicamente, ci si aspetta che la forza sia proporzionale alla proiezione del momento magnetico \vec{M} lungo z ottenendo una distribuzione gaussiana sullo schermo oltre i magneti. In verità, si osservano due sole zone disgiunte come se fossero presenti solamente due proiezioni del momento magnetico e nessun valore intermedio.

L'atomo d'argento ha 47 elettroni: i primi 46 costituiscono una shell sfero-simmetrica e ne rimane isolato soltanto uno. Il momento magnetico portato dall'atomo d'argento è quello dovuto ad un solo elettrone. Questo esperimento non può essere fatto con un fascio di elettroni in quanto essi sono carichi: la forza di Lorentz sovrasta l'effetto del momento magnetico.

I magneti al neodimio, al samario e quelli costituiti dalle terre rare sono i più forti perché presentano sette elettroni spaiati e tutti allineati.

L'esperimento di Stern e Gerlach permette di separare le componenti del momento magnetico di un sistema in $S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$. Questo consente di ottenere particelle con un spin definito. Applicando l'apparato di Stern e Gerlach lungo diversi assi si possono misurare le probabilità dei diversi stati. Ad esempio, si applica prima l'apparato il cui gradiente è orientato lungo z ed un fascio lo si fa passare dentro l'apparato orientato lungo l'asse x : si hanno due fasci con probabilità date dall'espansione dello stato allineato con z sugli auto-stati di S_x . In questo modo si convertono i problemi astratti in situazioni reali.

Alcuni libri (Feynman e Sakurai) illustrano la meccanica quantistica partendo da Stern e Gerlach.

13.1 Studio dello spin

Quando il momento angolare totale \vec{J} è semi-intero non si hanno gradi di libertà spaziali, geometrici, ma è elemento del proprio spazio di Hilbert. Si studia lo spin e si verifica che i risultati teorici siano compatibili con l'esperimento di Stern e Gerlach. Si tratta essenzialmente lo spin $J = \frac{1}{2} \hbar$. Gli stati della base sono

$$|j, m\rangle = |s, m_s\rangle = \left| \frac{1}{2}, m \right\rangle, \quad m = \pm \frac{1}{2}$$

Se non c'è pericolo di confusione perché si ha sempre $s = \frac{1}{2}$, allora si può scrivere

$$|s, m\rangle = |m\rangle = \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle = |\pm\rangle = |\updownarrow\rangle$$

Gli stati della base soddisfano

$$\hat{S}_z |\pm\rangle = \pm \frac{1}{2} \hbar |\pm\rangle$$

La completezza si può scrivere come

$$I = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| = |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|$$

Uno stato si scrive come

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

La base degli operatori \hat{S}^2 e \hat{S}_z è $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. In tale base si ha

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Gli operatori di momento angolare di spin sono rappresentati da

$$\hat{S}_z \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_x \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Matrici di Pauli. Risulta conveniente utilizzare le matrici di Pauli

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Esse sono hermitiane con autovalori ± 1 . L'operatore vettore spin si scrive come

$$\hat{\vec{S}} \doteq \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

Proposizione. Si vedono alcune proprietà. Vale

- Esse sono involutorie ed hermitiane

$$\sigma_j^2 = I, \quad \sigma_j^\dagger = \sigma_j$$

- Il commutatore è

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\varepsilon_{jkh}\sigma_h$$

- L'anti-commutatore è

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\delta_{jk}$$

- Il determinante e la traccia sono

$$\det \sigma_j = -1, \quad \text{Tr} \sigma_j = 0$$

- Dalle relazioni di commutazione e anti-commutazione si ha

$$\sigma_j \sigma_k = i\varepsilon_{jkh}\sigma_h + \delta_{jk}I$$

Proposizione. Si consideri il vettore \vec{A} (oppure operatore). Si ha

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{A} = \begin{pmatrix} A_3 & A_1 - iA_2 \\ A_1 + iA_2 & -A_3 \end{pmatrix}$$

Se \vec{A} e \vec{B} sono vettori (oppure operatori che commutano con σ_j), allora vale

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = (\vec{A} \cdot \vec{B})I + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B})$$

Dimostrazione. Infatti

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) &= \sum_{jk} \sigma_j A_j \sigma_k B_k = \sum_{jk} A_j B_k \left[\frac{1}{2} \{\sigma_j, \sigma_k\} + \frac{1}{2} [\sigma_j, \sigma_k] \right] \\ &= \sum_{jk} A_j B_k [\delta_{jk} + i \varepsilon_{jkh} \sigma_h] = (\vec{A} \cdot \vec{B}) I + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \end{aligned}$$

Proposizione. Sia \vec{n} un versore e $\varphi \in \mathbb{R}$. Dalla proposizione precedente, si ha

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{n})^k = \begin{cases} I, & k \text{ pari} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{n}, & k \text{ dispari} \end{cases}$$

Infatti, per $k = 0$ risulta banale ottenere I . Per $k = 2$ segue

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{n})^2 = (\vec{\sigma} \cdot \vec{n})(\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) = (\vec{n} \cdot \vec{n}) I + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{n} \times \vec{n}) = I + 0 = I$$

Da questo, tutte le potenze pari sono l'identità. Sia $k = 1$, segue

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{n})^1 = \vec{\sigma} \cdot \vec{n}$$

Tutte le potenze dispari si possono vedere come una potenza pari (quindi l'identità) moltiplicata per $\vec{\sigma} \cdot \vec{n}$.

Da ciò segue

$$\begin{aligned} \boxed{\exp[i \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \varphi]} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \varphi)^k}{k!} = I + (i \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \varphi) + \frac{1}{2!} (i \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \varphi)^2 + \frac{1}{3!} (i \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \varphi)^3 + \dots \\ &= I - \frac{\varphi^2}{2!} (\vec{\sigma} \cdot \vec{n})^2 + \frac{\varphi^4}{4!} (\vec{\sigma} \cdot \vec{n})^4 + \dots + i \left[(\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \varphi - \frac{\varphi^3}{3!} (\vec{\sigma} \cdot \vec{n})^3 + \dots \right] \\ &= \boxed{I \cos \varphi + i (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \sin \varphi} \end{aligned}$$

Si noti che riorganizzare in questo modo una serie è possibile solamente se la serie converge assolutamente (per il Riemann series theorem, in italiano “teorema di Riemann-Dini”). In rappresentazione matriciale si ha

$$\exp[i \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \varphi] = \begin{bmatrix} \cos \varphi + i n_z \sin \varphi & (i n_x + n_y) \sin \varphi \\ (i n_x - n_y) \sin \varphi & \cos \varphi - i n_z \sin \varphi \end{bmatrix}$$

Questa relazione è utile per una particella carica in un campo magnetico. La sua hamiltoniana è

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$$

L'operatore di evoluzione temporale è

$$\hat{U} = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right] = \exp \left[i \frac{\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}}{\hbar} t \right] \doteq \exp[i (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \varphi]$$

Esempio. Si vede l'esempio di un problema generico. Si supponga di orientare un esperimento di Stern e Gerlach cosicché il gradiente del campo magnetico sia parallelo al versore \vec{n} . Si vogliono trovare gli autovalori ed autovettori associati ai due fasci uscenti dall'apparato. Questo significa misurare la componente dello spin lungo \vec{n} :

$$\hat{S}_{\vec{n}} = \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{n}}, \quad \vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$$

Dunque, la rappresentazione matriciale sulla base $\{|\pm\rangle_z\}$ è

$$\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{n}} \doteq \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

Si cercano gli autovalori. Si ha

$$\hat{S}_{\vec{n}} |\chi\rangle = \frac{\hbar}{2} \lambda |\chi\rangle, \quad |\chi\rangle = \alpha |+\rangle_z + \beta |-\rangle_z \doteq \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

In forma matriciale segue

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

da cui si ottiene

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{n} - \lambda I) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta - \lambda & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0$$

Affinché il sistema non abbia soluzione banale, si impone

$$\det(\vec{\sigma} \cdot \vec{n} - \lambda I) = 0 \implies \lambda^2 - \cos^2 \theta - \sin^2 \theta = 0 \implies \lambda = \pm 1$$

Quindi gli autovalori di $\hat{S}_{\vec{n}}$ sono

$$\lambda' = \frac{\hbar}{2} \lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Si trovano gli autovettori. Sia $\lambda = 1$. Si ha

$$(\cos \theta - 1)\alpha + \sin \theta e^{-i\varphi} \beta = 0$$

Si può utilizzare l'ansatz

$$\alpha = \sin \gamma, \quad \beta = e^{i\delta} \cos \gamma$$

per incorporare la normalizzazione. Ma in questo caso, si utilizzano le relazioni di dimezzamento e duplicazione

$$\sin \frac{x}{2} = \sqrt{\frac{1 - \cos x}{2}}, \quad \sin x = 2 \sin \frac{x}{2} \cos \frac{x}{2}$$

ottenendo

$$-2 \sin^2 \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \alpha + 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \beta = 0 \implies \alpha = e^{-i\frac{\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2}, \quad \beta = e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2}$$

Si noti che essa non è l'unica soluzione: si può distribuire la fase in modo arbitrario. Pertanto

$$|+\rangle_{\vec{n}} = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle_z + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle_z$$

Sia $\lambda = -1$. Si ha

$$(\cos \theta + 1)\alpha + \sin \theta e^{-i\varphi} \beta = 0 \implies 2 \cos^2 \frac{\theta}{2} \alpha + 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \beta = 0$$

utilizzando

$$\cos \frac{x}{2} = \sqrt{\frac{1 + \cos x}{2}}$$

Quindi si ottiene

$$\alpha = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}}, \quad \beta = \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}}$$

Pertanto

$$|-\rangle_{\vec{n}} = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle_z + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle_z$$

Lezione 27

gio 17 nov
2022 13:30

Gli auto-stati dello spin sull'asse x sono

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z \pm |-\rangle_z), \quad \theta = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi = 0$$

mentre sull'asse y sono

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z \pm i |-\rangle_z), \quad \theta = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi = \frac{\pi}{2}$$

Un qubit di un computer quantistico è una sovrapposizione degli stati $|\pm\rangle$.

Esempio. Si consideri un sistema nello stato

$$|\psi\rangle = |+\rangle_z$$

Si misura lo spin $\hat{S} \cdot \vec{n}$ lungo un generico asse \vec{n} . Si studiano i valori che si possono trovare e con quali probabilità. Lo spin misurato fornisce gli autovalori $\pm \frac{\hbar}{2}$ lungo \vec{n} . Si espande lo stato $|+\rangle_z$ sugli stati $|\pm\rangle_{\vec{n}}$ da cui si ricavano le probabilità

$$P(+)=P\left(\hat{S} \cdot \vec{n}=\frac{\hbar}{2}\right)=|\vec{n}\langle +|+\rangle_z|^2=\cos^2 \frac{\theta}{2}$$

$$P(-)=P\left(\hat{S} \cdot \vec{n}=-\frac{\hbar}{2}\right)=|\vec{n}\langle -|+\rangle_z|^2=\sin^2 \frac{\theta}{2}$$

Si calcola il valor medio. Un primo modo è pesare le probabilità sugli autovalori

$$\langle \hat{S} \cdot \vec{n} \rangle = \frac{\hbar}{2} P(+)-\frac{\hbar}{2} P(-)=\frac{\hbar}{2}\left[\cos ^2 \frac{\theta}{2}-\sin ^2 \frac{\theta}{2}\right]=\frac{\hbar}{2} \cos \theta$$

Un secondo modo è utilizzare la rappresentazione matriciale

$$_z\langle +|\hat{S} \cdot \vec{n}|+\rangle_z \doteq (1 \quad 0)\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i \varphi} \\ \sin \theta e^{i \varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}(1 \quad 0)\begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta e^{i \varphi} \end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2} \cos \theta$$

Preparazione di un sistema in un particolare stato. Si vuole porre un sistema in uno stato particolare

$$|\psi\rangle=\alpha|+\rangle_z+\beta|-\rangle_z, \quad|\alpha|^2+|\beta|^2=1$$

Si utilizza l'ansatz

$$\alpha=\cos \frac{\theta}{2} e^{i \gamma}, \quad \beta=\sin \frac{\theta}{2} e^{i \delta}$$

per soddisfare automaticamente la condizione di normalizzazione. Lo stato diventa

$$|\psi\rangle=e^{i \gamma} \cos \frac{\theta}{2}|+\rangle_z+e^{i \delta} \sin \frac{\theta}{2}|-\rangle_z=e^{i \frac{\gamma}{2}} e^{i \frac{\delta}{2}}\left[\cos \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\gamma}{2}-i \frac{\delta}{2}}|+\rangle_z+\sin \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\gamma}{2}+i \frac{\delta}{2}}|-\rangle_z\right]$$

$$=e^{i \frac{\gamma+\delta}{2}}\left[\cos \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\varphi}{2}}|+\rangle_z+\sin \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\varphi}{2}}|-\rangle_z\right], \quad \varphi \equiv \delta-\gamma$$

Il termine tra parentesi risulta essere $|+\rangle_{\vec{n}}$. Pertanto, per costruire lo stato $|\psi\rangle$ bisogna orientare l'esperimento di Stern e Gerlach lungo la direzione \vec{n} definita dagli angoli θ e φ . Si noti che la fase globale si può ignorare per i fini fisici.

Osservazione. Gli stati di spin sono analoghi alla polarizzazione della luce vista in meccanica ondulatoria.

Spinore. Lo spin è un grado di libertà ulteriore: bisogna estendere l'equazione di Schrödinger. Si introduce lo spinore a due componenti. La funzione d'onda $\psi(\vec{x}, t)$ diventa

$$\psi_\alpha(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}, t) \\ \psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix}, \quad |\psi_\alpha\rangle = \psi_+ |+\rangle_z + \psi_- |-\rangle_z$$

Per ogni punto dello spazio bisogna fornire una ampiezza di probabilità riguardante lo spin. Deve valere

$$\int |\psi_+|^2 + |\psi_-|^2 d^3x = 1$$

L'equazione di Schrödinger con lo spinore diviene l'equazione di Pauli

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \hat{H} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$$

L'hamiltoniana è una matrice 2×2 per spin $\frac{1}{2}$.

13.2 Evoluzione di un elettrone localizzato in un campo magnetico uniforme

Si consideri una particella di spin $\frac{1}{2}$ con momento magnetico μ di cui si possono trascurare i gradi di libertà spaziali x , y e z . Essa viene posta in un campo magnetico costante ed uniforme. In analogia con la fisica classica, il momento magnetico è

$$\hat{\mu} = g_e \frac{e}{2m} \hat{S} = \gamma \hat{S}$$

Si allinea l'asse z con il campo magnetico. L'hamiltoniana è

$$\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \vec{B} = \omega \hat{S}_z, \quad \omega = -\gamma B = -\frac{egB}{2m}$$

Lo spin ha dimensioni $\text{ET} = \text{ML}^2\text{T}^{-1}$ dunque ω ha dimensioni T^{-1} . Per descrivere l'evoluzione temporale bisogna trovare gli auto-stati dell'hamiltoniana. Data la dipendenza da \hat{S}_z , gli auto-stati dell'hamiltoniana sono $|\pm\rangle_z$. Quindi

$$\hat{H} |\pm\rangle_z = \pm \frac{1}{2} \omega \hbar |\pm\rangle_z, \quad E_\pm = \pm \frac{1}{2} \omega \hbar, \quad \hat{H} \doteq \frac{1}{2} \omega \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Sono presenti due livelli energetici separati da un salto energetico $\hbar\omega$, associati allo spin up $|+\rangle$ ed allo spin down $|-\rangle$.

Si consideri uno stato arbitrario

$$|\psi(0)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle_z + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle_z$$

L'evoluto temporale è

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} e^{-i\frac{E_+ t}{\hbar}} |+\rangle_z + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} e^{-i\frac{E_- t}{\hbar}} |-\rangle_z \\ &= \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} e^{-i\frac{\omega}{2} t} |+\rangle_z + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} e^{i\frac{\omega}{2} t} |-\rangle_z \end{aligned}$$

Rappresentazione astratta degli operatori spin sugli assi. Noto

$$\hat{S} \doteq \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad \hat{S} \doteq \begin{pmatrix} \langle + | \hat{S} | + \rangle & \langle + | \hat{S} | - \rangle \\ \langle - | \hat{S} | + \rangle & \langle - | \hat{S} | - \rangle \end{pmatrix}$$

si osserva la rappresentazione matriciale per ottenere

$$\boxed{\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|), \quad \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|), \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} i (|+\rangle\langle -| - |-\rangle\langle +|)}$$

Caso particolare. Sia $\vec{B} = B\hat{z}$ e sia lo stato iniziale

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z + |-\rangle_z) \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \theta = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi = 0$$

L'evoluto temporale è

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i\frac{\omega}{2}t} |+\rangle_z + e^{i\frac{\omega}{2}t} |-\rangle_z] \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \\ e^{i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}$$

Si calcolano i valori di aspettazione dello spin su ogni asse. Quindi

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \hat{S}_z | \psi(t) \rangle &= \langle \hat{S}_z \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\frac{\omega}{2}t} \langle + | + e^{-i\frac{\omega}{2}t} \langle - |] \hat{S}_z [e^{-i\frac{\omega}{2}t} | + \rangle + e^{i\frac{\omega}{2}t} | - \rangle] \frac{1}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{1}{2} [e^{i\frac{\omega}{2}t} \langle + | + e^{-i\frac{\omega}{2}t} \langle - |] \left[e^{-i\frac{\omega}{2}t} \frac{\hbar}{2} | + \rangle - e^{i\frac{\omega}{2}t} \frac{\hbar}{2} | - \rangle \right] \\ &= \frac{1}{2} \frac{\hbar}{2} (1 - 1) = 0 \end{aligned}$$

Si noti che l'operatore \hat{S}_z commuta con l'hamiltoniana: esso è una costante del moto, i valori di aspettazione non dipendono dal tempo. Si può anche utilizzare la rappresentazione matriciale di \hat{S}_z per ottenere

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega}{2}t} & e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \\ e^{i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \hbar (1 - 1) = 0$$

Allo stesso modo, per \hat{S}_x si può ottenere il valor medio tramite la rappresentazione in termini della base $|\pm\rangle$:

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\frac{\omega}{2}t} \langle + | + e^{-i\frac{\omega}{2}t} \langle - |] \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) [e^{-i\frac{\omega}{2}t} | + \rangle + e^{i\frac{\omega}{2}t} | - \rangle] \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t)$$

Altrimenti si può usare la rappresentazione matriciale:

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega}{2}t} & e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \\ e^{i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t) \in \mathbb{R}$$

Questo risultato si può intendere secondo la fisica classica: il campo magnetico causa un momento torcente che produce la precessione di Larmor. Infine, per l'asse y si possono usare i due metodi per ottenere

$$\langle \hat{S}_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t)$$

13.3 Risonanza paramagnetica di spin

Nel 1947 Purcell e Block eseguirono l'esperimento della risonanza paramagnetica di spin. Si consideri un elettrone localizzato di cui si possono trascurare i gradi di libertà spaziali. Si studiano le proprietà magnetiche dell'elettrone. Il generico stato è

$$|\psi(t)\rangle = a(t) |+\rangle + b(t) |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

Si sottopone l'elettrone ad un campo magnetico intenso \vec{B}_0 parallelo a z . Si inserisce un campo magnetico B_x con intensità molto minore ed oscillante secondo

$$B_x = B_1 \cos(\omega t), \quad B_1 \ll B_0$$

L'hamiltoniana \hat{H} dipende esplicitamente dal tempo: essa non commuta con se stessa a tempi diversi perché costituita da \hat{S}_z e \hat{S}_x che con commutano. Quindi

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}(t) = -\gamma \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B}(t) = -\gamma [B_0 \hat{S}_z + B_1 \cos(\omega t) \hat{S}_x] \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \cos(\omega t) \\ \omega_1 \cos(\omega t) & -\omega_0 \end{pmatrix}$$

dove si ha

$$\omega_0 = -\gamma B_0 = -\frac{eg}{2m}B_0, \quad \omega_1 = -\gamma B_1 = -\frac{eg}{2m}B_1$$

L'equazione di Pauli diventa

$$i\hbar \partial_t \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \cos(\omega t) \\ \omega_1 \cos(\omega t) & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

Si ottengono le equazioni

$$i\dot{a} = \frac{\omega_0}{2}a(t) + \frac{\omega_1}{2}b(t)\cos(\omega t), \quad i\dot{b} = \frac{\omega_1}{2}a(t)\cos(\omega t) - \frac{\omega_0}{2}b(t)$$

Per trovare le soluzioni, si utilizza il metodo delle variazioni delle costanti: si rende esplicita la dipendenza da ω_0 così da isolare (e poi rimuovere) la dipendenza forte dal tempo. Se non fosse presente ω_1 (cioè le equazioni fossero omogenee), allora le soluzioni sarebbero

$$a(t) = Ae^{-i\frac{\omega_0}{2}t}, \quad b(t) = Be^{i\frac{\omega_0}{2}t}$$

Per il metodo delle variazioni delle costanti, si cercano soluzioni dove $A = A(t)$ e $B = B(t)$: tali fattori descrivono la dipendenza debole dal tempo della soluzione. Si è fatto un cambio di variabili. Le derivate sono

$$\dot{a} = \dot{A}e^{-i\frac{\omega_0}{2}t} - i\frac{\omega_0}{2}Ae^{-i\frac{\omega_0}{2}t}, \quad \dot{b} = \dot{B}e^{i\frac{\omega_0}{2}t} + i\frac{\omega_0}{2}Be^{i\frac{\omega_0}{2}t}$$

Inserite nelle equazioni iniziali, si ha

$$\begin{aligned} i\dot{A}e^{-i\frac{\omega_0}{2}t} + \frac{\omega_0}{2}Ae^{-i\frac{\omega_0}{2}t} &= \frac{\omega_0}{2}Ae^{-i\frac{\omega_0}{2}t} + \frac{\omega_1}{2}Be^{i\frac{\omega_0}{2}t}\cos(\omega t) \\ i\dot{B}e^{i\frac{\omega_0}{2}t} - \frac{\omega_0}{2}Be^{i\frac{\omega_0}{2}t} &= \frac{\omega_1}{2}Ae^{-i\frac{\omega_0}{2}t}\cos(\omega t) - \frac{\omega_0}{2}Be^{i\frac{\omega_0}{2}t} \end{aligned}$$

In questo modo si è eliminata la forte dipendenza dal tempo cioè il comportamento della soluzione in assenza di ω_1 . Segue

$$i\dot{A} = \frac{\omega_1}{2}B\cos(\omega t)e^{i\omega_0 t}, \quad i\dot{B} = \frac{\omega_1}{2}A\cos(\omega t)e^{-i\omega_0 t}$$

Espandendo il coseno in esponenziali si ottiene

$$i\dot{A} = \frac{\omega_1}{2}B\frac{1}{2}\left[e^{i(\omega_0+\omega)t} + e^{i(\omega_0-\omega)t}\right], \quad i\dot{B} = \frac{\omega_1}{2}A\frac{1}{2}\left[e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t}\right]$$

Queste equazioni si possono risolvere analiticamente. Tuttavia, si segue un ragionamento fisico: l'esperimento si compie con $\omega \approx \omega_0$. Gli esponenti con la somma sono fortemente oscillanti rispetto agli esponenti con la differenza. Pertanto, quando si fa l'esperimento, in media si ha un piccolo contributo dall'oscillazione rapida rispetto a quella lenta. Per questo si trascurano i variamenti rapidi. Dunque

$$i\dot{A}(t) = \frac{1}{4}\omega_1 B(t)e^{i(\omega_0-\omega)t}, \quad i\dot{B}(t) = \frac{1}{4}\omega_1 A(t)e^{-i(\omega_0-\omega)t}$$

Dalla prima si ha

$$B(t) = \frac{4i}{\omega_1}\dot{A}(t)e^{-i(\omega_0-\omega)t}$$

Derivandola e utilizzando la seconda, si ottiene

$$\begin{aligned} i\frac{4i}{\omega_1}\left[\ddot{A} - i(\omega_0 - \omega)\dot{A}\right]e^{-i(\omega_0-\omega)t} &= \frac{1}{4}\omega_1 A(t)e^{-i(\omega_0-\omega)t} \\ \ddot{A} - i(\omega_0 - \omega)\dot{A} + \frac{\omega_1^2}{16}A &= 0 \end{aligned}$$

Si cercano soluzioni del tipo $A(t) = A(0)e^{i\lambda t}$. Per cui si ha

$$-\lambda^2 + (\omega_0 - \omega)\lambda + \frac{\omega_1^2}{16} = 0 \implies \lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left[(\omega_0 - \omega) \pm \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \frac{1}{4}\omega_1^2} \right]$$

La soluzione risulta essere

$$A(t) = A_+ e^{i\lambda_+ t} + A_- e^{i\lambda_- t}, \quad B(t) = -\frac{4}{\omega_1} e^{-i(\omega_0 - \omega)t} [\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}]$$

Infine, le soluzioni per lo stato generico sono

$$a(t) = e^{-i\frac{\omega_0}{2}t} [A_+ e^{i\lambda_+ t} + A_- e^{i\lambda_- t}]$$

$$b(t) = -\frac{4}{\omega_1} e^{-i(\frac{\omega_0}{2} - \omega)t} [\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}]$$

Le costanti A_{\pm} si trovano dalle condizioni iniziali

$$|\psi(0)\rangle \doteq \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix}$$

Esempio. Si consideri un sistema nello stato

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_z \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Si ha

$$\begin{cases} a(0) = 1 = A_+ + A_- \\ b(0) = 0 = \lambda_+ A_+ + \lambda_- A_- \end{cases} \implies \begin{cases} A_+ = \frac{\lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+} \\ A_- = -\frac{\lambda_+}{\lambda_- - \lambda_+} \end{cases}$$

Lezione 28

La probabilità che il sistema abbia spin down $|-\rangle_z$ è

lun 21 nov
2022 13:30

$$|b(t)|^2 = \frac{16}{\omega_1^2} \left[\frac{\lambda_+ \lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+} \right]^2 |e^{i\lambda_+ t} - e^{i\lambda_- t}|^2 = \frac{\omega_1^2}{4(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left[\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \frac{1}{4}\omega_1^2} \frac{t}{2} \right]$$

Questa è la formula di Rabi che descrive la probabilità di inversione di spin (spin flipping). Se ω è molto diversa da ω_0 , allora $(\omega_0 - \omega)^2$ è grande (rispetto a zero). Pertanto, il massimo della probabilità è un numero molto minore dell'unità. Tuttavia, variando ω fino a $\omega = \omega_0$, il massimo della probabilità di inversione di spin raggiunge l'unità: si ha risonanza.

Osservazione. Si consideri un campione di materiale posto nella configurazione di campo magnetico studiata precedentemente. Per frequenze ω e ω_0 molto diverse, il campione ha bassa probabilità di invertire lo spin. Un eventuale rivelatore di onde elettromagnetiche registra una radiazione costante (in funzione della frequenza ω). Arrivando a $\omega = \omega_0$, il rivelatore segna un minimo di segnale perché gli elettroni richiedono energia per operare l'inversione: cambia l'energia potenziale dovuta all'interazione tra spin e campo magnetico. Questo è un modo per misurare B_0 in quanto legato a ω_0 . L'elettrone risente del campo magnetico B_0 , cioè il campo esterno, e di un campo magnetico \tilde{B} del proprio ambiente immediato, cioè di un campo locale. In questo modo si è costruita una sonda precisa per misurare il campo magnetico totale \vec{B} a cui è effettivamente sottoposto l'elettrone.

In quanto pure il nucleo ha spin e momento magnetico, si può fare nuovamente l'esperimento utilizzando le frequenze tipiche del nucleo: si ha la risonanza magnetica nucleare (RMN). La sensibilità al campo magnetico locale è talmente alta che, in un corpo organico, tessuti sani e tessuti danneggiati hanno una risposta diversa misurabile. Su questo principio si basa la TAC e la risonanza magnetica.

Lezione 29

mer 23 nov
2022 13:30

14 Particella carica senza spin in un campo elettromagnetico

Cohen H_{III}. Si tratta il campo elettromagnetico come un campo scalare e non quantizzato.

