

# Meccanica Quantistica

Marco Militello

# Indice

<b>1</b>	<b>La crisi della fisica classica</b>	<b>3</b>
1.1	Corpo nero . . . . .	
1.2	Effetto fotoelettrico . . . . .	
1.3	Effetto Compton . . . . .	
1.4	Spettri atomici . . . . .	
1.5	Interferenza e diffrazione onde elettromagnetiche . . . . .	
1.6	La polarizzazione della luce . . . . .	
1.7	De Broglie . . . . .	
<b>2</b>	<b>Il principio di indeterminazione</b>	<b>9</b>
<b>3</b>	<b>L'equazione di Schrodinger</b>	<b>10</b>
3.1	Equazione di Schrodinger per una particella libera . . . . .	
3.2	Equazione di Schrodinger per un potenziale arbitrario $V(x)$ . . . . .	
<b>4</b>	<b>Conservazione locale probabilità ed equazione di continuità</b>	<b>14</b>
<b>5</b>	<b>Considerazione sugli operatori: parte I</b>	<b>16</b>
<b>6</b>	<b>Potenziali indipendenti dal tempo e stati stazionari</b>	<b>17</b>
<b>7</b>	<b>Proprietà soluzioni in 1 dimensione</b>	<b>18</b>
<b>8</b>	<b>Considerazioni sugli operatori: parte II</b>	<b>19</b>
<b>9</b>	<b>I postulati della meccanica quantistica</b>	<b>20</b>
<b>10</b>	<b>Richiami spazi di Hilbert</b>	<b>23</b>
<b>11</b>	<b>Oscillatore armonico</b>	<b>25</b>
11.1	Ricerca spettro di N . . . . .	
11.2	Rappresentazione degli stati . . . . .	
11.3	Trovare rappresentazione dello stato fondamentale . . . . .	
11.4	Rappresentazione matriciale . . . . .	
11.5	Oscillatore armonico 3D . . . . .	
<b>12</b>	<b>Osservabili compatibili e incompatibili</b>	<b>32</b>
<b>13</b>	<b>Evoluzione temporale del valor medio di un'osservabile</b>	<b>33</b>
<b>14</b>	<b>Limite classico e teorema di Ehrenfest</b>	<b>34</b>

<b>15 Legame tra <math>\hat{L}^2</math> e <math>\hat{p}^2</math></b>	<b>35</b>
<b>16 Gli atomi idrogenoidi: prima approssimazione</b>	<b>36</b>
<b>17 Somma di momenti angolari</b>	<b>38</b>
17.1 Somma del momento di spin 1/2 di 2 particelle . . . . .	
<b>18 Particelle identiche</b>	<b>40</b>
18.1 Particelle composte . . . . .	
18.2 Stati di particella indipendente o particella singolare . . . . .	
<b>19 Metodi perturbativi</b>	<b>42</b>
19.1 Teoria perturbazioni non dipendenti dal tempo . . . . .	
19.1.1 Metodo generale calcolo perturbativo . . . . .	
19.1.2 Caso non degenerare . . . . .	
19.2 Teoria perturbazioni sugli stati degeneri . . . . .	
19.3 Effetto Stark su atomi idrogenoidi . . . . .	

# Capitolo 1

## La crisi della fisica classica

Concetti incompatibili con la fisica classica, che non si riescono a spiegare. Per fisica classica si intende

1. meccanica newtoniana
2. termodinamica fisica statistica classica
3. elettromagnetismo e le leggi di Maxwell
4. relatività ristretta

### 1.1 Corpo nero

Universalità: stesso spettro di emissione. Basi termodinamiche  $\rightarrow$  Kirchoff.

1900 Planck: giunge a risultato giusto, ma partendo da principi sbagliati

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

Ottiene questa relazione grazie a fit dei dati sperimentali; aggiusta i paramentri: si ottiene per la prima volta  $h$ , la costante di Planck

$$h = 6.6 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s} \quad (1.1)$$

ha la stessa dimesione di un momento angolare

### 1.2 Effetto fotoelettrico

1905 Einstein

Proposta di Einstein che spiega l'effetto: scambio di energia come multiplo di  $h\nu \rightarrow$  QUANTI DI RADIAZIONE.

Nel grafico dell'energia massima in funzione della frequenza, Millikan misurò la pendenza della retta che risultò essere  $\frac{h}{e}$ . Si continuava però a pensare che l'energia si propagasse nel continuo, mentre durante le interazioni ci fossere scambi a pacchetti. Questa idea viene abbandonata con l'effetto Compton

## 1.3 Effetto Compton

Raggi-x su un metallo;  $E_m \gg E_{legame}$ : in questo modo gli elettroni sono visti come liberi.

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

se  $v=c$  allora  $m=0$ . Quindi

$$p^2 c^2 = E^2 = (h\nu)^2 \Rightarrow p = \frac{h\nu}{c}$$

### Esperimento

Tratto fotone come particella con 
$$\begin{cases} E = h\nu \\ p = \frac{h\nu}{c} \end{cases}$$

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

onda elettromagnetica non completamente descritta dalle leggi di Maxwell

$\frac{h}{m_e c} \simeq 2.4 \times 10^{-12} m$ : lunghezza d'onda di Compton per l'elettrone  $\Rightarrow$  ha la dimensione di una lunghezza.

1926 Lewis: assegna nome ai fotoni

## 1.4 Spettri atomici

Spettro solare ha delle righe nere: radiazione viene assorbita dallo strato esterno del sole e poi viene diffusa, quindi ci arriva meno intensa  $\Rightarrow$  righe nere. He scoperto grazie allo spettro solare.

1897: scoperta elettrone

Modelli atomici  $\rightarrow$  Rutherford: però non riesce a spiegare spettri atomici

Emissione e assorbimento non sono un continuo

Bohr: Energia quantizzata

$$\nu_{mn} = (E_m - E_n) \frac{1}{h}$$

ma non dà alcun tipo di spiegazione

$$m_e v r = n \hbar \quad \text{momento angolare è multiplo intero di } \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

## 1.5 Interferenza e diffrazione onde elettromagnetiche

Luce descrivibile con fenomeni ondulatori.

Esperimento doppia fenditura: metto uno schermo a una distanza  $L \gg \lambda$  dalle fenditure. In ogni punto ho che  $I \neq I_1 + I_2$ , ma ho che

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

La differenza di fase vale  $d \sin(\theta)$ ; se la differenza di fase vale  $n \frac{\lambda}{2}$  allora ho interferenza distruttiva. Il primo punto di buio si ha per

$$\theta = \frac{n \lambda}{2 d} \text{ con } n = 1$$

Se prendo una lampadina gialla (580 nm) da 100 W, allora vengono emessi  $\sim 10^{20}$  fotoni al secondo. Cosa succede se abbasso intensità fino ad avere emissione di un fotone al secondo? L'esperimento della doppia fenditura porta allo stesso risultato precedente; però se ripeto di nuovo l'esperimento la posizione di ogni singolo fotone è diverso, anche se la figura che si viene a creare porta allo stesso risultato. Allora devo introdurre una trattazione probabilistica: posso solo dare distribuzione probabilità. Se chiudo una delle due fenditure non osservo alcuna figura di interferenza: il fotone "sente" la presenza di entrambe le fenditure. Ma con chi interferisce il fotone? Da che fenditura passa? Esperimenti per capire da che fenditura sia passato il fotone distruggono la figura di interferenza  $\Rightarrow$  misura microscopica disturba il fenomeno. Risultati esperimento:

1. Fotone colpisce schermo in un punto ben preciso  $\Rightarrow$  deposita tutta la sua energia  $h\nu$
2. Con pochi eventi lo schermo sembra riempirsi in maniera casuale; non sappiamo esattamente dove andrà un fotone, ma possiamo dire dove si sono addensati maggiormente  $\Rightarrow$  PROBABILITÀ
3. Se chiudo una fenditura sparisce figura di interferenza: fotone con  $\lambda \ll d$  "sente" le 2 fenditure; ogni tentativo di capire da quale fenditura passi il fotone distrugge la figura di interferenza  $\rightarrow$  disturbo con la misura. La misura su un sistema microscopico lo può disturbare in maniera significativa.

