

Meccanica Quantistica

Pietro Faraggiana

2022/2023

Indice

1	Introduzione matematica	6
1.1	Spazi lineari di vettori: Le basi	6
1.2	Spazio hermitiano	6
1.3	Spazi duali e notazione di Dirac	7
1.3.1	Espansione di vettori su base ortonormale	8
1.3.2	Operazioni aggiunte	8
1.4	Sottospazi	8
1.5	Operatori lineari	9
1.6	Matrice di un'applicazione lineare	9
1.6.1	Prodotto di matrici corrispondente al prodotto di operatori	10
1.6.2	Aggiunto di un operatore	10
1.6.3	Operatore hermitiano, anti-hermitiano e unitario	10
1.7	Trasformazioni attive e passive	11
1.8	Il problema degli autovalori	11
1.8.1	L'equazione caratteristica e la soluzione del problema degli autovalori	11
1.8.2	Degenerazione	12
1.8.3	Diagonalizzazione di una matrice Hermitiana	12
1.8.4	Diagonalizzazione di due operatori hermitiani	12
1.8.5	Propagatore	12
1.8.6	I modi normali	13
1.9	Funzioni di operatori e concetti correlati	13
1.9.1	Derivate di operatori rispetto a dei parametri	13
1.10	Generalizzazione ad infinite dimensioni	13
1.10.1	Operatori in infinite dimensioni	15
2	Revisione della meccanica classica	19
2.1	Il principio di minima azione e la meccanica lagrangiana	19
2.2	La lagrangiana elettromagnetica	20
2.3	Il problema dei due corpi	21
2.4	Quanto è intelligente una particella?	21
2.5	Formalismo Hemiltoniano	21
2.6	La forza elettromagnetica nel formalismo Hamiltoniano	22
2.7	Coordinate cicliche, parentesi di Poisson e trasformazioni canoniche	22
2.7.1	Trasformazioni canoniche	23
2.7.2	Trasformazioni attive	24
2.8	Simmetrie e le loro conseguenze	24
3	I problemi della fisica classica	25
3.1	Onde e particelle in fisica classica	25
3.2	Un esperimento con le onde e le particelle (classiche)	25
3.3	Esperimento di Young	25
3.4	Onde di materia (onde di De Broglie)	26
3.5	Conclusioni	26
4	I postulati: discussione generale	27
4.1	I postulati	27
4.2	Discussione dei postulati I-III	28
4.2.1	Collasso del vettore di stato	29
4.2.2	Come testare la teoria quantistica	30

4.2.3	Valore di aspettazione	30
4.2.4	Incertezza	31
4.2.5	Variabili compatibili e incompatibili	31
4.2.6	La matrice densità	32
4.2.7	Generalizzazione a più gradi di libertà	32
4.3	L'equazione di Shrödinger	32
4.3.1	Costruzione dell'hamiltoniana	33
4.3.2	Approccio generale alla soluzione	33
4.3.3	Scelta di una base per la risoluzione dell'equazione di Shrodinger	34
5	Problemi semplici in una dimensione	35
5.1	La particella libera	35
5.1.1	Evoluzione temporale del pacchetto gaussiano	36
5.1.2	Alcune caratteristiche generali delle autofunzioni dell'energia	36
5.2	La particella in una scatola	37
5.3	L'equazione di continuità per la probabilità	38
5.4	Il problema del potenziale a scalino, un problema di scattering	38
5.5	Esperimento di Young	41
5.6	Alcuni teoremi	41
6	Il limite classico	42
7	L'oscillatore armonico	44
7.1	Perché studiare l'oscillatore armonico?	44
7.2	Ripasso dell'oscillatore classico	45
7.3	Quantizzazione dell'oscillatore (in base di coordinate)	45
7.4	L'oscillatore nella base dell'energia	50
7.5	Passaggio dalla base E a quella X	53
8	La formulazione del path integral della teoria quantistica	54
8.1	La ricetta del path integral	54
8.2	Analisi della ricetta	54
8.3	Approssimazione ad $U(t)$ per una particella libera	54
8.4	Significato di propagazione sui cammini	55
8.5	Equivalenza con l'equazione di Shrodinger	56
8.6	Potenziali della forma $V = a + bx + cx^2 + d\dot{x} + ex\dot{x}$	57
9	Relazioni di indeterminazione di Heisenberg	59
9.1	Introduzione	59
9.2	Derivazione delle relazioni di incertezza	59
9.3	La minima incertezza del pacchetto	60
9.4	Applicazioni del principio di incertezza	61
9.5	La relazione di indeterminazione di tempo ed energia	62
10	Sistemi con N gradi di libertà	63
10.1	Sistemi di N particelle in una dimensione	63
10.1.1	Lo spazio di Hilbert per due particelle	63
10.1.2	$\mathbb{V}_{1\otimes 2}$ come spazio di un prodotto diretto	63
10.1.3	Rivisitazione del prodotto diretto	64
10.1.4	Evoluzione del vettore di stato di due particelle	64
10.1.5	Generalizzazione ad N particelle in una dimensione	66
10.2	Generalizzazione ad N dimensioni	66
10.3	Particelle identiche	66
10.3.1	Caso classico	66
10.3.2	Il sistema a due particelle, stato simmetrico e antisimmetrico	66
10.3.3	Bosoni e fermioni	67
10.3.4	Spazio di Fock	68
10.3.5	Determinazione della statistica della particella	68
10.3.6	Sistemi di N particelle identiche	69
10.3.7	Quando è possibile ignorare la simmetrizzazione e antisimmetrizzazione?	69