Meccanica classica. In meccanica classica, l'equazione del moto è

$$m\ddot{\vec{x}} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B}$$

dove i campi sono dati in termini dei potenziali $U(\vec{x}, t)$ e $\vec{A}(\vec{x}, t)$:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}U - \partial_t \vec{A}, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

le cui componenti sono

$$E_j = -\partial_{x_j}U - \partial_t A_j, \quad B_j = \varepsilon_{jkh} \partial_{x_k} A_h$$

Senza modificare le equazioni del moto, e soddisfacendo le equazioni di Maxwell, si ha una libertà nella scelta dei potenziali. Questa è l'invarianza di gauge

$$U \rightarrow U - \partial_t \Lambda, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \Lambda$$

con $\Lambda(\vec{x}, t)$ una funzione arbitraria. L'hamiltoniana che descrive una particella carica in un campo elettromagnetico è

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} [\vec{p} - q\vec{A}]^2 + qU, \quad qU \equiv V$$

Le equazioni del moto sono

$$\begin{cases} d_t x_j = \partial_{p_j} H = \frac{1}{m} (p_j - qA_j) = v_j \\ d_t p_j = -\partial_{x_j} H = \frac{1}{m} (p_k - qA_k) (q \partial_{x_j} A_k) - q \partial_{x_j} U \end{cases}$$

Derivando la prima equazione e sostituendovi la seconda si ha

$$\begin{aligned} m d_t^2 x_j &= d_t p_j - q d_t A_j = q v_k \partial_j A_k - q \partial_j U - q [\partial_t A_j + (\partial_k A_j) (d_t x_k)] \\ &= q E_j + q v_k (\partial_j A_k - \partial_k A_j) = q E_j + q (\vec{v} \times \vec{B})_j \end{aligned}$$

Si noti comparire un'espressione che ricorda il tensore elettromagnetico. Nell'ultima uguaglianza si utilizza

$$(\vec{a} \times \vec{b})_j = \varepsilon_{jkh} a_k b_h \implies (\vec{v} \times \vec{B})_j = \varepsilon_{jkh} v_k B_h$$

così come

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \implies B_h = \varepsilon_{hls} \partial_l A_s$$

unendo le due espressioni si ottiene

$$(\vec{v} \times \vec{B})_j = \varepsilon_{jkh} \varepsilon_{hls} v_k \partial_l A_s = \varepsilon_{hjk} \varepsilon_{hls} v_k \partial_l A_s = v_k \partial_j A_k - v_k \partial_k A_j = v_k (\partial_j A_k - \partial_k A_j)$$

La velocità è

$$\vec{v} = d_t \vec{x} = \frac{1}{m} (\vec{p} - q\vec{A})$$

dove si ricorda che \vec{p} è il momento coniugato. L'hamiltoniana diventa

$$H = K + V = \frac{1}{2} m v^2 + V$$

Il momento coniugato \vec{p} non è più legato alla velocità tramite

$$\vec{v} = \frac{1}{m}\vec{p}$$

Bisogna distinguere il momento coniugato \vec{p} nel formalismo di Hamilton dal momento cinetico $\vec{p}_{\text{kin}} = m\vec{v}$. Infatti, sia l'hamiltoniana \hat{H} che il momento coniugato \hat{p} dipendono dalla scelta del gauge in quanto dipendono da \vec{A} . D'altra parte, la velocità \vec{v} , per il proprio significato fisico, non deve dipenderne. La dipendenza dal gauge ha alcune conseguenze: lo stesso problema fisico ha diverse hamiltoniane e quindi diverse equazioni del moto. Scegliendo alcuni gauge, si possono complicare i calcoli, viceversa scegliendone altri, sebbene il significato fisico rimanga lo stesso. Nonostante l'hamiltoniana perda di poco il significato fisico perché dipendente dal gauge, l'energia finale ne rimane indipendente. La stessa cosa accade per la funzione d'onda ψ e il suo modulo quadro.

Meccanica quantistica. L'hamiltoniana in meccanica quantistica diventa

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{p} - q\vec{A}(\hat{x}, t) \right]^2 + V(\hat{x}, t)$$

Nella rappresentazione delle coordinate si ha

$$H = \frac{1}{2m} \left[-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}(x, t) \right]^2 + V(x, t)$$

Si noti che gli operatori non commutano necessariamente

$$(\hat{p} - q\vec{A})^2 = (\hat{p} - q\vec{A})(\hat{p} - q\vec{A}) = \hat{p}^2 - q(\hat{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{p}) + q^2\vec{A}^2$$

Nella rappresentazione delle coordinate, per il termine tra parentesi si ha

$$\begin{aligned} (\hat{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{p}) | \rangle &= \left[-i\hbar\vec{\nabla} \cdot (\vec{A} | \rangle) - i\hbar\vec{A} \cdot \vec{\nabla} | \rangle \right] = -i\hbar \left[\partial_j (\hat{A}_j | \rangle) + \hat{A}_j \partial_j | \rangle \right] \\ &= -i\hbar \left[(\partial_j \hat{A}_j) | \rangle + \hat{A}_j \partial_j | \rangle + \hat{A}_j \partial_j | \rangle \right] = -i\hbar \left[\partial_j \hat{A}_j + 2\hat{A}_j \partial_j \right] | \rangle \\ &= \left[-i\hbar\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + 2\vec{A} \cdot \hat{p} \right] | \rangle \end{aligned}$$

Invarianza di gauge. La meccanica quantistica è gauge invariante nel senso che le misure e le probabilità *non* dipendono dalla scelta di gauge. L'hamiltoniana ne dipende e pertanto pure la funzione d'onda. La velocità ha senso fisico, ma il momento coniugato \hat{p} dipende dal gauge. Il momento angolare risulta essere

$$\hat{L} = \vec{r} \times \hat{p}$$

dunque dipende dal gauge, ma i suoi risultati fisici non lo sono. Il potenziale vettore ha ruolo fondamentale nella meccanica quantistica rispetto all'elettromagnetismo classico. I potenziali assumono una maggiore realtà fisica di quella avuta in meccanica classica: questo si vede particolarmente nell'effetto Aharonov-Bohm. In tale effetto, si evidenzia come la funzione d'onda dipenda dal gauge, ma non i risultati fisici.

Osservazione. In letteratura, l'hamiltoniana

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - q\vec{A})^2$$

è detta accoppiamento minimale.

In questo modo si aprono tutti i problemi di interazione di una particella senza spin immersa in un campo elettromagnetico.

14.1 Oscillatore armonico in tre dimensioni

Cohen D_{VI}. Si sviluppano alcuni strumenti utili per la sezione successiva. Si consideri un potenziale a simmetria cilindrica

$$V(x, y) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x^2 + y^2)$$

L'hamiltoniana è

$$\hat{H} = \hat{H}_{xy} + \hat{H}_z, \quad \hat{H}_{xy} = \frac{1}{2\mu} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2), \quad \hat{H}_z = \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu}$$

Si cercano gli stati stazionari risolvendo l'equazione

$$\hat{H} |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle, \quad [\hat{H}_{xy}, \hat{H}_z] = 0$$

Per la condizione sul commutatore, si può separare la soluzione

$$|\varphi\rangle = |\varphi_{xy}\rangle \otimes |\varphi_z\rangle$$

per cui vale

$$\hat{H}_{xy} |\varphi_{xy}\rangle = E_{xy} |\varphi_{xy}\rangle, \quad \hat{H}_z |\varphi_z\rangle = E_z |\varphi_z\rangle$$

L'energia totale del sistema è la somma

$$E = E_{xy} + E_z$$

Si studia separatamente il moto lungo ogni asse. Lungo l'asse z si ha

$$\langle z | \varphi_z \rangle = \varphi_z(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i \frac{p_z z}{\hbar}}, \quad E_z = \frac{p_z^2}{2\mu}$$

cioè il moto di una particella libera. Si studia il piano xy . Precedentemente, si è tratta l'hamiltoniana \hat{H}_{xy} separandola e considerando ciascun oscillatore armonico come fosse monodimensionale. Si può utilizzare un approccio diverso. Infatti, il potenziale ha simmetria cilindrica attorno all'asse z : la proiezione del momento angolare \hat{L}_z si conserva. Si presentano due metodi per trovare gli auto-stati.

Metodo primo. Come già fatto in precedenza, si separa l'hamiltoniana

$$\hat{H}_{xy} = \hat{H}_x + \hat{H}_y, \quad \hat{H}_j = \frac{\hat{p}_j^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \hat{x}_j^2$$

per cui vale

$$[\hat{H}_x, \hat{H}_y] = 0, \quad |\varphi_{xy}\rangle = |\varphi_x\rangle \otimes |\varphi_y\rangle$$

Si devono risolvere due problemi monodimensionali. L'energia di ciascuno e quella complessiva nel piano sono

$$E_j = \hbar\omega \left(n_j + \frac{1}{2} \right), \quad n_j \in \mathbb{N}_0, \quad E_{xy} = E_x + E_y = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)$$

Si identifica unicamente lo stato tramite i due indici n_x e n_y . Pertanto, nel piano xy , l'insieme $\{\hat{H}_x, \hat{H}_y\}$ sono un CSCO (oppure si può considerare $\{\hat{H}_{xy}, \hat{H}_j\}$). Tuttavia, il problema è tridimensionale. L'energia totale dipende anche da E_z che è due volte degenera sul segno di p_z (perché l'energia dipende dal quadrato, ma la funzione d'onda $\varphi_z(z)$ risulta avere segni diversi). Il problema presenta una simmetria di traslazione lungo l'asse z . Infatti, lo stato lungo z (che è auto-stato di \hat{H}_z) è auto-stato del momento lineare

$$\hat{p}_z e^{i \frac{p_z z}{\hbar}} = p_z e^{i \frac{p_z z}{\hbar}}$$

La simmetria implica che il momento \hat{p}_z è una costante del moto: $[\hat{H}, \hat{p}_z] = 0$. Quindi, per costruire un CSCO in tre dimensioni bisogna considerare l'insieme

$$\{\hat{H}_x, \hat{H}_z, \hat{p}_z\}$$

L'hamiltoniana \hat{H}_{xy} nel piano ha autovalori $E_{xy} = (n+1)\hbar\omega$, ma per includerla in un CSCO bisogna considerare

$$\{\hat{H}_{xy}, \hat{H}_j, \hat{p}_z\}, \quad j = x \vee j = y$$

L'operatore di distruzione è

$$\hat{a}_j = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\beta \hat{x}_j + i \frac{\hat{p}_j}{\beta \hbar} \right], \quad \beta = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}, \quad [\hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger] = 1$$

Operatori corrispondenti a coordinate diverse commutano tra loro. Dunque

$$|\varphi_{n_x n_y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y!}} (\hat{a}_x^\dagger)^{n_x} (\hat{a}_y^\dagger)^{n_y} |00\rangle, \quad |00\rangle = |0\rangle_x \otimes |0\rangle_y$$

Metodo secondo – classificazione degli auto-stati in base al momento angolare. Risulta utile sfruttare la simmetria di rotazione attorno all'asse z per cui si ha conservazione di \hat{L}_z . Informalmente, notando

$$L_z \propto d_\varphi, \quad V \propto x^2 + y^2 = r^2 \sin^2 \theta$$

e osservando che la parte cinetica dell'hamiltoniana commuta con \hat{L}_z in quanto si può esprimere \hat{p}_j in termini del momento angolare totale \hat{L}^2 ed una parte radiale, ci si aspetta di ottenere

$$[\hat{L}_z, \hat{H}_{xy}] = 0$$

Per questo si vuole costruire una base comune ai due operatori. Si cercano degli stati collegati al momento angolare \hat{L}_z . L'hamiltoniana si può scrivere come

$$\hat{H}_{xy} = [\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + 1] \hbar\omega = [\hat{N}_x + \hat{N}_y + 1] \hbar\omega$$

Il momento angolare sull'asse z diventa

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = i\hbar [\hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_y \hat{a}_x^\dagger]$$

dove si sostituiscono \hat{x}_j e \hat{p}_j in termini di \hat{a}_j e \hat{a}_j^\dagger . Si studiano le regole di commutazione. Con l'hamiltoniana si ha

$$[\hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger, \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y] = 0, \quad [\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y, \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y] = 0$$

Pertanto

$$[\hat{H}_{xy}, \hat{L}_z] = 0$$

come si sospettava, ma così si è ricavato il risultato in modo formale ed astratto. A questo punto si cerca una base comune ai due operatori.

Quantità di momento circolare destro e sinistro. Si introducono gli operatori

$$\hat{a}_d = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x - i\hat{a}_y), \quad \hat{a}_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x + i\hat{a}_y)$$

per cui vale

$$[\hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger] = 1, \quad j = d, g$$

e gli altri commutatori sono nulli. Quindi

$$\hat{a}_d^\dagger \hat{a}_d = \frac{1}{2} (\hat{a}_x^\dagger + i\hat{a}_y^\dagger) (\hat{a}_x - i\hat{a}_y) = \frac{1}{2} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y - i\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + i\hat{a}_y^\dagger \hat{a}_x) = \frac{1}{2} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y - i\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + i\hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger)$$

così pure

$$\hat{a}_g^\dagger \hat{a}_g = \frac{1}{2} (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + i\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y - i\hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger)$$

Pertanto

$$\hat{H}_{xy} = (\hat{a}_d^\dagger \hat{a}_d + \hat{a}_g^\dagger \hat{a}_g + 1)\hbar\omega = (\hat{N}_d + \hat{N}_g + 1)\hbar\omega, \quad \hat{L}_z = \hbar(\hat{a}_d^\dagger \hat{a}_d - \hat{a}_g^\dagger \hat{a}_g) = \hbar(\hat{N}_d - \hat{N}_g)$$

Si identificano gli auto-stati dell'hamiltoniana e del momento angolare tramite i due indici n_d e n_g . Tali stati stazionari sono dati da

$$|\chi_{n_d n_g}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_d! n_g!}} (\hat{a}_d^\dagger)^{n_d} (\hat{a}_g^\dagger)^{n_g} |00\rangle$$

Si costituisce il CSCO $\{\hat{N}_d, \hat{N}_g\}$. Dunque

$$\begin{aligned} \hat{H}_{xy} |\chi_{n_d n_g}\rangle &= (n_d + 1)\hbar\omega |\chi_{n_d n_g}\rangle, \quad n = n_d + n_g \\ \hat{L}_z |\chi_{n_d n_g}\rangle &= m\hbar |\chi_{n_d n_g}\rangle, \quad m = n_d - n_g \end{aligned}$$

L'indice n_d indica le unità di momento angolare positivo lungo z , viceversa per n_g . L'operatore \hat{a}_d^\dagger aggiunge un quanto circolare destro (anti-orario), mentre \hat{a}_g^\dagger aggiunge un quanto circolare sinistro (orario): si ha costruzione e distruzione di quanti circolari. L'indice m è intero, ma non necessariamente naturale: può essere negativo. Questo è in accordo con quanto già sviluppato sul momento angolare orbitale (intero, positivo o negativo). In questo modo si costruisce un altro insieme completo

$$\{\hat{H}_{xy}, \hat{L}_z\}$$

Dati n e m che caratterizzano i due operatori sopra, si possono ricavare n_d e n_g da cui si ottengono gli auto-stati a partire da $|00\rangle$.

Rappresentazione sulle coordinate. La definizione dello stato fondamentale è data da

$$\hat{a}_d \hat{a}_g |00\rangle = \vec{0}$$

Bisogna esprimere gli operatori \hat{a} in termini delle coordinate. Utilizzando le coordinate cilindriche

$$x = \rho \cos \phi, \quad y = \rho \sin \phi, \quad z = z, \quad \phi \in [0, 2\pi)$$

si ha

$$\begin{aligned} \hat{a}_d &\doteq \frac{1}{2} [\beta(x - iy) + \frac{1}{\beta}(\partial_x - i\partial_y)] = \frac{1}{2} e^{-i\phi} \left[\beta\rho + \frac{1}{\beta} \partial_\rho - \frac{i}{\beta\rho} \partial_\phi \right] \\ \hat{a}_d^\dagger &\doteq \frac{1}{2} e^{i\phi} \left[\beta\rho - \frac{1}{\beta} \partial_\rho - \frac{i}{\beta\rho} \partial_\phi \right] \\ \hat{a}_g &\doteq \frac{1}{2} e^{i\phi} \left[\beta\rho + \frac{1}{\beta} \partial_\rho + \frac{i}{\beta\rho} \partial_\phi \right], \quad \hat{a}_g^\dagger \doteq \frac{1}{2} e^{-i\phi} \left[\beta\rho - \frac{1}{\beta} \partial_\rho + \frac{i}{\beta\rho} \partial_\phi \right] \end{aligned}$$

Bisogna imporre

$$\hat{a}_d \hat{a}_g \varphi(x, y) = \hat{a}_d \hat{a}_g \varphi(\rho, \phi) = 0$$

da cui si trova

$$\chi_{00}(\rho, \phi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\beta^2 \rho^2}$$

mentre gli altri stati stazionari si trovano tramite gli operatori di quanti circolari (right, left polarizer?).

Esercizio. Trovare $\chi_{00}(\rho, \phi)$ con il metodo descritto.

Soluzione ?. Separando le variabili

$$\chi(\rho, \phi) = R(\rho)\Phi(\phi), \quad r = \beta\rho$$

si svolge il prodotto tra le forme esplicite degli operatori e, con un po' di semplificazioni, si ottiene l'equazione differenziale

$$r^2 \left[2 + r^2 + \frac{2r}{R} R' + \frac{R''}{R} + \frac{1}{Rr} R' \right] = -\frac{\Phi''}{\Phi} = k^2$$

Se $k = 0$ allora $\Phi = \text{cost}$ per la condizione di continuità di ϕ :

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi)$$

La parte radiale risulta essere

$$R(\rho) = \alpha e^{-\frac{1}{2}r^2} = \alpha e^{-\frac{1}{2}\beta^2\rho^2}$$

Normalizzando la soluzione si ottiene

$$1 \equiv \int |\chi(\rho, \phi)|^2 d^2x = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} N^2 e^{-\beta^2\rho^2} \rho d\varphi d\rho = N^2 \frac{\pi}{\beta^2} \implies N = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}}$$

da cui la soluzione finale è

$$\chi_{00}(\rho, \phi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\beta^2\rho^2}$$

14.2 Campo magnetico uniforme e costante

Cohen E_{VI} . Si studiano gli stati stazionari di una particella senza spin in un campo magnetico uniforme e costante. Il campo magnetico è $\vec{B}(\vec{x}, t) = B \hat{k}$. Dalla meccanica classica, l'equazione del moto è

$$m\ddot{\vec{x}} = q\vec{v} \times \vec{B}, \quad \omega = -\frac{qB}{m}$$

dove ω è la frequenza di ciclotrone. Le traiettorie sono

$$x(t) = x_0 + R \cos(\omega t - \phi_0), \quad y(t) = y_0 + R \sin(\omega t - \phi_0), \quad z(t) = v_{0z}t + z_0$$

Si noti che questa è un'approssimazione. La particella è accelerata ed emette radiazione: il raggio della spirale diminuisce. [r] Il problema presenta sei costanti: la posizione e la velocità iniziali. Si conserva l'energia, le proiezioni del momento lineare e del momento angolare sull'asse z . In meccanica quantistica si ha

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}} - q\hat{\vec{A}})^2 = \frac{1}{2}m\hat{v}^2$$

Si fissa il gauge. Osservato

$$[\hat{A}_j, \hat{p}_k] |\rangle = -i\hbar [\hat{A}_j \partial_k |\rangle - \partial_k (\hat{A}_j |\rangle)] = -i\hbar [\hat{A}_j \partial_k |\rangle - (\partial_k \hat{A}_j) |\rangle - \hat{A}_j \partial_k |\rangle] = i\hbar (\partial_k A_j) |\rangle$$

si calcolano come le componenti della velocità commutano

$$[\hat{p}_j - q\hat{A}_j, \hat{p}_k - q\hat{A}_k] = -q[\hat{A}_j, \hat{p}_k] - q[\hat{p}_j, \hat{A}_k] = i\hbar q [-\partial_k A_j + \partial_j A_k]$$

dove si utilizza la rappresentazione delle coordinate. Noto

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \implies B_j = \varepsilon_{jkh} \partial_k A_h$$

si ha

$$\varepsilon_{jls} B_j = \varepsilon_{jls} \varepsilon_{jkh} \partial_k A_h = \partial_l A_s - \partial_s A_l \implies \partial_j A_k - \partial_k A_j = \varepsilon_{jkh} B_h$$

Pertanto, il commutatore risulta essere

$$[\hat{v}_j, \hat{v}_k] = \frac{qi\hbar}{m^2} \varepsilon_{jkh} B_h$$

Lezione 30

Inoltre, si ha

$$[\hat{x}_j, \hat{v}_k] = \frac{1}{m}[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = \frac{i\hbar}{m}\delta_{jk}$$

Si affronta il problema in maniera astratta. L'hamiltoniana è

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\hat{v}_x^2 + \frac{1}{2}m\hat{v}_y^2 + \frac{1}{2}m\hat{v}_z^2$$

Si è fissato l'asse z lungo il campo magnetico. Dunque, l'unico commutatore delle velocità non nullo è

$$[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = -i\frac{\hbar\omega}{m}$$

perché è presente solamente la componente B_z non nulla.

Autovalori. Si scompone l'hamiltoniana rispetto la direzione del campo magnetico

$$\hat{H} = \hat{H}_\perp + \hat{H}_\parallel, \quad \hat{H}_\perp = \frac{1}{2}m(\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2), \quad \hat{H}_\parallel = \frac{1}{2}m\hat{v}_z^2, \quad [\hat{H}_\perp, \hat{H}_\parallel] = 0$$

Si può separare il problema perché il commutatore è nullo. L'energia diventa $E = E_\perp + E_\parallel$. Si cercano gli autovalori dell'hamiltoniana \hat{H}_\parallel parallela. In quanto vale $[\hat{H}_\parallel, \hat{v}_z] = 0$ si possono trovare degli auto-stati comuni. Inoltre, vale

$$[\hat{z}, \hat{v}_z] = \frac{i\hbar}{m}, \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$$

Tuttavia, si ricordi che $\hat{p}_z \neq m\hat{v}_z$. Sia $\hat{\tilde{p}}_z \equiv m\hat{v}_z$. Si ha

$$\hat{H}_\parallel = \frac{\hat{\tilde{p}}_z^2}{2m}, \quad [\hat{z}, \hat{\tilde{p}}_z] = i\hbar$$

Questa è l'hamiltoniana di una particella libera. L'energia è

$$E_\parallel = \frac{\tilde{p}_z^2}{2m} = \frac{1}{2}mv_z^2, \quad \tilde{p}_z, v_z \in \mathbb{R}$$

Lungo l'asse z si ha un moto rettilineo uniforme. Lo spettro (l'energia) è continuo. Si cercano gli autovalori dell'hamiltoniana perpendicolare

$$\hat{H}_\perp = \frac{1}{2}m(\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2), \quad [\hat{v}_x, \hat{v}_y] = -i\frac{\hbar\omega}{m}$$

L'hamiltoniana ricorda quella di un oscillatore armonico. Si ha

$$[\hat{v}_y, \hat{v}_x] = i\frac{\hbar\omega}{m} \implies \frac{m}{\hbar\omega}[\hat{v}_y, \hat{v}_x] = i$$

Si definiscono gli operatori (adimensionali)

$$\hat{Q} \equiv \sqrt{\frac{m}{\hbar\omega}}\hat{v}_y, \quad \hat{S} \equiv \sqrt{\frac{m}{\hbar\omega}}\hat{v}_x$$

per cui l'hamiltoniana diventa

$$\hat{H}_\perp = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{Q}^2 + \hat{S}^2), \quad [\hat{Q}, \hat{S}] = i$$

gio 24 nov
2022 13:30

cioè l'oscillatore armonico (scritto per operatori posizione \hat{Q} e momento \hat{S} adimensionali). Si noti che non si è mai scelto il gauge. L'energia (gli autovalori) risulta essere

$$E_{\perp} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

Lo spettro è discreto e i livelli energetici sono detti livelli di Landau. Gli autovalori dell'hamiltoniana di partenza sono

$$E(n, v_z) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega + \frac{1}{2} m v_z^2$$

L'energia è quantizzata nel piano xy , mentre si ha un moto libero lungo z .

Ricerca degli auto-stati in un gauge fissato. Ci sono alcune scelte convenienti di gauge. Una prima scelta è

$$\vec{A}(\vec{x}) = -\frac{1}{2} \vec{x} \times \vec{B} \iff A_j = -\frac{1}{2} \varepsilon_{jkh} x_k B_h$$

Da questo risulta

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \iff \partial_j A_j = -\frac{1}{2} \varepsilon_{jkh} \delta_{jk} B_h = 0$$

in quanto ε è anti-simmetrico, mentre δ è simmetrico. Inoltre, si ha

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla} \times \vec{A})_l &= \varepsilon_{lrs} \partial_r A_s = -\frac{1}{2} \varepsilon_{skh} \varepsilon_{lrs} \partial_r (x_k B_h) = -\frac{1}{2} \varepsilon_{skh} \varepsilon_{lks} B_h \\ &= \frac{1}{2} \varepsilon_{skh} \varepsilon_{skl} B_h = \frac{1}{2} 2! \delta_{hl} B_h = B_l \end{aligned}$$

Si calcola la velocità. Il potenziale vettore è

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ 0 & 0 & B \end{vmatrix} = -\frac{1}{2} B (y\vec{i} - x\vec{j})$$

Le componenti della velocità sono

$$\hat{v}_x = \frac{\hat{p}_x}{m} - \frac{1}{2} \omega \hat{y}, \quad \hat{v}_y = \frac{\hat{p}_y}{m} + \frac{1}{2} \omega \hat{x}, \quad \hat{v}_z = \frac{\hat{p}_z}{m}$$

Pertanto si può separare l'hamiltoniana in due componenti

$$\hat{H}_{\parallel} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \quad \hat{H}_{\perp} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{1}{2} \omega \hat{L}_z + \frac{1}{8} m \omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2)$$

Si vede da dove compare la proiezione momento angolare. Il termine misto del quadrato della velocità è

$$-\frac{q}{2m} (\hat{p} \cdot \hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}} \cdot \hat{p}) = -\frac{q}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla} \cdot \hat{\vec{A}} + 2\hat{\vec{A}} \cdot \hat{p}) = -\frac{q}{m} \hat{\vec{A}} \cdot \hat{p} = \frac{q}{2m} (\hat{x} \times \vec{B}) \cdot \hat{p}$$

dove si ha

$$(\hat{x} \times \vec{B}) \cdot \hat{p} = \varepsilon_{jkh} \hat{x}_k B_h \hat{p}_j = -\varepsilon_{h kj} B_h \hat{x}_k \hat{p}_j = -\vec{B} \cdot \hat{\vec{L}}$$

Pertanto

$$-\frac{q}{2m} (\hat{p} \cdot \hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}} \cdot \hat{p}) = -\frac{q}{2m} \vec{B} \cdot \hat{\vec{L}} = -\frac{q}{2m} B \hat{L}_z = \frac{1}{2} \omega \hat{L}_z$$

Gli auto-stati e gli autovalori di \hat{H}_{\parallel} nella rappresentazione delle coordinate sono

$$\varphi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[i \frac{p_z z}{\hbar}\right], \quad E_{\parallel} = \frac{p_z^2}{2m}, \quad p_z \in \mathbb{R}$$

Il problema ha simmetria cilindrica: la proiezione del momento angolare \hat{L}_z è costante del moto. Pertanto vale

$$[\hat{H}_\perp, \hat{L}_z] = 0, \quad \hat{H}_\perp = \hat{H}_{xy} + \frac{1}{2}\omega\hat{L}_z$$

per cui esiste una base comune. Gli autovalori dell'hamiltoniana nel piano e del momento angolare sono

$$E_{xy} = \frac{1}{2}(n_d + n_g + 1)\hbar\omega, \quad L_z = (n_d - n_g)\hbar$$

Si noti che l'hamiltoniana \hat{H}_{xy} dell'oscillatore armonico ha frequenza $\frac{\omega}{2}$ ed è l'hamiltoniana studiata nella sezione precedente. Dunque, gli autovalori dell'hamiltoniana perpendicolare sono

$$E_\perp = \frac{1}{2}(n_d + n_g + 1 + n_d - n_g)\hbar\omega = \left(n_d + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

Questa energia è degenera perché proviene dalla somma di due numeri quantici, ma ne dipende solo da uno, n_d .