In fisica classica, date le condizioni iniziali posso completamente determinare il moto di una particella; invece non posso determinare moto di un fotone: fotone ha una certa probabilità di colpire lo schermo proporzionale all'intensità  $I(x)$  [probabilità che fotone finisca in un punto preciso dello schermo]

## Dualismo onda-particella

In alcuni esperimenti è più facile interpretare come particella altre volte come onda; la vera natura è l'elettrodinamica quantistica

1. La radiazione elettromagnetica si comporta come un flusso di particelle
2. Previsioni sul comportamento sono solo probabilistiche
3. In un certo punto  $\vec{r}$  dello schermo al tempo  $t \rightarrow$  fotone è portato da campo elettrico  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  che è soluzione delle equazioni di Maxwell; campo elettrico va interpretato come un'ampiezza di probabilità di trovare un fotone in un istante  $t$  in un punto  $\vec{r}$

$$|E(\vec{r}, t)|^2 \rightarrow \text{densità di probabilità}$$

4. Le equazioni di Maxwell sono lineari in  $\vec{E} \Rightarrow$  vale principio di sovrapposizione: se  $E_1, E_2$  sono soluzioni delle equazioni di Maxwell allora anche  $\vec{E} = \lambda_1 \vec{E}_1 + \lambda_2 \vec{E}_2$  con  $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$  è soluzione delle equazioni di Maxwell. Principio di sovrapposizione è anche quello che ci permette di spiegare interferenza

"Ogni fotone interferisce solo con se stesso"

## 1.6 La polarizzazione della luce

La luce ha una direzione privilegiata. Es.: laser, smartphone

# Esperimento

Mettere immagine

Interpretazione classica: c'è onda che si propaga lungo z

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

Il campo elettrico è libero, non ci sono cariche  $\Rightarrow \nabla \cdot \vec{E} = 0 \rightarrow \vec{k} \cdot \vec{e}_p = 0$ . Quindi trasverso rispetto alla direzione di propagazione

$\vec{k} // \vec{z} \Rightarrow$  il vettore di polarizzazione appartiene al piano perpendicolare alla direzione di propagazione

$$I_0 = |E_0|^2$$

Dopo polarizzazione:  $\vec{E}'(\vec{r}, t) = E'_0 \vec{e}_x e^{i(kz - \omega t)}$

$$E'_0 = E_0 \cos \theta \Rightarrow I = I_0 \cos^2 \theta$$

Dopo polarizzatore passa solo componente parallela  $\rightarrow$  interpretazione che viene data.

Adesso faccio esperimento in cui diminuisco intensità fascio fino a che emetta solo un fotone alla volta.

Conseguenze:

1. Rilevatore o vede il fotone o non lo vede
2. Quando vede fotone lo vede tutto  $\rightarrow$  tutta energia  $h\nu$
3. se  $\begin{cases} \theta = 0 \Rightarrow \text{rilevatore vede tutto fotone} \\ \theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow \text{rilevatore non lo vede mai} \end{cases}$

La probabilità con cui vedo fotone è  $\cos^2 \theta \Rightarrow$  Numero fotoni arrivato  $= N_0 \cos^2 \theta$ . Ogni singolo fotone può essere rappresentato come miscela di 2 stati

- uno stato con probabilità di passare 1:  $\psi_x$
- uno stato con probabilità di passare 0:  $\psi_y$

Questi valori sono mutualmente esclusivi

4. Descrivo come somma di due stati  $\psi_p = \psi_x \cos \theta + \psi_y \sin \theta \rightarrow$  inizio principio di decomposizione spettrale
  - $\psi_x$  passa con probabilità  $|\cos \theta|^2 = \cos^2 \theta$
  - $\psi_y$  non passa con probabilità  $|\sin \theta|^2 = \sin^2 \theta$

Interpretazione probabilistica è sensata perchè  $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$

5. Se io ora metto un altro polarizzatore lungo x, tutti i fotoni passeranno perchè ora tutti i fotoni sono  $\psi_x$ : dopo polarizzatore lo stato fotone è diventato  $\psi_x$ . La misura ha fatto precipitare lo stato del sistema da  $\psi_p$  a  $\psi_x$

## 1.7 De Broglie

Maxwell introduce andamento ondulatorio della radiazione elettromagnetico, mentre Einstein ipotizza andamento corpuscolare. De Broglie nel 1923 introduce ipotesi andamento ondulatorio elettroni.

Onda  $\rightarrow \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t)$ ; per essere invariante secondo Lorentz  $(\vec{k}, \omega), (\vec{p}, E)$  diventano tetravettori

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

Ad ogni particella di massa è associato  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$  e quindi un'onda  $\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$

Numericamente

1. Elettroni:  $m_e = 0.9 \times 10^{-30} \text{ Kg} = 0.511 \text{ MeV} = 0.511 \times 10^6 \text{ eV} [eV = 1.6 \times 10^{-19} \text{ V} \cdot J]$ . Un elettrone non relativistico

$$E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} = \frac{123}{\sqrt{V \text{olt}}} \times 10^{-10} \text{ m}(\text{\AA})$$

$\lambda \simeq 1 \text{\AA} \Rightarrow$  comparabile con raggi-x e distanza atomi cristallo

2. Neutroni termici (bassa temperatura termica):

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_n E}} = \frac{h}{\sqrt{2m_n \frac{3}{2} K_B T}} = \frac{30}{\sqrt{T(\text{Kelvin})}} \times 10^{-10} \text{ m}(\text{\AA})$$

3. Granello polvere:  $1 \mu\text{m}$  di dimensione

$$v = 1 \frac{\text{mm}}{\text{s}} \quad m = 10^{-10} \text{ Kg} \Rightarrow \lambda = 6.6 \times 10^{-11} \text{\AA}$$

Non posso vederlo per oggetti macroscopici, ma solo a livello microscopico

## Esperimento di Davisson-Germer 1927

Fascio di elettroni su un cristallo di Nichel  $\rightarrow$  ogni punto come sorgente  $\Rightarrow$  nasce figura di interferenza/diffrazione

## Esperimento doppia fenditura con elettroni 1950

## Esperimento doppia fenditura con elettrone singolo 1974: Merli-Missiroli-Pozzi

1. Elettrone arriva tutto intero; la carica non si sparpaglia sullo schermo
2. È un grande numero di elettroni che dà origine a figura di interferenza
3. Arrivo sullo schermo sembra un arrivo casuale
4. Interpreto come distribuzione di probabilità
5. Se chiudo una fenditura  $\Rightarrow$  sparisce figura interferenza



6. Ogni tentativo di capire da quale fenditura sia passato l'elettrone distrugge la figura di interferenza
7. Cade il concetto di traiettoria

Per conservazione del momento  $\rightarrow$  durante interazione con lo schermo c'è trasferimento di momento

## Capitolo 2

# Il principio di indeterminazione

Traiettoria  $\rightarrow$  determinare posizione e velocità della particella istante per istante  $\Rightarrow$  determino procedura di misura

Per determinare da quale fenditura sia passata la mia particella pongo uno schermo (1 fenditura), ma la particella forma una figura di diffrazione al passaggio nella fenditura

Facendo un'analisi degli ordini di grandezza, per una particella che passa da una fenditura di larghezza  $\Delta y$ , con una lunghezza d'onda  $\lambda$ , che forma un angolo  $\theta$  si ha che

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

ottengo così il principio di indeterminazione di Heisenberg

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \simeq h \quad (2.1)$$

più voglio determinare la posizione (minuisce  $\Delta y$ ) più aumenta l'intervallo  $\Delta p_y$ ; cade così il concetto di traiettoria.

Questa è un'approssimazione: significato completamente diverso da quello che ricaveremo esattamente

Principio di indeterminazione è l'effetto della perturbazione causata dallo strumento di misura  $\rightarrow$  perturbazione ha ruolo essenziale in meccanica quantistica perchè ha lo stesso ordine di grandezza della mia misura

- Elettrone: oltre a carica e massa ha anche un momento magnetico, che è una proprietà dell'elettrone  $\Rightarrow$  spin  $\left(\pm \frac{h}{2}\right)$  [elettrone come piccola calamita]

# Capitolo 3

## L'equazione di Schrodinger

È ricavata da ipotesi plausibili, ma non è dimostrabile; descrive fenomeni quantistici, ma non relativistici.

Deve contenere:

1. Principio di indeterminazione di Heisenberg  $\rightarrow$  incapacità operativa di calcolare traiettoria particella
2. Corretto limite classico  $\rightarrow$  quando posso trascurare dettagli quantistici devo riavere fisica classica
3. Equazione lineare per poter sovrapporre soluzioni  $\Rightarrow$  principio sovrapposizione. Algoritmo per costruire diffrazione (del tipo  $|\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2 \neq |\vec{E}_1|^2 + |\vec{E}_2|^2$ )  $\rightarrow$  somma coerente di 2 oggetti  $\Rightarrow |\psi|^2$ : densità di probabilità
4. Somma coerente richiede lunghezza d'onda  $\rightarrow$  ipotesi di De Broglie
5. Per somma coerente non è necessario campo vettoriale; massima semplicità: campi scalari complessi  $\rightarrow$  in ogni punto ho bisogno di 2 soli valori, non di 3. Ipotesi valida perchè:  $|c_1 + c_2|^2 \neq |c_1|^2 + |c_2|^2$

### 3.1 Equazione di Schrodinger per una particella libera

Costruzione...