11 Conseguenze delle simmetrie	71
11.1 Introduzione	71
11.2 Invarianza sotto traslazioni nella teoria quantistica	71
11.2.1 Traslazione in termini di trasformazioni passive	73
11.2.2 Digressione sull'analogia con la meccanica classica	73
11.2.3 Trasformazioni finte	74
11.2.4 Digressione sulle trasformazioni canoniche e unitarie finite	75
11.2.5 Sistemi di particelle	75
11.2.6 Implicazione dell'invarianza sotto traslazioni	75
11.3 Invarianza sotto traslazione temporale	76
11.4 Invarianza pari	76
11.5 Simmetria temporale	77
12 Invarianza rotazionale e momento angolare	79
12.1 Traslazioni in due dimensioni	79
12.2 Rotazioni in due dimensioni	79
12.2.1 Costruzione esplicita di $U[R]$	80
12.2.2 Operatori vettori	81
12.3 Autovalori di L_z	81
12.3.1 Soluzione ai problemi invarianti sotto rotazioni	82
12.4 Momento angolare in 3 dimensioni	82
12.5 Il problema degli autovalori tra L^2 e L	83
12.5.1 Rotazioni finite	86
12.5.2 Autofunzioni del momento angolare nella base delle coordinate	86
12.6 Soluzione di problemi con invarianza rotazionale	87
12.6.1 Proprietà generali di U_{EI}	88
12.6.2 La particella libera in coordinate sferiche	89
12.6.3 Connessione con le coordinate cartesiane	90
13 L'ATOMO DI IDROGENO	94
13.1 Il problema degli autovalori	94
13.1.1 Comportamento asintotico	95
13.1.2 Lo stato fondamentale e la sua normalizzazione	96
13.2 Considerazioni sui risultati e analisi	97
13.2.1 Degenerazione delle autofunzioni	97
14 Spin	99
14.1 Introduzione	99
14.2 Quale è la natura dello spin?	99
14.3 Cinematica dello spin	99
14.3.1 Spin 1	102
14.3.2 Forma esplicita degli operatori di rotazione	102
14.4 FORMA MATRICIALE DELLE ROTAZIONI TRIDIMENSIONALI	102
14.4.1 Angoli di Eulero e Matrici di Wigner	103
14.4.2 Rotazione degli spinori	104
14.5 ROTAZIONI DI ANGOLO 2π : FERMIONI E BOSONI	105
14.5.1 Una condizione sulle osservabili	106
14.6 Dinamiche dello spin	107
14.6.1 Momento magnetico orbitale nella teoria quantistica	108
14.6.2 Momento magnetico di spin	108
14.6.3 Risonanza paramagnetica	109
14.7 Ritorno dei gradi di libertà orbitali	109
14.7.1 L'esperimento di Stern-Gerlach	110
15 Unione di spin e momento angolare	111
15.1 OPERATORI TENSORIALI E ROTAZIONI	118

16 Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo	121
16.1 Il formalismo	121
16.2 Alcuni esempi	122
16.2.1 Regole di selezione	123
16.3 Teoria delle perturbazioni degenerare	125
16.3.1 Struttura fine	126
17 Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo	128
17.1 Il problema	128
17.2 Teoria delle perturbazione del primo ordine	128
17.2.1 Perturbazione improvvisa	129
17.2.2 Perturbazione adiabatica	129
17.2.3 Perturbazione periodica	130
17.3 Ordini più alti nella teoria delle perturbazioni	131
17.3.1 Interpretazione di interazione	132
17.3.2 Interpretazione di Heisenberg	133
17.4 Discussione generale sul elettromagnetismo	134
17.4.1 Elettrodinamica classica	134
17.4.2 Potenziali nella teoria quantistica	134
17.5 Interazione di atomi con la radiazione elettromagnetica	135
17.5.1 Effetto fotoelettrico nell'idrogeno	135
17.5.2 Quantizzazione dei campi	137
18 INTRODUZIONE ALLO SCATTERING QUANTISTICO	138
18.1 Ampiezza di scattering e comportamento asintotico	138
18.1.1 Onde sferiche e onde piane	140
18.1.2 La sezione d'urto differenziale	141
18.2 Approssimazione di Born	142
18.2.1 Regimi di applicabilità	143
18.3 Una prima soluzione approssimata	145
18.3.1 Esempio: potenziale uniforme a raggio d'azione finito	146
18.3.2 Esempio: potenziale di Yukawa	147
18.4 Seconda soluzione: trattazione perturbativa time-dependent	148
18.4.1 La relazione di completezza su stati del continuo	149
18.4.2 Lo spazio delle fasi	150
18.4.3 Il rate di probabilità	150
18.4.4 La regola d'oro: il continuo	151
18.4.5 Verifica della consistenza: confrontiamo i due approcci	152
18.5 Sviluppo in onde parziali	152
18.5.1 Scattering da particelle lente	155

Prefazione

Il testo è un riassunto del libro "R. Shankar: Introduction to quantum mechanics, II edizione". Le dimostrazioni sono quasi sempre non trascritte e , soprattutto nel primo capitolo, vengono saltate alcune definizioni date per scontato, ma comunque viene annotato che sono state definite.

Capitolo 1

Introduzione matematica

1.1 Spazi lineari di vettori: Le basi

In quantistica la definizione di vettore si allarga. I vettori perdono alcune di quelle che erano le loro caratteristiche di base, ovvero verso, direzione e intensità. Questo è dato dalla notazione di Dirac che ci sarà utile più avanti. Un vettore $|V\rangle$ (il simbolo è chiamato ket) è un oggetto e vive nello spazio lineare vettoriale $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |V\rangle$ dove esiste una regola per la somma di vettori $|V\rangle + |W\rangle$ e una regola per la moltiplicazione per scalari $a|V\rangle$. Abbiamo inoltre le seguenti regole:

- Il risultato di queste operazioni appartiene nuovamente allo spazio;
- La moltiplicazione per scalari è distributiva sia per scalari che per vettori;
- La moltiplicazione per scalari è associativa;
- L'addizione è commutativa e associativa;
- Esiste un vettore nullo $|0\rangle$ per il quale $|V\rangle + |0\rangle = |V\rangle$ (unico e spesso scritto come 0);
- Esiste un inverso dell'addizione $|-V\rangle$ per il quale $|V\rangle + |-V\rangle = |0\rangle$ (unico).

Gli scalari a, b, \dots definiscono il campo (reale, complesso). Un esempio di vettore senza direzione, verso o intensità è una matrice.

Un insieme di vettori è detto linearmente indipendente se

$$\sum_{i=1}^n a_i |i\rangle = |0\rangle$$

è possibile solo avendo $a_i = 0$ sempre; altrimenti è detto linearmente indipendente. Questo significa che non è possibile scrivere un vettore di questo insieme come combinazione lineare degli altri.

Vengono poi introdotti i concetti di base, dimensione di uno spazio e componenti di un vettore (che sono unici).

1.2 Spazio hermitiano

Vediamo adesso come possiamo definire il prodotto scalare di questi vettori; il prodotto scalare è fondamentale per definire la lunghezza e l'angolo tra due vettori. Data

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = |\vec{A}| |\vec{B}| \cos \theta,$$

possiamo definire la lunghezza di \vec{A} come $\sqrt{|\vec{A}| \cdot |\vec{A}|}$ e l'angolo come $\vec{A} \cdot \vec{B} / |\vec{A}| |\vec{B}|$. Per fare questo usiamo la seconda espressione del prodotto scalare

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z.$$

Il prodotto scalare ha le seguenti proprietà:

1. $\vec{A} \cdot \vec{B} = \vec{B} \cdot \vec{A}$ (simmetria);
2. $\vec{A} \cdot \vec{A} \geq 0$ 0 iff $\vec{A} = 0$ (semidefinito positivo);

$$3. \vec{A} \cdot (b\vec{B} + c\vec{C}) = b\vec{A} \cdot \vec{B} + c\vec{A} \cdot \vec{C} \text{ (linearità)}.$$

Passiamo adesso al nuovo prodotto scalare che chiamiamo prodotto interno o hermitiano. Indichiamo il prodotto hermitiano con $\langle V | W \rangle$ e deve avere le seguenti proprietà:

1. $\langle V | W \rangle = \langle W | V \rangle^*$ (antisimmetria del coniugato e positività della lunghezza);
2. $\langle V | V \rangle \geq 0 \quad 0 \text{ iff } |V\rangle = |0\rangle$ (semidefinito positivo);
3. $\langle V | (a|W\rangle + b|Z\rangle) \equiv \langle V | aW + bZ \rangle = a\langle V | W \rangle + b\langle V | Z \rangle$ (linearità del ket).