Si vede una seconda scelta di gauge. Si pone

$$A_x = -By, \quad A_y = A_z = 0 \implies \vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -By & 0 & 0 \end{vmatrix} = B\vec{k}$$

L'hamiltoniana diventa

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x + qB\hat{y})^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$$

Si noti che essa non dipende da \hat{x} né da \hat{z} . Pertanto, vale

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = [\hat{H}, \hat{p}_z] = 0$$

Si può trovare una base comune. Si cercano gli auto-stati nella forma

$$\varphi(x, y, z) = \chi(y) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)\right]$$

Si vede il significato fisico. Dalla velocità si ha

$$m\hat{v}_j = \hat{p}_j - q\hat{A}_j$$

Sull'asse z si ottiene

$$A_z = 0 \implies \hat{p}_z = m\hat{v}_z$$

cioè il momento coniugato coincide con il momento cinetico. Se p_z è costante, allora pure v_z . Sull'asse x vale

$$m\hat{v}_x = \hat{p}_x + qB\hat{y}$$

In questo caso se p_x è costante, la velocità potrebbe non essere costante. Tuttavia, si ha

$$mv_x - qBy = \text{cost} \implies y - \frac{mv_x}{qB} = \text{cost} = y_0$$

cioè la coordinata y del punto attorno a cui gira la particella. L'equazione di Schrödinger diventa

$$\hat{H}\varphi = E\varphi \implies \frac{1}{2m}(p_x + qBy)^2\chi(y) - \frac{\hbar^2}{2m}\chi''(y) + \frac{p_z^2}{2m}\chi = E\chi$$

da cui si ricava

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''(y) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(y - \frac{p_x}{m\omega}\right)^2\chi = \left(E - \frac{p_z^2}{2m}\right)\chi$$

cioè l'equazione di un oscillatore armonico di massa m con frequenza ω il cui potenziale è traslato orizzontalmente e l'energia è traslata. Per sostituzione si ha

$$\eta \equiv y - \frac{p_x}{m\omega}, \quad d_y = d_\eta, \quad \chi(y) = \chi\left(\eta + \frac{p_x}{m\omega}\right)$$

da cui

$$-\frac{\hbar^2}{2m} d_\eta^2 \chi + \frac{1}{2} m \omega^2 \chi = \left(E - \frac{p_x^2}{2m}\right) \chi$$

Gli autovalori di questo oscillatore armonico sono

$$E - \frac{p_x^2}{2m} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \implies E = \frac{p_x^2}{2m} + \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n \in \mathbb{N}_0$$

Questo è lo stesso risultato di quanto ottenuto con la prima scelta di gauge. L'energia, che è una quantità fisica, rimane la stessa. Tuttavia, cambia la rappresentazione sulle coordinate degli stati stazionari

$$\varphi(x, y, z) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)\right] \varphi_n^{\text{Hermite}}\left(y - \frac{p_x}{m\omega}\right)$$

dove $\varphi_n^{\text{Hermite}}$ sono le soluzioni trovate in precedenza dell'oscillatore armonico semplice monodimensionale descritte in termini dei polinomi di Hermite e di un esponenziale. Questa funzione dipende da due numeri reali p_x e p_z ed un numero intero n . Ciò mostra come la funzione d'onda ψ dipende dal gauge, ma le quantità fisiche sono invarianti.

Effetto Hall quantistico. Un'applicazione di questo fenomeno e dei livelli di Landau è l'effetto Hall quantistico: la conduttanza in certi materiali ha delle discontinuità.

15 Somma di momenti angolari

15.1 Prodotto tensoriale tra spazi di Hilbert

Si considerino due spazi di Hilbert H_1 e H_2 . Siano le loro basi $\{|u_n\rangle\}$ e $\{|v_m\rangle\}$. Dei vettori a loro appartenenti si scrivono come

$$|\varphi\rangle_1 = \sum_n a_n |u_n\rangle, \quad |\zeta\rangle_2 = \sum_m b_m |v_m\rangle$$

Lo spazio di Hilbert $H = H_1 \otimes H_2$ ha base $\{|u_n\rangle \otimes |v_m\rangle\}$. Un elemento di tale spazio si scrive come

$$|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} |u_n\rangle \otimes |v_m\rangle$$

Sia $N_j = \dim(H_j)$. Allora

$$|\varphi(1)\rangle = \sum_{n=1}^{N_1} a_n |u_n(1)\rangle, \quad |\chi(2)\rangle = \sum_{m=1}^{N_2} b_m |v_m(2)\rangle$$

Il loro prodotto tensoriale è

$$|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = \sum_{n,m} a_n b_m |u_n(1)\rangle \otimes |v_m(2)\rangle$$

Esso è lineare. Lo spazio H contiene più elementi di quanti si possono ricavare dal prodotto tensoriale di due vettori di H_1 e H_2 . Per ogni elemento di H bisogna fornire $N_1 N_2$ elementi, ma non è sempre possibile scriverli in termini di prodotti $a_n b_m$ di N_1 numeri a_n e N_2 numeri b_m . Non tutti elementi di H si possono scrivere in termini di elementi di H_1 e H_2 . Si considerino gli stati

$$|\varphi\rangle = |\alpha\rangle_1 \otimes |\beta\rangle_2, \quad |\zeta\rangle = |\gamma\rangle_1 \otimes |\delta\rangle_2$$

Il prodotto scalare risulta essere

$$\langle \zeta | \varphi \rangle = {}_1\langle \gamma | \alpha \rangle_1 \cdot {}_2\langle \delta | \beta \rangle_2$$

Prodotto tensoriale di operatori. Si considerino due operatori, $\hat{A}(1)$ e $\hat{B}(2)$, appartenenti a spazi di Hilbert diversi. Il loro prodotto tensoriale è

$$[\hat{A}(1) \otimes \hat{B}(2)][|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] = [\hat{A}(1)|\varphi(1)\rangle] \otimes [\hat{B}(2)|\chi(2)\rangle]$$

Si osservi la scrittura

$$\hat{A}(1)[|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] \equiv [\hat{A}(1) \otimes I(2)][|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle]$$

Similmente quando compare solamente $\hat{B}(2)$.

15.2 Somma

Date N particelle, in fisica classica, il momento angolare totale è la somma dei momenti angolari delle particelle

$$\vec{L} = \sum_j \vec{L}_j = \sum_j \vec{r}_j \times \vec{p}_j$$

Sebbene i singoli momenti angolari non si conservino, così non vale per il momento angolare totale. In meccanica quantistica si ha

$$\hat{\vec{J}} = \sum_n \hat{\vec{L}}_n + \hat{\vec{S}}_n$$

I momenti angolari (orbitali o di spin) di particelle diverse non comunicano tra loro:

$$[\hat{L}_{n,j}, \hat{L}_{m,k}] = i\hbar\delta_{nm}\varepsilon_{jkh}\hat{L}_{jh}, \quad [\hat{S}_{n,j}, \hat{S}_{m,k}] = i\hbar\delta_{nm}\varepsilon_{jkh}\hat{S}_{jh}$$

Il momento angolare orbitale e lo spin sono dissociati:

$$[\hat{L}_{nj}, \hat{S}_{mk}] = 0$$

Per il momento angolare totale si ha

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkh}\hat{J}_h$$

come si è già visto, in quanto queste sono le regole di definizione del momento angolare. Si cercano gli autovalori degli operatori \hat{J}^2 e \hat{J}_z . Per fare questo bisogna studiare la somma dei momenti angolari.

Somma di due momenti angolari. Si consideri la somma di due momenti angolari

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}_1 + \hat{\vec{J}}_2, \quad \hat{\vec{J}}_n \in H_n, \quad n = 1, 2$$

dove essi possono essere entrambi \hat{L} o \hat{S} di due particelle, oppure \hat{L} ed \hat{S} per la stessa particella. L'azione del momento angolare è

$$\hat{J}_n^2 |k_n, j_n, m_n\rangle = j_n(j_n + 1)\hbar^2 |k_n, j_n, m_n\rangle, \quad \hat{J}_{nz} |k_n, j_n, m_n\rangle = m_n\hbar |k_n, j_n, m_n\rangle$$

dove k racchiude tutti i numeri quantici oltre j ed m . Gli operatori alzatore ed abbassatore sono

$$\hat{J}_{n\pm} |k_n, j_n, m_n\rangle = \hbar\sqrt{j_n(j_n + 1) - m_n(m_n \pm 1)} |k_n, j_n, m_n \pm 1\rangle$$

Lezione 31

ven 25 nov
2022 15:30

Il generico spazio di Hilbert che rappresenta la somma è

$$H = H_1 \otimes H_2$$

La cui base è data da

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$$

La dimensione dello spazio è

$$\dim(H) = \dim(H_1 \otimes H_2) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

Dato che \hat{J} è un momento angolare, allora \hat{J}^2 e \hat{J}_z possono essere diagonalizzati simultaneamente in H . Si cercano gli stati $|jm\rangle$ che sono auto-stati di tali due operatori:

$$\hat{J}^2 |jm\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle, \quad \hat{J}_z |jm\rangle = m\hbar |jm\rangle$$

Si studia che valori assume j ed il legame tra questa base e la base data dal prodotto tensoriale. Si hanno due possibilità. Per le relazioni che definiscono le azioni di \hat{J}_n e \hat{J}_{nz} sulla base $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$, la prima possibilità consiste nella scelta dei seguenti operatori per costituire un CSCO

$$\hat{J}_1^2, \quad \hat{J}_2^2, \quad \hat{J}_{1z}, \quad \hat{J}_{2z}$$

La seconda possibilità vede il coinvolgimento del momento angolare totale \hat{J}^2 e la sua proiezione \hat{J}_z . Il momento angolare totale è

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 &= \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2 + \hat{J}_2 \cdot \hat{J}_1 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2 \\ &= \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z} + \hat{J}_{1+}\hat{J}_{2-} + \hat{J}_{1-}\hat{J}_{2+} \end{aligned}$$

Dalla prima riga segue

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_1^2] = 0, \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_2^2] = 0$$

Per la proiezione del momento angolare si ha

$$\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_n^2] = [\hat{J}_{nz}, \hat{J}_n^2] = 0, \quad n = 1, 2$$

Sebbene

$$[\hat{J}_{1z}, \hat{J}_z] = [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_z] = 0$$

risulta

$$\begin{aligned} [\hat{J}^2, \hat{J}_{1z}] &= [\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2, \hat{J}_{1z}] = 2[\hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2, \hat{J}_{1z}] = 2[\hat{J}_{1x}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1y}\hat{J}_{2y}, \hat{J}_{1z}] \\ &= 2i\hbar(-\hat{J}_{1y}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1x}\hat{J}_{2y}) \neq 0 \end{aligned}$$

Similmente si ha

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_{2z}] \neq 0$$

Dunque il CSCO è dato dall'insieme

$$\{\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2\}$$

Pertanto, un'altra base di H risulta essere

$$|j_1 j_2 jm\rangle$$

Trasformazione unitaria tra le due basi Si cerca la trasformazione unitaria tra le due basi

$$|j_1 j_2 jm\rangle = I |j_1 j_2 jm\rangle = \sum_{n_1, n_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 jm\rangle$$

I prodotti scalari sono detti coefficienti di Clebsch-Gordan.

Proposizione. Se $m \neq m_1 + m_2$, allora i coefficienti sono nulli.

Dimostrazione. Partendo da

$$\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z} \implies \hat{J}_z - \hat{J}_{1z} - \hat{J}_{2z} = 0$$

si ottiene

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | (\hat{J}_z - \hat{J}_{1z} - \hat{J}_{2z}) | j_1 j_2 j m \rangle = 0$$

Si applicano gli operatori sui propri auto-stati: l'operatore \hat{J}_z agisce sul ket e gli altri due sul bra. Pertanto

$$(m - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle = 0$$

cioè la tesi.

Proposizione. Se *non* vale

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

allora i coefficienti sono nulli.

Osservazione. La corretta implicazione logica è

$$\neg U \implies P_1 \wedge P_2$$

dove U è l'affermazione “i coefficienti sono nulli”, P_1 è l'affermazione $m = m_1 + m_2$ e P_2 è l'affermazione $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$. Da ciò risulta

$$\neg U \implies P_1, \quad \neg U \implies P_2$$

che equivalgono alle due proposizioni precedenti:

$$\neg P_1 \implies U, \quad \neg P_2 \implies U$$

Le affermazioni P_1 e P_2 sono condizioni necessarie affinché i coefficienti siano non nulli, ma non sono condizioni sufficienti: i coefficienti potrebbero comunque essere nulli, ma se almeno un'affermazione è falsa, allora di sicuro i coefficienti sono nulli.

15.3 Somma del momento di spin semi-intero di due particelle

Si studia il caso più semplice

$$j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$$

Qualunque sia la base, i numeri quantici j_n di spin non cambiano, pertanto si omettono dalla scrittura della base. Si utilizza la notazione

$$|m_1 m_2\rangle \equiv |\pm\pm\rangle$$

Si vuole calcolare lo stato $|jm\rangle$. Si studia quale sia il numero quantico magnetico $m = m_1 + m_2$ più grande

$$m = j_1 + j_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

Per la proprietà del momento angolare

$$-j \leq m \leq j$$

deve esistere uno stato con momento angolare $j = 1$

$$|jm\rangle = \boxed{|1, 1\rangle = |++\rangle} = |m_1 m_2\rangle$$

Da ciò si ricava primo dei coefficienti. Si applicano gli operatori di distruzione per ottenere gli altri stati. Noto

$$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2, \quad \hat{J}_{\pm} = \hat{J}_{1\pm} + \hat{J}_{2\pm}$$

si ottiene

$$\hat{J}_- |1, 1\rangle = (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) |++\rangle$$

Il primo membro è

$$\hat{J}_- |1, 1\rangle = \sqrt{2}\hbar |1, 0\rangle$$

Per il secondo membro si ha

$$\hat{J}_{n-} |+\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - 1 \right)} |-\rangle = \hbar |-\rangle$$

da cui

$$\sqrt{2}\hbar |1, 0\rangle = \hbar(|-+\rangle + |+-\rangle) \implies |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-+\rangle + |+-\rangle)$$

Applicando nuovamente \hat{J}_- si ha

$$\hat{J}_- |1, 0\rangle = \sqrt{2}\hbar |1, -1\rangle$$

mentre in termini di \hat{J}_{n-} si ha

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-})[|-+\rangle + |+-\rangle] = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}[|--\rangle + |--\rangle] = \sqrt{2}\hbar |--\rangle$$

Pertanto si ottiene

$$|1, -1\rangle = |--\rangle$$

Come ci si aspetta dalla discussione sopra per la disuguaglianza del momento angolare. Per momento angolare $j = 1$ si hanno $2j + 1 = 3$ stati

$$|1, 1\rangle, \quad |1, 0\rangle, \quad |1, -1\rangle$$

Questi stati sono detti del tripletto.

Osservazione. Sorge un problema. La dimensione dello spazio iniziale è $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. In questo caso, la dimensione è quattro, ma si sono trovati solo tre vettori della base. Lo stato $|1, 0\rangle$ ha $m = 0$ e si può costruire un vettore ad esso ortogonale con ancora $m = 0$. Per $j = 1$ si sono utilizzati tutti i valori disponibili di m . Bisogna scendere di una unità: lo stato che può dare $m = 0$ è quello con $j = 0$. Si ha

$$|00\rangle = \alpha |+-\rangle + \beta |-+\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

Si impone l'ortogonalità

$$0 = \langle 10|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta) \implies \alpha = -\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta}, \quad \delta \in \mathbb{R}$$

Scegliendo $\delta = 0$ per convenienza, si ha

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle - |-+\rangle]$$

Questo è lo stato di singoletto. Gli stati di tripletto e singoletto sono quelli sottoposti ad entanglement.

Conteggio degli stati. Il conteggio degli stati delle basi concordano. Per la base $|j_1 j_2\rangle$ si ha

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = \left(2\frac{1}{2} + 1\right)^2 = 4$$

Mentre per la base $|j, m\rangle$ si ha

$$\begin{aligned} j &= 1, & 2j + 1 &= 3 \\ j &= 0, & 2j + 1 &= 1 \end{aligned}$$

15.4 Caso generale

Si supponga $j_1 > j_2$. Si ricorda valere

$$m = m_1 + m_2, \quad -j_n \leq m_n \leq j_n, \quad \dim H = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

Il numero quantico magnetico assume i valori

$$(-j_1 - j_2), (-j_1 - j_2 + 1), \dots, (j_1 + j_2 - 1)(j_1 + j_2)$$

Scegliendo $j_1 = 2$ e $j_2 = 1$ si hanno 15 elementi della base. Si raggruppino gli stati in insiemi per cui $j_1 + j_2 = m = \text{cost.}$ [immagine] Come precedentemente, si studia lo stato con m massimo, cioè $m_1 = j_1$ e $m_2 = j_2$. In questo caso si ha $m = 3$. In quanto non sono presenti proiezioni del momento angolare maggiori, allora $m = 3$ appartiene allo stato con $j = 3$. Pertanto

$$|jm\rangle = |3, 3\rangle = |2, 1, 2, 1\rangle = |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

Si applica $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ così da ottenere

$$\alpha |3, 2\rangle = \beta |2, 1, 1, 1\rangle + \gamma |2, 1, 2, 0\rangle, \quad \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}$$

Applicando nuovamente l'operatore si ottengono gli altri stati

$$\alpha |3, 1\rangle = \beta |2, 1, 0, 1\rangle + \gamma |2, 1, 1, 0\rangle + \delta |2, 1, 1, 0\rangle + \varepsilon |2, 1, 2, -1\rangle$$

e così via (le costanti in lettere greche non sono le stesse nelle scritture riportate). Si conosce già com'è fatto l'ultimo stato

$$|3, -3\rangle = |2, 1, -2, -1\rangle$$

In totale sono presenti $2j + 1 = 7$ stati. Per arrivare a 15 si utilizza la procedura precedente. Si sono esauriti gli stati con $m = 3$ pertanto si passa ad $m = 2$. Si cerca una combinazione lineare degli stati $|m_1 m_2\rangle$ con $m = 2$ perpendicolare a $|3, 2\rangle$: il vettore d'interesse $|j, 2\rangle$ può provenire solamente da $j = 2$. Si applica nuovamente \hat{J}_- per trovare gli altri stati così da averne cinque totali. Esauriti gli stati con $m = 2$, si passa ad $m = 1$: una combinazione lineare è $|3, 1\rangle$, un'altra è $|2, 1\rangle$, ma ne manca un'altra. Occupati i momenti $j = 3, 2$, si utilizza $j = 1$ per cui lo stato $|1, 1\rangle$ si scrive come combinazione lineare degli stati con $m = 1$ già trovati e si impone

$$\langle 3, 1 | 1, 1 \rangle = \langle 2, 1 | 1, 1 \rangle = 0, \quad \langle 1, 1 | 1, 1 \rangle = 1$$

Da tale stato si costruiscono gli altri tramite \hat{J}_- : in tutto si hanno tre stati. In questo modo si hanno i quindici stati della base. Da $j_1 = 2$ e $j_2 = 1$ si ha $j = 3, 2, 1$ come affermato dalla disuguaglianza per j .

Esempio. Sia $j_1 = j_2 = 1$. La base nota è

$$\{|1, 1, m_1, m_2\rangle\}, \quad m_1, m_2 \in \{-1, 0, 1\}$$

Essa ha dimensione pari a 9. Dalla disuguaglianza ci si aspetta $0 \leq j \leq 2$. Partendo dal numero quantico magnetico maggiore $m = 2$ si ha

$$|j, m\rangle = |2, 2\rangle = |1, 1, 1, 1\rangle = |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Applicando \hat{J}_- si ha

$$\begin{aligned} |2, 1\rangle &= \frac{1}{2\hbar} \hat{J}_- |2, 2\rangle = \frac{1}{2\hbar} (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) |1, 1, 1, 1\rangle = \dots = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1, 1, 0, 1\rangle + |1, 1, 1, 0\rangle] \\ |2, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} [|1, 1, 1, -1\rangle + 2|1, 1, 0, 0\rangle + |1, 1, -1, 1\rangle] \\ |2, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|1, 1, 0, -1\rangle + |1, 1, -1, 0\rangle] \\ |2, -2\rangle &= |1, 1, -1, -1\rangle \end{aligned}$$

Si sono ottenuti 5 stati, ne mancano altri quattro. Dallo stato $|2, 1\rangle$ si ricavano altri stati con $j = 1$ come combinazione degli stati costituenti $|2, 1\rangle$. Dunque

$$|1, 1\rangle = \alpha |1, 1, 1, 0\rangle + \beta |1, 1, 0, 1\rangle, \quad \langle 2, 1|1, 1\rangle = 0, \quad \langle 1, 1|1, 1\rangle = 1$$

Pertanto

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1, 1, 1, 0\rangle - |1, 1, 0, 1\rangle]$$

Per il segno si utilizza la convenzione di fase di Condon-Shortley: tutti i coefficienti sono reali e quello per cui $m_1 = j_1$ è preso positivo. Si applica \hat{J}_- per ottenere

$$\begin{aligned} |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|1, 1, 1, -1\rangle - |1, 1, -1, 1\rangle] \\ |1, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|1, 1, 0, -1\rangle - |1, 1, -1, 0\rangle] \end{aligned}$$

Si sono trovati tre stati. Ne manca uno. Con momento $m = 0$ si sono trovati $|2, 0\rangle$ e $|1, 0\rangle$ e manca lo stato a loro perpendicolari e data dalla combinazione lineare dei loro stati costituenti. Rimanendo $j = 0$, si ha

$$|0, 0\rangle = \alpha |1, 1, 1, -1\rangle + \beta |1, 1, 0, 0\rangle + \gamma |1, 1, -1, 1\rangle, \quad \langle 00|00\rangle = 1, \quad \langle 2, 0|0, 0\rangle = \langle 1, 0|0, 0\rangle = 0$$

da cui

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1, 1, 1, -1\rangle - |1, 1, 0, 0\rangle + |1, 1, -1, 1\rangle]$$

Lezione 32

15.5 Somma di momento angolare orbitale e momento angolare di spin semi-intero

lun 28 nov
2022 13:30

Si consideri

$$j_1 = l \neq 0, \quad j_2 = \frac{1}{2}, \quad \hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

Le dimensioni dello spazio sono

$$(2l+1) \left(2\frac{1}{2} + 1 \right) = 2(2l+1)$$

I valori assunti del momento angolare sono

$$j = l \pm \frac{1}{2}$$

[r] Sia $j = l + \frac{1}{2}$. Lo stato con proiezione maggiore

$$|j, m\rangle = \left| j + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2} \right\rangle = \left| l, \frac{1}{2}, l, + \right\rangle = |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Ora si applica \hat{J}_- per ricavare gli altri stati. Si può ricavare una formula generale

$$\left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left[\sqrt{l+m+\frac{1}{2}} \left| l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, + \right\rangle + \sqrt{l-m+\frac{1}{2}} \left| l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, - \right\rangle \right]$$

I valori ammessi della proiezione sono

$$m = l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}, \dots, -\left(l + \frac{1}{2}\right)$$

Sia $j = l - \frac{1}{2}$. Allora si ha

$$\left| l - \frac{1}{2}, m \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left[\sqrt{l+m+\frac{1}{2}} \left| l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, - \right\rangle - \sqrt{l-m+\frac{1}{2}} \left| l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, + \right\rangle \right]$$

Quanto visto per la somma di momenti angolari vale anche per la differenza: si parte dalla proiezione massima e si scende trovando gli altri stati.

15.6 Proprietà dei coefficienti di Glebsch-Gordan

Si vedono alcune proprietà dei coefficienti di Glebsch-Gordan.

Proposizione. I coefficienti

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle$$

sono numeri reali ed esiste una convenzione di segno. [r]

Proposizione. In quanto sono reali vale

$$\langle jm | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle^* = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle$$

Proposizione. In quanto sono basi, il prodotto scalare risulta essere

$$\sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \langle j' m' | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle$$

[r] dove si è applicata la completezza all'identità

$$\langle j' m' | jm \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

La completezza si può scrivere anche come

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^j |jm\rangle \langle jm| = I$$

Proposizione. Soddifano delle regole di ricorsione.

Proposizione. Vedere Sakurai p. 216 teorema di addizione per Y_l^m .

Proposizione. Vale

$$\int (Y_l^m)^* Y_{l_1}^{m_1} Y_{l_2}^{m_2} d\Omega = \text{Clebsch-Gordan}$$

vedere p. 1047 Cohen. Questa relazione è utile per calcolare gli integrali con tre armoniche sferiche. Vedere sito Oleari.

16 Particelle identiche

Per quanto si sa odiernamente ogni elettrone è identico a tutti gli altri (eccetto la posizione ed il momento). Questo vale anche per fotoni, protoni, neutroni, muoni, bosoni, quarks, bosoni vettori e Higgs. Tuttavia, esiste una differenza tra la meccanica classica e meccanica quantistica. In meccanica classica, le particelle sono distinguibili: in un urto di due particelle, si riescono sempre a distinguere perché si possono seguire le loro traiettorie. In meccanica quantistica, questo non si può avere, non si possono definire delle traiettorie. Non si può mantenere la mappatura (etichetta, label) al passare del tempo. Si conosce la configurazione iniziale, ma si riesce a farla corrispondere alla situazione finale. Questo discorso vale per un arbitrario numero di particelle: si parte da due perché è il caso più semplice. Nasce la questione della indistinguibilità delle particelle identiche: non si può più dare una mappatura alle particelle nella configurazione iniziale. Ciò è una conseguenza del principio di indeterminazione: il tentativo di osservare il fenomeno conferisce energia al sistema e non si può più sapere dove sono andate le particelle.

Bisogna costruire un sistema, una metodologia di numerare i gradi di libertà delle particelle evitando di implicare una numerazione delle particelle. Per particelle indistinguibili non deve essere presente alcuna differenza nell'ordine in quale si scrive la posizione, la proiezione dello spin di quella particella in un certo stato fisico. Si può solamente affermare che, in un certo stato fisico $\psi(\vec{x}_1, m_1; \vec{x}_2, m_2; \dots)$, esiste un elettrone nella posizione \vec{x}_1 con proiezione del momento m_1 , un altro elettrone in posizione \vec{x}_n e proiezione del momento m_n . Non si può dire che il *primo* elettrone ha posizione \vec{x}_1 e proiezione m_1 , il *secondo* etc. perché questo implicherebbe la capacità di distinguere gli elettroni. Lo stato fisico ψ deve essere lo stesso stato fisico (cioè fornire le stesse informazioni) dello stato (per esempio) $\psi(\vec{x}_2, m_2; \vec{x}_1, m_1, \dots)$. Tutti i gradi di libertà sono indicati tramite numeri interi. La funzione ψ che descrive un certo stato $\psi(1, 2, \dots)$ deve rappresentare lo stesso stato $\psi(2, 1, \dots)$ cioè lo stesso stato a prescindere dal numero di permutazione dei gradi di libertà. Si noti che il fatto che due stati contengano la stessa informazione fisica non vuol dire che i due stati sono uguali, identici. Infatti, a noi basta che siano uguali a meno di un fattore di fase (cfr. projective Hilbert space)

$$\psi(2, 1, \dots) = \alpha \psi(1, 2, \dots)$$

Il fattore di fase può dipendere solamente dal *tipo* di particelle con cui si lavora. Esso non può dipendere dal momento, dalla posizione, etc. Infatti, se ne dipendesse, allora lo spazio-tempo non è più invariante per rotazioni e traslazioni: si osserva che lo spazio-tempo circostante è omogeneo ed isotropo. Se le funzioni d'onda sono uguali a meno di un fattore di fase, allora

$$\psi(2, 1, \dots) = \alpha \psi(1, 2, \dots) \implies \psi(1, 2, \dots) = \alpha \psi(2, 1, \dots)$$

Questo implica che

$$\psi(1, 2, \dots) = \alpha^2 \psi(1, 2, \dots) \implies \alpha^2 = 1 \implies \alpha = \pm 1$$

Per segno positivo, la funzione d'onda è simmetrica per scambio di due particelle qualunque (cioè di tutti i loro gradi di libertà). Per segno negativo, la funzione d'onda è anti-simmetrica rispetto allo scambio di due particelle. Questa discussione vale per particelle qualsiasi, sia elementari che composte.

Le particelle con $\alpha = 1$ sono dette bosoni in onore di Satyendra Bose. Le particelle con $\alpha = -1$ sono detti fermioni in onore di Enrico Fermi. Queste due categorie di particelle hanno un comportamento completamente diverso.