- Particella libera in 1 dimensione
- $f(x)$ : campo scalare complesso
- $|f(x)|^2 dx = dP \rightarrow$  probabilità infinitesima di trovare particella tra  $x$  e  $x + dx \Rightarrow |f(x)|^2$ : densità di probabilità
- $\int dP = 1 \rightarrow$  postulato probabilità

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)|^2 = 1$$

- $f(x)$  ampiezza di probabilità (campo quantistico)
- Rappresento particella come pacchetto d'onde molto localizzato; ambito naturale è trasformata di Fourier

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

Esempio uso gaussiana  $g(k) = e^{\alpha(k-k_0)^2}$  che ha come ordine di grandezza della larghezza  $\frac{1}{\sqrt{\alpha}}$

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

Posso calcolare

$$\begin{cases} \langle x \rangle = \int dx x f(x) \\ \Delta x^2 = \int dx (x - \langle x \rangle)^2 f(x) \end{cases}$$

ottenendo che  $\Delta x = \sqrt{\alpha}$  e  $\Delta k = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}$  e quindi che

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

In generale si può dimostrare che per qualunque funzione vale che

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

- Se voglio che sia valido De Broglie chiamo:  $\hbar k = p \rightarrow k = \frac{p}{\hbar}$

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

che ci rimanda al principio di indeterminazione: la trasformata di Fourier ci dà informazioni sui momenti

- Tutto questo è valido per una particella ad un istante  $t = \bar{t} = 0$ ; devo inserire il tempo: per farlo uso la condizione che il baricentro del pacchetto d'onda soddisfi equazione di Newton  $\rightarrow$  posizione classica della particella è il baricentro  $\langle x \rangle$  del pacchetto d'onda
- Per un'onda piana qualsiasi vale che  $e^{i(kx - w(k)t)}$ , ma per le onde elettromagnetiche nel vuoto  $w(k) = 2\pi\nu = 2\pi\frac{c}{\lambda} = kc$ , quindi

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

ogni singola onda piana si muove con velocità  $c$ . Per soddisfare equazioni di Maxwell  $f(x, t) \mapsto f(x - ct)$

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

espandendo attorno a  $k_0 \rightarrow w(k) = w(k_0) + (k - k_0) \left( \frac{dw}{dk} \right)_{k_0} + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 \left( \frac{d^2 w}{dk^2} \right)_{k_0} + \dots$ , ponendo  $k' = k - k_0$

$$f(x, t) = e^{i(k_0 x - w(k_0)t)} \int dk' g(k') e^{i(x - v_g t)} e^{i\beta t k'^2} \quad v_g = \left( \frac{dw}{dk} \right)_{k_0} \quad \beta = \left( \frac{d^2 w}{dk^2} \right)_{k_0}$$

$v_g$ : velocità di gruppo con cui si propaga il centro del pacchetto d'onda.

I pacchetti sono centrati  $\rightarrow p_0 = \hbar k_0$

- Impongo equazioni di Newton

$$v_g = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar k_0}{m} \Rightarrow \left( \frac{dw}{dk} \right)_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$$

integrando si ottiene la relazione di dispersione per una particella libera

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

mettendo insieme

$$f(x, t) = \int dk g(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \underbrace{= \frac{1}{\hbar} \int dp g(p) e^{\frac{i}{\hbar} (px - \frac{p^2}{2m} t)}}_{p=\hbar k} = \underbrace{\frac{1}{\hbar} \int dp g(p) e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)}}_{E=\frac{p^2}{m}}$$

$$\psi(x, t) = \int dp \phi(p) e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)}$$

- Impongo condizione che

$$\int_{-\infty}^{\infty} dV |\psi(x, t)|^2 = 1$$

- Cerco equazione lineare più semplice che soddisfa  $\psi$ :

$$\begin{aligned} - \frac{\delta \psi}{\delta t} &= \int dp \Phi(p) \left( -\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \right) e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)} \\ - \frac{\delta \psi}{\delta x} &= \int dp \Phi(p) \frac{i}{\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)} \\ - \frac{\delta^2 \psi}{\delta x^2} &= \int dp \Phi(p) \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^2 p^2 e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)} \end{aligned}$$

$$i\hbar \frac{\delta \psi}{\delta t} = \frac{1}{2m} \int dp \Phi(p) p^2 e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2 \psi}{\delta x^2}$$

EQUAZIONI DI SCHRODINGER di 1 particella libera in una dimensione

$$i\hbar \frac{\delta \psi}{\delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2 \psi}{\delta x^2} \quad (3.1)$$

Conclusioni:

- equazione lineare del secondo ordine nelle coordinate spaziali e del primo ordine in quelle temporali
- non è un'equazione relativistica
- $\psi$  è una funzione complessa

Commenti gaussiani centrata in  $\frac{\hbar k_0}{m} t$

1. Centro si sposta con velocità  $v_g = \frac{\hbar k_0}{m}$
2. La larghezza del pacchetto

$$\Delta x = \frac{\alpha}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 \alpha^4}}$$

aumenta con il tempo; con il passare del tempo è sempre più difficile determinare la posizione

3. L'allargamento di  $\Delta x$  per la particella libera non è una caratteristica del solo pacchetto gaussiano: per ogni distribuzione iniziale, se faccio passare un tempo sufficientemente lungo, la larghezza del pacchetto cresce
4. La distribuzione dei momenti non cambia.  $e^{-\frac{\alpha^2}{4}(k-k_0)^2}$  rimane lo stesso, compreso il valore centrale dei momenti  $\hbar k_0$ . La distribuzione dei momenti non cambia perchè pacchetto è libero, non ci sono forze  $\rightarrow$  MOMENTO CONSERVATO

### 3.2 Equazione di Schrodinger per un potenziale arbitrario $V(x)$

Per particella libera:  $E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{\delta\psi}{\delta t} = \int dp \Phi(p) E e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \\ i\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2\psi}{\delta x^2} = \int dp \Phi(p) E e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \end{cases}$  Se ho un potenziale  $V(x)$  l'energia vale

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

se moltiplico entrambi i membri per  $\int dp \Phi(p) E e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$  ottengo

$$i\hbar \frac{\delta\psi}{\delta t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2}{\delta x^2} + V(x) \right] \psi$$

Se generalizzo in 3 dimensioni ottengo l'equazione di Schrodinger in 3 dimensioni

$$i\hbar \frac{\delta}{\delta t} \psi(t, \vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(t, \vec{x}) + V(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) \quad \vec{x} = (x, y, z) \quad \nabla^2 = \frac{\delta^2}{\delta x^2} + \frac{\delta^2}{\delta y^2} + \frac{\delta^2}{\delta z^2}$$

Per avere interpretazione probabilistica voglio che a ogni tempo valga

$$\int d^3x |\psi(t, \vec{x})|^2 = 1$$

$dP$  è la probabilità infinitesima di trovare particella in un punto  $\vec{x}$  nel volume di  $d^3x$ s

## Capitolo 4

# Conservazione locale probabilità ed equazione di continuità

É vero sempre che vale la seguente relazione?

$$\int d^3x |\psi(t, \vec{x})|^2 = 1$$

Considero l'equazione di Schrodinger

$$i\hbar \frac{\delta}{\delta t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi$$

e ne faccio il complesso coniugato

$$-i\hbar \frac{\delta}{\delta t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^*$$

Prendo l'equazione

$$\frac{\delta}{\delta t} |\psi|^2 = \frac{\delta}{\delta t} \psi^* \psi = \frac{\delta \psi^*}{\delta t} \psi + \psi^* \frac{\delta \psi}{\delta t}$$

sostituendo con ciò che abbiamo ottenuto dalle due equazioni precedenti si ottiene

$$\frac{\delta}{\delta t} |\psi|^2 = \frac{1}{i\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi + \psi^* V \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \psi \nabla^2 \psi^* - \psi V \psi^* \right]$$

che in definitiva si ottiene

$$\frac{\delta}{\delta t} |\psi|^2 = -\frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \quad (a)$$

Ora posso definire  $\vec{J}$ , densità di corrente di probabilità

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

calcolo la divergenza di  $\vec{J}$

$$\text{div} \vec{J} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$$

definendo la densità di probabilità  $\rho$

$$\rho = |\psi(t, \vec{x})|^2$$

l'equazione (a) diventa

$$\frac{\delta \rho}{\delta t} + \text{div} \vec{J} = 0 \quad (b)$$

Commenti:

1.  $\vec{J}$  è reale:  $\vec{J}^* = \vec{J}$

2. A meno di interpretazione la è uguale all'equazione di continuità della carica elettrica: conservazione della carica locale e non globale

Prendo un volume  $\Omega$  arbitrario ( $\delta\Omega$  è la superficie del volume)

$$\frac{\delta}{\delta t} \int_{\Omega} d^3x \rho(t, \vec{x}) = - \int_{\Omega} d^3x \operatorname{div} \vec{J}(t, \vec{x})$$

usando il teorema di Gauss

$$\frac{\delta}{\delta t} \int_{\Omega} d^3x \rho = \int_{\delta\Omega} \vec{J} \cdot d\vec{s}$$

se  $\Omega$  è tutto lo spazio

$$\int_{\Omega} d^3x |\psi|^2 = \text{finito}$$

affinchè  $\psi$  possa essere integrata deve "morire" all'infinito  $\Rightarrow$  non c'è  $\vec{J}$

$$\frac{\delta}{\delta t} \int d^3x |\psi(t, \vec{x})|^2 = 0$$

quindi

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3x |\psi(t, \vec{x})|^2 = \text{cost} = 1 \quad \forall t$$



## Capitolo 5

### Considerazione sugli operatori: parte I

## Capitolo 6

# Potenziali indipendenti dal tempo e stati stazionari

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

Potenziale che non dipende dal tempo non implica che  $\psi(t, x)$  non dipenda dal tempo. Cerco soluzioni in una famiglia a variabili separabili

$$\psi(t, \vec{x}) = \phi(\vec{x})T(t)$$

$$i\hbar\phi(\vec{x})\frac{\delta T}{\delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m}T(t)\nabla^2\phi(\vec{x}) + V(\vec{x})T(t)\phi(\vec{x})$$