Uno spazio vettoriale con un prodotto hermitiano è chiamato spazio hermitiano.

Riporto qua il caso dell'antilinearità del prodotto hermitiano nel caso di sovrapposizione al primo fattore poiché mostra che l'asterisco del coniugato *, va un po' trattato come se fosse una potenza (elevato alla prima perché non ci sono prodotti misti ma va su tutti i termini di un fattore (linea 3)).

$$\begin{aligned} \langle aW + bZ | V \rangle &= \langle V | aW + bZ \rangle^* \\ &= (a\langle V | W \rangle + b\langle V | Z \rangle)^* \\ &= a^*\langle V | W \rangle^* + b^*\langle V | Z \rangle^* \\ &= a^*\langle W | V \rangle + b^*\langle Z | V \rangle \end{aligned}$$

In futuro potrei chiamare prodotto hermitiano: prodotto interno o scalare, ma a meno di specificazioni mi riferirò sempre al prodotto hermitiano appena definito.

Possiamo ora definire il concetto di ortogonalità (il prodotto hermitiano sparisce), $\sqrt{\langle V | V \rangle}$ è la norma (un vettore normalizzato ha norma unitaria) e data una base di vettori, se questi sono normalizzati e il loro prodotto hermitiano svanisce allora è detta base ortonormale.

A questo punto possiamo dare l'espressione del prodotto hermitiano

$$\langle V | W \rangle = \sum_i \sum_j v_i^* w_j \langle i | j \rangle$$

$\langle i | j \rangle$ è il prodotto hermitiano della base di cui noi sappiamo solo che i vettori sono linearmente indipendenti, in realtà questo è un problema presente anche nel prodotto scalare classico ma viene solitamente omesso.

Per superare questo problema usiamo il teorema di Gram-Shmidt che ci permette, data una qualsiasi base, di costruire un'altra per lo stesso spazio, che sia ortonormale. Allora abbiamo

$$\langle i | j \rangle = \begin{cases} 1 & \text{per } i = j \\ 0 & \text{per } i \neq j \end{cases} \equiv \delta_{ij}$$

dove δ_{ij} è la delta di Kronecker. Il prodotto hermitiano in questo caso è

$$\langle V | W \rangle = \sum_i v_i^* w_i$$

che si calcola

$$\langle V | W \rangle = [v_1^*, v_2^*, \dots, v_n^*] \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix}.$$

1.3 Spazi duali e notazione di Dirac

Il prodotto interno è uno scalare dato da due ket, il truccetto per ottenerlo è stato rendere uno dei due ket un vettore riga (e prendendone il coniugato, ovvero prendendone l'aggiunto (trasposta coniugata)) in modo che la loro moltiplicazione sia uno scalare, tuttavia la risposta dipende da quale dei due venga preso in riga $\langle V | W \rangle \neq \langle W | V \rangle$. Possiamo muoverci al contrario e dire che ogni vettore colonna è associato ad un ket ed associare ogni vettore riga ad un bra $\langle V |$, in questo modo abbiamo due spazi vettoriali, lo spazio dei ket e uno spazio duale dei bra, e i prodotti hermitiani sono definiti da elementi di due spazi vettoriali tra cui intercorre una certa relazione.

1.3.1 Espansione di vettori su base ortonormale

Supponiamo di espandere un $|V\rangle$ su base ortonormale, per trovare la componente i -esima si fa il prodotto scalare con la componente i -esima della base, sommando i prodotti con la base otteniamo

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} = v_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + v_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \dots + v_n \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}.$$

1.3.2 Operazioni aggiunte

Possiamo passare da un ket al suo corrispondente bra, facendo un'operazione aggiunta (ad esempio il trasposto coniugato). Per prendere l'aggiunto di un'equazione lineare tra ket (bra), sostituiamo ogni ket (bra) con il corrispondente bra (ket) e facciamo il complesso coniugato di tutti i coefficienti (come le moltiplicazioni per scalari). Possiamo generalizzare dicendo che l'aggiunta di una qualsiasi equazione con bra e ket è trovata invertendo l'ordine di tutti i componenti, cambiando bra con i ket e viceversa e prendendo il complesso coniugato di tutti i coefficienti.

Teorema di Gram-Schmidt

Vediamo adesso la procedura per convertire una base linearmente indipendente in una ortonormale.

Con le frecce il ragionamento è facile, si prende il primo vettore e si riscalda a norma 1, si prende il secondo e gli si sottrae il vettore della sua proiezione sul primo e poi si riscalda a norma 1.

Con i bracket è uguale ma si devono fare i calcoli essendo essi astratti, facciamo l'esempio con 3 dimensioni e una base $|I\rangle, |II\rangle$ e $|III\rangle$, allora

$$|1\rangle = \frac{|I\rangle}{|I|}$$

$$|2\rangle = |II\rangle - |1\rangle\langle 1 | II\rangle$$

$$|3\rangle = |III\rangle - |1\rangle\langle 1 | III\rangle - |2\rangle\langle 2 | III\rangle.$$

Con Gram-Schmidt si può dimostrare l'equivalenza delle due definizioni di dimensione di uno spazio (numero di direzioni perpendicolari e massimo numero di vettori linearmente indipendenti).

Disuguaglianza di Schwarz e triangolare

Enunciamo le due disuguaglianze con i bracket:

- Schwarz:

$$|\langle V | W \rangle| \leq |V||W|;$$

- Triangolare:

$$|V + W| \leq |V| + |W|;$$

1.4 Sottospazi

Dato uno spazio vettoriale V , un sottospazio dei suoi elementi che forma a sua volta uno spazio vettoriale è chiamato sottospazio vettoriale. Denoteremo un sottospazio i con dimensionalità n come V_i^n .

Dati due sottospazi possiamo definire la loro somma diretta

$$V_i^{n_i} \oplus V_j^{m_j} = V_k^{m_k}$$

come l'insieme che contiene tutti gli elementi dei due sottospazi e le loro combinazioni lineari (ma la proprietà di chiusura per le combinazioni lineari sarà persa).