[r] Unendo la meccanica quantistica e la relatività speciale si ottiene il teorema spin-statistica. Questo non si può ricavare da principi primi in questo corso (ma si può vedere tramite teorie quantistiche di campo). Tutte le particelle il cui spin è semi-intero (e^\pm, μ^\pm, ν, q) sono fermioni ed ubbidiscono la statistica di Fermi-Dirac. Tutte le particelle con spin intero (W^\pm, Z) sono bosoni e sono soggette alla statistica di Bose-Einstein. Per le particelle senza massa non si può propriamente ricavare quanto fatto in modo semplice: lo spin non ha valori tra $+s$ e $-s$ saltando di una unità perché mancano i valori intermedi. Infatti, il fotone non ha spin, ma

ha elicità (la proiezione dello spin lungo la direzione di propagazione) ± 1 , manca lo zero. Con le rappresentazioni del gruppo irriducibile di Poincaré bisogna fare operazioni particolari per particelle senza massa [r]. La stessa cosa vale per i gluoni e gli ipotetici gravitoni, $S = 2$. Anche queste tre particelle sono bosoni.

Particelle composte. Si considerino due protoni. Scambiarli significa scambiare tutti i costituenti uno nell'altro. Scambiare bosoni mantiene la parità, scambiare fermioni cambia la parità.

Proposizione. Una particella composta formata da un numero pari di fermioni e da un numero arbitrario di bosoni è un bosone. Una particella composta da un numero dispari di fermioni e da un numero arbitrario di bosoni è un fermione. [r] Per tante particelle, per ricavare il momento angolare totale bisogna utilizzare le regole sviluppate. [r]

16.1 Approssimazione di particelle indipendenti

Stati a particella indipendente, a particella singola. Si consideri un sistema con una sorgente qualunque e tanti altri oggetti attorno (cioè la tipica struttura atomica). L'equazione di Schrödinger è

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \dots) + V_{\text{centr}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) + \sum_{j \neq k} V(\vec{r}_j - \vec{r}_k) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots)$$

Quando possibile, si esegue la sostituzione

$$V_{\text{centr}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) + \sum_{j \neq k} V(\vec{r}_j - \vec{r}_k) \approx \sum_{j=1}^N \tilde{V}(\vec{r}_j)$$

dove \tilde{V} è un potenziale medio. Per esempio, dal punto di vista chimico, alcuni elementi hanno facilità a cedere (o acquistare) elettroni: questo perché l'ultimo elettrone è solo. Questo sistema è ben descritto dalla singolare equazione di Schrödinger in cui si usa un potenziale sfero-simmetrico che approssima il moto degli elettroni interni [r]. La sostituzione è l'inizio di approssimazioni dello studio degli atomi nella materia. Se il potenziale si può approssimare nel modo visto, si sa già come trovare la soluzione: si cerca una funzione d'onda a variabili separabili e l'energia è la somma delle singole energie. La soluzione è

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) \approx \phi(\vec{r}_1) \phi(\vec{r}_2), \dots, \phi(\vec{r}_N)$$

Ogni funzione d'onda ϕ sono detti stati di particella indipendente o stati di particella singola (indipendente non significa che la particella non stia interagendo con altri elettroni, ma si considera l'interazione come potenziale di schermo [r]). Con questo ansatz si ottengono equazioni separate della forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \tilde{V}(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}) = E_s \phi(\vec{r})$$

Prima ipotesi. Si supponga di trattare gli elettroni come se fossero indipendenti (ma comunque interagenti) tra loro. Si ha la trattazione indipendente quando

- si trascurano completamente le interazioni tra gli elettroni;
- oppure si considera l'influenza degli elettroni attorno su di un potenziale $V_c = \frac{1}{c}$ come un potenziale $\tilde{V} \sim \frac{1}{r\alpha}$: questa è l'approssimazione di Hartree-Fock.

In questa approssimazione, la soluzione ψ è il prodotto delle auto-funzioni ϕ di un elettrone singolo. La funzione d'onda dello stato considerato (usando solamente due elettroni) risulta essere

$$\psi(1, 2) = \phi_a(1)\phi_b(2)$$

dove a e b sono dei numeri quantici:

$$\{a, b\} \in \text{CSCO}$$

Lo stato ψ non può essere uno stato che descrive i due elettroni considerati. Scritto nel modo sopra, il primo elettrone ha numeri quantici a , mentre il secondo ha numeri quantici b . Infatti, scambiando i gradi di libertà dei due elettroni si ha

$$\psi(2, 1) = \phi_a(2)\phi_b(1) \neq \phi_a(1)\phi_b(2) = \psi(1, 2)$$

L'unico modo per costruire una funzione d'onda anti-simmetrica (in quanto si tratta di uno scambio di fermioni, cioè gli elettroni) risulta essere

$$\psi_F(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(1)\phi_b(2) - \phi_a(2)\phi_b(1)]$$

Infatti si ha

$$\psi_F(2, 1) = -\psi_F(1, 2)$$

Quando si costruiscono le funzioni d'onda che descrivono fermioni, non basta risolvere l'equazione di Schrödinger, ma bisogna rendere la risposta anti-simmetrica. Solo in questo modo la funzione d'onda descrive correttamente due fermioni. Per due bosoni, sempre nell'approssimazione di particelle indipendenti, la soluzione dev'essere simmetrica per scambio di gradi di libertà

$$\psi_B(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_a(1)\phi_b(2) + \phi_a(2)\phi_b(1)] \implies \psi_B(2, 1) = \psi_B(1, 2)$$

Si vede una conseguenza della relazione per i fermioni. Ponendo due fermioni nello stesso stato, cioè $a = b$, la funzione d'onda è nulla

$$a = b \implies \boxed{\psi_F(1, 2) = 0}$$

Due fermioni non possono occupare lo stesso stato di particella singola (cioè la versione generale del principio di esclusione di Pauli). Pauli la introdusse per giustificare il fatto che gli elettroni non si trovassero tutti nello stato fondamentale. Tuttavia, quanto ricavato è una pura e semplice conseguenza della anti-simmetria della funzione d'onda.

Riassunto. Tutto quanto fatto suggerisce l'esistenza di una correlazione nel moto di due (o più) fermioni anche nel caso in cui non siano interagenti (ad esempio trascurando la forza debole di due neutrini). Solamente far parte dello stesso sistema impedisce la possibilità di avere gli stessi numeri quantici.

Seconda ipotesi. Si suppone la separabilità dello spin. Si consideri il caso in cui si possano separare i gradi di libertà di spin dai gradi di libertà spaziali. Per esempio, questo implica che il fatto che l'elettrone abbia spin up o down prescinde dalla sua posizione. La soluzione presenta due parti

$$\psi = \phi(\vec{r}, \dots)\chi(s)$$

Si studia come sono fatte le due parti. Si possono considerare quattro casi in base alla parità di tali due funzioni. Per parità concorde, la funzione d'onda ψ è totalmente simmetrica. Per parità discorde, la funzione d'onda è totalmente dispari. La funzione d'onda delle due particelle è

$$\psi(1, 2) \propto [\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) \pm \phi_a(\vec{r}_2)\phi_b(\vec{r}_1)] \chi_{\text{spin}} = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_{\text{spin}}$$

Il termine tra parentesi è la funzione d'onda che descrive solamente i gradi spaziali. Della funzione χ si sanno già molte proprietà: essa descrive particelle con spin $\frac{1}{2}$. Si è visto esistere gli stati

$$|++\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \quad |--\rangle$$

che hanno spin totale $s = 1$ e proiezione pari a 1, 0 e -1 (perché sono gli stati del tripletto). Tali stati sono simmetrici. Lo stato con spin totale $s = 0$ (singoletto) è anti-simmetrico

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$

In quanto la funzione prodotto ψ dev'essere totalmente anti-simmetrica, un sistema di due elettroni può avere una parte spaziale simmetrica soltanto se si trovano nello stato di singoletto. Due fermioni hanno parte spaziale anti-simmetrica soltanto se si trovano in uno stato di tripletto.

Si studia la probabilità di trovare due elettroni vicini cioè $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$. Dalla scrittura completa di ψ si ha

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} 2\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2), & \text{parte spaziale simmetrica} \\ 0, & \text{parte spaziale anti-simmetrica} \end{cases}$$

Se la parte spaziale è anti-simmetrica, allora la probabilità di trovare due elettroni nello stesso punto è nulla. Esiste una correlazione nel loro moto ancora prima di considerare delle interazioni. In uno stato spazialmente anti-simmetrico, gli elettroni tendono a stare lontani (si ricordi che non stanno nemmeno interagendo). [immagine] Una funzione d'onda anti-simmetrica corrisponde ad una densità di probabilità nulla per $r \rightarrow 0$ (e così all'infinito per quadrato-integrabilità). Viceversa, per funzione d'onda simmetrica, si ha densità di probabilità positiva (non zero) all'origine. La distanza media di due elettroni è maggiore per la funzione d'onda spaziale anti-simmetrica.

Lezione 33

mar 29 nov
2022 13:30

[r] Se non si considera la repulsione coulombiana, i due stati potrebbero avere la stessa energia. [r] Ora si consideri l'interazione coulombiana. Lo stato con energia minore è quello con gli elettroni lontani, cioè la funzione d'onda è anti-simmetrica. L'energia in assenza della repulsione è minore dell'energia in presenza. [r] Per la parte spaziale anti-simmetrica, gli elettroni si trovano nello stato di tripletto (spin simmetrico), per la parte spaziale simmetrica, essi si trovano nello stato di singoletto (spin anti-simmetrico).

Si osserva una tendenza naturale a disporre N elettroni nella configurazione di massima anti-simmetria spaziale compatibilmente alla funzione d'onda totale sempre anti-simmetrica. Pertanto, la natura tende a realizzare dei sistemi con spin massimo, cioè di una configurazione simmetrica. Risulta naturale costruire oggetti magnetici: lo spin degli elettroni tende ad essere allineato. La massima simmetria degli spin è chiamata regola di Hund dalla chimica.

Funzione d'onda per più fermioni. Finora si sono trattate due particelle. Si vuole costruire una funzione d'onda totalmente anti-simmetrica per N fermioni identici. Se si trattano gli stati di particella indipendente, allora una funzione d'onda totalmente anti-simmetrica si può scrivere come

$$\psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_a(1) & \varphi_a(2) \\ \varphi_b(1) & \varphi_b(2) \end{vmatrix}$$

Per N particelle si ha

$$\psi(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_a(1) & \varphi_a(2) & \dots & \varphi_a(N) \\ \varphi_b(1) & \varphi_b(2) & \dots & \varphi_b(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{vmatrix}$$

il determinante è detto di Slater: ha le proprietà di anti-simmetria di cui si ha bisogno. Le funzioni d'onda costruite in questo modo sono dette determinanti.

Proposizione. Si vedono alcune proprietà:

- scambiando due particelle, cioè scambiando due righe, il determinante cambia segno;
- se $a = b$ (o qualunque altri due) il determinante è nullo perché ha due righe proporzionali.

Proposizione. Si vedono alcune conseguenze. La prima riguarda l'ordine di riempimento dei livelli: si riempiono i livelli ad energia minore e, probabilmente, richiede più energia mettere un fermione nel livello successivo che porre un elettrone nello stesso livello, ma con spin opposto. I livelli energetici si addensano verso i livelli elevati, mentre ci sono grandi salti tra i livelli minori. Si arriva velocemente al livello $E = 0$. Questa configurazione spiega:

- quando gli elettroni si addensano agli alti livelli, basta un'energia $E \sim k_B T$ affinché un elettrone sia liberato dall'atomo;
- un gas di elettroni è incompressibile: non si può condensare tutti gli elettroni nei livelli più bassi.

I bosoni sono descritti da una funzione d'onda totalmente simmetrica: non c'è limite al numero di bosoni che si possono porre nello stato fondamentale. Se si abbassa la temperatura in modo tale che l'ordine di energia $k_B T$ sia più piccolo del salto per andare al livello successivo, allora non ci possono essere bosoni nel primo stato eccitato. Un sistema in tale stato è un superfluido, cioè un liquido che scorre senza viscosità. Un gas di ^4He (cioè un bosone perché costituito da due protoni, due neutroni e due elettroni) può diventare un superfluido, ma non un gas di elettroni. D'altra parte ^3He è un fermione e non può costituire un superfluido.

La distinzione tra fermioni e bosoni con le loro configurazioni spiega la superconduttività: le coppie di Cooper sono bosoni che portano la corrente elettrica. Si spiegano anche i calori specifici dei materiali.

Considerazione sugli operatori. Gli operatori non devono distinguere le particelle identiche. Si consideri l'hamiltoniana

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + W(\vec{r}_1) + Y(\vec{r}_2)$$

In generale, essa non è valida. Lo risulta essere qualora $W = Y$ e $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$.

17 Simmetrie e leggi di conservazione

Si veda Feynman vol. III, cap. 17.

17.1 Simmetria

Si traduce a livello quantistico la presenza di una simmetria in un sistema. Si vede un esempio. Si supponga di studiare il moto di un elettrone attorno ad un filo (indefinito) carico. Il sistema ha una simmetria rotazionale attorno al filo (posto lungo l'asse z). Una rotazione attorno al filo non varia la fisica grazie alla simmetria. A livello quantistico, si consideri la situazione generale che il sistema sia descritto da uno stato $|\psi_1\rangle$ all'istante iniziale. Passa del tempo e il sistema evolve nello stato

$$|\psi_2\rangle = \hat{U}(t) |\psi_1\rangle$$

Si studia la presenza della simmetria. Si consideri di partire da uno stato $|\psi'_1\rangle$ ruotato di un angolo φ rispetto $|\psi_1\rangle$. Il legame tra i due è

$$|\psi'_1\rangle = \hat{U}_R |\psi_1\rangle$$

Ad una rotazione nello spazio fisico corrisponde un operatore unitario nello spazio dei ket. Il nuovo stato iniziale è $|\psi'_1\rangle$. Se il sistema si trova in $|\psi_1\rangle$ e finisce in $|\psi_2\rangle$, allora, partendo da $|\psi'_1\rangle$, il sistema finisce in

$$|\psi'_2\rangle = \hat{U}_R |\psi_2\rangle$$

Se la fisica del sistema è simmetrica per la rotazione \hat{U}_R , allora risulta chiaro che

$$|\psi'_2\rangle = \hat{U}(t) |\psi'_1\rangle$$

dove $\hat{U}(t)$ è lo stesso operatore prima e dopo la rotazione. Da queste relazioni si ha

$$|\psi'_2\rangle = |\psi'_2\rangle \iff \hat{U}(t)\hat{U}_R |\psi_1\rangle = \hat{U}(t) |\psi'_1\rangle = |\psi'_2\rangle = \hat{U}_R |\psi_2\rangle = \hat{U}_R \hat{U}(t) |\psi_1\rangle$$

Questa relazione deve valere per ogni stato, dunque vale a livello operatoriale. Pertanto

$$\hat{U}_R \hat{U}(t) = \hat{U}(t) \hat{U}_R \implies [\hat{U}_R, \hat{U}(t)] = 0$$

La relazione sul commutatore fornisce la simmetria in meccanica quantistica. L'operatore della simmetria commuta con l'operatore di evoluzione temporale. Un sistema fisico è simmetrico rispetto l'operazione generica \hat{Q} qualora

$$[\hat{Q}, \hat{U}(t)] = 0$$

L'operatore \hat{Q} può essere una rotazione lungo un asse, una traslazione, una inversione di coordinate, etc. L'operatore di evoluzione temporale infinitesimo è

$$\hat{U}(dt) = 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H} dt$$

La relazione del commutatore si può scrivere come

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

per un operatore che corrisponde una simmetria.

17.2 Simmetria e leggi di conservazione

Si consideri lo stato di un sistema al quale, applicando \hat{Q} , si ottiene lo stato stesso con un termine di fase

$$|\psi'\rangle = \hat{Q} |\psi_0\rangle = e^{i\delta} |\psi_0\rangle$$

Si applica questa ipotesi al caso precedente. Lo stato iniziale è

$$\hat{Q} |\psi_1\rangle = e^{i\delta} |\psi_1\rangle$$

Il sistema evolve e si trova nello stato

$$|\psi_2\rangle = \hat{U}(t) |\psi_1\rangle$$

Se \hat{Q} è un operatore di simmetria, allora

$$\hat{Q} |\psi_2\rangle = \hat{Q} \hat{U}(t) |\psi_1\rangle = \hat{U}(t) \hat{Q} |\psi_1\rangle = \hat{U}(t) e^{i\delta} |\psi_1\rangle = e^{i\delta} \hat{U}(t) |\psi_1\rangle = e^{i\delta} |\psi_2\rangle$$

Se \hat{Q} è operatore di simmetria ($[\hat{Q}, \hat{H}] = 0$) e $\hat{Q} |\psi_1\rangle = e^{i\delta} |\psi_1\rangle$, allora \hat{Q} applicato a qualunque stato evoluto temporale riproduce il medesimo stato a meno dello stesso fattore di fase

$$\hat{Q} |\psi_2\rangle = e^{i\delta} |\psi_2\rangle$$

La proprietà dello stato iniziale vale in qualunque stato evoluto. Se esiste una proprietà che vale sempre, allora esiste una quantità conservata: si ha una legge di conservazione. Il valore della fase δ è fisso e costante al passare del tempo.

Rotazioni. Si considerino nuovamente le rotazioni. Il potenziale è invariante per rotazioni: si ha simmetria cilindrica. L'operatore di simmetria di rotazione attorno un asse è

$$\hat{U}_R(\varphi) = \exp\left[-i\frac{\varphi}{\hbar}\hat{J}_z\right]$$

Gli stati, a cui si applica l'operatore, forniscono se stessi a meno di un termine di fase ($m\hbar$) sono [r]

$$\exp\left[-i\frac{\varphi}{\hbar}\hat{J}_z\right]|\psi\rangle = \exp\left[-i\frac{\varphi}{\hbar}m\hbar\right]|\psi\rangle$$

Se il sistema è invariante per rotazioni lungo z (c'è simmetria) e lo stato iniziale ha una proiezione definita lungo l'asse z pari a $m\hbar$ allora la quantità m è conservata, cioè è una costante del moto. [r]

Se l'hamiltoniana (essenzialmente il potenziale) ha una simmetria per rotazione attorno ad un asse arbitrario e se si parte da uno stato con proiezione di momento angolare definito lungo tale asse, allora tale proiezione del momento si conserva. La condizione affinché l'operazione di rotazione sia una simmetria è

$$[\hat{U}_R, \hat{H}] = 0$$

Per una rotazione infinitesima si ha

$$\hat{U}_R(d\varphi) = 1 - i\frac{d\varphi}{\hbar}\hat{J}_z$$

Pertanto, condizione necessaria (e sufficiente?) [r] affinché si abbia conservazione della proiezione del momento angolare è

$$[\hat{J}_z, \hat{H}] = 0$$

Nella base comune, l'hamiltoniana si conserva perché potenziale conservativo e \hat{J}_z si conserva perché commuta con l'hamiltoniana. [r] Tutte le quantità che commutano con l'hamiltoniana sono conservate per questo risulta importante trovarle osservando le simmetrie del problema. Si consideri il momento angolare orbitale

$$\hat{L}_z \propto d\varphi$$

La relazione sul commutatore precedente implica

$$\left[d\varphi, \frac{p^2}{2m} + V(r, \theta, \varphi)\right] = 0 \implies [d\varphi, V] = 0$$

Il momento angolare \hat{L}_z causa una rotazione, ma p^2 è il modulo di un vettore che è invariante per rotazioni: questa è una interpretazione della commutazione tra questi due termini. Dunque

$$[d\varphi, V] = d\varphi(V\psi) - V d\varphi\psi = d\varphi(V)\psi = 0 \implies d\varphi V = 0 \implies V = V(r, \theta)$$

questo corrisponde alla presenza di simmetria per rotazione attorno all'asse z . Quindi

$$d\varphi V = 0 \implies \hat{L}_z \text{ costante del moto}$$

Similmente se il potenziale è sfero-simmetrico $V = V(r)$, allora si conserva il momento angolare lungo qualsiasi asse

$$[\hat{L}, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{L}^2, \hat{H}] = 0$$

si conserva il momento totale. Bisogna applicare la teoria dei gruppi: si studiano quali operazioni sono simmetrie.

Parità. L'operatore parità \hat{P} svolge l'operazione $\hat{x} \rightarrow -\hat{x}$. Sia \hat{H} invariante per cambio di parità. Si parta dallo stato

$$|\psi'_0\rangle = \hat{P} |\psi_0\rangle = e^{i\delta} |\psi_0\rangle$$

Si applica nuovamente l'operatore

$$\hat{P} |\psi'_0\rangle = \hat{P} \hat{P} |\psi_0\rangle = I |\psi_0\rangle$$

L'operatore parità è idempotente. Inoltre, vale

$$\hat{P} |\psi'_0\rangle = \hat{P} e^{i\delta} |\psi_0\rangle = e^{i\delta} \hat{P} |\psi_0\rangle = e^{i2\delta} |\psi_0\rangle$$

Unendo questo con la relazione precedente, si ha

$$e^{2i\delta} = 1$$

Se l'operatore parità \hat{P} è un operatore di simmetria e se lo stato viene trasformato a meno di un fattore di fase, allora

$$e^{i\delta} = \pm 1 \implies \delta = 0, \pi$$

Pertanto

$$\hat{P} |\psi_0\rangle = \pm |\psi_0\rangle$$

Il segno (cioè δ) è una costante del tempo. Il segno positivo corrisponde a parità pari, il segno negativo corrisponde a parità dispari.

Osservazione. Molte (ma non tutte) leggi fisiche rimangono inalterate per l'applicazione dell'operatore parità \hat{P} . Per esempio sono tutte le leggi dell'elettrodinamica, la gravità e la cromodinamica quantistica, ma non ne sono un esempio il settore elettrodebole (bosoni vettori e neutrini).

Un sistema con parità definita (o pari o dispari) mantiene la parità. Solamente grazie alla parità si può affermare che alcune transizioni non sono permesse.

17.3 Evoluzione temporale e valori medi

Si è vista la relazione debole (quella forte si è vista con la descrizione di Heisenberg)

$$d_t \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \langle \partial_t \hat{A} \rangle$$

Se $\partial_t \hat{A} = 0$ allora \hat{A} è candidato ad essere costante del moto. Se, inoltre, $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ allora

$$d_t \langle \hat{A} \rangle = 0 \implies \langle \hat{A} \rangle \text{ costante del moto}$$

Parte V

Teoria delle perturbazioni

Metodi perturbativi. Finora si è studiata la ricerca di autovalori ed auto-funzioni di hamiltoniane indipendenti dal tempo. Si vede un metodo approssimato, un altro si vede in Struttura della Materia. Questo metodo permette di trovare solo le soluzioni analitiche. Esso si tratta della teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo a cui segue subito la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo.

18 Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo

Il problema da risolvere è

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

Lezione 34

mer 30 nov
2022 13:30

Non si può risolvere esattamente questa equazione pertanto bisogna approssimare

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1, \quad \lambda \ll 1$$

Si supponga che \hat{H}_p sia piccolo rispetto ad \hat{H}_0 . Si suppone di risolvere il problema in cui è presente solo \hat{H}_0 e si cercano soluzioni che si possono scrivere come serie di potenze in λ . La speranza è che la serie di potenze sia rapidamente convergente per cui bastano i primi termini della serie per avere una buona descrizione della soluzione. Si cercano soluzioni analitiche in λ . Un caso tipico è un elettrone in un atomo immerso in un campo elettromagnetico. I campi sono meno intensi dell'attrazione del nucleo, hanno un effetto debole: si spera di trattare i campi come una perturbazione rispetto al sistema costituito dal solo nucleo e atomo. Il parametro di accoppiamento λ è proporzionale al campo elettrico o magnetico e, in base alla loro intensità, su tale parametro si fa l'espansione in serie di potenze.

Osservazione. Non è detto che le soluzioni di \hat{H} siano funzioni analitiche in λ . Un esempio è dato dalla superconduzione: BCS [r] e le vibrazioni reticolari non sono una soluzione analitica perché dipende da $e^{-\frac{1}{\lambda}}$ [r].

Bisogna fare anche un'altra considerazione. Classicamente, esistono punti di equilibrio stabile ed instabile. Il metodo della teoria delle perturbazioni funziona nel primo caso, mentre nel secondo caso, una perturbazione causa una catastrofe.

18.1 Metodo generale del calcolo perturbativo

Per ipotesi si sa risolvere

$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_n\rangle$$

I ket $|\varphi_n\rangle$ costituiscono una base dello spazio di Hilbert \mathcal{H} . Dunque, le funzioni d'onda $|\psi_n\rangle$ perturbate di \hat{H} sono espandibili su tale base imperturbata [r]. Bisogna risolvere il seguente problema

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

dove le funzioni d'onda sono

$$|\psi_n\rangle = \sum_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k | \psi_n \rangle = \sum_k d_{nk} |\varphi_k\rangle$$

Il calcolo delle funzioni d'onda perturbate è portato avanti nella rappresentazione degli stati imperturbati. L'approssimazione appare quando si scrivono i coefficienti d_{nk} . Bisogna distinguere due casi: degenerazione o meno degli autovalori $E_n^{(0)}$.

18.1.1 Perturbazione su stati non degeneri

L'ipotesi è

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_n\rangle$$

dove $E_n^{(0)}$ è non degeneri. Lo stato perturbato è

$$|\psi_n\rangle = d_{nn}(\lambda) |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} d_{nk}(\lambda) |\varphi_k\rangle \equiv N(\lambda) \left[|\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}(\lambda) |\varphi_k\rangle \right]$$

[r] dove $d_{nn} \equiv N$ è un fattore di fase globale che si determina in base alla normalizzazione. Devono valere tre condizioni:

- Se $\lambda = 0$ allora

$$N(0) = 1, \quad c_{nk}(0) = 0$$

perché deve valere $\hat{H} = \hat{H}_0$. Questo non succede quando il sistema è instabile.

- L'essenza del metodo è data da $c_{nk}(\lambda)$ espansi su λ

$$c_{nk}(\lambda) = c_{nk}^{(0)} + \lambda c_{nk}^{(1)} + \lambda^2 c_{nk}^{(2)} + \dots$$

Si cercano condizioni analitiche.

- La terza condizione è l'espansione in serie dell'energia [r]

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

Dunque, deve valere

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) \left[|\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\varphi_k\rangle + \dots \right] \\ &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) \left[|\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\varphi_k\rangle + \dots \right] \end{aligned}$$

Si eguagliano i termini in ordine crescente.

Ordine zero. L'ordine zero, λ^0 , è

$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_n\rangle$$

cioè l'equazione iniziale che si ottiene per $\lambda \rightarrow 0$.

Primo ordine. Il primo ordine, λ , è

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \hat{H}_0 |\varphi_k\rangle &= E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle + E_n^{(1)} |\varphi_n\rangle \\ E_n^{(1)} |\varphi_n\rangle &= \hat{H}_1 |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) |\varphi_k\rangle \end{aligned}$$

Nella seconda riga si è sostituito $\hat{H}_0 |\varphi_0\rangle$ con l'equazione sopra. [r] Moltiplicando per $\langle \varphi_n |$ si ottiene

$$\boxed{E_n^{(1)} = \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle, \quad \lambda E_n^{(1)} = \langle \varphi_n | \hat{H}_p | \varphi_n \rangle}$$

La prima correzione in λ è il valore di aspettazione del termine perturbativo dell'hamiltoniana \hat{H}_p sugli stati imperturbati. Nella rappresentazione delle coordinate si ha

$$\lambda E_n^{(1)} = \int \varphi_n^*(\vec{x}) \lambda \hat{H}_1 \varphi_n(\vec{x}) d^3x = \int |\varphi_n(\vec{x})|^2 \hat{H}_p(\vec{x}) d^3x$$

[r]

Si trovano i coefficienti $c_{nk}^{(1)}$. Si moltiplica per $\langle \varphi_m |$ con $m \neq n$. Si ottiene

$$0 = \langle \varphi_m | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle + c_{nm}^{(1)} (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \implies \boxed{\lambda c_{nk}^{(1)} = \lambda \frac{\langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}}$$

La perturbazione mescola gli stati con certi pesi proporzionali all'elemento di matrice della perturbazione tra due stati imperturbati normalizzato rispetto la differenza di energia tra i due stati. Pertanto

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda) \left[|\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \lambda \frac{\langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\varphi_k\rangle + o(\lambda) \right]$$

Si trova la costante di normalizzazione

$$\begin{aligned}\langle \psi_n | \psi_n \rangle &= |N|^2 \left[\langle \varphi_n | + \sum_{k \neq n} \lambda c_{nk}^{*(1)} \langle \varphi_k | + o(\lambda) \right] \left[| \varphi_n \rangle + \sum_{k' \neq n} \lambda c_{nk'}^{(1)} | \varphi_{k'} \rangle + o(\lambda) \right] \\ &= |N|^2 [1 + 0 + 0 + o(\lambda)] \equiv 1 \implies N = 1 + o(\lambda)\end{aligned}$$

Dunque, la soluzione al primo ordine è

$$| \psi_n \rangle = | \varphi_n \rangle + \sum_{k \neq n} \lambda \frac{\langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} | \varphi_k \rangle + o(\lambda)$$

Esempio. La perturbazione di un campo elettrico è

$$\hat{H}_p = -q\mathcal{E}\hat{z}$$

La correzione al prim'ordine è data dal valore di aspettazione di \hat{H}_p sullo stato $\varphi_n(\vec{x})$. Se la funzione φ_n ha parità definita, il modulo quadro è pari, ma la perturbazione è dispari e l'integrale è nullo.