Divido per  $\phi(\vec{x})T(t)$

$$i\hbar\frac{1}{T}\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\phi}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi + V\phi\right] = E(\text{cost})$$

$$i\hbar\frac{dT}{T} = E dt \rightarrow \text{integro} \int_{T_i}^{T_f} \int_{t_i}^{t_f}$$

$$T = ce^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad T(0) = c$$

E interpretabile come energia totale del sistema che è costante, a patto che il potenziale non dipenda dal tempo. Esistono stati particolari, che chiamiamo stati stazionari, che dipendono dal tempo con un puro fattore di fase

$$\psi(t, \vec{x}) = \phi(\vec{x})e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

allora  $|\psi| = |\phi|$ : non dipende dal tempo

## Equazione di Schrodinger per gli stati stazionari

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\vec{x}) + V(\vec{x})\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x}) \quad E = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (6.1)$$

Operatore hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad \underbrace{\quad}_{\text{rapp. coord}} \quad = \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})$$

Allora l'equazione di Schrodinger per gli stati stazionari diventa

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

# Capitolo 7

## Proprietà soluzioni in 1 dimensione

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

con  $\hat{H}$  operatore autoaggiunto o hermitiano

$$(g, f) = \int_{-\infty}^{\infty} dx g^* f$$

### 1. Spettro discreto

- $E_n$  sono reali
- Autofunzioni corrispondenti ad autovalori di  $E_n$  diversi sono ortogonali

$$\phi_1, \phi_2 \quad E_1 \neq E_2 \Rightarrow \int dx \phi_1 \phi_2^* = 0$$

- $\hat{H}\phi = E\phi$  ha una sola soluzione per ogni valore di  $E$ : gli stati dello spettro discreto non sono degeneri
- $\phi_n$  dello spettro discreto sono reali
- $\phi_n$  corrispondente ad autovalore  $(n+1)$ -esimo di energia si azzera per  $n$  punti finiti di  $x$
- Se  $V(x)$  è una funzione pari ( $V(x)=V(-x)$ ) allora gli stati stazionari  $\phi_n(x)$  sono o pari o dispari

### 2. Spettro continuo: le autofunzioni $\notin L^2(\mathbb{R})$ , ma possono essere utilizzate per costruire soluzioni fisiche

- Data  $\phi_E \rightarrow \hat{H}\phi_E = E\phi_E \Rightarrow \hat{H}$  è limitato
- $\int_{E-\Delta E}^{E+\Delta E} E c(E) \phi_E(x) \in L^2(\mathbb{R}) \Rightarrow c(E)$  hanno spettro finito

# Capitolo 8

## Considerazioni sugli operatori: parte II

Considero i due operatori  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$  e una cenerica osservabile classica  $A(\vec{x}, \vec{p})$ . A livello quantistico abbiamo  $A(\hat{x}, \hat{p})$ , ma abbiamo un problema: se a livello classico non c'è preferenza su ordine, in meccanica quantistica cosa succede se  $A$  contiene  $px$  e non  $xp$ ?

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

N.B.

1. A noi interessano operatori Hermitiani:  $\hat{x}\hat{p}$  non è hermitiano

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

ma

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

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

## Capitolo 9

# I postulati della meccanica quantistica

Ipotesi meccanica quantistica: ogni sistema descritto da funzione d'onda  $\psi(t, \vec{x})$ .

Voglio prendere misura di un'osservabile  $A$ ; considero tutti i sistemi descritti dalla stessa funzione d'onda  $\psi(\vec{x})$

Cosa succede se misuro  $A$ ? Generalmente succede che non avrò lo stesso risultato, INDIPENDENTE-  
MENTE dagli errori di misura. Misuro  $A_1, A_2, A_3, \dots, A_i$ , che possono essere sia valori discreti (per  
semplicità il caso che analizziamo), sia continui

Mi aspetto che

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

corrisponda al valore classico, quindi

$$\sum_i^N \frac{a_i}{N} \sim \langle \hat{A} \rangle$$

Per lo scarto quadratico medio posso scrivere l'equivalente di quello che otteniamo classicamente

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

$$SQM = \int dx \psi^* (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi \quad (9.1)$$

Esistono casi in meccanica quantistica in cui, data  $\psi$ , ottengo sempre lo stesso risultato di misura?

Se esiste  $\psi$  che mi fa ottenere sempre lo stesso risultato, allora  $SQM = 0$ ; ciò significa che esiste uno  
stato particolare  $\bar{\psi}$  che rende nullo l'integrale 9.1

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

Se esiste una  $\bar{\psi}$  per cui la misura è sempre la stessa allora deve valere la seguente relazione

$$\hat{A} \psi_a = a \psi_a \quad \text{EQUAZIONE AGLI AUTOVALORI}$$

NON abbiamo detto che  $\{a\}$  siano gli unici valori delle misure

Adesso prendo uno stato generico  $\psi$  e faccio una certa misura di un'osservabile; pochissimo tempo  
dopo faccio di nuovo stessa misura della stessa grandezza: se non lascio evolvere il sistema, mi aspetto  
di ottenere lo stesso risultato, perchè non ho perturbato il sistema  $\rightarrow$  riproducibilità in piccolo

Questa è una ragionevole assunzione, non la posso dimostrare

Se faccio una misura e ottengo il valore  $a_3$ , e subito dopo ottengo lo stesso valore, allora lo stato subito  
dopo la prima misura si deve essere trasformato nello stato  $\psi_3$ : solo su questo stato ho la certezza di  
avere di nuovo  $a_3$ . Allora la prima misura deve aver trasformato pesantemente il sistema  $\rightarrow$  lo proietta

su uno degli autostati ( $\psi \mapsto \psi_a$ )

SE É COSÌ ALLORA GLI UNICI RISULTATI POSSIBILI DI UNA MISURA SONO GLI AUTOVALORI DELL'OSSERVABILE MISURATA

Commenti:

1. Se  $\psi$  generica fosse autofunzione di  $A$  ( $\psi_{a_j}$ ): allora prima misura mi darebbe sempre  $a_j$
2. Se  $\psi$  non è autofunzione di  $A$ : allora  $\psi$  deve precipitare su  $\psi_{a_j}$  perchè seconda misura deve essere  $a_j$
3. Le osservabili sono rappresentate da operatori i cui autovalori sono tutti e soli i valori di una misura
4. All'atto della misura funzione precipita su autovettore corrispondente ad autovalore misurato

In maniera imprevedibile precipitiamo su autostato. A priori non possiamo sapere su quale autostato precipito. Possiamo solo e soltanto ottenere i valori  $a_j$

Possiamo prevedere con quale probabilità arriviamo su certo autostato?

Suppongo di fare esperimento su diversi sistemi con valore  $\psi$ , per farmi idea statistica di ciò che ottengo

- se  $\psi$  coincide con  $\psi_{a_3}$  allora  $Prob(a_3) = 1$

- se  $\psi \simeq \psi_{a_3}$  allora  $Prob(a_3) \sim 1$

1. Probabilità devono essere proporzionali a coefficienti di sviluppo in serie della  $\psi$  su  $\psi_{a_i}$
2. Deve valere principio di sovrapposizione delle ampiezze

$$\psi = \sum_{i=1}^N c_i \psi_i$$

Per avere interpretazione probabilistica

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

Se gli autovettori fossero ortogonali:

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

allora posso interpretare  $|c_i|^2$  come probabilità di ottenere  $a_i$ . Se ortogonali allora buona congettura che  $|c_i|^2$  è una probabilità

Data  $\psi = \sum c_i \psi_{a_i}$

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

Conseguenze formali:

Se " $a_j$ " sono tutti e soli i valori di misura allora devono essere reali  $\rightarrow$  autovettori ortogonali. Esiste classe di operatori che ha sempre autovalori reali  $\rightarrow$  spazio di Hilbert con operatori hermitiani o autoaggiunti

## I postulati

1. Qualunque stato quantistico è descritto vettore di stato (ket)  $|\psi\rangle$  che vive in uno spazio di Hilbert
2. Ad ogni quantità misurabile  $A$  è associato operatore  $\hat{A}$  che agisce su spazio di Hilbert;  $\hat{A}$  è hermitiano ed è chiamato osservabile
3. I soli possibili risultati di una misura di una quantità sono gli autovalori associati ad  $\hat{A}$
4. Supponendo di avere uno spettro discreto e non degenere, allora quando osservo  $A$  su stato normalizzato  $|\psi\rangle$

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

dove  $\psi_{a_n}$  è autovettore normalizzato associato ad autovalore  $a_n$  dell'operatore  $\hat{A}$

5. Supponendo di avere uno spettro discreto e non degenere, se faccio misura di  $A$  descritto da stato  $|\psi\rangle$  e ottengo  $a_n$  allora la misura successiva si trova su  $|\psi_{a_n}\rangle$  corrispondente ad  $a_n$
6. L'evoluzione temporale  $|\psi(t)\rangle$  obbedisce all'equazione di Schrodinger

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

$\hat{H}(t)$  osservabile associata all'energia totale del sistema  $\rightarrow$  hamiltoniana

# Capitolo 10

## Richiami spazi di Hilbert

Uno spazio di Hilbert è uno spazio vettoriale, normato (norma segue da definizione prodotto scalare) e completo. Perché usiamo uno spazio di Hilbert?