1.5 Operatori lineari

Un operatore Ω è un'istruzione su come trasformare un certo vettore

$$\Omega|V\rangle = |V'\rangle$$

oppure con i bra

$$\langle V'|\Omega = \langle V''|.$$

Noi restringeremo la nostra attenzione unicamente alle trasformazioni che non ci portano fuori da V e a quelle lineari (ovvero quelle che soddisfano):

$$\begin{aligned}\Omega\alpha|V_i\rangle &= \alpha\Omega|V_i\rangle; \\ \Omega\{\alpha|V_i\rangle + \beta|V_j\rangle\} &= \alpha\Omega|V_i\rangle + \beta\Omega|V_j\rangle; \\ \langle V_i|\alpha\Omega &= \langle V_i|\Omega\alpha; \\ (\langle V_i|\alpha + \langle V_j|\beta)\Omega &= \alpha\langle V_i|\Omega + \beta\langle V_j|\Omega.\end{aligned}$$

Una grossa facilitazione è che una volta noto come un operatore trasforma una base, allora è noto come trasforma tutti i vettori dello spazio generato da quella base. Il prodotto di due operatori

$$\Lambda\Omega|V\rangle = \Lambda(\Omega|V\rangle) = \Lambda|\Omega V\rangle$$

non è generalmente commutativo e

$$\Omega\Lambda - \Lambda\Omega \equiv [\Omega, \Lambda]$$

è detto commutatore di Ω e Λ . Due identità importanti dei commutatori sono

$$\begin{aligned}[\Omega, \Lambda\theta] &= \Lambda[\Omega, \theta] + [\Omega, \Lambda]\theta \\ [\Lambda\Omega, \theta] &= \Lambda[\Omega, \theta] + [\Lambda, \theta]\Omega.\end{aligned}$$

L'inverso di un prodotto è

$$(\Omega\Lambda)^{-1} = \Lambda^{-1}\Omega^{-1}$$

e

$$(\Omega\Lambda)(\Omega\Lambda)^{-1} = (\Omega\Lambda)(\Lambda^{-1}\Omega^{-1}) = \Omega\Lambda\Lambda^{-1}\Omega^{-1} = \Omega\Omega^{-1} = I$$

1.6 Matrice di un'applicazione lineare

Come un vettore può essere rappresentato da una n-upla, un'applicazione lineare può essere rappresentata da una matrice di $n \times n$ elementi la cui azione è sufficiente sia osservata sulla base (e la sua scrittura è proprio la matrice). Un esempio di operatore lineare è l'identità, un altro è il proiettore P . Per vedere cosa è il proiettore P partiamo dall'osservare la scomposizione di un vettore nei suoi componenti

$$|V\rangle = \sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i|V\rangle$$

che possiamo scrivere come

$$|V\rangle = \left(\sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i| \right) |V\rangle$$

il termine tra parentesi vale

$$I = \sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i| = \sum_{i=1}^n \mathbb{P}_i.$$

L'oggetto $\mathbb{P}_i = |i\rangle\langle i|$ è chiamato proiettore del ket $|i\rangle$, la relazione 1.21 (I indica l'identità) è chiamata relazione di completezza ed è molto importante. Guardiamo adesso l'azione di P ,

$$\mathbb{P}_i|V\rangle = |i\rangle\langle i|V\rangle = |i\rangle v_i$$

P è chiaramente lineare e prende la proiezione di un vettore V lungo un elemento della base $|i\rangle$. P agisce anche sui bra in modo simile

$$\langle V|\mathbb{P}_i = \langle V|i\rangle\langle i| = v_i^*\langle i|$$

Possiamo vedere P come una polaroid che agisce su un raggio con una polarizzazione diversa dalla perpendicolare rispetto all'asse del polaroid, il raggio si linearizza e si conserva solo la componente perpendicolare; se mettiamo più polaroid dello stesso tipo una dietro l'altra non succede nulla dopo la prima e se mettiamo due polaroid diverse il raggio uscente è 0. Allo stesso modo i proiettori

$$P_i P_j = |i\rangle\langle i| |j\rangle\langle j| = \delta_{ij} P_j.$$

La matrice P è fatta da 0 ad esclusione della componente i -esima sulla diagonale (che è quella di cui vogliamo la proiezione)

$$|i\rangle\langle i| \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} (0, 0, \dots, 1, 0, \dots, 0) = \begin{bmatrix} 0 & & \dots & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & 0 & & \\ \vdots & & & 1 & \\ & & & & 0 \\ & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

1.6.1 Prodotto di matrici corrispondente al prodotto di operatori

Possiamo usare la relazione di completezza per costruire il prodotto di matrici

$$\begin{aligned} (\Omega\Lambda)_{ij} &= \langle i|\Omega\Lambda|j\rangle = \langle i|\Omega I\Lambda|j\rangle \\ &= \sum_k \langle i|\Omega|k\rangle\langle k|\Lambda|j\rangle = \sum_k \Omega_{ik}\Lambda_{kj} \end{aligned}$$

Il primo passaggio

$$(\Omega\Lambda)_{ij} = \langle i|\Omega\Lambda|j\rangle$$

è vero perché per prendere il componente ij della matrice dobbiamo fare una doppia proiezione (per i vettori ne bastava una) sul bar i e sul ket j e non perché il componente ij di $\Omega\Lambda$ è uguale al prodotto scalare tra $|i\rangle$ e $|j\rangle$ ovvero j trasformato dalla matrice, quello è il punto di arrivo.

1.6.2 Aggiunto di un operatore

Come abbiamo fatto con i vettori, vale anche per gli operatori e l'aggiunto di

$$\Omega|V\rangle = |\Omega V\rangle$$

è

$$\langle\Omega V| = \langle V|\Omega^\dagger$$

dove l'operatore aggiunto è la trasposta coniugata

$$\Omega_{ij}^\dagger = \Omega_{ji}^*$$

L'aggiunto di un prodotto è invece

$$(\Omega\Lambda)^\dagger = \Lambda^\dagger\Omega^\dagger$$

e se vogliamo fare l'aggiunto di un'intera operazione dobbiamo invertire l'ordine di tutti i fattori e fare le seguenti sostituzioni: $\Omega \leftrightarrow \Omega^\dagger, | \rangle \leftrightarrow \langle |, \alpha \leftrightarrow \alpha^*$.