Osservazione. Ottenuta l'espressione, si possono studiare i suoi limiti di validità. Si cerca una serie convergente (velocemente) in λ . Affinché la serie sia convergente, occorre che i termini dell'espansione diventino più piccoli dell'ordine precedente. [r] Si hanno due condizioni:

- la serie dell'energia converge qualora il valore $\langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle$ è piccolo rispetto a $E_n^{(0)}$;
- gli elementi off-diagonal $\langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle$ per gli stati imperturbati devono essere molto minore di $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$.

Secondo ordine – parte prima. Si ha

$$\hat{H}_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} | \varphi_k \rangle + \hat{H}_1 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} | \varphi_k \rangle = E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} | \varphi_k \rangle + E_n^{(1)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} | \varphi_k \rangle + E_n^{(2)} | \varphi_n \rangle$$

Per ottenere l'energia si moltiplica per $\langle \varphi_n |$ per ottenere

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \varphi_k \rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \varphi_k \rangle = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Pertanto, la correzione al secondo ordine dell'energia è

$$\lambda^2 E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_k | \hat{H}_p | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Osservazione. Al primo ordine compaiono i valori di aspettazione dell'hamiltoniana \hat{H}_p sullo stato non perturbato φ_n (cioè gli elementi diagonali). Al secondo ordine sono presenti anche gli altri elementi. Al denominatore compare ancora $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$. Ci si aspetta che gli stati lontani in energia, rispetto allo stato $E_n^{(0)}$, contribuiscono sempre meno alla somma perché la differenza di energia è al denominatore. Si ha la speranza di troncare la somma quando i coefficienti diventano sufficientemente piccoli.

Si supponga che $| \varphi_n \rangle$ sia lo stato fondamentale cioè

$$E_n^{(0)} \leq E_k^{(0)}, \quad \forall k$$

Le correzioni al secondo ordine sono negative: la perturbazione spinge lo stato fondamentale più in basso.

Si supponga l'esistenza di uno stato k più importante degli altri cioè o è vicino a $E_n^{(0)}$ (quindi il denominatore è piccolo) oppure il modulo è grande (rispetto ad uno). Se lo stato k è sopra il livello n (cioè ha energia maggiore), allora le correzioni al secondo ordine spingono n verso il basso. Se lo stato k si trova sotto a k , allora n sale. I due stati tendono a respingersi.

Secondo ordine – parte seconda. Si ottengono i coefficienti moltiplicando per $\langle \varphi_m |$ per $m \neq n$

$$c_{nk}^{(2)} \text{ esercizio, scrivere in termini di } c_{nk}^{(1)}$$

18.1.2 Perturbazione su stati degeneri

[r] Ad un livello energetico $E_n^{(0)}$ corrispondono più auto-stati $|\varphi_n^i\rangle$. Si suppone che essi siano già ortogonali

$$\langle \varphi_n^i | \varphi_n^j \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ij}$$

Si ripete la procedura precedente. Si ha

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda) \left[\sum_{i=1}^{g_n} \alpha_i |\varphi_n^i\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^{g_k} \beta_i |\varphi_k^i\rangle \right]$$

dove g_n è il grado di degenerazione del livello n -esimo (per l'atomo di idrogeno si ha $g_n = 2n^2$, dove il fattore 2 tiene conto dello spin). [r] Il secondo addendo corrisponde alla somma su tutti i numeri quantici (anche quelli non presenti esplicitamente). Si determinano solamente i coefficienti α_i . Questo stato nell'equazione dell'hamiltoniana

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

Primo ordine. Si ha

$$\hat{H}_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_i \beta_i |\varphi_k^i\rangle + \hat{H}_1 \sum_i \alpha_i |\varphi_n^i\rangle = E_n^{(1)} \sum_i \alpha_i |\varphi_n^i\rangle + E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_i \beta_i |\varphi_k^i\rangle$$

[r]

Per ottenere l'energia si moltiplica per $\langle \varphi_n^j |$

$$\sum_i \alpha_i \langle \varphi_n^j | \hat{H}_1 | \varphi_n^i \rangle = E_n^{(1)} \alpha_j$$

Si definiscono gli elementi della matrice della perturbazione sugli stati degeneri che corrispondono ad $E_n^{(0)}$

$$H_{ji} = \langle \varphi_n^j | \hat{H}_1 | \varphi_n^i \rangle$$

Tale matrice ha dimensione $g_n \times g_n$. L'equazione precedente diventa

$$\sum_i H_{ji} \alpha_i = E_n^{(1)} \alpha_j \implies H \vec{\alpha} = E_n^{(1)} \vec{\alpha}$$

Il problema del calcolo delle correzioni al primo ordine per uno stato degeneri è diventato un problema agli autovalori. Bisogna diagonalizzare la perturbazione nel sottospazio degeneri. Si deve calcolare

$$\det[H - E_n^{(1)} I] = 0$$

In generale, le correzioni all'energia $E_n^{(1)}$ sono in numero pari a g_n . I valori degeneri potrebbero avere correzioni diverse. Per ogni valore $E_n^{(1)}$ si trova l'autovettore corrispondente: si hanno g_n autovettori. Essi diagonalizzano l'hamiltoniana perturbata \hat{H}_1 nel sottospazio degeneri [r].

Osservazione. Non si diagonalizza \hat{H}_1 in tutto lo spazio perché se così fosse, si potrebbe diagonalizzare simultaneamente \hat{H}_0 e \hat{H}_1 ottenendo gli auto-stati esatti, ma questo si sarebbe già fatto.

Esempio. Si supponga di partire da sei stati degeneri di energia $E_n^{(0)}$. Si inserisce una perturbazione. All'energia si aggiunge $E_n^{(1)}$ di cui si hanno sei valori (magari anche uguali). Gli stati hanno energia (al primo ordine) diversa e corrispondono all'hamiltoniana $\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$. Ogni nuovo stato è combinazione lineare degli stati degeneri iniziali che sono autovettori della matrice \hat{H}_1 nello spazio degenero.

Lezione 35

ven 02 dic
2022 10:30

19 Effetto Stark dell'atomo di idrogeno

Cohen EXII. L'effetto Stark è lo spostamento e la divisione delle linee spettrali dovuti alla presenza di un campo elettrico esterno. Si considera un atomo di idrogeno immerso in un campo elettrico esterno diretto lungo l'asse z . L'hamiltoniana perturbativa è

$$\hat{H}_p = -q\vec{\mathcal{E}} \cdot \hat{\vec{x}} = -q\mathcal{E}\hat{z}$$

I campi elettrici che si possono creare sono sempre minori dell'attrazione tra l'elettrone ed il nucleo: non modificano sostanzialmente il problema. Dunque, l'hamiltoniana totale è

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p = \hat{H}_0 - q\mathcal{E}\hat{z} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}, \quad \lambda = -\frac{q\mathcal{E}}{\dim(q\mathcal{E})}$$

Si utilizza il campo elettrico (insieme alla carica) come parametro di espansione ed accoppiamento.

Stato fondamentale. I numeri quantici dello stato fondamentale sono $n = 1$, $l = 0$ e $m = 0$. Lo stato sarebbe degenero rispetto lo spin, però non lo si considera. Dunque, lo stato non è degenero. Pertanto, la correzione al primo ordine dell'energia è

$$\lambda E_{100}^{(1)} = \langle 100 | \hat{H}_p | 100 \rangle = -q\mathcal{E} \langle 100 | \hat{z} | 100 \rangle = -q\mathcal{E} \int |\varphi_{100}(\vec{x})|^2 z d^3x = 0$$

Le soluzioni all'atomo di idrogeno hanno parità $P = (-1)^l$ a causa delle armoniche sferiche. Nell'integrale si cambia la parità: il modulo quadro non cambia, ma z cambia segno; l'integrando è dispari. Infatti nel valor di aspettazione, \hat{z} è un operatore con parità dispari, ma gli stati hanno parità definita secondo l . Per queste ragioni di parità, il valore di aspettazione della correzione al primo ordine è nullo. Si calcola la correzione al secondo ordine

$$\lambda^2 E_{100}^{(2)} = q^2 \mathcal{E}^2 \sum_{n \neq 1} \sum_{l, m} \frac{|\langle nlm | \hat{z} | 100 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

La somma coinvolge anche gli stati del continuo dell'atomo di idrogeno ($E > 0$). Si calcola il valore di aspettazione

$$\langle nlm | \hat{z} | 100 \rangle$$

Risulta fondamentale sfruttare le simmetrie. La perturbazione ha rotto una simmetria sferica facendola diventare cilindrica: esiste un asse privilegiato. In tale simmetria, \hat{L}_z è un buon numero quantico perché conservato. Infatti, l'operatore commuta con l'hamiltoniana in quanto $[\hat{z}, \hat{L}_z] = 0$ e $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$. Si ha

$$\hat{L}_z(\hat{z} | nlm \rangle) = \hat{z} \hat{L}_z | nlm \rangle = m\hbar(\hat{z} | nlm \rangle)$$

Lo stato $\hat{z}|nlm\rangle$ è auto-stato del momento angolare con autovalore $m\hbar$. Questo deriva solamente da una questione di simmetria. Pertanto,

$$\langle nlm|\hat{z}|n'l'm'\rangle \neq 0 \iff m = m'$$

Nasce una delle prime regole di selezione. Condizione affinché il valore di aspettazione non sia nullo è che

$$\Delta m = m - m' = 0$$

Per lo stato fondamentale si ha $m' = 0$ e dunque $m = 0$. Pertanto bisogna preoccuparsi della sommatoria dei valori

$$\langle nl0|\hat{z}|100\rangle$$

Ora l'espressione particolare del potenziale diventa rilevante. L'espressione esplicita del valor medio è

$$\langle nlm|\hat{z}|n'l'm'\rangle = \int_0^\infty \int_\Omega R_{nl}^*(r)(Y_l^m)^*(\theta, \varphi)zR_{n'l'}(r)Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi)r^2 d\Omega dr$$

La parte angolare per lo stato fondamentale dell'atomo di idrogeno è

$$\int_\Omega (Y_l^0)^* \hat{z} Y_0^0 d\Omega, \quad z = r \cos \theta \propto r Y_1^0$$

L'integrale si può scrivere come

$$\langle l0|(|10\rangle \otimes |l'm'\rangle) = \int_\Omega (Y_l^0)^* Y_1^0 Y_{l'}^{m'} d\Omega$$

Nel caso in esame si ha

$$\int_\Omega (Y_l^0)^* Y_1^0 Y_0^0 d\Omega = c \langle l0|10\rangle = \delta_{l1}$$

Si ricordi che Y_0^0 è una costante. Pertanto, la parte radiale del valore di aspettazione cercato è

$$\langle nlm|\hat{z}|100\rangle = c\delta_{l1}\delta_{m0}$$

Il secondo delta dipende dalla simmetria cilindrica. Il primo delta dipende dalla potenza di z che compare nel valore di aspettazione. Dunque

$$\langle nlm|\hat{z}|100\rangle = c \int_0^\infty \int_\Omega R_{nl}^* z R_{10} \delta_{l1} \delta_{m0} r^2 d\Omega dr$$

Il suo modulo quadro è una funzione del tipo

$$|\langle nlm|\hat{z}|100\rangle|^2 = a_0^2 f(n)$$

Studiando le proprietà generali delle funzioni R_{nl} si può scrivere

$$\lambda^2 E_{100}^{(2)} = -q^2 \mathcal{E}^2 a_0^2 \sum_{n=2}^\infty \frac{f(n)}{\frac{1}{2}\mu c^2 \alpha^2 (1 - \frac{1}{n^2})} = -8\pi \varepsilon_0 \mathcal{E}^2 a_0^3 \sum_{n=2}^\infty \frac{n^2 f(n)}{n^2 - 1}$$

dove

$$f(n) = \frac{1}{3} \frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}, \quad e^2 = \frac{q^2}{4\pi \varepsilon_0} = \hbar \alpha c, \quad a_0 = \frac{\hbar}{\mu \alpha c}$$

Si noti che la correzione è negativa: lo stato fondamentale si è abbassato.

Primo stato eccitato. Si consideri il primo stato eccitato $n = 2$. Si trascura lo spin, la struttura fine ed iperfine: lo stato energetico è quattro volte degenerare

$$|200\rangle, \quad |211\rangle, \quad |210\rangle, \quad |21-1\rangle$$

Si deve diagonalizzare la perturbazione nel sottospazio degenerare. In questo caso, bisogna calcolare gli elementi di matrice

$$\langle 2lm | \hat{z} | 2l'm' \rangle \propto \delta_{mm'}$$

Per i ragionamenti di prima, lo stato $\hat{z} | 2l'm' \rangle$ ha momento angolare $m'\hbar$. La matrice (le cui entrate sono nell'ordine $|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle$) è

$$\begin{bmatrix} \langle 200 | \hat{z} | 200 \rangle & \langle 200 | \hat{z} | 210 \rangle & 0 & 0 \\ \langle 210 | \hat{z} | 200 \rangle & \langle 210 | \hat{z} | 210 \rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle 211 | \hat{z} | 211 \rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle 21-1 | \hat{z} | 21-1 \rangle \end{bmatrix}$$

La parità della armoniche sferiche è $(-1)^l$. Gli stati $l = 0$ sono pari, gli stati $l = 1$ sono dispari. L'operatore \hat{z} è dispari. Se gli stati hanno stessa parità, allora il valor di aspettazione di \hat{z} è nullo. Gli integrali dei valori di aspettazione sono diversi da zero quando calcolati su stati con numero quantico l diverso. Quindi, la matrice da diagonalizzare è

$$\begin{bmatrix} 0 & A & 0 & 0 \\ A^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A \equiv \langle 200 | \hat{z} | 210 \rangle$$

Si può solo diagonalizzare la sottomatrice rilevante, perché si vedono già due autovalori pari a zero. Pertanto, la correzione al primo ordine agli stati $|211\rangle$ e $|21-1\rangle$ è nulla: non si ha correzione. Anche con un campo elettrico, quei due livelli non cambiano energia. Si diagonalizza

$$q\mathcal{E} \begin{bmatrix} 0 & A \\ A^* & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = E_2^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} -E_2^{(1)} & q\mathcal{E}A \\ q\mathcal{E}A^* & -E_2^{(1)} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \vec{0}$$

Il valore di aspettazione rilevante è

$$\begin{aligned} A &= \langle 200 | \hat{z} | 210 \rangle = \int_0^\infty \frac{1}{(2a_0)^3} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{2r}{\sqrt{3}a_0} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) r \cdot r^2 dr \int (Y_0^0)^* \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0 Y_1^0 d\Omega \\ &= \text{esercizio, funzione gamma, } x \equiv \frac{r}{a_0} \\ &= -3a_0 \end{aligned}$$

Si noti che alla prima riga, nel secondo integrale, la Y_1^0 è reale e quindi coincide con il proprio complesso coniugato, pertanto l'integrale risulta essere un prodotto scalare. Gli autovalore della diagonalizzazione sono

$$E_2^{(1)} = \pm 3a_0 q\mathcal{E}$$

L'effetto di correzione è lineare nel campo elettrico. Nello stato fondamentale, la correzione è quadratica nel campo elettrico. Nelle unità naturali del problema, il campo elettrico è piccolo, pertanto le correzioni quadratiche sono minori di quelle lineari: risulta più evidente la separazione di $n = 2$ che l'abbassamento di $n = 1$. Gli autovettori corrispondenti sono

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Nell'approssimazione sviluppata dell'atomo di idrogeno, senza il campo elettrico, sono presenti quattro livelli con la stessa energia. Due livelli ($|21 \pm 1\rangle$) hanno autovalore nullo per la correzione

al prim'ordine: non cambiano energia. Gli altri due livelli si sono mescolati: uno sale ed uno scende di una quantità pari a $E_2^{(1)}$. Lo stato con energia maggiore corrisponde a

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle - |210\rangle)$$

Lo stato con energia minore corrisponde a

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle + |210\rangle)$$

Spettroscopicamente, senza il campo elettrico si osserva una linea di emissione a frequenza ν ; con il campo elettrico si vedono tre righe: una a frequenza ν e due separate, una sopra ed una sotto.

19.1 Considerazioni sulla simmetria del problema

Si è partiti da una hamiltoniana e si è aggiunta una perturbazione

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p$$

In generale, la simmetria di \hat{H} è minore della simmetria di \hat{H}_0 . Le auto-funzioni di \hat{H}_0 hanno la simmetria del sistema imperturbato. Le auto-funzioni di \hat{H} hanno la simmetria del sistema perturbato. Pertanto, le combinazioni delle auto-funzioni imperturbate che bisogna creare per diagonalizzare il termine perturbativo nel sottospazio degenere sono le combinazioni che hanno la simmetria del sistema perturbato perché hanno i numeri quantici del sistema perturbato. Prima di fare i calcoli, si può ragionare sulle simmetrie [r].

Sistema imperturbato a simmetria sferica. [r] Si diagonalizza un oggetto con simmetria cilindrica utilizzando una base che ha simmetria sferica. Pertanto, l non è più un buon numero quantico (perché riferito a \hat{L}^2), ma m continua ad esserlo (perché riferito a $L\hat{h}_z$). Bisogna trovare quattro combinazioni lineari dei quattro stati imperturbati che corrispondono al fatto che sia solo m ad essere un buon numero quantico (cioè una quantità conservata). Solamente alcune combinazioni sono possibili. Lo stato $|21-1\rangle$ con $m = -1$ rimane per conto proprio perché ha già buoni numeri quantici cioè $m = -1$: non esiste alcun altro stato con cui si può combinare. Lo stesso avviene per $|211\rangle$ con $m = 1$. D'altra parte, gli altri due stati hanno $m = 0$. Sebbene l sia diverso, esso non è più un buon numero quantico. Pertanto, i due stati si possono combinare

$$\sin\theta|200\rangle + \cos\theta e^{i\varphi}|210\rangle, \quad \cos\theta|200\rangle - \sin\theta e^{i\varphi}|210\rangle$$

Uno è l'ortogonale dell'altro.

Osservazione. Bisogna tenere a mente un'altra cosa. Tutti gli stati, tranne quello fondamentale, sono degeneri. Bisogna diagonalizzare le perturbazioni nel sottospazio degenere utilizzando la base di \hat{H}_0 non perturbata cioè oggetti con simmetrie e caratteristiche diverse dalla perturbazione. Per diagonalizzare bisogna essere accorti. All'esterno della matrice sono presenti gli stati non perturbati. Bisogna calcolare autovettori ed autovalori della matrice diagonale. Quanto più si è accorti nel scegliere gli stati imperturbati come base, tanto più si può rendere la matrice diagonale a blocchi. Bisogna scegliere una base di modo che la simmetria degli stati della base sia vicina alla simmetria della perturbazione. Risulta conveniente scegliere una base che si adatta alla simmetria della perturbazione.

20 Struttura fine degli atomi idrogenoidi

La fisica è l'arte delle approssimazioni. Bisogna saper fare l'approssimazione giusta al momento adatto. L'interazione maggiore degli atomi idrogenoidi è data dal potenziale coulombiano.

L'hamiltoniana imperturbata è

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r), \quad V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{e^2}{r}$$

Nello studio degli atomi idrogenoidi si sono trascurati:

- gli effetti relativistici in quanto

$$\frac{v}{c} \approx Z\alpha$$

- Gli effetti magnetici dell'elettrone. Esso ha momento magnetico e si comporta come una calamita (lo stesso per i protoni ed i neutroni). Inoltre è carico e si muove attorno al nucleo generando un altro campo magnetico.

Non tutti gli effetti hanno lo stesso impatto. Si studia l'atomo di idrogeno, ma la descrizione vale per tutti gli atomi idrogenoidi.

Primo effetto – cinematica relativistica. Per semplicità, si considera infinita la massa del protone. L'energia relativistica è

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$$

Il limite non relativistico si basa su

$$\vec{p} = \gamma m \vec{v} \implies \frac{p}{mc} \ll 1$$

L'energia diventa

$$\begin{aligned} E &= c\sqrt{p^2 + (mc)^2} = mc^2 \left[1 + \left(\frac{p}{mc} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} = mc^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{p}{mc} \right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{p}{mc} \right)^4 + o\left(\frac{p}{mc} \right)^4 \right] \\ &= mc^2 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} + o\left(\frac{p^4}{m^3 c^2} \right) \end{aligned}$$

Il primo addendo è l'energia di riposo, ma è influente nella trattazione non relativistica della meccanica quantistica. Il secondo addendo è l'hamiltoniana H_0 imperturbata. Il terzo addendo è la prima correzione relativistica H_k . Si stima l'ordine di grandezza

$$\frac{H_k}{H_0} = \frac{\frac{p^4}{8m^3 c^2}}{\frac{p^2}{2m}} = \frac{p^2}{4(mc)^2} \approx \frac{(mv)^2}{4(mc)^2} = \frac{1}{4} \left(\frac{v}{c} \right)^2 \approx \alpha^2$$

Secondo effetto – accoppiamento di spin-orbita. Si considera l'interazione tra la spin e l'orbita. Un elettrone ha momento magnetico

$$\vec{\mu} = g_e \frac{q}{2m} \vec{S}, \quad g_e \approx 2$$

Nel sistema a riposo dell'elettrone, l'elettrone risente del campo magnetico \vec{B}' generato dal moto del protone. Vale

$$\vec{B}' = \gamma \left[\vec{B} - \frac{\vec{v}}{c^2} \times \vec{E} \right] - \frac{\gamma^2}{\gamma + 1} \vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{B}), \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c} \right)^2}} = 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{v}{c} \right)^2 + o\left(\frac{v}{c} \right)^2$$

dove \vec{E} e \vec{B} sono i campi elettrici e magnetici nel riferimento del protone (il laboratorio). Il campo magnetico nel riferimento dell'elettrone è

$$\vec{B}' = \left[1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} \right] \left[\vec{B} - \frac{\vec{v}}{c^2} \times \vec{E} \right] - \frac{1 + \frac{v^2}{c^2} + \dots}{2 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} + \dots} \vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{B}) = \vec{B} - \frac{\vec{v}}{c^2} \times \vec{E} + o\left(\frac{v^2}{c^2} \right)$$

Ad un campo magnetico è associata un'energia potenziale di un momento magnetico

$$\mathcal{E}_p = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}' \approx -\vec{\mu} \cdot \left[\vec{B} - \frac{v}{c^2} \times \vec{E} \right] = \mathcal{E}_p^{(1)} + \mathcal{E}_p^{(2)}$$

Il primo addendo è

$$\mathcal{E}_p^{(1)} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Nel secondo addendo si considera solamente il potenziale coulombiano. Tuttavia, il protone ha dimensioni finite, quindi il potenziale non può andare come $\frac{1}{r}$ ovunque. Nel riferimento del protone, la forza elettrica è

$$q\vec{E} = -(\mathrm{d}_r V) \frac{\vec{r}}{r}$$

Il secondo addendo diventa

$$\mathcal{E}_p^{(2)} = -\frac{gq}{2m} \vec{S} \cdot \frac{\vec{v}}{c^2} \times \vec{r} \frac{1}{r} (\mathrm{d}_r V) \frac{1}{q} = \frac{g}{2m^2 c^2} (\vec{r} \times m\vec{v}) \cdot \vec{S} \frac{1}{r} \mathrm{d}_r V = \frac{g}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \mathrm{d}_r V \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Da questa espressione si comprende perché questa è l'interazione spin-orbita. Dalla relatività speciale, per ragioni cinematiche compare una correzione: la precessione di Thomas. L'energia potenziale di Thomas è

$$\mathcal{E}_p^T = \vec{S} \cdot \vec{\omega}_T, \quad \vec{\omega}_T = \frac{\gamma^2}{\gamma + 1} \frac{\vec{a} \times \vec{v}}{c^2}$$

Nell'approssimazione in esame si ha

$$\frac{v}{c} \ll 1 \implies \vec{\omega}_T = -\frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} (\mathrm{d}_r V) \vec{L}$$

Dunque, si ottiene il termine di interazione spin-orbita

$$H_{\mathrm{SO}} = \frac{g-1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \mathrm{d}_r V \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{g-1}{2m^2 c^2} \frac{e^2}{r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Lezione 36

L'ordine di grandezza dell'interazione spin-orbita rispetto l'interazione di Coulomb è

lun 12 dic
2022 13:30

$$\frac{H_{\mathrm{SO}}}{H_0} = \frac{\frac{1}{m^2 c^2} \frac{e^2}{r^3} \hbar^2}{\frac{e^2}{r}} = \frac{\hbar^2}{(mcr)^2} \sim \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} = \alpha^2, \quad r \sim a_0 \sim \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Terzo effetto – termine di Darwin. Non si ricava il termine di Darwin in questo corso: bisogna fare il limite non relativistico dell'equazione di Dirac. Tale termine è dato da

$$H_{\mathrm{D}} = \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 V(r) = -\frac{e^2 \hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 \frac{1}{r} = \frac{\hbar^2 e^2 \pi}{2m^2 c^2} \delta^3(x)$$

Il suo ordine di grandezza è [r]

$$\frac{\hbar^2 e^2 \pi}{2m^2 c^2} |\psi(0)|^2$$

In quanto il contributo maggiore è in $r = 0$, allora questo termine dà contributo maggiore se il momento angolare degli elettroni è nullo. Noto

$$\|\psi\|^2 = \int |\psi(r)|^2 \mathrm{d}^3 r = 1$$

e che le funzioni d'onda dell'atomo di idrogeno decadono esponenzialmente, allora si può approssimare il modulo quadro all'origine

$$\|\psi\|^2 = |\psi(0)|^2 \int \mathrm{d}^3 r = |\psi(0)|^2 a_0^3 \implies |\psi(0)|^2 \sim \frac{1}{a_0^3} \sim \left[\frac{me^2}{\hbar^2} \right]^3$$

Pertanto, il termine di Darwin è

$$H_D \sim \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c^2} \left[\frac{m e^2}{\hbar^2} \right]^3 = m c^2 \frac{e^8}{\hbar^4 c^4} = m c^2 \alpha^4$$

[r] Inoltre

$$H_0 \sim m v^2 \sim m (\alpha c)^2 = m c^2 \alpha^2$$

Dunque

$$\frac{H_D}{H_0} \sim \alpha^2$$

Esercizio. Ricavare

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta^3(x)$$

Si suggerisce di utilizzare

$$I = \int_{\Omega} \int_0^\varepsilon f(r) \nabla^2 \frac{1}{r} dr d\Omega = f(0) \int_{\Omega} d\Omega \int_0^\varepsilon \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{r} dr$$

dove $f(r)$ è una funzione abbastanza liscia. Si utilizzi il teorema della divergenza.

Soluzione. La funzione $\frac{1}{r}$ è proporzionale alla funzione di Green del laplaciano in $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$. Pertanto, dalla definizione di funzione di Green e dal suo calcolo per il laplaciano in tre dimensioni si ha

$$\nabla^2 G = \delta(x), \quad G = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{r}$$

da cui la soluzione (vedere Fisica Matematica).

Riassunto. L'hamiltoniana completa è

$$H = m c^2 + \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{H_0} + V(r) - \underbrace{\frac{p^4}{8m^3 c^2}}_{H_k} + \underbrace{\frac{g-1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} (d_r V) \vec{L} \cdot \vec{S}}_{H_{SO}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 V(r)}_{H_D}$$

dove

$$H_k, H_{SO}, H_D \sim \alpha^2 H_0$$

Questa è la struttura fine dell'atomo di idrogeno.