1. Sovrapposizione di funzioni d'onda voglio che siano funzioni d'onda: spazio lineare

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

2. Prodotto scalare è un numero complesso

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

3.  $L^2(\mathbb{R})$  funzioni a quadrato sommabile

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3x |\psi(\vec{x})|^2 < +\infty$$

### Proprietà prodotto scalare

- $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*$
- È lineare nel secondo argomento  $\Rightarrow \langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle$
- È antilineare nel secondo argomento  $\Rightarrow \langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle$

### Norma

È un numero reale  $\geq 0$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 = \|\psi\|^2$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 0 \iff \psi(\vec{x}) = 0$$

### Basi ortonormate

1.  $|n\rangle$  con  $n = 1, 2, \dots$  tale che  $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$
2. Trasformate di Fourier, polinomi di Hermite  $\Rightarrow$  basi improprie (continue)



## Spazio completo

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

$$|\phi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n |n\rangle$$

Allora

$$\langle \psi|\phi\rangle = \sum_{n,m} \psi_n^* \phi_n \langle n|m\rangle = \sum_n \psi_n^* \phi_n$$

## Notazione di Dirac

Serve qualcosa di più astratto per descrivere lo stato della particella; ad esempio  $\psi(\vec{x}), \phi(\vec{p})$  portano stesse informazioni, solo che a volte le coordinate vengono indicate con le x, altre volte con le p  $\Rightarrow |\psi\rangle$ . Indico lo stato fisico di un sistema con un KET  $|\psi\rangle$ ; allo spazio dei ket associo un BRA  $\langle\phi|$  spazio duale: spazio dei funzionali lineare nello spazio di Hilbert, dato  $\langle\phi|$  prendo un elemento dello spazio H e ci associo un numero complesso.

Se ho ket

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

il suo duale vale

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

Quindi lo spazio dei ket è lineare, mentre lo spazio dei bra è antilineare

$$\langle \psi|\phi\rangle = \sum_n \psi_n^* \phi_n = (\psi_1^*, \psi_2^*, \dots, \psi_n^*) \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix}$$

Possiamo rappresentare  $|\phi\rangle$  con i suoi coefficienti su una data base e li organizziamo in un vettore colonna, mentre rappresentiamo  $\langle\psi|$  in un vettore riga. Per passare da  $|\psi\rangle$  a  $\langle\psi|$  devo fare il trasposto e il complesso coniugato

# Capitolo 11

## Oscillatore armonico

$$H = \frac{p^2}{2m} + \underbrace{\frac{1}{2}m\omega^2 x^2}_k$$

In prima approssimazione serve a risolvere molti problemi (intorno a punti di minimo)  
Potenziale oscillatore armonico è di tipo quadratico; intorno a un punto di minimo  $V'(x_0) = 0$  posso fare uno sviluppo in serie di Taylor

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$$

- Vibrazioni atomi di una molecola
- Oscillazioni di atomi in reticolo cristallino → FONONI
- Quantizzazione campo elettromagnetico → FOTONI

Stati stazionari:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E\varphi(x)$$

Essendo il potenziale di tipo quadratico, lo spettro dell'oscillatore armonico sarà discreto (2 punti di inversione del moto).

Esistono 2 metodi di risoluzione:

- Metodo standard: risoluzione equazione differenziale  
Per prima cosa rendo l'espressione adimensionata

$$\xi = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (a)$$

allora l'equazione diventa

$$\left( -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \right) \varphi - \xi \varphi = 0$$

introduco y

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad \frac{dy}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad \frac{d}{dx} = \frac{dy}{dx} \frac{d}{dy}$$

otteniamo

$$\frac{d^2}{dy^2} \varphi + (\xi - y^2) \varphi = 0 \quad (b)$$

Guardo cosa succede all'infinito (localmente decrescita esponenziale)

$$y \rightarrow \pm\infty \Rightarrow \ddot{\varphi} - y^2 \simeq 0 \quad (1)$$

ipotizzando che

$$\varphi \div e^{-ay^2}$$

si ha che

$$\dot{\varphi} = -2ay e^{-ay^2} \quad \ddot{\varphi} = (-2a + 4a^2 y^2) e^{-ay^2}$$

sostituendo nella (1)

$$(-2a + 4a^2 y^2 - y^2) e^{-ay^2} \simeq 0$$

$$[-2a + (4a^2 - 1)y^2] e^{-ay^2} \simeq 0$$

$$4a^2 - 1 = 0 \Rightarrow a = \frac{1}{2}$$

Quindi

$$\varphi(x) = e^{-\frac{y^2}{2}} h(x) \quad (**)$$

sostituendo (\*\*) in (b)

$$\frac{d^2}{dy^2} h(y) - 2y \frac{dh(y)}{dy} + (\xi - 1)h(y) = 0 \quad (2)$$

Per  $y \ll \infty$

$$h(y) \sim \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \quad (c)$$

sostituendo (c) in (2) ricavo il coefficiente di  $y^m$

$$(m+1)(m+2)a_{m+2} = (2m - \xi + 1)a_m \quad (3)$$

- $a_0$ : serie di soli termini pari
- $a_2$ : serie di soli termini dispari

Guardo il comportamento per m grande ( $m > N$ )

$$a_{m+2} \simeq \frac{2m}{m^2} a_m \simeq \frac{2}{m} a_m$$

allora la funzione  $h(y)$  ha un andamento polinomiale fino a N, poi

$$a_N y^N + \frac{2}{N} a_N y^{N+2} + \frac{2^2}{(N+2)N} a_N y^{N+4} + \frac{2^3}{(N+4)(N+2)N} a_N y^{N+6} + \dots$$

$$h(y) = \dots + a_N y^2 \left(\frac{N}{2}\right)! \left[ \frac{(y^2)^{\frac{N}{2}-1}}{\left(\frac{N}{2}-1\right)!} + \frac{(y^2)^{\frac{N}{2}}}{\left(\frac{N}{2}\right)!} + \frac{(y^2)^{\frac{N}{2}+1}}{\left(\frac{N}{2}+1\right)!} \right] \simeq \text{cost } y^2 [e^{y^2} - \text{polinomio in } y]$$

$$h(y) \simeq \text{cost } y^2 e^{y^2} + \text{pol}$$

Da (\*\*)

$$\varphi \simeq e^{-\frac{y^2}{2}} y^2 e^{y^2} \simeq y^2 e^{\frac{y^2}{2}}$$

che diverge per  $y$  grande; devo impedire che la serie mi dia esponenziale: la serie deve essere fermata

Se esiste  $n$  tale che

$$2n - \xi + 1 = 0$$

allora la serie si ferma

$$\xi = 2n + 1 \quad (d)$$

Sostituendo la (d) nella (a) ottengo che *i livelli energetici devono essere quantizzati*

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Conseguenze:

1. Energia è quantizzata con pacchetti  $\hbar\omega$
2. Stato con energia minima (energia di punto 0)

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

in accordo con il principio di indeterminazione di Heisenberg

3. Sostituendo (d) in (2) si ottiene l'equazione dei polinomi di Hermite

$$\frac{d^2 h}{dy^2} - 2y \frac{dh}{dy} + 2nh = 0$$

- Metodo algebrico: Dirac

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

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

Rendo le quantità adimensionate

$$\hat{\hat{x}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \quad \hat{\hat{p}} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \quad \hat{\hat{H}} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega}$$

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

$$\hat{\hat{H}} = \frac{1}{2}(\hat{\hat{x}}^2 + \hat{\hat{p}}^2) = \frac{\hat{\hat{x}} + i\hat{\hat{p}}}{\sqrt{2}} \frac{\hat{\hat{x}} - i\hat{\hat{p}}}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}$$

definisco

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\hat{x}} + i\hat{\hat{p}}) \quad \text{distruttore}$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\hat{x}} - i\hat{\hat{p}}) \quad \text{costruttore} \quad (e)$$

da (e)

$$\hat{\hat{x}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ + \hat{a}) \quad \hat{\hat{p}} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a})$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \Rightarrow \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1 \quad (f)$$

usando la (f)

$$\hat{H} = \hat{a}\hat{a}^+ - \frac{1}{2} = \hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}$$

posso definire l'operatore numero

$$\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$$

allora

$$\hat{H} = \hat{N} + \frac{1}{2}$$

N.B.  $\hat{N}$  è autoaggiunto

$$\hat{N}^+ = (\hat{a}^+\hat{a})^+ = \hat{a}^+\hat{a}$$

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

$$- [\hat{N}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+$$

## 11.1 Ricerca spettro di N

$$\hat{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle \quad \langle \nu|\nu\rangle = 1 \quad \nu \in \mathbb{R}$$

$$\hat{H}|\nu\rangle = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)|\nu\rangle$$

Calcolo

$$\boxed{\hat{N}\hat{a}|\nu\rangle = (\nu - 1)\hat{a}|\nu\rangle} \quad (4)$$

$$\hat{N}\hat{a}^+|\nu\rangle = (\nu + 1)\hat{a}^+|\nu\rangle \quad (5)$$

allora

- $\nu$  è autovalore corrispondente a  $\hat{N}|\nu\rangle$
- $(\nu + 1)$  è autovalore corrispondente a  $\hat{a}^+|\nu\rangle$
- $(\nu - 1)$  è autovalore corrispondente a  $\hat{a}|\nu\rangle$