1.6.3 Operatore hermitiano, anti-hermitiano e unitario

Un operatore è definito hermitiano (o auto-aggiunto) se $\Omega^\dagger = \Omega$ e anti-hermitiano se $\Omega^\dagger = -\Omega$. Gli operatori hermitiani (anti-hermitiani) sono la generalizzazione a matrici dei numeri reali (immaginari) e come si può dividere un numero nella sua componente reale e complessa, possiamo fare la stessa cosa con tutti gli operatori

$$\Omega = \frac{\Omega + \Omega^\dagger}{2} + \frac{\Omega - \Omega^\dagger}{2}.$$

Un operatore è invece detto unitario se $UU^\dagger = 1$, ovvero se il suo aggiunto è il suo inverso. Gli operatori unitari sono una generalizzazione degli operatori ortogonali da $\mathbb{V}^3(R)$ a $\mathbb{V}^n(C)$ e sono come numeri complessi di norma unitaria $u = e^{i\theta}$. Se prendiamo le colonne o le righe di un operatore unitario, esse sono una base ortonormale dello spazio. Gli operatori unitari conservano il prodotto hermitiano di uno spazio.

1.7 Trasformazioni attive e passive

Supponiamo di trasformare uno spazio vettoriale attraverso una trasformazione unitaria

$$|V\rangle \rightarrow U|V\rangle$$

è chiaro che ogni operatore che agisce sullo spazio adesso agirà come

$$\langle V'|\Omega|V\rangle \rightarrow \langle UV'|\Omega|UV\rangle = \langle V'|U^\dagger\Omega U|V\rangle$$

è ovvio che questa è la stessa cosa di modificare un operatore attraverso una matrice di cambiamento di base U

$$\Omega \rightarrow U^\dagger\Omega U.$$

La prima è chiamata trasformazione attiva (modifica i vettori) mentre la seconda passiva (modifica gli operatori) e le due trasformazioni sono indifferenti *per quanto riguarda gli operatori*.

1.8 Il problema degli autovalori

Consideriamo un'operazione lineare Ω non banale e con un ket diverso da 0, allora esisteranno alcuni vettori per cui la matrice ha unicamente un'azione di riscalamento

$$\Omega|V\rangle = \omega|V\rangle$$

$|V\rangle$ è un autovettore (eigenket) e ω è un autovalore (eigenvalue) di Ω .

1.8.1 L'equazione caratteristica e la soluzione del problema degli autovalori

Attraverso una veloce costruzione si arriva alla conclusione che la condizione per avere autovettori diversi da 0 è

$$\det(\Omega - \omega I) = 0$$

Per risolverla dobbiamo risolvere polinomio caratteristico

$$P^n(\omega) = \sum_{m=0}^n c_m \omega^m.$$

Anche se il polinomio caratteristico è dipendente dalla base scelta, gli autovalori non lo sono; inoltre se lo spazio vettoriale ha dimensione n, allora il polinomio caratteristico è di grado n e per il teorema fondamentale dell'algebra ha n radici. Per trovare gli autovettori relativi ad un ω risolviamo 1.31. Ad esempio per la trasformazione $R(\frac{1}{2}\pi i)$ per $\omega = i$ otteniamo

$$\begin{aligned}(1-i)x_1 &= 0 \text{ (i.e., } x_1 = 0) \\ -ix_2 - x_3 &= 0 \text{ (i.e., } x_2 = ix_3) \\ x_2 - ix_3 &= 0 \text{ (i.e., } x_2 = ix_3)\end{aligned}$$

la cui soluzione normalizzata è

$$|\omega = i\rangle \leftrightarrow \frac{1}{2^{1/2}} \begin{bmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{bmatrix}$$

Se abbiamo un autovalore con molteplicità $\neq 1$ allora si parla di autovalore degenere, lo guarderemo meglio dopo. Vediamo adesso due importanti teoremi degli operatori hermitiani:

- Gli autovalori di un operatore hermitiano sono reali;
- Per ogni operatore hermitiano esiste almeno una base fatta di autovettori ortonormali. In questa base l'operatore è una matrice diagonale e gli elementi della diagonale sono i suoi autovalori.

1.8.2 Degenerazione

Vediamo adesso cosa accade se abbiamo molteplicità >1 per un autovalore; per farlo consideriamo l'operatore Ω come esempio

$$\Omega \leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

i suoi autovalori sono

$$\omega = 0, 2, 2$$

quindi per $\omega = 2$ abbiamo molteplicità pari a 2. Le equazioni per trovare l'autovettore sono

$$-x_1 + x_3 = 0$$

$$0 = 0$$

$$x_1 - x_3 = 0.$$

Abbiamo quindi solo un'equazione linearmente indipendente in questo caso (senza degenerazione ne abbiamo sempre $n-1$); questo accade sempre in presenza di degenerazione e per ogni grado oltre 1 di molteplicità in più leviamo un'altra equazione. In questo caso abbiamo quindi $x_1 = x_3$ e x_2 arbitraria, questo insieme definisce un insieme di vettori perpendicolari a $|\omega = 0\rangle$. Scelto un valore per il primo $\omega = 2$ allora il terzo sarà ortonormale al primo. Abbiamo quindi che se ci troviamo di fronte ad una degenerazione, allora l'autovalore $|\omega_i\rangle$ non si riferisce più ad un singolo autovettore, ma ad un autospazio $\mathbb{V}_{\omega_i}^{m_i}$; per riferirci ad un autovettore in particolare usiamo il simbolo $|\omega_i, \alpha\rangle$. Vediamo adesso gli analoghi degli ultimi due teoremi ma per le matrici unitarie:

- Gli autovalori di un operatore unitario sono numeri complessi di modulo unitario.
- Gli autovettori di un operatore unitario sono mutualmente ortogonali (assumendo che non ci sia degenerazione).

1.8.3 Diagonalizzazione di una matrice Hermitiana

Consideriamo un operatore hermitiano in forma matriciale, trasformiamo la sua base in un'autobase (che diagonalizza la matrice), la matrice di cambiamento base è unitaria (perché ruota una base ortonormale in un'altra). Possiamo quindi dire che ogni matrice hermitiana di $\mathbb{V}^n(\mathbb{C})$ può essere diagonalizzata da un cambio di base unitario. Notiamo quindi come il problema di trovare gli autovalori è equivalente al problema di diagonalizzazione di una matrice hermitiana.

1.8.4 Diagonalizzazione di due operatori hermitiani

Se Ω e Λ sono due operatori hermitiani che commutano, esiste (almeno) una base di autovettori comuni che li diagonalizza entrambe. A questo punto il libro presenta un esempio per trovare la legge oraria di due masse collegate tra loro da una molla e altre due molle che le collegano a dei punti fissi, possiamo riassumere il tutto così:

- Troviamo le equazioni che descrivono le forze su tutti i punti;
- Vediamo questo sistema lineare come una matrice Ω ;
- Troviamo gli autovalori di Ω e i relativi autovettori;
- A questo punto abbiamo due equazioni differenziali scoppiate, risolvendole per le condizioni iniziali, troviamo le leggi orarie cercate.