Struttura iperfine. La considerazione del momento magnetico dei nucleoni e degli elettroni produce la struttura iperfine degli atomi idrogenoidi. Si consideri l'atomo di idrogeno: si ha un protone ed un elettrone. Sia I lo spin $\frac{1}{2}\hbar$ del protone. [r] Il suo momento magnetico è

$$\vec{M}_I = g_p \frac{q}{2m_p} \vec{I}, \quad g_p \approx 5.585$$

La massa del protone è 1836 volte la massa dell'elettrone: gli effetti magnetici sono più piccoli di quelli dell'elettrone. Nell'energia è presente l'interazione di due calamite cariche in moto: esse generano campi magnetici. Si hanno effetti di spin-orbita dell'elettrone in orbita sul protone [r]. Alla struttura fine bisogna aggiungere l'hamiltoniana iperfine (hyperfine)

$$H_{\text{hf}} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{q}{m_e r^3} \vec{L} \cdot \vec{M}_I + \frac{1}{r^3} \left[3(\vec{\mu} \cdot \vec{n})(\vec{M}_I \cdot \vec{n}) - \vec{\mu} \cdot \vec{M}_I \right] + \frac{8\pi}{3} \vec{\mu} \cdot \vec{M}_I \delta^3(\vec{r}) \right]$$

dove \vec{n} è il versore congiungente il protone e l'elettrone [immagine].

Il primo addendo è l'effetto spin-orbita, cioè l'interazione del momento magnetico del protone nel campo magnetico generato dal moto dell'elettrone

$$\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q \vec{L}}{m_e r^3}$$

Il secondo addendo è l'interazione dipolo-dipolo (magnetico) tra l'elettrone ed il protone. Il terzo addendo è il termine di contatto di Fermi. Esso deriva dall'interazione del momento magnetico dell'elettrone con il campo magnetico del protone all'interno del protone stesso (si ricordi che l'elettrone passa del tempo considerevole all'interno del protone, almeno per gli orbitali s).

Ordine di grandezza. I primi due addendi hanno ordine pari a

$$H_{\text{hf},1}, H_{\text{hf},2} \sim \frac{q^2 \hbar^2}{m_e m_p r^3} \frac{\mu_0}{4\pi} = \frac{e^2 \hbar^2}{m_e m_p c^2} \frac{1}{r^3}$$

Un termine della struttura fine è

$$H_{\text{SO}} \sim \frac{e^2}{m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{r^3}$$

Il loro rapporto è dell'ordine di

$$\frac{H_{\text{hf},1,2}}{H_{\text{SO}}} \sim \frac{m_e}{m_p} \approx \frac{1}{1836}$$

I termini dell'interazione iperfine sono 1836 volte più piccoli rispetto al termine di struttura fine il quale, a sua volta, è α^2 volte più piccolo di H_0 . Anche per l'ultimo termine si ha un ordine di

$$\frac{H_{\text{hf},3}}{H_{\text{D}}} \sim \frac{m_e}{m_p} \approx \frac{1}{1836}$$

20.1 Calcolo delle correzioni

In quanto vale $H_{\text{hf}} \ll H_0$, si applica la teoria delle perturbazioni. La base di H_0 [r] è

$$|nlsmm_s\rangle, \quad E_n = -\frac{E_0}{n^2}$$

dove $s = \frac{1}{2}$. L'energia è altamente degenera. Fissato n , il numero quantico angolare assume i valori $l = 0, 1, \dots, n-1$, mentre il numero quantico magnetico assume i valori $m = -l, \dots, 0, \dots, l$. La degenerazione dell'energia è

$$g(E) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

Per $n \geq 2$, si applica la teoria delle perturbazioni degeneri.

L'hamiltoniana completa è

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})}_{H_0} - \underbrace{\frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2}}_{H_k} + \underbrace{\frac{g-1}{2m^2 c^2} \frac{Ze^2}{r^3} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}}_{H_{\text{SO}}} + \underbrace{\frac{Z\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \delta^3(\hat{r})}_{H_{\text{D}}}$$

[r] Si vogliono utilizzare le costanti del moto. Il problema principale è dato dal prodotto scalare tra i momenti angolari: né \hat{L}_j né \hat{S}_j commutano con $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$. Globalmente il sistema è simmetrico rispetto una rotazione totale. Infatti

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} \implies \hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} \implies \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \frac{1}{2} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2]$$

Inoltre, valgono le regole di commutazione

$$[\hat{J}_j, \hat{L}^2] = [\hat{L}_j + \hat{S}_j, \hat{L}^2] = [\hat{L}_j, \hat{L}^2] = 0, \quad [\hat{J}_j, \hat{S}^2] = 0$$

La stessa cosa vale per $[\hat{J}_j, \hat{S}^2]$. Si hanno le seguenti costanti del moto

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{S}^2] = [\hat{H}, \hat{J}_j] = [\hat{H}, \hat{J}^2] = 0$$

I buoni numeri quantici sono dati da queste costanti. Risulta utile cambiare base utilizzando

$$|nlsjm_j\rangle$$

Il CSCO risulta essere

$$\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$$

Bisogna passare dalla base $|nlsmm_s\rangle$ a quella sopra. [r] La nuova base tiene conto delle simmetrie del problema ed è comunque una base di \hat{H}_0 . [r]

Le hamiltoniane \hat{H}_k e \hat{H}_D presentano identiche correzioni [r]. L'hamiltoniana \hat{H}_{SO} è già diagonale sulla nuova base perché costituita da \hat{J}^2 e \hat{J}_z .

Hamiltoniana cinetica. Si calcola la prima correzione

$$\langle nlsmm_s | -\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} |nl'sm'm'_s\rangle$$

il numero quantico principale n è fissato perché bisogna diagonalizzare l'hamiltoniana nel sottospazio degenere. Inoltre, il numero di spin rimane $s = \frac{1}{2}$ perché l'elettrone non cambia natura. Si studiano alcune proprietà da poter applicare. Vale

$$[\hat{L}_j, \hat{p}^4] = 0, \quad \hat{L}_j(\hat{p}^4 |nlm\rangle) = \hat{p}^4 \hat{L}_j |nlm\rangle = \hat{p}^4 m_0 \hbar |nlm\rangle = m\hbar(\hat{p}^4 |nlm\rangle)$$

Lo stato $\hat{p}^4 |nlm\rangle$ ha la stessa proiezione del momento angolare di $|nlm\rangle$ cioè m . In quanto vale

$$[\hat{L}^2, \hat{p}^4] = 0 \implies \hat{L}^2(\hat{p}^4 |nlm\rangle) = \hbar^2 l(l+1)(\hat{p}^4 |nlm\rangle)$$

allora lo stato $\hat{p}^4 |nlm\rangle$ ha momento angolare l . Lo stesso vale per \hat{S}_j e \hat{S}^2 cioè m_s ed s [r]. Pertanto bisogna calcolare gli unici termini non nulli

$$\langle nlsmm_s | -\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} |nlsmm_s\rangle$$

L'hamiltoniana è diagonale nella base iniziale. Si utilizza un trucco. Si può scrivere l'hamiltoniana della correzione cinetica come

$$\hat{H}_k = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} = -\frac{1}{2mc^2} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} \right]^2$$

Mentre l'hamiltoniana imperturbata è

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

per cui si ha

$$\hat{H}_k = -\frac{1}{2mc^2} \left[\hat{H}_0 - V(r) \right]^2 = -\frac{1}{2mc^2} \left[\hat{H}_0 + \frac{Ze^2}{r} \right]^2$$

Dunque [r]

$$\langle \hat{H}_k \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle nlm | \left[\hat{H}_0 + \frac{Ze^2}{r} \right] \left[\hat{H}_0 + \frac{Ze^2}{r} \right] |nlm\rangle$$

Sapendo

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

segue

$$\langle \hat{H}_k \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle nlm | \left[E_n + \frac{Ze^2}{r} \right]^2 |nlm\rangle = -\frac{1}{2mc^2} \left[E_n^2 + 2E_n Ze^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} + (Ze^2)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nl} \right]$$

Non importano gli indici smm_s perché bisogna calcolare valori medi solamente della parte radiale. Se tali indici fossero diversi, allora facendo il bra-ket si ottiene zero. I valori di aspettazione sono

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} = \langle nl | \frac{1}{r} | nl \rangle = \frac{Z}{a_0} \frac{1}{n^2}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \dots = \frac{Z^2}{a_0^2} \frac{1}{n^3 (l + \frac{1}{2})}$$

Pertanto, il valore di aspettazione della correzione relativistica sugli stati perturbati è

$$\langle \hat{H}_k \rangle = -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^2 \left[\frac{(Z\alpha)^2}{n^3 (l + \frac{1}{2})} - \frac{3(Z\alpha)^2}{4n^4} \right] \delta_{ll'} \delta_{jj'} \delta_{m_j m_j'} = -\frac{1}{2} mc^2 \frac{(Z\alpha)^3}{n^3} \left[\frac{1}{l + \frac{1}{2}} + \frac{3}{4n} \right] \bar{\delta}$$

Termine di Darwin. A causa della funzione $\delta^3(\hat{r})$ si ha un contributo non nullo solamente per $l = 0$. Per tale valore si ha $j = l \pm \frac{1}{2}$. L'univo valore permesso è $j = \frac{1}{2}$ [r]. La matrice è diagonale. Il valore di aspettazione è

$$\langle \hat{H}_D \rangle = \frac{Z\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \langle \delta^3(\hat{r}) \rangle = mc^2 \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \delta_{l0} \delta_{m_j m_j'} \delta_{j \frac{1}{2}} \delta_{j' \frac{1}{2}}$$

in quanto si ha

$$\delta^3(\hat{r}) \sim |\psi(0)|^2 = R_{n0}^2(0) Y_0^0(\theta, \varphi)^2 = \frac{1}{4\pi} R_{n0}^2(0), \quad R_{n0}^2(0) = \frac{4}{n^3} \left[\frac{Z\alpha mc}{\hbar} \right]^3$$

Termine di interazione spin-orbita. Si utilizza la base nuova $|nlsm_j\rangle$. Si è già ricavata la somma di un momento l ed uno spin $\frac{1}{2}$. Siano $j = l + \frac{1}{2}$ e $m_j = m + \frac{1}{2}$. Allora

$$\begin{aligned} \hat{S} \cdot \hat{L} |j, m_j\rangle &= \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) |j, m_j\rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) - l(l+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] |j, m_j\rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 l |j, m_j\rangle \end{aligned}$$

Sia $j = l - \frac{1}{2}$. Allora

$$\hat{S} \cdot \hat{L} |j, m_j\rangle = -\frac{1}{2} \hbar^2 (l+1) |j, m_j\rangle$$

Bisogna diagonalizzare la perturbazione nel sottospazio degenere: il valore di aspettazione è diagonale sulla nuova base e vale

$$\langle nlsjm_j | \hat{H}_{SO} | nlsjm_j \rangle = \frac{g-1}{4m^2 c^2} Z e^2 \hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \int_0^\infty R_{nl}^2(r) \frac{1}{r^3} r^2 dr$$

L'integrale è pari a

$$\int_0^\infty R_{nl}^2(r) \frac{1}{r^3} r^2 dr = \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3} \frac{1}{n^3 l (l + \frac{1}{2}) (l + 1)}$$

Pertanto

$$\langle \hat{H}_{SO} \rangle = \frac{g-1}{4} \frac{(Z\alpha)^4 mc^2}{n^3 l (l + \frac{1}{2}) (l + 1)} \begin{cases} l, & j = l + \frac{1}{2} \\ -l-1, & j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Riassunto delle correzioni al primo ordine. Le correzioni al primo ordine dell'energia sono

$$E_n^{(1)} = \langle \hat{H}_k + \hat{H}_D + \hat{H}_{SO} \rangle = -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right]$$

dove si pone $g = 2$. Questa formula vale anche nel caso $l = 0$, cioè quando $j = \frac{1}{2}$.

Lezione 37

mar 13 dic
2022 13:30

Notazione spettroscopica. La notazione spettroscopica utilizza gli indici nl_j . Per il livello $n = 1$ si ha $l = 0$, $j = \frac{1}{2}$ e dunque $nl_j = 1s_{\frac{1}{2}}$ e la correzione è

$$E^{(1)} = -\frac{1}{8}mc^2(Z\alpha)^4$$

Per $n = 2$ si hanno due casi di l . Per $l = 0$ si ha $j = \frac{1}{2}$ quindi $nl_j = 2s_{\frac{1}{2}}$. La correzione è

$$E^{(1)} = -\frac{5}{128}mc^2(Z\alpha)^4$$

Per $l = 1$ si ha $j = \frac{1}{2}$ con $2p_{\frac{1}{2}}$ e $j = \frac{3}{2}$ con $2p_{\frac{3}{2}}$ le cui correzioni sono

$$E^{(1)} = -\frac{5}{128}mc^2(Z\alpha)^4, \quad E^{(1)} = -\frac{1}{128}mc^2(Z\alpha)^4$$

Struttura fine del primo livello eccitato. Gli stati $2s_{\frac{1}{2}}$ e $2p_{\frac{1}{2}}$ diminuiscono la propria energia di

$$E^{(1)} = -\frac{5}{128}mc^2(Z\alpha)^4$$

rispetto lo stato $n = 2$ otto volte degenero ($2n^2$). Essi sono due volte degeneri. Lo stato $2p_{\frac{3}{2}}$ è quattro volte degenero e si abbassa di

$$E^{(1)} = -\frac{1}{128}mc^2(Z\alpha)^4$$

La degenerazione di m_j è ancora presente in quanto tutte le componenti di \hat{J} commutano con l'hamiltoniana: il sistema è invariante per rotazioni. Inoltre, si ha una degenerazione accidentale per gli stati $2s_{\frac{1}{2}}$ e $2p_{\frac{1}{2}}$. Tale degenerazione è valida a tutti gli ordini. Infatti, partendo dall'equazione di Dirac, l'energia per un sistema idrogenoide è

$$E_{nj} = mc^2 \left[1 + \alpha^2 \left(n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha^2} \right)^{-2} \right]^{-\frac{1}{2}}$$

Essa è indipendente da l . L'espansione di questa espressione al quarto ordine in α risulta essere

$$E_{nj} = mc^2 - \frac{1}{2}mc^2 \frac{\alpha^2}{n^2} - \frac{1}{2}mc^2 \frac{1}{n^3} \left[\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right] \alpha^4 + o(\alpha^4)$$

Il secondo addendo si è ottenuto risolvendo l'equazione di Schrödinger con un potenziale coulombiano, il terzo addendo si è trovato dalla struttura fine. In realtà, la degenerazione non esiste in natura. Tramite la teoria quantistica dei campi, le fluttuazioni del campo elettromagnetico permettono di rimuovere la degenerazione tra $2s_{\frac{1}{2}}$ e $2p_{\frac{1}{2}}$ cioè i due livelli non hanno la stessa energia: il livello $2s_{\frac{1}{2}}$ ha energia maggiore del livello $2p_{\frac{1}{2}}$. La differenza è detta Lamb shift e corrisponde ad una radiazione di 1057.8 MHz.

Struttura iperfine del primo stato eccitato. La struttura iperfine rimuove tante degenerazioni, anche quella precedente. Vedere Cohen cap. XII. Considerando un atomo di idrogeno, al momento angolare dell'elettrone bisogna aggiungere il momento angolare del protone

$$\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$$

Aggiungendo tutte le interazioni studiate [r], i livelli energetici visti degeneri precedentemente si dividono. In ordine energetico decrescente: lo stato $2p_{\frac{3}{2}}$ si divide in $F = 2$ e $F = 1$; lo stato $2s_{\frac{1}{2}}$ si apre in $F = 1$ e $F = 0$; lo stato $2p_{\frac{1}{2}}$ si apre in $F = 1$ e $F = 0$.

Struttura fine ed iperfine dello stato fondamentale. Nella struttura fine, lo stato $n = 1$ cioè $1s_{\frac{1}{2}}$ scende di un'energia

$$E^{(1)} = -\frac{1}{8}mc^2\alpha^4$$

ma non viene diviso: esso è ancora due volte degenero. Nella struttura iperfine, bisogna aggiungere il momento angolare del protone e i livelli energetici si dividono in $F = 1$ e $F = 0$. La radiazione tra tali due stati è la radiazione di 21 cm dell'idrogeno atomico interstellare utilizzata in radioastronomia.

21 Effetto Zeeman

Si vede l'effetto Stark ma con il campo magnetico cioè l'effetto Zeeman. Si studia come cambiano i livelli energetici di un atomo di idrogeno in un campo magnetico $\vec{B} = B\vec{k}$ uniforme e costante. Si è visto com'è fatta l'hamiltoniana di una particella carica senza spin

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}(\hat{p} - q\vec{A})^2 + V(\hat{r}), \quad \mu \approx m_e$$

[r] Se \vec{B} è uniforme e costante, allora si può scegliere il potenziale vettore come

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}$$

da cui l'hamiltoniana diventa

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{r}) + \frac{\mu_B}{\hbar}\hat{\vec{L}} \cdot \vec{B} + \frac{q^2 B^2}{8\mu}r_{\perp}^2, \quad \mu_B = \frac{q\hbar}{2\mu}$$

dove μ_B è il magnetone di Bohr: l'unità magnetica portata dalla più piccola calamita cioè l'elettrone. Inoltre, la proiezione del raggio rispetto la direzione del campo magnetico è

$$r_{\perp}^2 = r^2 - \frac{(\vec{r} \cdot \vec{B})^2}{B^2}$$

Orientando l'asse z lungo il campo magnetico, l'hamiltoniana diventa

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

dove si ha

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{r}), \quad \hat{H}_1 = \frac{\mu_B}{\hbar}B\hat{L}_z, \quad \hat{H}_2 = \frac{q^2 B^2}{8\mu}(x^2 + y^2)$$

[r] Il secondo termine è lineare nel campo magnetico, mentre l'ultimo è quadratico.

Ordine di grandezza. Si stimano gli ordini di grandezza di tali oggetti. Il magnetone di Bohr risulta essere

$$\mu_B \approx 5.788 \times 10^{-5} \text{ eV T}^{-1}$$

Il campo magnetico più intenso creato in laboratorio (2019) è stato di 45.5 T. In una risonanza magnetica nucleare, il campo magnetico più intenso è di 3 T. Il Large Hadron Collider ha magneti di 8 T. Pertanto, l'ordine di grandezza dell'hamiltoniana imperturbata è

$$\langle \hat{H}_0 \rangle \approx mc^2\alpha^2 \approx 10 \text{ eV}$$

Il primo termine della perturbazione è

$$\langle \hat{H}_1 \rangle = \mu_B B = 5.8 \times 10^{-5} \text{ eV} \cdot B \approx 5.8 \times 10^{-5} \text{ eV}$$

L'effetto di un campo magnetico rispetto all'interazione coulombiana è al massimo cinque ordini più piccoli. Si studia il secondo termine di perturbazione. Se si considera l'atomo di idrogeno,

si possono approssimare le dimensioni dell'atomo in termini dell'atomo di Bohr $x^2 + y^2 = a_0^2$. Dunque, l'ordine di grandezza è

$$\langle \hat{H}_2 \rangle = \frac{q^2 B^2}{8\mu} a_0^2 \approx (B\mu_B)^2 \frac{1}{mc^2 \alpha^2} \sim 10^{-11} \text{ eV}$$

Risulta chiaro che non si possono trascurare

- gli effetti fini perché hanno ordine $\langle \hat{H}_f \rangle \sim \alpha^2 \hat{H}_0 \sim 5 \times 10^{-4} \text{ eV}$;
- gli effetti iperfini perché hanno ordine $\langle \hat{H}_{hf} \rangle \sim \frac{\hat{H}_f}{1836} \sim 3 \times 10^{-7} \text{ eV}$.

[r] In tutto questo manca l'interazione del momento magnetico all'interno di un campo magnetico:

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -g \frac{q}{2\mu} \vec{S} \cdot \vec{B} = -g \frac{q}{2\mu} S_z B$$

Esso ha ordine di grandezza simile a $\langle \hat{H}_1 \rangle$.

Per la trattazione completa si veda Cohen cap. XII. Si considera \vec{B} sufficientemente intenso da poter trascurare gli effetti iperfini, ma sufficientemente debole da non considerare il termine quadratico del campo magnetico cioè \hat{H}_2 .

Osservazione. Il termine quadratico nel campo magnetico non è trascurabile quando

- gli altri termini sono nulli, ad esempio quando L_z^{tot} e S_z^{tot} sono nulli, come nello stato fondamentale dell'elio;
- i campi magnetici B sono molto intensi, 10^8 T ;
- compaiono i livelli di Landau: è presente un elettrone in un ciclotrone e dunque le dimensioni non si possono approssimare con $x^2 + y^2 = a_0^2$. [r]

L'hamiltoniana è data da

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}) + \hat{H}_k + \hat{H}_D + \underbrace{\frac{g-1}{2\mu^2 c^2} \frac{1}{r} (\text{d}_r V) \hat{L} \cdot \hat{S}}_{\hat{H}_{\text{SO}}} - \underbrace{\frac{q}{2\mu} B (\hat{L}_z + g\hat{S}_z)}_{\hat{H}_B}$$

[r] Si pone $g = 2$ consi del fatto che l'errore commesso è dell'ordine di α^5 . Si studiano tre casi:

- campo magnetico B debole, però sempre abbastanza intenso da trascurare gli effetti iperfini: si ha $\langle \hat{H}_B \rangle < \langle \hat{H}_{\text{SO}} \rangle$;
- campo magnetico B intenso, però sempre abbastanza debole da trascurare i termini quadratici in B^2 : si ha $\langle \hat{H}_B \rangle > \langle \hat{H}_{\text{SO}} \rangle$;
- caso generale, niente ipotesi aggiuntive sull'intensità del campo magnetico B (ma sempre con le due accezioni di trascurabilità di cui sopra).

L'intensità del campo è descritta in base alla grandezza relativa delle hamiltoniane correttive.

21.1 Campo magnetico debole

Si consideri il caso di campo magnetico debole, $\langle \hat{H}_B \rangle < \langle \hat{H}_{\text{SO}} \rangle$. Si tratta \hat{H}_B come una perturbazione sugli stati dell'hamiltoniana $\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{SO}}$. Questo non vuol dire che si è risolta tale hamiltoniana, ma significa utilizzare i suoi stati. Le hamiltoniane \hat{H}_k e \hat{H}_D traslano tutti i livelli energetici, ma non interagiscono con il momento angolare. In questo caso interessa l'interazione del campo magnetico con il momento angolare che apre, non trasla, i livelli

energetici [r].

L'hamiltoniana di guida (detta impropriamente imperturbata) è

$$\hat{H}_{\text{imp}} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{SO}} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{1}{2\mu^2 c^2} \frac{Ze^2}{r^3} \hat{L} \cdot \hat{S}$$

L'hamiltoniana perturbativa è

$$\hat{H}_p = \hat{H}_B = -\frac{qB}{2\mu} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$$

Gli effetti dei momenti angolari del protone sono soppressi dalla massa del protone: pesano in parte minore. Ricordando $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ e $J^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2$, l'hamiltoniana di partenza è

$$\hat{H}_{\text{imp}} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{SO}} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{1}{2\mu^2 c^2} \frac{Ze^2}{r^3} (J^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$$

mentre quella perturbativa è

$$\hat{H}_p = \hat{H}_B = -\frac{qB}{2\mu} (\hat{J}_z + \hat{S}_z)$$

[r] L'hamiltoniana imperturbata suggerisce di utilizzare la base $|l s j m_j\rangle$. Solamente \hat{S}_z non è diagonale a priori in tale base [r]. L'energia E_n è degenere su m_j perché $[\hat{J}, \hat{H}] = 0$: l'energia non può dipendere da tale numero quantico. Quando si diagonalizza la perturbazione sugli stati imperturbati bisogna solo diagonalizzare \hat{S}_z :

$$\langle j m_j | \hat{S}_z | j m'_j \rangle$$

Si studiano alcune proprietà. Valgono le regole di commutazione

$$[\hat{J}_z, \hat{S}_z] = [\hat{L}_z + \hat{S}_z, \hat{S}_z] = 0$$

Pertanto

$$\hat{J}_z (\hat{S}_z | j m'_j \rangle) = \hat{S}_z \hat{J}_z | j m'_j \rangle = \hbar m'_j \hat{S}_z | j m'_j \rangle$$

cioè lo stato $\hat{S}_z | j m'_j \rangle$ è auto-stato di \hat{J}_z con lo stesso autovalore di $| j m'_j \rangle$. Dunque

$$\langle j m_j | \hat{S}_z | j m'_j \rangle \neq 0 \iff m_j = m'_j$$

La perturbazione è diagonale in \hat{J}_z e, ora, pure in \hat{S}_z nella base scelta. In tale base si conosce il momento angolare totale, ma non il momento angolare di spin: bisogna cambiare la base per poter applicare \hat{S}_z .

Il momento angolare totale è la somma di l e lo spin $\frac{1}{2}$. Dunque si hanno i valori $j_{\pm} = l \pm \frac{1}{2}$. Si utilizzano le formule già viste

$$|j_{\pm} m_j\rangle = \pm \sqrt{\frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m_l = m_j - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{l \mp m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m_j + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Siano $j = l + \frac{1}{2}$ e $m_j = m_l + \frac{1}{2}$. Allora

$$|j, m_j\rangle \doteq \sqrt{\frac{l+m_l+1}{2l+1}} Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) |+\rangle + \sqrt{\frac{l-m_l}{2l+1}} Y_l^{m_l+1}(\theta, \varphi) |-\rangle$$

Sia $j = l - \frac{1}{2}$, $m_j = m_l + \frac{1}{2}$. Allora

$$|j, m_j\rangle \doteq \sqrt{\frac{l-m_l}{2l+1}} Y_l^{m_l} |+\rangle - \sqrt{\frac{l+m_l+1}{2l+1}} Y_l^{m_l+1} |-\rangle$$

Bisogna calcolare gli elementi diagonali di \hat{S}_z . Sia $j = l \pm \frac{1}{2}$. Allora

$$\begin{aligned}\langle jm_j | \hat{S}_z | jm_j \rangle &= \langle jm_j | \left[\frac{1}{2} c_+ \hbar \left| m_j - \frac{1}{2}, + \right\rangle - \frac{1}{2} c_- \hbar \left| m_j + \frac{1}{2}, - \right\rangle \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} [|c_+|^2 - |c_-|^2] = \dots = \pm \frac{\hbar m_j}{2l+1}\end{aligned}$$

[r] Dunque, la correzione all'energia al prim'ordine è

$$E^{(1)} = \langle jm_j | \hat{H}_B | jm_j \rangle = -\frac{qB}{2\mu} \hbar m_j \left[1 \pm \frac{1}{2l+1} \right]$$

Partendo da uno stato con l e $s = \frac{1}{2}$, l'interazione spin-orbita separa lo stato in due con $j = l \pm \frac{1}{2}$. Aggiungendo un campo magnetico, si rompe la simmetria sferica e non si ha più la degenerazione in m_j . Lo stato superiore $j = l + \frac{1}{2}$ si apre in tanti stati quanti sono m_j ognuno separato dal successivo da una energia

$$\Delta_+ = \frac{qB\hbar}{\mu} \frac{l+1}{2l+1}$$

Pure la riga inferiore $j = l - \frac{1}{2}$ si apre in stati separati da

$$\Delta_- = \frac{qB\hbar}{\mu} \frac{l}{2l+1}$$

Si ha una divisione diversa degli stati a seconda del valore di j . cfr fig. 17.2 Gasiorowicz.

Atomo di idrogeno. Sia

$$\mathcal{E} = \frac{qB\hbar}{2\mu}$$

Il livello fondamentale $n = 1$, $1s_{\frac{1}{2}}$, si apre in due [r] con differenza di energia pari a $2\mathcal{E}$. Il primo livello eccitato si divide in $2p_{\frac{3}{2}}$, $2p_{\frac{1}{2}}$ e $2s_{\frac{1}{2}}$. Il primo di questi si apre in quattro stati in base a m_j la cui separazione in energia è pari a $\frac{4}{3}\mathcal{E}$. Il terzo si separa in due. Il secondo si separa in due i cui livelli si trovano all'interno dei due provenienti da $2s_{\frac{1}{2}}$. La separazione tra questi quattro livelli è $\frac{2}{3}\mathcal{E}$.