Nello spazio di Hilbert, la norma è sempre maggiore o uguale a 0 ed nulla se e soltanto se il vettore è nullo

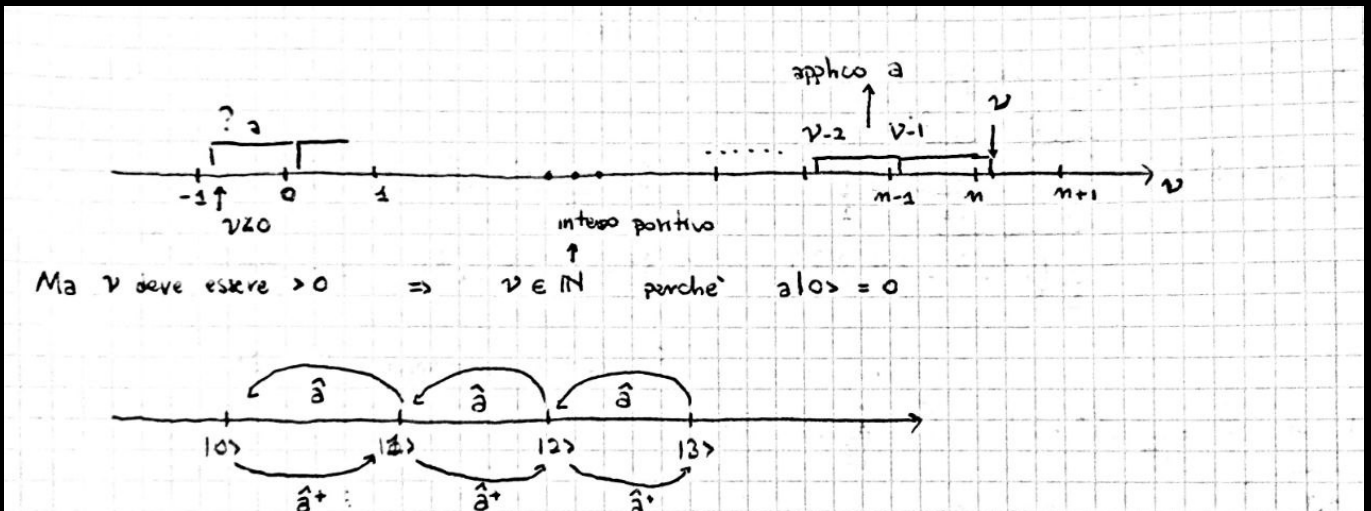
$$0 \leq \|a|\nu\rangle\|^2 = \langle \nu|\hat{a}^+\hat{a}|\nu\rangle = \nu \langle \nu|\nu\rangle = \nu \quad \Rightarrow \nu \geq 0$$

Conseguenze:

1. Esiste un minimo  $\rightarrow \nu = 0$  corrispondente allo stato  $|0\rangle$ ; poichè la norma è nulla vale che  $a|0\rangle = 0$ :  
*stato fondamentale*

$$\hat{N}|0\rangle = 0|0\rangle$$

2.  $\nu > 0 \quad \nu \in \mathbb{R}$   
Applico la (4)



Gli autovalori di  $\hat{N}$  appartengono ai numeri reali: ecco perchè del nome *operatore numero*

## 11.2 Rappresentazione degli stati

$$\begin{aligned} a|0\rangle &= 0 \\ a^+a|0\rangle &= |1\rangle \\ a^+|n\rangle &= c_n|n+1\rangle \end{aligned} \quad (c)$$

Ne calcolo la norma al quadrato di (c)

$$\|a^+|n\rangle\|^2 = \dots = (n+1) \quad (a)$$

$$\|c_n|n+1\rangle\|^2 = |c_n|^2 \quad (b)$$

uguagliando (a)=(b)

$$|c_n|^2 = n+1 \Rightarrow c_n = \sqrt{n+1}$$

sostituendo nella (c)

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (6)$$

facendo i conti, si può anche ottenere

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (7)$$

usando la (6)

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a^+|n-1\rangle$$

Ripetendo

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle$$

## 11.3 Trovare rappresentazione dello stato fondamentale

Riconverto a in termini di x e p

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p} \right] |0\rangle = 0 \quad (a)$$

$$1. \hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$$

$$2. \langle x | \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \langle x |$$

moltiplicando la (a) per  $\langle x |$  si ottiene

$$\left\{ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \right\} \langle x | 0 \rangle = 0$$

$$\left( \frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \varphi_0(x) = 0$$

integrando e imponendo la condizione di normalizzazione

$$\varphi_0(x) = \frac{m\omega}{\pi\hbar}^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (9)$$

Calcolo il bracket

$$\langle x | n \rangle = \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right)^n \varphi_0(x)$$

introducendo

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

si trova

$$\varphi_n(x) = \frac{m\omega}{\pi\hbar}^{\frac{1}{4}} \frac{H_n(\xi)}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

dove gli  $H_n(\xi)$  sono i polinomi di Hermite

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left( \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2}$$

## 11.4 Rappresentazione matriciale

$$a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$\hat{x} |n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n+1} |n+1\rangle + \sqrt{n} |n-1\rangle)$$

$$\hat{p} |n\rangle = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\sqrt{n+1} |n+1\rangle - \sqrt{n} |n-1\rangle)$$

- $\langle n' | a | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n', n-1}$
- $\langle n' | a^+ | n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}$
- $\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} + \sqrt{n} \delta_{n', n-1})$
- $\langle n' | p | n \rangle = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} - \sqrt{n} \delta_{n', n-1})$
- $\langle n' | N | n \rangle = n \delta_{n', n}$

$$\hat{a} \doteq \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} \quad \hat{a}^+ \doteq \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{N} \doteq \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

$$\hat{x} \doteq \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{p} \doteq \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 \\ +i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix}$$

## 11.5 Oscillatore armonico 3D

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z = \sum_{i=0}^3 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2}{\delta x_i^2} + \frac{1}{2} m \omega_i^2 x_i^2$$

$$\varphi(x, y, z) = \varphi_{n_1}^{\omega_1}(x) + \varphi_{n_2}^{\omega_2}(y) + \varphi_{n_3}^{\omega_3}(z)$$

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

Se  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$  sono incommensurabili  $\Rightarrow$  non c'è degenerazione

Posso aumentare al massimo la simmetria:  $\omega = \omega_1 = \omega_2 = \omega_3$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad V = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 = V(r) \text{ sferosimmetrico}$$

allora nascono nuove costanti del moto e quindi compare la degenerazione

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

$$n_{deg} = \frac{1}{2}(n+1)(n+2) \quad n = n_1 + n_2 + n_3$$



## Capitolo 12

# Osservabili compatibili e incompatibili

### Notazione

Dati due operatori  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  che commutano, il ket viene identificato dai  $a_i, b_i$

$$\hat{A}|a_i b_j\rangle = a_i |a_i b_j\rangle$$

$$\hat{B}|a_i b_j\rangle = b_j |a_i b_j\rangle$$

I  $b'_j$  trovati dalla diagonalizzazione di  $B_3$  sono diversi tra loro? Se alcuni autovalori sono uguali, allora conoscere il valore di  $a_i$  e  $b_j$  non è sufficiente a conoscere l'autovettore (ci sono  $k$  autovalori legati a  $b_j$ ). Si cerca allora il terzo operatore  $\hat{C}$  che commuta simultaneamente con  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] = 0$$

Etichettiamo allora l'autovettore con  $|a_i b_j c_k\rangle$  affinché l'autostato sia univocamente definito. Una volta trovati tutti gli operatori necessari per fare ciò, si dice che si ha RISOLTO LA DEGENERAZIONE. Tutti gli operatori usati sono contemporaneamente diagonali sulla base usata.

Il compito fondamentale della meccanica quantistica è quindi di ricercare il set completo di osservabili che commutano per poter porre un label a ogni autostato in modo che esso sia univocamente determinato  $\rightarrow$  complete set of commuting observables. Il set si dice completo se aggiungendo un'altra osservabile che commuta con tutte quelle già esistenti questa osservabile è funzione di quelle già presenti nel set.