1.8.5 Propagatore

Per trovare un'equazione del moto date le condizioni iniziali si usa il propagatore, qua è presente la costruzione e la sua forma tramite i ket

$$\begin{aligned} U(t) &= |I\rangle\langle I| \cos \omega_I t + |II\rangle\langle II| \cos \omega_{II} t \\ &= \sum_{i=I}^{II} |i\rangle\langle i| \cos \omega_i t \end{aligned}$$

In meccanica classica era scritto

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix} = \text{Re} \left[C_- \begin{pmatrix} c_{-1} \\ c_{-2} \end{pmatrix} e^{-i\omega_- t} + C_+ \begin{pmatrix} c_{+1} \\ c_{+2} \end{pmatrix} e^{-i\omega_+ t} \right] \\ = A \begin{pmatrix} c_{-1} \\ c_{-2} \end{pmatrix} \cos(\omega_- t + \phi_-) + B \begin{pmatrix} c_{+1} \\ c_{+2} \end{pmatrix} \cos(\omega_+ t + \phi_+)$$

Il propagatore ci permette di saltare l'ultimo passaggio nella ricerca di leggi orarie e ci dà direttamente le leggi orarie inserendo autovettori e autovalori nella formula.

1.8.6 I modi normali

I modi normali sono i vettori per cui se un sistema si muove su uno solo di essi, allora rimarrà su quel vettore. In pratica sono delle basi ortogonali.

1.9 Funzioni di operatori e concetti correlati

Abbiamo visto due tipi di oggetti che interagiscono con i vettori: gli scalari (chiamati anche c number) e gli operatori (q number). Siamo abituati a prendere funzioni di c number ma non di q number, ora vedremo proprio questo concetto limitandoci però al caso di operatori hermitiani e serie di potenze con un limite ben definito

$$f(\Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \Omega^n.$$

Prendiamo per esempio

$$e^{\Omega} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Omega^n}{n!}$$

e prendiamo la base di autovalori così che l'operatore sia diagonale, allora

$$e^{\Omega} = \begin{bmatrix} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\omega_1^m}{m!} & & \\ & \ddots & \\ & & \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\omega_n^m}{m!} \end{bmatrix}.$$

1.9.1 Derivate di operatori rispetto a dei parametri

Consideriamo un operatore $\theta(\lambda)$ che dipenda dal parametro λ . Definiamo la sua derivata rispetto a λ come

$$\frac{d\theta(\lambda)}{d\lambda} = \lim_{\Delta\lambda \rightarrow 0} \left[\frac{\theta(\lambda + \Delta\lambda) - \theta(\lambda)}{\Delta\lambda} \right]$$

se $\theta(\lambda)$ è scritta in una qualche base, allora la sua derivata si ottiene differenziando gli elementi della matrice.

Un caso speciale e importante è

$$\theta(\lambda) = e^{\lambda\Omega}$$

dove Ω è un hermitiano. Scrivendo Ω sulla eigenbasis otteniamo

$$\frac{d\theta(\lambda)}{d\lambda} = \Omega e^{\lambda\Omega} = e^{\lambda\Omega} \Omega = \theta(\lambda) \Omega.$$

Le operazioni e funzioni con i q number sono uguali a quelle con i c number, l'unica differenza è che i q non commutano. Se abbiamo un solo q non è un problema, ma se ne abbiamo di più allora è bene fare attenzione all'ordine degli elementi.

1.10 Generalizzazione ad infinite dimensioni

Fin ora abbiamo sempre ragionato in dimensione finita, vediamo adesso i concetti già studiati, ma in dimensione infinita.

Vettori

Per capire bene facciamo un esempio: abbiamo una corda che va dal punto 0 al punto L con una curva (che non si intreccia), vogliamo comunicare la posizione della corda a qualcuno che non può vederla, per farlo dividiamo l'intervallo $[0, L]$ in 20 punti equidistanti e comunichiamo il valore della corda posizionata su un piano cartesiano; a questo punto se vogliamo essere più precisi dividiamo in n intervalli e comunichiamo la n -upla di valori $\{f_n(x_1), f_n(x_2), \dots, f_n(x_n)\}$ che possiamo interpretare come il ket $|f_n\rangle$

$$|f_n\rangle \leftrightarrow \begin{bmatrix} f_n(x_1) \\ f_n(x_2) \\ \vdots \\ f_n(x_n) \end{bmatrix}.$$

I vettori che compongono la base sono

$$|x_i\rangle \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \leftarrow i\text{-esimo posto}$$

e la base soddisfa

$$\langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij} \text{ (ortogonalità)}$$

$$\sum_{i=1}^n |x_i\rangle \langle x_i| = I \text{ (completezza)}$$

Possiamo quindi approssimare una qualsiasi funzione $f_n(x)$ ad un corrispondente vettore $|g_n\rangle$, tutti i ket che formano le funzioni da 0 a L formano uno spazio vettoriale.

Prodotto interno

Adesso definiamo il prodotto interno come

$$\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^n f_n(x_i) g_n(x_i)$$

due funzioni saranno dette ortogonali se $\langle f_n | g_n \rangle = 0$.

L'addizione vettoriale e la moltiplicazione per uno scalare sono definiti come prima ma per il prodotto interno non possiamo fare così, infatti per n finito avevamo

$$\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^n f_n(x_i) g_n(x_i),$$

$$\langle f_n | f_n \rangle = \sum_{i=1}^n [f_n(x_i)]^2$$

e quindi per n che va ad infinito anche la somma va ad infinito per quasi tutte le funzioni. La scelta più naturale è

$$\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^n f_n(x_i) g_n(x_i) \Delta, \quad \Delta = L/(n+1).$$

In questo modo per n che va ad infinito otteniamo la definizione di integrale e quindi

$$\langle f | g \rangle = \int_0^L f(x) g(x) dx,$$

$$\langle f | f \rangle = \int_0^L f^2(x) dx.$$

Consideriamo ora anche le funzioni complesse, allora il prodotto interno diventa

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx.$$

Base e funzione di Dirac

I vettori alla base sono un vettore $|x\rangle$ per ogni punto x della funzione (questi vettori sono tra loro tutti ortogonali). Ma come vengono normalizzati? In generale $\langle x | x \rangle \neq 1$, partendo dalla relazione di completezza generalizzata

$$\int_a^b |x'\rangle \langle x'| dx' = I$$

otteniamo che la norma di un vettore alla base è data dalla funzione di Dirac per cui

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x'),$$

dove la parentesi $(x - x')$ denota che questa funzione dipende unicamente dalla distanza di x da x' . La funzione delta è anche chiamata funzione di campionamento (sampling function) perché campiona il valore della funzione $f(x')$ ad un punto

$$\int \delta(x - x') f(x') dx = f(x).$$

La delta di Dirac è già ampiamente conosciuta e sappiamo che può essere vista come il limite di una gaussiana infinitesimamente stretta, non spenderò quindi altre parole sulle sue proprietà ma passerò direttamente alle sue applicazioni.