21.2 Campo magnetico intenso

Si consideri il caso di campo magnetico intenso, $\langle \hat{H}_B \rangle > \langle \hat{H}_{SO} \rangle$. L'hamiltoniana \hat{H}_B appartiene alla parte imperturbata, mentre \hat{H}_{SO} è la perturbazione [r]. Si vede l'effetto Paschen-Back. L'hamiltoniana imperturbata è

$$\hat{H}_0 + \hat{H}_B$$

I buoni numeri quantici da utilizzare sono \hat{L}_z e \hat{S}_z in quanto rispettano la simmetria cilindrica del problema: \hat{J}^2 non fornisce più un buon numero quantico. Gli auto-stati da utilizzare per descrivere l'hamiltoniana imperturbata sono

$$|lsm_l m_s\rangle, \quad s = \frac{1}{2}$$

Si ha l'hamiltoniana già diagonalizzata

$$\langle \hat{H}_B \rangle = -\frac{qB}{2\mu} \hbar (m_l + 2m_s)$$

Ad n ed l fissato, l'hamiltoniana \hat{H}_B riduce la degenerazione da un numero iniziale $2(2l+1)$. Tuttavia, esistono ancora stati degeneri:

$$(m_l) + 2\left(\frac{1}{2}\right) = m_l + 1 = (m_l + 2) + 2\left(-\frac{1}{2}\right)$$

Lezione 38

mer 14 dic
2022 13:30

[r] cambiare indice i con j per evitare confusione con unità immaginaria

Esempio. Si consideri uno stato con $l = 1$. La proiezione del momento angolare m_l assume i valori ± 1 e 0 . La proiezione dello spin m_s assume i valori $\pm \frac{1}{2}$. Pertanto, il contributo dell'hamiltoniana \hat{H}_B risulta essere

m_l	$2m_s$	$m_l + 2m_s$
1	± 1	2, 0
0	± 1	1, -1
-1	± 1	0, -2

Il livello $l = 1$ è sei volte degenere, $2(2l + 1)$. Dalla tabella si nota che esso si separa in cinque livelli di cui uno è due volte degenere. Con gli stati imperturbati bisogna calcolare il valore di aspettazione della perturbazione data dall'operatore [r]

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = \hat{L}_z \hat{S}_z + \frac{1}{2} (\hat{L}_+ \hat{S}_- + \hat{L}_- \hat{S}_+)$$

Sugli stati non degeneri si ha

$$\langle m_l m_s | \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} | m_l m_s \rangle = \langle m_l m_s | \hat{L}_z \hat{S}_z | m_l m_s \rangle = \hbar^2 m_l m_s$$

Se lo stato è degenere, allora bisogna diagonalizzare la perturbazione nel sottospazio degenere. Tale sottospazio è costituito dagli elementi della base

$$|m_l, +\rangle, \quad |m_l + 2, -\rangle$$

Su tale base $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$ (cioè l'operatore della perturbazione) è già diagonale: gli operatori alzatore ed abbassatore producono prodotti scalari nulli e rimane solamente la componente lungo z . Pertanto, la rappresentazione matriciale dell'operatore risulta essere

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} \doteq \begin{bmatrix} \frac{1}{2} m_l & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} (m_l + 2) \end{bmatrix}$$

Le correzioni all'energia sono

$$E^{(1)} = \langle n l m_l m_s | \hat{H}_{SO} | n l m_l m_s \rangle = \frac{\hbar^2 m_l m_s}{2\mu c^2} \left\langle \frac{1}{r} d_r V \right\rangle$$

dove si ha

$$\left\langle \frac{1}{r} d_r V \right\rangle = \int_0^\infty R_{nl}^*(r) \frac{1}{r} (d_r V) R_{nl}(r) r^2 dr$$

21.3 Caso generale

Cohen cap. XII, §E-4 e complemento D_{XII}. Matrice 6×6 partendo $l = 1$ e $s = \frac{1}{2}$.

22 Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo

Le perturbazioni dipendenti dal tempo coinvolgono casi interessanti di studio come lo scambio di radiazione elettromagnetica: si ha una dipendenza dal tempo. Si considera un sistema che, quando non è perturbato, è descritto dall'hamiltoniana \hat{H}_0 di cui si conoscono gli auto-stati

$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$

Per semplicità, si suppone che lo spettro sia discreto e non degenere. Al tempo iniziale $t = 0$ si applica una perturbazione. Ad un tempo generico successivo, l'hamiltoniana è

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_p(t), \quad \hat{H}_p(t) = \lambda \hat{W}(t), \quad \lambda \ll 1$$

Alle volte λ può essere un parametro dimensionato. Si suppone che, all'istante iniziale, il sistema si trova nell'auto-stato $|\varphi_i\rangle$ imperturbato. Per tempi positivi $t > 0$, tale stato $|\varphi_i\rangle$ non è più auto-stato perché non ha più energia fissa ad ogni tempo. Si vuole calcolare la probabilità che al tempo t il sistema sia passato dall'auto-stato i -esimo all'auto-stato f -esimo di \hat{H}_0 :

$$P_{if}(t) : |\varphi_i\rangle \rightarrow |\varphi_f\rangle$$

Si vuole calcolare la probabilità di transizione [r] sotto l'effetto della perturbazione $\hat{H}_p(t)$ tra gli stati stazionari di \hat{H}_0 .

Si utilizza l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = [\hat{H}_0 + \lambda \hat{W}(t)] |\psi(t)\rangle, \quad |\psi(0)\rangle = |\varphi_i\rangle$$

Si vuole calcolare la probabilità

$$P_{if}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2$$

L'equazione di Schrödinger non è quasi mai risolvibile analiticamente in forma esatta. Si è potuto fare ciò per la risonanza magnetica nucleare perché sono presenti solamente due livelli. L'unica speranza è trovare una soluzione approssimata tramite la teoria delle perturbazioni. Se $\lambda = 0$ allora la soluzione dell'equazione è

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |\varphi_n\rangle$$

Come già visto per la risonanza magnetica, la maggior parte del comportamento di questa soluzione è già esplicitato ($c_n E_n$). [r] Tramite la variazione delle costanti arbitrarie, si scrive la soluzione come

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |\varphi_n\rangle$$

Inserendo questo ansatz nell'equazione di Schrödinger temporale si ha

$$\sum_n [i\hbar d_t c_n(t) + c_n(t) E_n] e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |\varphi_n\rangle = \sum_n c_n(t) [E_n + \lambda \hat{W}(t)] e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |\varphi_n\rangle$$

Cambiando l'indice $n \rightarrow k$ si ha

$$\sum_k i\hbar [d_t c_k(t)] e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}} |\varphi_k\rangle = \sum_k c_k(t) \lambda \hat{W} e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}} |\varphi_k\rangle$$

Si moltiplica per $\langle \varphi_n |$ per ottenere il prodotto scalare

$$i\hbar [d_t c_n(t)] e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} = \sum_k c_k(t) \lambda \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_k \rangle e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}}$$

si ricorda che $\langle \varphi_n | \varphi_k \rangle = \delta_{nk}$ in quanto lo spettro non è degenere, altrimenti sono presenti altre sommatorie. Siano

$$W_{nk}(t) \equiv \langle \varphi_n | \hat{W}(t) | \varphi_k \rangle, \quad \omega_{nk} \equiv \frac{E_n - E_k}{\hbar}$$

L'equazione diventa

$$i\hbar d_t c_n(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk}t} W_{nk}(t) c_k(t)$$

Questa è un'equazione esatta, non si è ancora fatta alcuna approssimazione. Al posto di cercare una funzione ignota $|\psi\rangle$ si cercano i suoi coefficienti sulla base $|\varphi_n\rangle$. L'equazione corrisponde ad

un sistema infinito di equazioni accoppiate.

Ora si approssima. Se $\lambda \ll 1$, allora si cercano le soluzioni analitiche in λ (si noti che potrebbero esistere soluzioni non analitiche più importanti, come la BCS nella superconduzione). Pertanto, le soluzioni $c_n(t)$ si devono espandere in serie di potenze in λ

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + o(\lambda^2)$$

Si inserisce questo ansatz nell'equazione precedente. L'ordine zero è dato da

$$i\hbar d_t c_n^{(0)}(t) = 0 \implies c_n^{(0)}(t) = \text{cost}$$

L'ordine r -esimo risulta essere

$$i\hbar d_t c_n^{(r)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} W_{nk}(t) c_k^{(r-1)}(t)$$

Questa equazione da una relazione di ricorrenza. Interessa il primo ordine.

Soluzione al primo ordine. A tempo negativo $t \leq 0$, il sistema si trova in un auto-stato dell'hamiltoniana imperturbata \hat{H}_0

$$|\psi(t)\rangle = |\varphi_i\rangle \implies c_n(t) = \begin{cases} 1, & n = i \\ 0, & n \neq i \end{cases}$$

A tempo $t = 0$ si aziona la perturbazione $\lambda \hat{W}(t)$. Anche se la perturbazione iniziasse ad agire in modo discontinuo, la funzione d'onda è comunque continua (anche nel caso estremo di una delta). Pertanto, a tutti gli ordini in λ si ha

$$c_n(0) = \delta_{ni}$$

Dunque

$$c_n^{(0)}(0) = \delta_{ni}, \quad c_n^{(r)}(0) = 0, \quad r \geq 1$$

Sapendo che il coefficiente dell'ordine zero è costante si ha

$$c_n^{(0)}(t) = \text{cost} = c_n^{(0)}(0) = \delta_{ni}, \quad t \geq 0$$

Quindi, l'equazione di Schrödinger per l'ordine r calcolato al primo ordine risulta essere

$$i\hbar d_t c_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} W_{nk}(t) c_k^{(0)}(t) = e^{i\omega_{ni}t} W_{ni}(t)$$

La soluzione si ottiene per integrazione dal tempo iniziale ad un tempo arbitrario

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}\tau} W_{ni}(\tau) d\tau$$

La probabilità di transizione cercata è

$$P_{if}(t) = |c_f(t)|^2 = \left| c_f^{(0)}(t) + \lambda c_f^{(1)}(t) + \lambda^2 c_f^{(2)}(t) + o(\lambda^2) \right|^2$$

Si studia il caso $f \neq i$. Si ha

$$c_f^{(0)}(t) = \delta_{fi} = 0$$

Pertanto, la probabilità all'ordine minore è

$$P_{if}(t) = \lambda^2 \left| c_f^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}\tau} \langle \varphi_f | \hat{H}_p | \varphi_i \rangle d\tau \right|^2$$

Soluzione al secondo ordine. L'equazione per l'ordine r calcolato al secondo ordine diventa [r]

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n^{(2)}(t') = \sum_k e^{i\omega_{nk}t'} W_{nk}(t') \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} e^{i\omega_{ki}t''} W_{ki}(t'') dt''$$

Integrando dal tempo iniziale ad un tempo t si ha

$$c_n^{(2)}(t) = \left[-\frac{i}{\hbar} \right]^2 \sum_k \int_0^t \int_0^{t'} e^{i\omega_{nk}t'} W_{nk}(t') e^{i\omega_{ki}t''} W_{ki}(t'') dt'' dt'$$

La probabilità risulta essere

$$P_{if}(t) = \left| \lambda c_f^{(1)}(t) + \lambda^2 c_f^{(2)}(t) + o(\lambda^2) \right|^2$$

Il coefficiente $c_f^{(2)}$ contribuisce nel doppio prodotto con $c_f^{(1)}$ prima del proprio quadrato.

22.1 Perturbazione costante

Per perturbazione costante si intende una perturbazione a gradino: improvvisamente interagisce con il sistema. Da potenziale nullo si passa ad un valore non nullo. [r] Il potenziale non dipende esplicitamente dal tempo, ma è ancora funzione degli operatori \hat{x} , \hat{p} , \hat{L} e \hat{S} .

Il sistema si trova in un auto-stato dell'hamiltoniana imperturbata. Al tempo $t = 0$, il potenziale nullo diventa costante. I coefficienti sono

$$c_n^{(0)} = \delta_{in}, \quad c_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \langle \varphi_n | \hat{V} | \varphi_i \rangle \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} dt' = \frac{V_{ni}}{E_n - E_i} (1 - e^{i\omega_{ni}t})$$

[r] La probabilità corrispondente è

$$P_{in}(t) = \left| c_n^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2}{(E_n - E_i)^2} \sin^2 \frac{E_n - E_i}{2\hbar} t = \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{\omega_{ni}t}{2}}{\left[\frac{\omega_{ni}}{2} \right]^2}$$

In funzione di ω_{ni} , il seno si annulla a $\frac{2\pi j}{t}$, $j \in \mathbb{Z}$. Da questo, lo stato i -esimo può transire a tutti gli stati con la probabilità sopra. La transizione può essere in energia maggiore o minore.

Osservazione. L'area è proporzionale a $\frac{2\pi}{t} t^2 \sim t$ (base per altezza). La probabilità non può essere maggiore dell'unità. Quanto studiato è solamente una parte della soluzione perché sono presenti gli altri ordini. Per un tempo grande, non ci si può fidare dei risultati ottenuti. Inoltre, più passa il tempo, la probabilità è sempre più simile ad una funzione delta $\delta(\omega_{ni})$: la probabilità di transizione agli stati con energia diversa è sempre meno probabile.

22.2 Perturbazione sinusoidale

Si consideri una perturbazione

$$\hat{W}(t) = \hat{A} e^{i\omega t} + \hat{A}^\dagger e^{-i\omega t}, \quad \omega > 0$$

dove l'operatore \hat{A} può dipendere da \hat{x} , \hat{p} , \hat{L} , \hat{S} , etc. La probabilità di transizione al primo ordine è proporzionale è

$$c_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \left[A_{ni} \int_0^t e^{i(\omega_{ni} + \omega)t'} dt' + A_{ni}^\dagger \int_0^t e^{i(\omega_{ni} - \omega)t'} dt' \right]$$

Per le proprietà degli operatori aggiunti, vale

$$(A^\dagger)_{ni} = A_{in}^*$$

Pertanto, si ha

$$\begin{aligned} c_n^{(1)}(t) &= \frac{1}{\hbar} \left[A_{ni} \frac{1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t}}{\omega + \omega_{ni}} + A_{ni}^\dagger \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} \right] \\ &= \frac{1}{\hbar} \left[-A_{ni} e^{i \frac{\omega + \omega_{ni}}{2} t} i \frac{\sin \frac{\omega + \omega_{ni}}{2} t}{\frac{\omega + \omega_{ni}}{2}} - A_{ni}^\dagger e^{i \frac{\omega - \omega_{ni}}{2} t} i \frac{\sin \frac{\omega - \omega_{ni}}{2} t}{\frac{\omega_{ni} - \omega}{2}} \right] \end{aligned}$$

Perturbazione sinusoidale per due stati discreti. Si trova il fenomeno della risonanza. Ad un tempo fissato t , la probabilità di transizione è

$$P(t) = \left| c_n^{(1)}(t) \right|^2$$

Si osservano tempi sufficientemente grandi, ma non così grandi da invalidare le predizioni. Il modulo quadro del primo termine di $c_n^{(1)}$ ha un picco in $-\omega_{ni}$. Il modulo quadro del secondo termine ha picco in ω_{ni} . Se la distanza $2\omega_{ni}$ dei due picchi è sufficientemente grande, cioè più grande della larghezza $\frac{4\pi}{t}$ dei picchi, allora la parte reale (cioè il termine di interferenza) dei due termini è trascurabile. Tra tutti i possibili stati raggiungibili, ce ne sono due particolari $\omega = \pm\omega_{ni}$. Si parte da $|i\rangle$ e si arriva a $|n\rangle$ salendo (assorbimento) o scendendo (emissione). Gli stati di transizione più probabili sono quelli per cui la differenza di energia corrisponde ai picchi ω_{ni} .

Perturbazione costante. La perturbazione costante corrisponde a

$$\omega = 0 \implies \omega_{ni} = 0$$

Osservazione. Questo fenomeno è detto assorbimento ed emissione stimolate. L'assorbimento corrisponde a

$$E_n = E_i + \hbar\omega$$

L'emissione corrisponde a

$$E_n = E_i - \hbar\omega$$

Dipendenza dal tempo della probabilità. Si consideri l'assorbimento alla frequenza ω_{ni} . Si supponga una perturbazione sinusoidale

$$\hat{W}(t) = \hat{W} \sin \omega t = \frac{\hat{W}}{2i} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

La probabilità di transizione $i \rightarrow n$ è

$$P(t) = \frac{|W_{ni}|^2}{4\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{\Delta\omega}{2} t}{\left[\frac{\Delta\omega}{2}\right]^2}, \quad \Delta\omega = \omega - \omega_{ni}$$

Lezione 39

Osservazione. In quanto si utilizza la teoria delle perturbazioni, i risultati non sono esatti: per $\Delta\omega \rightarrow 0$ si ha

gio 15 dic
2022 13:30

$$P_{in}(t, \omega_{ni}) = \frac{|W_{ni}|^2}{4\hbar^2} t^2$$

Risulta evidente che questo non può valere per tempi grandi perché la probabilità diventa maggiore dell'unità. Bisogna tenere presente che si sta studiando ordine per ordine, non l'espressione completa. La relazione sopra vale nel caso $P_{in} \ll 1$ cioè

$$t \ll \frac{\hbar}{|W_{ni}|}$$

Osservazione. Cohen C_{XIII}. Ci si chiede se la probabilità di transizione $i \rightarrow n$ trovata è corretta. Si consideri un sistema a due livelli. Quando si è studiata la risonanza magnetica, si è calcolata esattamente la probabilità di transizione dovuta ad un campo magnetico [r]. Risolvendo il sistema di (due) equazioni accoppiate con una perturbazione sinusoidale si ottiene

$$P_{in}(t, \omega) = \frac{|W_{ni}|^2}{|W_{ni}|^2 + \hbar^2(\Delta\omega)^2} \sin^2 \left[\frac{t}{2} \sqrt{\frac{|W_{ni}|^2}{\hbar^2} + (\Delta\omega)^2} \right]$$

Questa equazione è esatta, ma tradotta per un sistema a due livelli. Se $|W_{ni}| \ll 1$ allora la formula esatta coincide con la probabilità di transizione trovata dalla teoria perturbativa. [r] Se fossero presenti solamente due livelli, la formula approssimata cessa di validità dopo un certo tempo, mentre la formula esatta permette di capire che esiste un'oscillazione.

Osservazione. A parte il comportamento transiente al momento iniziale, si è interessanti a tempi sufficientemente grandi da osservare due picchi separati in $\pm\omega_{ni}$. La loro larghezza si restringe perché proporzionale a $\frac{4\pi}{t}$. Interessa la situazione di risonanza: quando la frequenza della radiazione corrisponde alla differenza di energia tra due livelli, la probabilità di transizione presenta dei picchi. Affinché si possa instaurare la risonanza, si richiede che la larghezza debba essere molto minore della distanza dei picchi:

$$\frac{4\pi}{t} \ll 2\omega_{ni} \implies t \gg \frac{1}{\omega_{ni}}$$

Finalmente si può capire cosa si intende per tempi piccoli e tempi grandi per instaurare il fenomeno di risonanza. Si consideri $\omega \approx \omega_{ni}$. Il regime temporale di validità è

$$\boxed{\frac{1}{\omega} \ll t \ll \frac{\hbar}{|W_{ni}|}}$$

La quantità $\frac{1}{\omega_{ni}}$ è il tempo caratteristico del sistema (si ricorda che ω_{ni} è rappresenta la differenza di energia tra due stati). Inoltre, quando la perturbazione W_{ni} diventa grande, il limite superiore diminuisce annullandosi nel limite.

22.3 Relazione di indeterminazione per il tempo e l'energia

Si è già incontrata la relazione

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar$$

Si vede una interpretazione diversa dal movimento del valor medio di un'osservabile. Si può dare un'altra interpretazione tramite la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo (sia costanti che sinusoidali): la relazione è data dall'interazione del sistema con lo strumento di misura (ad esempio, dell'energia). Per quanto piccola possa essere la perturbazione, è sempre presente una probabilità di transizione ad uno stato con energia diversa. Tale probabilità è centrata in ω_{ni} ed ha un andamento simile a $\text{sinc } \omega$. Il primo zero risulta trovarsi a $\omega = \frac{2\pi}{t}$: esso è l'ordine di grandezza della larghezza del picco centrale. Il tempo trascorso da quando si ha iniziato ad interagire con il sistema è

$$\Delta t = t - t_0$$

Alla larghezza del picco centrale $\Delta\omega$ è associata una energia

$$\Delta E = \hbar\Delta\omega$$

Si cerca di misurare una differenza di energia, ma, interagendo, non si è sicuri di quale stato si misura perché sono presenti tanti stati attorno al picco centrale di larghezza

$$\Delta\omega \sim \frac{4\pi}{\Delta t} \implies \boxed{\Delta E \Delta t \geq \hbar}$$

Nell'implicazione si moltiplica per \hbar . Quanto più è lunga l'interazione con il sistema, tanto più l'incertezza sull'energia diminuisce.

22.4 Accoppiamento con gli stati del continuo

Si consideri lo stato finale di transizione $|\varphi_n\rangle$ nel continuo di \hat{H}_0 . In questo contesto, si ha la densità di probabilità

$$|\langle\varphi_n|\varphi_i\rangle|^2$$

La probabilità si ottiene sommando la densità su vari stati finali.

Caso generale. Sia $|\alpha\rangle$ un generico stato del continuo. Per gli stati continui vale la normalizzazione

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

La probabilità che uno stato $|\psi(t)\rangle$ evolva in sottoinsieme (dominio) D_f di valori α attorno ad un valore centrale α_f risulta essere

$$\delta P(\alpha_f) = \int_{D_f} |\langle\alpha|\psi(t)\rangle|^2 d\alpha$$

In generale, l'indice α indica una famiglia di indici: l'energia E e altri indici β continui o discreti. Il CSCO è composto da

$$\{E, \beta\}$$

Il differenziale di α è

$$d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE$$

dove ρ è la densità degli stati finali in funzione degli indici β ed E . La formula finale per calcolare le probabilità su stati del continuo di finire in un intorno di α_f risulta essere

$$\delta P(\alpha_f) = \int_{\delta E_f} \int_{\delta \beta_f} \rho(\beta, E) |\langle\beta E|\psi(t)\rangle|^2 d\beta dE$$

Regola di Fermi. Si deriva la regola per una particella in un potenziale costante. In base a quanto visto, la densità di probabilità di una transizione ad uno stato con indici β , E risulta essere

$$|\langle\beta E|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle\beta E|\hat{W}|\varphi_i\rangle|^2 F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right), \quad F(t, \omega) = \left[\frac{\sin \frac{\omega t}{2}}{\frac{\omega t}{2}}\right]^2$$

La probabilità è

$$\delta P(\alpha_f) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\delta E_f} \int_{\delta \beta_f} \rho(\beta, E) |\langle\beta E|\hat{W}|\varphi_i\rangle|^2 F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) d\beta dE$$

Per t sufficientemente grande, la funzione $F(t, \omega)$ diventa sempre più piccata

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) = \pi t \delta\left(\frac{E - E_i}{2\hbar}\right) = 2\pi \hbar t \delta(E - E_i)$$

In molti casi, la funzione

$$\rho(\beta, E) |\langle\beta E|\hat{W}|\varphi_i\rangle|^2$$

varia molto lentamente rispetto ad F . Pertanto, nell'integrale si può approssimare F come una delta e la funzione sopra come una costante. Dunque, si calcola la probabilità attorno ai valori centrali β_f e E_f per ottenere [r]

$$\delta P(\alpha_f) = \delta \beta_f \frac{2\pi}{\hbar} t |\langle\beta_f E_f|\hat{W}|\varphi_i\rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f), \quad E_f = E_i$$

Questo vale se $E_i \in \delta E_f$. Altrimenti la funzione delta produce un integrale nullo. Se $E_i \notin \delta E_f$ allora $\delta P(\alpha_f) = 0$. Da questa formula, per un potenziale costante si induce una transizione solo tra stati con stessa energia.

Osservazione. La probabilità è lineare nel tempo. Si definisce il tasso di transizione

$$\delta W(\varphi_i, \alpha_f) \equiv d_t[\delta P(\alpha_f)]$$

Si definisce anche il tasso di transizione per unità di tempo, per unità di intervallo di β attorno β_f [r]

$$W(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\delta W(\varphi_i, \alpha_f)}{\delta \beta_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \beta_f, E_f | \hat{W} | \varphi_i \rangle \right|^2 \rho(t, E_f), \quad E_f = E_i$$

Questa è la regola d'oro di Fermi. Questa formula può essere invertita per calcolare la densità degli stati ρ .

Perturbazioni sinusoidali. [r] Si consideri l'assorbimento $E_f = E_i + \hbar\omega$. Allora

$$W(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\pi}{2\hbar} \left| \langle \beta_f, E_f | \hat{W} | \varphi_i \rangle \right|^2 \rho(\beta_f, E_f)$$

Osservazione. Cohen D_{XIII}. Uno stato discreto $|\varphi_i\rangle$ accoppiato con un continuo di stati da una perturbazione costante (o sinusoidale) può lasciare irreversibilmente lo stato $|\varphi_i\rangle$. Infatti, la probabilità che il sistema rimanga nello stato iniziale risulta essere

$$P_{ii}(t) = e^{-\gamma t}$$

Osservazione. Altre considerazioni riguardano il fatto che gli stati energetici hanno uno spessore ed un tempo di vita.

22.5 Considerazioni sul secondo termine correttivo della perturbazione

Si vedono delle considerazioni sul secondo termine $c_n^{(2)}(t)$ di correzione della funzione d'onda perturbata. Si consideri una perturbazione costante. Il secondo termine è

$$c_n^{(2)} = \left[-\frac{i}{\hbar} \right]^2 \sum_k W_{nk} W_{ki} \int_0^t e^{i\omega_{nk}t'} \int_0^{t'} e^{i\omega_{ki}t''} dt'' dt'$$

Il secondo integrale è pari a

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

Pertanto

$$c_n^{(2)} = \frac{i}{\hbar} \sum_k \frac{W_{nk} W_{ki}}{E_k - E_i} \int_0^t \left[e^{i\omega_{ni}t'} - e^{i\omega_{nk}t'} \right] dt'$$

Il primo addendo dell'integrando è pari al termine $c_n^{(1)}$. Esso dà contributo solamente quando $E_n \approx E_i$ per tempi lunghi [r]. Il secondo addendo va manipolato perché è una somma su k . Se $E_k \neq E_n$ e $E_k \neq E_i$, allora, quando $E_n \approx E_i$, il primo addendo è dominante e si è nella regione in cui $e^{i\omega_{nk}t'}$ è fortemente oscillante, ma dato $E_k \neq E_n$, si è nelle code del primo termine, non nel picco [r]. In questa ipotesi, si trascura il secondo addendo. Cambiando l'indice $n \rightarrow f$, allora il tasso di transizione è

$$W(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| W_{fi} + \sum_k \frac{W_{fk} W_{ki}}{E_k - E_i} \right|_{E_f \approx E_i}^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i)$$

Osservazione. Il primo addendo rappresenta una transizione diretta (detta reale) tra due stati $i \rightarrow f$ che hanno la stessa energia. Il secondo addendo rappresenta una transizione $i \rightarrow k$ senza conservazione dell'energia e poi una transizione $k \rightarrow f$ ma senza conservazione di energia perché $E_k \neq E_i$ e $E_k \neq E_f$. L'energia si conserva solamente nella combinazione delle due transizioni $i \rightarrow f$. Le transizioni che non conservano l'energia sono dette virtuali. La conservazione è violata in base al principio di indeterminazione

$$\Delta E = \frac{\hbar}{\Delta t}$$

Per tempi piccoli, si può violare la conservazione dell'energia perché non si ha modo di controllarla. Ciò che importa è che la combinazione della transizioni comporti la conservazione dell'energia.

Un fotone che si propaga diventa una coppia elettrone-positrone che viola la conservazione di shell (cioè non vale $p^\mu p_\mu = m^2$ relativisticamente parlando) per poi ricombinarsi in un fotone. Questa correzione virtuale produce l'effetto Casimir quantistico. Il bosone di Higgs è stato previsto tramite le correzioni virtuali: al tempo della previsione, non si poteva creare per mancanza di strumentazione potente, ma le sue correzioni virtuali erano già evidenti.

23 Interazione di un atomo con un'onda elettromagnetica

Cohen A_{XIII}. Si consideri un atomo in interazione elettromagnetica monocromatica. Si ipotizza che l'intensità della radiazione sia tale da non invalidare il trattamento perturbativo. La radiazione è classica. Si consideri un sistema in cui è presente una onda elettromagnetica piana, senza sorgenti.