Per dare una descrizione completa di un sistema, ovvero a dare la massima informazione possibile, bisogna determinare il numero massimo di osservabili indipendenti e che commutano fra di loro. Questa è detta OSSERVAZIONE MASSIMA: dato uno stato  $|a_i b_j c_k d_l \dots\rangle$  misurare  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D}$  darà con certezza i risultati  $a_i, b_j, c_k, d_l$ . Per fare la ricerca del set si osserva l'hamiltoniana e le simmetrie del problema

## Capitolo 13

# Evoluzione temporale del valor medio di un'osservabile

Consideriamo un operatore  $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p}, t)$  e il generico stato  $|\psi(t)\rangle$ . Il valore medio sarà

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \int d^3x \psi^*(x, t) \hat{A}\left(\hat{x}, -i\hbar \frac{\delta}{\delta x}, t\right) \psi(x, t)$$

e sarà un numero t-dipendent. La dipendenza dal tempo veniva sia dall'operatore che dalla funzione d'onda. Per notazione scriviamo il valore medio come

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

allora la derivata sarà

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle (t) = \left( \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\delta}{\delta t} \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} | \frac{d}{dt} \psi(t) \rangle$$

L'ultimo pezzo è noto in quanto deve soddisfare che

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

da essa si ricava che

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | \langle \psi | \hat{H}$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle (t) = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{A}(t) \hat{H}(t) - \hat{H}(t) \hat{A}(t)] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\delta}{\delta t} \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

Ottenendo

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle (t) = \frac{1}{i\hbar} \underbrace{\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle}_{\text{valor medio del commutatore}} + \underbrace{\left\langle \frac{\delta \hat{A}}{\delta t} \right\rangle}_{\text{valor medio della derivata}} \quad (13.1)$$

# Capitolo 14

## Limite classico e teorema di Ehrenfest

Consideriamo una particella senza spin in un potenziale stazionario  $V(\vec{x})$ . L'hamiltoniana sarà

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

Applichiamo (13.1) a  $\hat{x}, \hat{p}$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{i\hbar 2m} \langle \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, V(\vec{x})] \rangle = - \langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle$$

Teorema di Ehrenfest

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = - \langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle$$

Possiamo ora combinare le equazioni

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{x} \rangle = - \langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle$$

Nel limite classico

# Capitolo 15

## Legame tra $\hat{L}^2$ e $\hat{p}^2$

$$\hat{L}^2 = (\vec{\hat{x}} \times \vec{\hat{p}})^2 = \sum_{ijkl=1}^3 \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k \varepsilon^{ils} \hat{x}^l \hat{p}^s$$
$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon^{ils} = \delta_j^l \delta_k^s - \delta_j^s \delta_k^l \quad (a)$$

$$\hat{L}^2 = \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_j \hat{p}_k - \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_k \hat{p}_j = \hat{x}_j (\hat{x}_j \hat{p}_k - i\hbar \delta_{jk}) \hat{p}_k - \hat{x}_j \hat{p}_k (\hat{p}_j \hat{x}_k + i\hbar \delta_{jk})$$

$$\hat{L}^2 = \hat{x}^2 \hat{p}^2 - (\hat{\vec{x}} \cdot \hat{\vec{x}})^2 + i\hbar (\hat{\vec{x}} \cdot \hat{\vec{x}}) \quad (0)$$

# Capitolo 16

## Gli atomi idrogenoidi: prima approssimazione

- Nucleo come puntiforme
- Trascuro spin
- Trascuro effetti relativistici
- Interazione solo coulombiana

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$$

L'hamiltoniana vale

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}$$

Soluzioni radiali equazione di Schrodinger:

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \\ R_{20}(r) &= \frac{\sqrt{2}}{2} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left( 2 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \\ R_{21}(r) &= \frac{\sqrt{3}}{3} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \\ R_{30}(r) &= 2 \left( \frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left( 1 - 2\frac{Zr}{3a_0} + 2\frac{Zr^2}{27a_0^2} \right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \\ R_{31}(r) &= \frac{4\sqrt{2}}{9} \left( \frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left( 1 - \frac{Zr}{6a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \\ R_{32}(r) &= \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left( \frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{Zr}{a_0} \right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \end{aligned}$$

Autofunzioni:

$$\begin{aligned}\varphi_{100} &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \\ \varphi_{200} &= \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \\ \varphi_{211} &= -\frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{i\varphi} \\ \varphi_{210} &= \frac{1}{4\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta \\ \varphi_{21-1} &= \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{-i\varphi}\end{aligned}$$

Condizioni numeri quantici:

$$\begin{aligned}l &= 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ m &= -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l\end{aligned}$$

Quantità utili:

$$\begin{aligned}r_n &= \frac{n^2 \hbar^2}{\mu Z e^2} & v_n &= \frac{Z e^2}{n \hbar} & E_n &= \frac{1}{2} \frac{Z^2 \mu e^4}{n^2 \hbar^2} \\ m_p &\sim 2000 m_e\end{aligned}$$

Costante di accoppiamento elettromagnetico

$$\alpha = \frac{e^2}{c \hbar} = \frac{q^2}{4\pi \varepsilon_0 c \hbar}$$

# Capitolo 17

## Somma di momenti angolari

$$\hat{J} = \sum_n \hat{L}_n + \sum_n \hat{S}_n$$

La somma di due momenti angolari è ancora un momento angolare  
Date due particelle allora il momento angolare totale vale

$$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$$

La dimensione dello spazio H contenente il momento angolare J vale

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

Adesso posso usare due diverse basi

1. posso usare come CSCO  $(\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2)$  cioè la base

$$|j_1, j_2, j, m\rangle$$

2. oppure posso usare come CSCO  $(\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z})$  cioè

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Per passare da una base all'altra si usa una trasformazione unitaria che utilizza i COEFFICIENTI DI CLEBSH-GORDON

Proprietà

- I coefficienti sono nulli eccetto quando si ha conservazione della proiezione del momento angolare lungo z

$$m = m_1 + m_2$$

- I coefficienti sono nulli a meno che

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

## 17.1 Somma del momento di spin 1/2 di 2 particelle

Stati del tripletto (simmetrici)

$$|1, +1\rangle = |++\rangle$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|-+\rangle + |+-\rangle]$$

$$|1, -1\rangle = |--\rangle$$

Stato del singoletto (antisimmetrico)

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle - |-+\rangle]$$



# Capitolo 18

## Particelle identiche

In meccanica classica le particelle sono distinguibili, perchè è possibile seguire la traiettoria; in meccanica quantistica per un arbitrario numero di particelle è valido che le traiettorie non sono definibili: non è possibile fare una mappatura o dare delle etichette.

Una conseguenza del principio di inderteminazione è l'indistinguibilità delle particelle identiche. Devo costruire un modo di numerare i gradi di libertà tale che non implichi la numerazione delle particelle

Per le particelle indistinguibili non ci deve essere alcuna differenza nell'ordine: possiamo solo dire che in certo stato fisico  $\psi$  c'è una particella nella posizione 1 con una certa massa, una particelle nella posizione 2, una nella posizione 3, ..., ma non possiamo dire che sia la prima particella nella posizione 1, ecc.

Tutti i gradi di libertà li indico con "1", "2", "3", ...

La  $\psi(1, 2, 3, \dots)$  deve rappresentare lo stesso stato di  $\psi(2, 1, 3, \dots)$ : posso permutare tutte le N partcelle e avere lo stesso stato; ma ciò non vuol dire che i due stati sono indentici

$$\psi(2, 1) = \alpha \psi(1, 2) \quad (1)$$

con  $\alpha$  che può solo dipendere dal tipo con cui abbiamo a che fare; non può dipendere dalla posizione, dal momento o dalla proiezione della particella perchè lo spazio è omogeneo e isotropo

Si ricava che  $\alpha^2 = 1$  allora si hanno solo 2 casi

1.  $\alpha = 1$ : simmetrica per scambio di due particelle qualunque
2.  $\alpha = -1$ : antisimmetrica per scambio di due particelle qualunque

Questo discorso è valido per qualsiasi particella, sia che sia elementare, sia che sia composta

Le particelle con  $\alpha = 1$  sono dette BOSONI, mentre quelle con  $\alpha = -1$  sono dette FERMIONI; hanno comportamenti completamente differenti

Combinando la meccanica quantistica e la relatività si ricava il teorema SPIN-STATISTICA:

tutte le particelle il cui spi è semi-intero sono dette fermioni e seguono la statistica di Fermi; quelle invece che hanno spin intero sono dette bosoni e seguono la statistica di Bose-Einstein

Per le particelle massless non si può ricavare quello che abbiamo fatto fino ad ora perchè mancano le proiezioni intermedie. Però nei fatti vengono considerate bosoni perchè hanno "spin" intero

### 18.1 Particelle composte

Una particella composta da un numero pari di fermioni e un numero arbitrario di bosoni è un bosone, mentre una composta da un numero dispari di fermioni e un numero arbitrario di bosoni è detta fermione

## 18.2 Stati di particella indipendente o particella singolare

Per il potenziale, uso come approssimazione il considerare soltanto la distanza dal nucleo e non l'interazione tra le singole particelle. Con questa approssimazione posso procedere alla separazione delle variabili, ottenendo una soluzione fattorizzata, costituita da stati di particella indipendente (indipendente del moto delle altre particelle)

Ipotesi: considero elettroni indipendenti tra di loro (APPROSSIMAZIONE DI HARTREE)

1. trascuro totalmente le interazioni tra gli elettroni
2. considero che gli altri elettroni attorno trasformano

$$V_c = \frac{1}{r} \mapsto \tilde{V} = \frac{1}{r^\alpha}$$

3.  $\psi$  prodotto di autofunzioni dell'elettrone singolo

- considero due elettroni

$$\psi(1, 2) = \phi_a(1)\phi_b(2)$$

non può esistere uno stato di questo tipo che descrive i due elettroni perchè ci dice che il primo elettrone ha numeri quantici "a", mentre il secondo ha numeri quantici "b"

devo costruire una funzione d'onda antisimmetrica

$$\psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_a(1)\phi_b(2) - \phi_a(2)\phi_b(1)]$$

- considero due bosoni con approssimazione di Hartree, devo simmetrizzare la funzione d'onda

$$\psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_a(1)\phi_b(2) + \phi_a(2)\phi_b(1)]$$