La prima applicazione che vediamo è la sua derivata rispetto al primo argomento x

$$\delta'(x - x') = \frac{d}{dx} \delta(x - x') = -\frac{d}{dx'} \delta(x - x').$$

Di per se non è molto utile ma sotto integrale diventa

$$\int \delta'(x - x') f(x') dx' = \frac{d}{dx} f(x).$$

Possiamo generalizzare a molti ordini di derivata in modo semplice come:

$$\frac{d^n \delta(x - x')}{dx^n} = \delta(x - x') \frac{d^n}{dx^n};$$

Come ultima cosa vediamo un metodo alternativo di scrivere la delta di Dirac, utilizzando la trasformata di Fourier otteniamo

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-x')} = \delta(x' - x).$$

1.10.1 Operatori in infinite dimensioni

Abbiamo familiarizzato con gli elementi di uno spazio di vettori (i ket f) e i vettori alla base $|x\rangle$. Vediamo adesso gli operatori lineari che agiscono su di essi.

Consideriamo l'equazione

$$\Omega|f\rangle = |\tilde{f}\rangle.$$

Un'applicazione che già conosciamo che agisce in tale modo è l'operatore differenziale. Nello spazio di funzioni noi possiamo descrivere l'azione di tale operatore come

$$D|f\rangle = |df/dx\rangle.$$

Gli elementi di D nella base $|x\rangle$ sono dati da

$$\langle x|D|x'\rangle = D_{xx'} = \delta'(x - x') = \delta(x - x') \frac{d}{dx'}$$

L'operatore differenziale è una matrice infinito dimensionale con gli elementi dati sopra ma normalmente D , essendo infinito, non è pensato come una matrice. D inoltre non è hermitiano, infatti in generale

$$D_{xx'} \neq D_{x'x}^*,$$

questo perché

$$D_{xx'} = \delta'(x - x')$$

e

$$D_{xx}^* = \delta'(x' - x)^* = \delta'(x' - x) = -\delta'(x - x').$$

Osserviamo anzi che questo significa che abbiamo l'equivalente di un immaginario puro in matrice mentre ricordiamo l'hermitianità equivale all'essere una matrice puramente reale, possiamo quindi convertire D in una matrice hermitiana moltiplicandola per un numero immaginario puro

$$K = -iD.$$

In una matrice finito dimensionale questo garantirebbe l'hermitianità, ma non è questo il caso. Questo perché in uno spazio infinito dimensionale $K_{xx'} = K_{x'x}^*$ non è sufficiente come condizione perché K sia hermitiana ma è necessario anche che vedere cosa accade agli estremi. In particolare la seconda condizione perché K sia hermitiana in uno spazio infinito dimensionale è

$$-ig^*(x)f(x)\Big|_a^b = 0,$$

qui il testo non è granché chiaro su che funzioni siano g e f, vengono definite come due funzioni qualsiasi. Questa equazione si verifica solo quando agli estremi a e b assumono gli stessi valori. Questo significa che in uno spazio di funzioni periodiche $K = i d/d \phi$ è sempre hermitiano.

Nello studio della meccanica quantistica saremo interessati a funzioni di intervallo R, queste funzioni cadono in due categorie, quelle per cui quando $|x| \rightarrow \infty$ la funzione tende a 0 e quelle per cui non lo fa (le seconde si comportano come e^{ikx} con k parametro reale). K è hermitiana quando almeno una tra f e g è della prima categoria. È anche possibile che K sia hermitiana quando entrambe le funzioni sono della seconda categoria, infatti

$$e^{ikx}e^{-ikx}\Big|_{-\infty}^{\infty} \stackrel{?}{=} 0$$

se $k = k'$ oppure se $e^{i(k-k')x}$ tende a 0. Possiamo definire il limite di $e^{i(k-k')x}$, una funzione che oscilla, come la media su un ampio intervallo

$$\lim_{x \rightarrow \infty} e^{ikx}e^{-ik'x} = \lim_{\substack{L \rightarrow \infty \\ \Delta \rightarrow \infty}} \frac{1}{\Delta} \int_L^{L+\Delta} e^{i(k-k')x} dx = 0 \quad \text{se } k \neq k'.$$

Vediamo adesso il problema degli autovalori di K ($K|k\rangle = k|k\rangle$).

Dobbiamo trovare le radici di un polinomio caratteristico di ordine infinito, dall'equazione secolare si arriva facilmente a

$$-i \frac{d}{dx} \psi_k(x) = k \psi_k(x),$$

che ha soluzione

$$\Psi_k(x) = A e^{ikx},$$

dove $\Psi_k(x) = \langle x | k \rangle$ (e rappresenta le autofunzioni) e A è un parametro libero. Scegliamo $A = (1/2\pi)^{-1/2}$ ottenendo

$$|k\rangle \leftrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{ikx}$$

così da semplificare la norma

$$\langle k | k' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k | x \rangle \langle x | k' \rangle dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k-k')x} dx = \delta(k - k').$$

Non ci è dunque possibile normalizzare $|k\rangle$ all'unità. Gli autovalori sono tutti reali e siamo in quello che è chiamato spazio di Hilbert fisico (diverso da quello usuale matematico), uno spazio di funzioni dove ogni funzione può essere normalizzata all'unità o alla delta di Dirac. Da ora assumeremo che nello spazio di Hilbert le autofunzioni (autovettori per le funzioni) di un operatore lineare formano una base completa, cosa in generale non vera, inoltre ometteremo il termine fisico.

Ricordiamo che K è stato costruito come controparte hermitiana di X, la funzione derivata, che aveva una base completa, allora tutte le funzioni che potevano essere scritte espandendole sulla base x, devono avere anche un'espansione sulla base k. La loro espansione in base k è scritta

$$f(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx$$

e per tornare in base x

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} f(k) dk.$$

Quindi la trasformata di Fourier è solo il passaggio da una base completa $|x\rangle$ ad una $|k\rangle$. Gli elementi di K in base k sono banalmente

$$\langle k|K|k'\rangle = k'\langle k|k'\rangle = k'\delta(k-k')$$

mentre gli elementi di X in base x sono

$$\langle x'|X|x\rangle = x\delta(x'-x).$$

Adesso possiamo vedere quale sia l'azione di X su una funzione dello spazio di Hilbert, in base x

$$X|f(x)\rangle = |xf(x)\rangle$$

mentre in base k

$$X|g(k)\rangle = \left| \frac{idg(k)}{dk} \right\rangle.$$

Vediamo anche che K si comporta in maniera analoga ad X : in base k la sua funzione è solo di moltiplicare per k , mentre in base x $K|f(k)\rangle = \left| \frac{idf(k)}{dk} \right\rangle$. Inoltre vediamo che X e K non commutano

$$[X, K] = iI,$$

gli operatori con queste relazioni sono chiamati coniugati. Vediamo un esempio di ricerca dei modi normali nello spazio di Hilbert.