Scelta di gauge. Bisogna scegliere il gauge. Il potenziale è $U = 0$ perché non sono presenti sorgenti. Si sceglie il gauge di Coulomb

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

Le equazioni di Maxwell assumono la forma

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \vec{A} = 0$$

La soluzione è data da

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = A_0 \vec{\epsilon} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + A_0^* \vec{\epsilon}^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$$

Reinserendola nell'equazione di Maxwell si ottiene la relazione di dispersione

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$$

dove talvolta si scrive

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi\nu$$

da cui

$$k = \frac{\omega}{c} \implies \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{c} \implies \lambda\nu = c$$

La polarizzazione $\vec{\epsilon}$ è un versore: può essere reale o complesso (per poter dare una polarizzazione circolare). L'ampiezza del campo \vec{A} è data da A_0 . Inoltre, \vec{k} è la direzione di propagazione dell'onda. Per il gauge scelto, segue

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \implies \vec{k} \cdot \vec{\epsilon} = 0$$

cioè il vettore di polarizzazione è perpendicolare alla direzione di propagazione dell'onda. Si indica \vec{n} il versore di propagazione

$$\vec{k} = \frac{\omega}{c} \vec{n}, \quad \vec{n} = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$$

Lezione 40

lun 19 dic
2022 13:30

Il campo elettrico e magnetico sono dati da

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = -\partial_t \vec{A}(\vec{x}, t), \quad \vec{B}(\vec{x}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{x}, t)$$

Esplicitando il potenziale vettore, si ottiene il campo elettrico

$$\vec{E} = i\omega A_0 \vec{\varepsilon} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + h.c.$$

dove $h.c.$ sta per “hermitian conjugate”. Mentre il campo magnetico è

$$B_l = \varepsilon_{lrs} \partial_r A_s = \varepsilon_{lrs} A_0 \varepsilon_s i k_r e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + h.c. = i A_0 (\vec{k} \times \vec{\varepsilon})_l e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + h.c.$$

da cui

$$\vec{B} = i k A_0 \vec{n} \times \vec{\varepsilon} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + h.c.$$

Il campo magnetico è anch'esso perpendicolare alla direzione di propagazione \vec{n} . [r] Si definiscono i moduli del campo elettrico e magnetico (che sono numeri reali)

$$\frac{1}{2} \mathcal{E} \equiv i\omega A_0, \quad \frac{1}{2} \mathcal{B} \equiv i k A_0$$

Pertanto, scegliendo l'origine del tempo di modo che $A_0 \in i\mathbb{R}$ sia solo immaginario, si ottiene

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{x}, t) &= \mathcal{E} \vec{\varepsilon} \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) \equiv \vec{\mathcal{E}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) \\ \vec{B}(\vec{x}, t) &= \mathcal{B} \vec{n} \times \vec{\varepsilon} \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) \equiv \vec{\mathcal{B}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) \end{aligned}$$

Il campo elettrico è parallelo al versore di polarizzazione che è perpendicolare alla direzione di propagazione \vec{n} . Similmente, il campo magnetico è perpendicolare sia al campo elettrico che alla direzione di propagazione. Inoltre

$$\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}} = \frac{\omega}{k} = c$$

23.1 Hamiltoniana dell'interazione elettromagnetica a basse intensità

Si inserisce quanto trovato nella meccanica quantistica. Si ha un nucleo con massa infinita. L'hamiltoniana è

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{p} - q \vec{A}(\vec{x}, t) \right]^2 + V(\hat{r}) - g \frac{q}{2m} \vec{S} \cdot \vec{B} \quad \left(+ \hat{H}_k + \hat{H}_D + \hat{H}_{SO} \right)$$

L'ultimo addendo è il potenziale del momento magnetico $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Nel gauge di Coulomb vale

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \implies \hat{p} \cdot \hat{A} = 0$$

Nell'hamiltoniana sopra, si trascurano tutte le altre interazioni (quelle tra parentesi) perché si sa già cosa fanno [r]. L'interazione importante che si aggiunge successivamente è l'interazione spin-orbita. L'hamiltoniana è nella forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(t), \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}), \quad \hat{W}(t) = -\frac{q}{m} \hat{A} \cdot \hat{p} - g \frac{q}{2m} \vec{S} \cdot \vec{B} + \frac{q^2}{2m} \hat{A}^2(\vec{x}, t)$$

Risulta chiaro che

$$A_0 \rightarrow 0 \implies \hat{W}(t) \rightarrow 0$$

Pertanto, si identifica A_0 con il parametro λ di espansione della teoria delle perturbazioni. L'ultimo termine di $\hat{W}(t)$ è proporzionale ad A_0^2 . Per valori piccoli di A_0 (rispetto a?), cioè quando il campo elettromagnetico è poco intenso, si possono trascurare i termini quadratici in A_0 . L'hamiltoniana perturbativa si può scrivere come

$$\hat{W}(t) = \hat{W}_I(t) + \hat{W}_{II}(t), \quad \hat{W}_I(\vec{x}, t) = -\frac{q}{m} \hat{A} \cdot \hat{p}, \quad \hat{W}_{II}(\vec{x}, t) = -g \frac{q}{2m} \vec{S} \cdot \vec{B}, \quad g = 2$$

Ordine di grandezza. Dunque

$$\frac{\hat{W}_{II}}{\hat{W}_I} \sim \frac{\frac{q}{m} \hbar k A_0}{\frac{q}{m} A_0 m v} = \frac{\hbar k}{m v} \sim \frac{a_0}{\lambda} \ll 1$$

dove l'ordine di grandezza della velocità è $v \sim \frac{e^2}{\hbar}$, mentre il raggio di Bohr è

$$a_0 \sim \frac{\hbar^2}{m e^2}$$

Inoltre λ è la lunghezza caratteristica della radiazione elettromagnetica. L'energia di un salto energetico di una transizione nel visibile è dell'ordine

$$10 \text{ eV} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \approx 1240 \text{ eV nm} \frac{1}{\lambda} \implies \lambda \approx 100 \text{ nm}$$

Pertanto

$$\hat{W}_{II} \ll \hat{W}_I$$

Si tratta \hat{W}_I come una perturbazione quando le intensità sono basse. Si valutano gli elementi di matrice tra gli stati imperturbati. La perturbazione ha la forma

$$\hat{W}(\vec{x}, t) = -\frac{q}{m} A_0 e^{-i\omega t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} + h.c.$$

Gli elementi di matrice sono

$$\langle \varphi_n | \hat{W}_I | \varphi_m \rangle$$

Essi sono degli integrali. Le funzioni d'onda sopra sono esponenzialmente decrescenti: i valori dominanti si trovano fino all'ordine di a_0 . Quindi gli elementi di matrice sono proporzionali a [r]

$$\int_0^{\sim a_0} e^{-\frac{r}{a_0}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} dr = \int e^{-\frac{r}{a_0}} e^{i\frac{2\pi}{\lambda} \vec{n} \cdot \vec{x}} dr$$

Dunque, la posizione \vec{x} riceve dei contributi fino ad a_0 : il valore più grande di \vec{x} è a_0 . [r] All'esponenziale con \vec{x} compare λ^{-1} , per cui, ricordando $\frac{a_0}{\lambda} \ll 1$, si ha

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = e^{i\frac{2\pi}{\lambda} \vec{n} \cdot \vec{x}} = 1 + i\frac{2\pi}{\lambda} \vec{n} \cdot \vec{x} + o\left(\frac{\vec{x}}{\lambda}\right)$$

Pertanto, il primo termine perturbativo diventa

$$\hat{W}_I(t) = -\frac{q}{m} A_0 \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} e^{-i\omega t} + h.c. - \frac{q}{m} A_0 i(\vec{k} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) e^{-i\omega t} + h.c. + o\left(\frac{\vec{x}}{\lambda}\right)$$

Ordine di grandezza. Il secondo addendo è dell'ordine

$$\frac{q}{m} A_0 p k a_0 \sim \frac{q}{m} B p a_0 \sim \frac{q}{m} \hbar B$$

si prende l'ordine di grandezza di p tramite il principio di indeterminazione. Si ottiene lo stesso ordine di grandezza di \hat{W}_{II} . Pertanto, si tratta il primo addendo da solo, mentre il secondo addendo si mette insieme alla perturbazione \hat{W}_{II} .

23.1.1 Hamiltoniana di dipolo elettrico

L'hamiltoniana di dipolo elettrico è il primo addendo di $\hat{W}_I(t)$ cioè

$$\hat{W}_{DE}(t) = -\frac{q}{m} A_0 \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} e^{-i\omega t} + h.c. = \frac{q}{m\omega} \mathcal{E} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} \sin \omega t$$

Si noti che la forma esplicita di queste espressioni è gauge dipendente. Tuttavia, le quantità fisiche sono gauge indipendenti.

Elementi di matrice. Il senso del nome di dipolo elettrico diventa apparente successivamente. Si ha una perturbazione dipendente dal tempo. Bisogna calcolare [r] la probabilità di transizione [r]

$$\langle \varphi_f | \hat{W}_{DE} | \varphi_i \rangle$$

I due stati hanno energia E_f ed E_i rispettivamente. Dalla teoria delle perturbazioni, si conosce già il comportamento di una perturbazione sinusoidale: la probabilità è piccata su di stati con energia

$$E_f = E_i \pm \hbar\omega$$

La transizione è decisa da

$$\langle \varphi_f | \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{p}} | \varphi_i \rangle = \vec{\varepsilon} \cdot \langle \varphi_f | \hat{\vec{p}} | \varphi_i \rangle = \varepsilon_j \langle \varphi_f | \hat{p}_j | \varphi_i \rangle$$

Si calcolano i valori di aspettazione tramite un accorgimento. L'hamiltoniana imperturbata è

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

Un suo commutatore è

$$[\hat{x}_j, \hat{H}_0] = [\hat{x}_j, \hat{p}^2] \frac{1}{2m} = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_j$$

Pertanto, il valor di aspettazione tra un qualunque stato finale ed iniziale è

$$\langle \varphi_f | \hat{p}_j | \varphi_i \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle \varphi_f | [\hat{x}_j, \hat{H}_0] | \varphi_i \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle \varphi_f | (\hat{x}_j \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{x}_j) | \varphi_i \rangle = \frac{m}{i\hbar} (E_i - E_f) \langle \varphi_f | \hat{x}_j | \varphi_i \rangle$$

dove si è applicato il primo termine del commutatore al ket ed il secondo termine al bra. Dunque

$$\langle \varphi_f | \hat{W}_{DE} | \varphi_i \rangle = iq \frac{\omega_{fi}}{\omega} \mathcal{E} \sin(\omega t) \varepsilon_j \langle \varphi_f | \hat{x}_j | \varphi_i \rangle$$

Osservazione. Se il campo elettrico è

$$\vec{E} = \mathcal{E} \vec{\varepsilon} \sin(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)$$

[r] allora l'hamiltoniana di un dipolo elettrico è

$$\hat{W}_{DE} = -\vec{D} \cdot \vec{E} = -q\vec{x} \cdot \vec{E} = -qx_j \mathcal{E} \varepsilon_j \cos(\omega t) = q\mathcal{E} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{x} \cos(\omega t)$$

La presenza del coseno al posto del seno è spiegata dalla dipendenza dal gauge. Per un cambio di gauge si ottiene il seno.

Osservazione. [r] L'avvenimento della transizione (assorbimento o emissione, $\omega = \pm\omega_{fi}$) è deciso dall'elemento di matrice

$$\langle \varphi_f | \hat{x}_j | \varphi_i \rangle$$

Quando esso è non nullo, allora si ha una transizione di dipolo elettrico. In quanto gli elementi di matrice sono più grandi degli altri termini, le righe spettrali date dal dipolo elettrico sono quelle più intense.

Elementi di matrice. Le funzioni d'onda sono

$$\varphi = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Si scrivono le coordinate cartesiane in termini delle coordinate sferiche

$$\frac{x}{r} = \frac{1}{3} \sqrt{6\pi} (Y_1^{-1} - Y_1^1), \quad \frac{y}{r} = \frac{1}{3} \sqrt{6\pi} (Y_1^{-1} + Y_1^1), \quad \frac{z}{r} = \frac{2}{3} \sqrt{3\pi} Y_1^0$$

La parte angolare è

$$\langle \hat{x}_j \rangle \propto \int (Y_{l_f}^{m_f})^* Y_1^{\pm 1, 0} Y_{l_i}^{m_i} d\Omega, \quad Y_1^{\pm 1, 0} Y_{l_i}^{m_i} \doteq |1, m\rangle \otimes |l_i, m_i\rangle, \quad m = \pm 1, 0$$

[r] Il prodotto scalare è non nullo qualora

$$m_f \in \{\pm 1, 0\} + m_i \implies \boxed{\Delta m = m_f - m_i = \pm 1, 0}$$

[r] La transizione deve avvenire tra stati con differenza di energia $\pm \hbar \omega_{fi}$ e con la relazione sopra tra le proiezioni del momento angolare [r]. Si passa alla base del momento angolare totale

$$|1, m\rangle \otimes |l_i, m_i\rangle \rightarrow |l_i, 1, L, m_L\rangle, \quad L = |l_i - 1|, \dots, l_i + 1$$

Dunque

$$|l_1 m_1\rangle \otimes |l_2 m_2\rangle = \sum_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} c(L, m_1+m_2, l_1, l_2, m_1, m_2) |L, m_1+m_2\rangle$$

dove i coefficienti c sono gli inversi dei coefficienti di Glebsch-Gordan. [r] I momenti finali hanno i valori di momento totale

$$l_f = L \in \{\pm 1, 0\} + l_i$$

Pertanto

$$\Delta l = l_f - l_i = \pm 1, 0$$

La transizione di dipolo elettrico avviene tra stati con $\pm \hbar \omega_{fi}$ e con differenze $\Delta m = \Delta l = \pm 1, 0$. Tuttavia, le armoniche sferiche hanno parità secondo $(-1)^l$. Se $l_f = l_i$, allora nella funzione integranda si ha la parità $(-1)^{l_f}(-1)(-1)^{l_f} = -1$ ed il suo integrale è nullo. Dunque

$$\boxed{\Delta l = l_f - l_i = \pm 1}$$

Le due relazioni riquadrate sono dette regole di selezione.

Osservazione. In quanto l'operatore di dipolo elettrico ha parità dispari, le transizioni di dipolo elettrico (che sono le più intense) possono avvenire solamente tra stati di parità opposta.

Osservazione. Quando si inserisce l'interazione di spin-orbita $\xi(r)\vec{L} \cdot \vec{S}$, [r] gli stati sono organizzati in termini del momento angolare totale $j = l + s$ e m_j sulla base

$$|l, s, j, m_j\rangle$$

La base $|l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle$ non è adatta. Gli stati della base sopra sono una combinazione lineare della base precedente. Rifacendo i calcoli per la base sopra, le regole di selezione per il dipolo elettrico sono

$$\boxed{\Delta l = \pm 1, \quad \Delta j = 0, \pm 1, \quad \Delta m_j = 0, \pm 1, \quad \Delta m_s = 0}$$

Esiste una transizione proibita: $j_i = j_f = 0$. Infatti, il fotone scambiato ha momento (elicità) non nullo: se non c'è momento angolare, allora non si può emettere il fotone. [r]

23.1.2 Hamiltoniana di dipolo magnetico e quadrupolo elettrico

Si tratta il secondo termine dell'espansione di $\hat{W}_I(t)$ e la perturbazione

$$\hat{W}_{II} = -g \frac{q}{2m} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{B}}$$

Il termine dell'espansione è

$$\hat{W}_I^{(2)}(t) = -\frac{q}{m} i A_0 e^{-i\omega t} (\vec{k} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) + h.c.$$

[r] Si scrivono i prodotti scalari come

$$(\vec{k} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) = \frac{1}{2} \left[(\vec{k} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) - (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{x})(\vec{p} \cdot \vec{k}) + (\vec{k} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) + (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{x})(\vec{p} \cdot \vec{k}) \right]$$

Notando

$$(\vec{k} \times \vec{\varepsilon}) \cdot (\vec{x} \times \vec{p}) = \varepsilon_{lmn} k^m \varepsilon^n \varepsilon^{lab} x_a p_b = \left| \begin{matrix} \delta_m^a & \delta_m^b \\ \delta_n^a & \delta_n^b \end{matrix} \right| k^m \varepsilon^n x_a p_b = (\vec{k} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) - (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{x})(\vec{k} \cdot \vec{p})$$

si ottiene

$$(\vec{k} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) = \frac{1}{2} (\vec{k} \times \vec{\varepsilon}) \cdot (\vec{x} \times \vec{p}) + \frac{1}{2} \left[(\vec{k} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) + (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{x})(\vec{p} \cdot \vec{k}) \right]$$

Hamiltoniana di dipolo magnetico. Si consideri il primo addendo dell'espressione precedente. Il vettore $\vec{k} \times \vec{\varepsilon}$ punta nella direzione di \vec{B} . Pertanto [r] nell'espressione di $\hat{W}_I^{(2)}(t)$ si ha un termine pari a

$$-\frac{q}{m} A_0 i e^{-i\omega t} \frac{1}{2} (\vec{k} \times \vec{\varepsilon}) \cdot \vec{L} + h.c. = -\frac{q}{2m} \vec{B} \cdot \vec{L} \cos \omega t$$

Questo termine ha lo stesso ordine di grandezza di \hat{W}_{II} . In esso, scrivendo

$$\vec{B} = \vec{B} \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)$$

si ripercorrono gli stessi calcoli del dipolo elettrico [r] per ottenere

$$\cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) = \frac{1}{2} \left[e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + h.c. \right] = \frac{1}{2} \left[1 + i \vec{k} \cdot \vec{x} + \dots \right] e^{-i\omega t} + h.c.$$

Pertanto [r] il primo termine dell'espansione sopra è parte dell'hamiltoniana di dipolo magnetico:

$$\hat{W}_{DM} = -\frac{q}{2m} \left[\hat{\vec{L}} + g \hat{\vec{S}} \right] \cdot \vec{B} \cos \omega t$$

Il momento di spin deriva da $\hat{W}_{II}(t)$.

Hamiltoniana di quadrupolo elettrico. Il secondo addendo dell'espressione $(\vec{k} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p})$ non contiene $\vec{k} \times \vec{\varepsilon}$ cioè il campo magnetico, ma contiene $\vec{\varepsilon}$ che ha la stessa direzione del campo elettrico [r]. Pertanto, l'altra parte di $\hat{W}_I^{(2)}(t)$ risulta essere

$$\hat{W}_{QE} = -\frac{q}{m} A_0 i e^{-i\omega t} \frac{1}{2} \left[(\vec{k} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) + (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{x})(\vec{k} \cdot \vec{p}) \right] + h.c.$$

Noto

$$\vec{k} = k \vec{n} = \frac{\omega}{c} \vec{n}$$

si ha

$$\begin{aligned} \hat{W}_{QE} &= -\frac{q}{m} i A_0 \frac{\omega}{c} e^{-i\omega t} [(\vec{n} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) + (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{x})(\vec{n} \cdot \vec{p})] + h.c. \\ &= -\frac{q}{2m} \frac{1}{c} \mathcal{E} \cos(\omega t) [(\vec{n} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) + (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{x})(\vec{n} \cdot \vec{p})] \end{aligned}$$

Lezione 41

 mar 20 dic
2022 13:30

Esempio. Si vede un caso particolare. Siano $\vec{k} = k\hat{j}$ e $\vec{\varepsilon} = \varepsilon\hat{k}$. L'hamiltoniana di quadrupolo diventa

$$\hat{W}_{QE} = -\frac{q}{2m} \frac{1}{c} \mathcal{E} \cos(\omega t) [\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_y]$$

In quanto $\vec{n} \perp \vec{\varepsilon}$, allora gli operatori all'interno dell'hamiltoniana commutano tra loro. In generale, i termini tra parentesi diventano

$$[(\vec{n} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) + (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{x})(\vec{n} \cdot \vec{p})] = n_a \varepsilon_j (\hat{x}_a \hat{p}_j + \hat{x}_j \hat{p}_a), \quad \hat{x}_j \hat{p}_a = \hat{p}_a \hat{x}_j + i\hbar \delta_{aj}$$

[r] Quindi

$$\begin{aligned} [(\vec{n} \cdot \vec{x})(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}) + (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{x})(\vec{n} \cdot \vec{p})] &= n_a \varepsilon_j \left(\hat{x}_a [\hat{x}_j, \hat{H}_0] + [\hat{x}_a, \hat{H}_0] \hat{x}_j \right) \frac{m}{i\hbar} \\ &= \frac{m}{i\hbar} n_a \varepsilon_j \left(\hat{x}_a \hat{x}_j \hat{H}_0 - \hat{x}_a \hat{H}_0 \hat{x}_j + \hat{x}_a \hat{H}_0 \hat{x}_j - \hat{H}_0 \hat{x}_a \hat{x}_j \right) \\ &= n_a \varepsilon_j \frac{m}{i\hbar} \left(\hat{x}_a \hat{x}_j \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{x}_a \hat{x}_j \right) \end{aligned}$$

Osservazione. I termini di quadrupolo elettrico e dipolo magnetico sono dello stesso ordine di grandezza e quindi vanno considerati assieme.

Transizione di dipolo magnetico. Le transizioni dovute all'hamiltoniana \hat{W}_{DM} sono dette di dipolo magnetico. Infatti [r], si ha l'interazione tra il momento magnetico totale $(\vec{L} + g\vec{S})$ con il campo magnetico \vec{B} oscillante. La probabilità di transizione tra due stati è data da

$$\langle \varphi_f | \hat{W}_{DM} | \varphi_i \rangle \propto \langle \varphi_f | \hat{\vec{L}} + g\hat{\vec{S}} | \varphi_i \rangle$$

Le regole di selezione si trovano quando l'espressione sopra è diversa da zero. Né $\hat{\vec{L}}$ né $\hat{\vec{S}}$ cambiano i numeri quantici angolari l o s . Infatti, le componenti di $\hat{\vec{L}}$ cambiano m_l , ma non l e lo stesso per lo spin. Pertanto, la prima regola di selezione afferma

$$\Delta l = l_f - l_i = 0$$

Il numero quantico magnetico cambia al più di una unità (a causa di \hat{L}_{\pm} , mentre non cambia per \hat{L}_z):

$$\Delta m_l = m_f - m_i = 0, \pm 1$$

Vale lo stesso per lo spin

$$\Delta s = 0, \quad \Delta m_s = 0, \pm 1$$

Dunque, le regole di selezione per il dipolo magnetico sono

$$\boxed{\Delta l = 0, \quad \Delta m_l = 0, \pm 1, \quad \Delta m_s = 0, \pm 1}$$

Si noti che vale sempre $\Delta s = 0$ in quanto il momento angolare intrinseco non può cambiare.

Osservazione. Quando è presente l'interazione spin-orbita, cioè il termine $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$, conviene utilizzare la base $|lsjm_j\rangle$ con $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$ e $j = l \pm \frac{1}{2}$ [r]. Pertanto, le regole di selezione diventano

$$\Delta l = 0, \quad \Delta j = 0, \pm 1, \quad \Delta m_j = 0, \pm 1$$

Osservazione. La transizione iperfine da $F = 0$ a $F = 1$ nello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno è una transizione di dipolo magnetico perché si ha l'inversione dello spin. Infatti, si ha

$$l = 0, \quad \langle \varphi_f | \hat{S} | \varphi_i \rangle \neq 0$$

quando si passa da $F = 1$ a $F = 0$ [r].

Transizione di quadrupolo elettrico. La probabilità di transizione è data da

$$\langle \varphi_f | \hat{W}_{QE} | \varphi_i \rangle \propto \langle \varepsilon_f | (\hat{x}_a \hat{x}_j \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{x}_a \hat{x}_j) | \varphi_i \rangle$$

l'hamiltoniana del primo termine agisce sul ket, quella del secondo agisce sul bra. Pertanto, si ottiene

$$\langle \varphi_f | \hat{W}_{QE} | \varphi_i \rangle = \frac{q}{2ic} \mathcal{E} \cos(\omega t) \frac{E_f - E_i}{\hbar} \langle \varphi_f | \hat{x}_a \hat{x}_j | \varphi_i \rangle n_a \varepsilon_j$$

[r] La frazione con l'energia è ω_{fi} . [r] Dallo sviluppo in multipolo, si ha il quadrupolo

$$x_a x_j - \frac{r^2}{3} \delta_{aj} I$$

Proprio per questo l'hamiltoniana è detta di quadrupolo elettrico. I termini di quadrupolo elettrico sono

$$\frac{q\omega_{fi}}{c} \mathcal{E} = \frac{q\omega_{fi}}{\omega} k \mathcal{E} \propto q \partial_y E$$

La derivata è parte del gradiente del campo elettrico. Le derivate compaiono quando si fa lo sviluppo in multipolo di una radiazione [r].

Per ottenere le probabilità bisogna calcolare dei termini del tipo

$$\langle \varphi_f | \hat{y} \hat{z} | \varphi_i \rangle, \quad \langle \varphi_f | \hat{z} \hat{x} | \varphi_i \rangle, \quad \langle \varphi_f | \hat{x} \hat{y} | \varphi_i \rangle$$

La parte radiale deve essere calcolata perché difficilmente è nulla. Per la parte angolare si fa come in precedenza: si scrivono le coordinate cartesiane in termini delle armoniche sferiche (al secondo ordine, l'ottupolo ha il terzo ordine, etc):

$$xy \propto Y_2^{\pm 2}, \quad xz \propto Y_2^{\pm 1}, \quad yz \propto Y_2^{\pm 1}, \quad 1 \propto Y_0^0$$

Una parte del calcolo della componente angolare è

$$\int (Y_{l_f}^{m_f})^* Y_2^{\pm 1, \pm 2} Y_{l_i}^{m_i} d\Omega$$

Questo integrale equivale a fare una somma dei momenti angolari delle ultime due armoniche sferiche e poi fare un bra-ket con la prima armonica sferica (la seconda armonica può anche essere Y_0^0). Pertanto

$$\Delta m = m_f - m_i = 0, \pm 1, \pm 2$$

Inoltre, per il momento angolare orbitale totale si

$$|l_i - 2| \leq l_f \leq l_i + 2$$

Pertanto

$$\Delta l = 0, \pm 1, \pm 2$$

L'operatore dato dal prodotto di due coordinate è pari. Affinché l'integrale del prodotto scalare sia diverso da zero allora Y_{l_f} e Y_{l_i} devono avere stessa parità. Sapendo che la parità è $(-1)^l$, allora $\Delta l = \pm 1$ è escluso. Pertanto, le regole di selezione diventano

$$\boxed{\Delta l = 0, \pm 2, \quad \Delta m = 0, \pm 1, \pm 2}$$

Osservazione. Le hamiltoniane di dipolo magnetico e di quadrupolo elettrico sono operatori pari: esse possono connettere stati solo con stessa parità. Per una data transizione, questi due operatori non sono in competizione con l'hamiltoniana di dipolo elettrico (l'effetto più intenso) che è un operatore dispari. Dunque, o avviene una transizione descritta dalle prime due, oppure la terza. [r]

Esempio. La risonanza magnetica è una transizione di dipolo magnetico.

Osservazione. Per $\Delta l = 0$ e $\Delta m = 0, \pm 1$, le probabilità di transizione di dipolo magnetico e di quadrupolo elettrico possono essere simultaneamente diverse da zero. Si può anche solo farne avvenire una, ma non l'altra. Si deve organizzare l'apparato sperimentale in modo che gli atomi siano posti in una cavità risonante (la radiazione elettromagnetica è stazionaria) ed essi siano disposti in modo che il campo magnetico \vec{B} sia grande, ma il gradiente del campo elettrico sia piccolo. In questo modo accade la transizione di dipolo magnetico. Viceversa per il quadrupolo elettrico.

Osservazione. Per $\Delta l = \pm 2$, si ha solamente transizione di quadrupolo elettrico. Più aumentano i multipoli, più i coefficienti diventano piccoli perché soppressi da $\frac{a_0}{\lambda}$ [r]: le righe spettrali sono sempre più deboli.

Esempio. Una linea dello spettro dell'aurora boreale è dovuta alla transizione dell'ossigeno atomico a lunghezza $\lambda = 5577 \text{ \AA}$ ed è una transizione di quadrupolo elettrico.

Osservazione. [r] Si è arrivati fino allo sviluppo al secondo termine di $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ [r]. Continuando con l'espansione si ottengono gli altri termini: ottupolo elettrico, quadrupolo magnetico, etc. Bisogna calcolare i valori di aspettazione di polinomi di grado crescente e aumenta la possibilità di transire con Δl maggiore.

Osservazione. L'intensità delle righe di transizione è proporzionale alla probabilità di transizione.

Osservazione. Bisogna sommare sulle polarizzazioni del fotone. Un fascio non polarizzato è costituito in maniera equa di fotoni con polarizzazioni $\vec{\epsilon}_1$ ed $\vec{\epsilon}_2$ perpendicolari tra loro ed entrambi a \vec{k} .