Conseguenze:

se cerchiamo di mettere 2 fermioni nello stesso stato otteniamo che la funzione d'onda finale è nulla; allora due fermioni non possono occupare lo stesso stato di una particella singola: principio di esclusione di Pauli

Esiste quindi una correlazione nel moto di 2 fermioni anche se non fossero interamente interagenti. Non possono avere lo stesso set di numeri quantici

# Capitolo 19

## Metodi perturbativi

Vengono utilizzati per determinare autovalori e autofunzioni di hamiltoniane che non dipendono dal tempo; metodi approssimati validi solo per soluzioni analitiche

### 19.1 Teoria perturbazioni non dipendenti dal tempo

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$$

ipotizzo  $\lambda$  un parametro piccolo detto PARAMETRO DI ACCOPPIAMENTO

Se riesco a risolvere esattamente  $\hat{H}_0$  allora posso cercare soluzioni come serie di potenze di  $\lambda$  che siano rapidamente convergenti in modo da guardare i primi termini della serie per capirne l'andamento

N.B. Non è detto che  $\hat{H}$  siano funzioni analitiche in  $\lambda$

Per usare questo metodo devo essere sicuro che il mio sistema sia stabile, in modo che una piccola perturbazione nel sistema non cambi molto

#### 19.1.1 Metodo generale calcolo perturbativo

Sapendo risolvere esattamente per  $\hat{H}_0$  posso riscrivere  $|\psi_n\rangle$  sulle autofunzioni  $\varphi_n$

Quindi il calcolo PERTURBATO è portato avanti con rappresentazione degli stati imperturbati

Esistono due diversi casi, il caso in cui  $E_n^{(0)}$  sia non degenero e il caso in cui invece sia degenero

#### 19.1.2 Caso non degenero

Posso scrivere

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda) \left[ |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq 0} c_{nk}(\lambda) |\varphi_k\rangle \right] \quad (1a)$$

Se  $\lambda = 0$  allora

- $N(0) = 1$
- $c_{nk}(0) = 0$

Per trovare  $c_{nk}(\lambda)$  cerco soluzioni analitiche espandendo in termini di  $\lambda$

$$c_{nk} = c_{nk}(0) + \lambda c_{nk}^{(1)} + \lambda^2 c_{nk}^{(2)}$$

faccio lo stesso con  $E_n$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)}$$

Applico  $\hat{H}$  alla (1a) e guardo i termini che hanno lo stesso ordine in  $\lambda$

All'ordine 0 si ha l'energia della hamiltoniana imperturbata; non si hanno correzioni all'energia

La prima correzione dell'energia all'ordine 1 in  $\lambda$  è il valore di aspettazione della perturbazione tra gli stati imperturbati

$$\lambda E_n^{(1)} = \langle \varphi_n | \hat{H}_p | \varphi_n \rangle$$

Nella rappresentazione delle coordinate la correzione dell'energia al primo ordine si scrive

$$\lambda E_n^{(1)} = \int d^3x \varphi_n^*(x) \lambda \hat{H}_1 \varphi_n(x) = \int d^3x |\varphi_n(\vec{x})|^2 H_p(\vec{x})$$

Se  $\varphi_n$  ha parità definita e la perturbazione è dispari allora l'integrale è nullo perchè diventa l'integrale di una funzione dispari

Calcolando  $c_{nk}(\lambda)$  si trova che la perturbazione mescola gli stati con diversi pesi, proporzionale al valore di aspettazione della perturbazione tra i due stati imperturbati diviso per la differenza di energia tra i due stati imperturbati

$$\lambda c_{nk}^{(1)} = \frac{\lambda \langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Affinchè la serie in  $\lambda$  sia convergente voglio che i coefficienti siano sempre più piccoli; voglio:

1. che l'energia all'ordine 1 sia piccola rispetto all'energia all'ordine 0
2. che gli elementi-off-the-diagonal degli stati della perturbazione tra gli stati imperturbati siano piccoli rispetto alla differenza di energia degli stati imperturbati

All'ordine 2 si ottiene

$$\lambda^2 E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_k | \hat{H}_p | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

## Commenti

- Per l'energia all'ordine 1 ho il valore di aspettazione della perturbazione tra gli stati imperturbati; all'ordine 2 trovo gli elementi fuori dalla diagonale
- $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$ : per k diverso da n il denominatore non si annulla mai; gli stati lontani da  $E_n^{(0)}$  contribuiscono sempre meno alla somma: allora ho la speranza di troncare la sommatoria ai primi termini
- Se  $\varphi_n$  è lo stato fondamentale allora le correzioni al secondo ordine sono negative
- Suppongo che lo stato k sia "più importante": allora se k è sopra il livello "n" le correzioni al secondo ordine sono negative, quindi il livello n viene spinto verso il basso; se k invece è sotto il livello n allora le correzioni al secondo ordine sono positive e quindi il livello n viene spinto verso l'alto. Si ha quella che viene chiamata TENDENZA DEI LIVELLI A RESPINGERSI

## 19.2 Teoria perturbazioni sugli stati degeneri

Esistono più stati con la stessa energia  $E_n^{(0)}$

All'ordine 1 in  $\lambda$  si trova che per risolvere il problema dobbiamo diagonalizzare la perturbazione nel sottospazio degenere

$$\sum \alpha_i \langle \varphi_n^j | \hat{H}_1 | \varphi_n^i \rangle = E_n^{(1)} \alpha_j$$

Troviamo che la correzione all'energia all'ordine 1 ha  $g_n$  valori, dove  $g_n$  rappresenta il numero della degenerazione del livello n-esimo. Per ogni valore di  $E_n^{(1)}$  corrisponde un autovettore ( $g_n$  autovettori che diagonalizzano l'hamiltoniana perturbata nel sottospazio degenere)

N.B. Non stiamo diagonalizzando la perturbazione in tutto lo spazio, altrimenti saremmo in grado di trovare gli autostati esatti

## 19.3 Effetto Stark su atomi idrogenoidi

Considero un'ampolla di gas immersa in un campo elettrico esterno diretto lungo la direzione z. Considero un potenziale di tipo coulombiano puntiforme

La perturbazione è del tipo

$$\hat{H} = -q\vec{E}\vec{x} = -qEz$$

La hamiltoniana imperturbata è

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}$$

e per ogni valore del campo elettrico si ha che

$$H_p \ll H_0$$

### Stato fondamentale

Si ha che  $n=1, l=0, m=0$  e per questo viene rappresentato con  $|100\rangle$

Per quello che stiamo considerando ora lo stato fondamentale non è degenere; allora calcolo la correzione dell'energia al primo ordine usando la teoria delle perturbazioni non degeneri.

Poiché l'atomo idrogeno ha parità definita, mentre z ha parità dispari, allora l'integrale è nulla. Di conseguenza non si hanno correzioni all'energia al primo ordine

Per calcolare la correzione al secondo ordine dell'energia, faccio prima alcune considerazioni sulle simmetrie del mio sistema: la perturbazione ha rotto la simmetria sferica e ci ha fatto passare a una simmetria cilindrica. Ha senso quindi considerare  $\hat{L}_z$ .

Utilizzando il fatto che  $\hat{L}_z$  commuta con z, si può vedere che  $|nlm\rangle$  è autostato di  $\hat{L}_z$ . Ciò ci permette subito di scrivere la prima regola di selezione

$$\Delta m = m - m' = 0$$

Si ottiene quindi, nel nostro caso, che  $m=m'=0$

Devo calcolare

$$\langle nl0|z|100\rangle$$

che dipende da come è fatta la perturbazione.

Per farlo guardo prima come è fatta la parte angolare: poichè z è proporzionale alla  $Y_1^0$  e la  $Y_0^0$  è una costante, si ottiene che  $l=1$

$$E_{100}^{(2)} = -q^2 E^2 a_0^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f(n)}{\frac{1}{2}\mu c^2 \alpha^2 \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)} = -2a_0^3 E^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{n^2 f(n)}{n^2 - 1} \quad f(n) = \frac{1}{3} 2^8 \frac{n^7 (n-1)^{2n-5}}{n+1}$$

La correzione all'energia ha segno negativo, quindi vuol dire che l'energia è scesa

## Primo stato eccitato

Per il primo stato eccitato si ha  $n=2$ , di conseguenza lo stato è 4 volte degenere, trascurando lo spin, la struttura fine e iperfine; gli stati sono  $|200\rangle$ ,  $|211\rangle$ ,  $|210\rangle$ ,  $|21-1\rangle$

Dato che lo stato è degenere devo diagonalizzare nel sottospazio degenere: si ottiene una matrice  $4 \times 4$

Anche in questo caso  $\hat{z}|nlm\rangle$  è autostato di  $\hat{L}_z$ , di conseguenza si ottiene  $\delta_{mm'}$ ; per ragioni di parità gli stati che hanno entrambi  $l=0$  o  $l=1$  danno integrale nullo perchè hanno entrambi parità definita che vale  $(-1)^l$  mentre  $z$  ha parità dispari.

Gli unici integrali che danno valore non nulli sono quelli che connettono stati con  $l$  diversi

Diagonalizzando nel sottospazio degenere si ottiene che la correzione all'energia vale

$$E_2^{(2)} = \pm 3a_0 q E$$

Si ottenuto un effetto lineare in  $E$