Consideriamo una corda bloccata ai due estremi $x=0$ e L . La posizione della corda $\Psi(x, t)$ obbedisce l'equazione differenziale

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

la posizione a $t=0$ è $\Psi(x, 0)$ e la velocità è $\dot{\Psi}(x, 0) = 0$. Il problema è uguale a quello delle due massette, ci è sufficiente identificare $\Psi(x, t)$ con il vettore $|\Psi(t)\rangle$ in uno spazio di Hilbert composto da tutte le funzione che svaniscono a 0 e L . Ricordandoci che $K \leftrightarrow -i\partial/\partial x$ e che K agirebbe in uno spazio dove svanisce agli estremi (e quindi è hermitiano), scriviamo

$$|\ddot{\Psi}(t)\rangle = -K^2|\Psi(t)\rangle$$

Ora dobbiamo procedere in questo modo:

- Risolviamo il problema degli autovalori di $-K^2$;
- Costruiamo il propagatore $U(t)$ in termini di autovettori e autovalori;
- Risolviamo

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$$

Partiamo dal primo punto, l'equazione da risolvere è

$$K^2|\Psi\rangle = k^2|\Psi\rangle$$

che in base X diventa

$$-\frac{d^2}{dx^2}\Psi_k(x) = k^2\Psi_k(x)$$

la cui soluzione generale è

$$\Psi_k(x) = A \cos kx + B \sin kx$$

Ora usiamo le condizioni iniziali e di bordo per ottenere

$$\Psi_m(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right)$$

Dove $B = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}$ di modo che

$$\int_0^L \Psi_m(x)\Psi_{m'}(x)dx = \delta_{mm'}.$$

Possiamo associare ogni soluzione (una per ogni $m=1,2,3,\dots$) creando così il vettore

$$|m\rangle \xrightarrow{x \text{ basis}} (2/L)^{1/2} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right).$$

A questo punto se proiettiamo $|\Psi(t)\rangle$ sulla base $|m\rangle$ in cui K è diagonale con autovalori $(m\pi/L)^2$, i componenti di $\langle m | \Psi(t) \rangle$ obbediranno le equazioni scoppiate

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle m | \Psi(t) \rangle = - \left(\frac{m^2 \pi^2}{L^2} \right) \langle m | \Psi(t) \rangle, \quad m = 1, 2, \dots$$

Di conseguenza

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} |m\rangle \langle m | \Psi(0) \rangle \cos \omega_m t, \quad \omega_m = \frac{m\pi}{L}.$$

Il propagatore è

$$|\Psi(t)\rangle = U(t) |\Psi(0)\rangle,$$

da esso otteniamo

$$\langle x | U(t) | x' \rangle = \sum_m \left(\frac{2}{L} \right) \sin \left(\frac{m\pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{m\pi x'}{L} \right) \cos \omega_m t$$

e quindi

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \sum_{m=1}^{\infty} \langle x | m \rangle \langle m | \Psi(0) \rangle \cos \omega_m t \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \sin \left(\frac{m\pi x}{L} \right) \cos \omega_m t \langle m | \Psi(0) \rangle \end{aligned}$$

Capitolo 2

Revisione della meccanica classica

In questo capitolo svilupperemo il formalismo lagrangiano e hamiltoniano partendo dalle leggi di Newton. Il passaggio dalla formulazione lagrangiana alla meccanica quantistica è stato fatto da Feynman attraverso il formalismo dei path integrals. Noi seguiremo però un'altra strada partendo dal formalismo hamiltoniano scoperto da Schrodinger, Heisenberg, Born e Dirac.

2.1 Il principio di minima azione e la meccanica lagrangiana

Cominciamo partendo da Newton. Prendiamo un punto materiale di massa m che si muove sull'asse x sotto un potenziale $V(x)$, dalla seconda legge di Newton

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = - \frac{dV}{dx}.$$

Datoci lo stato iniziale della particella (posizione e velocità) possiamo calcolarci lo stato in un momento successivo e quindi da lì anche in un momento ancora successivo. Questo schema può essere generalizzato per più particelle e più dimensioni spaziali (dati n punti potremmo creare un *configuration space* di n dimensioni). Il formalismo lagrangiano invece si pone una domanda diversa, dati 2 eventi di una particella, cosa distingue la traiettoria corretta dalle altre? Questo approccio è di tipo globale, mentre quello di Newton è di tipo locale. Dividiamo il procedimento in 3 parti:

- Definiamo una funzione \mathcal{L} chiamata lagrangiana e data da $L=T-V$;
- Per ogni possibile traiettoria $x(t)$ che connette (x_i, t_i) (evento I) e (x_f, t_f) (evento F) calcoliamo l'azione

$$S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(x, \dot{x}) dt.$$

La parentesi quadra serve a ricordarci che l'azione è dipendente da tutta la traiettoria;

- La traiettoria *classica* è quella per cui S è minimo (o un estremo).

Verifichiamo ora che la traiettoria trovata è la stessa descritta da Newton.

Possiamo vedere S come una funzione di $n \rightarrow \infty$ variabili $(x(t_i), \dots, x(t), \dots, x(t_f))$. Troviamone il minimo facendone la derivata parziale al primo ordine (che deve svanire)

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}^0} = 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Ora vediamo come si comporta S . Prendiamo $x_{cl}(t)$ come traiettoria di minima azione e $x_{cl}(t) + \eta(t)$ una traiettoria vicina. Richiediamo che le due traiettorie coincidano a t_i e t_f , allora

$$\eta(t_i) = \eta(t_f) = 0$$

e quindi

$$\begin{aligned} S[x_{cl}(t) + \eta(t)] &= \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(x_{cl}(t) + \eta(t); \dot{x}_{cl}(t) + \dot{\eta}(t)) dt \\ &= S[x_{cl}(t)] + \delta S^{(1)} + \text{termini di ordine maggiore} \end{aligned}$$

Se vogliamo che S trovi la traiettoria di minima azione, allora $\delta S^{(1)} = 0$, quindi dopo un paio di passaggi

$$0 = \delta S^{(1)} = \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x(t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}(t)} \right] \eta(t) dt.$$

Notiamo come questa procedura non richieda che S sia minimo, in realtà basta che sia un estremo. Chiamiamo

$$\left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x(t)} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}(t)} \right] \right\}_{x_{cl}(t)} = 0 \quad \text{per } t_i \leq t \leq t_f$$

equazione di Eulero-Lagrange. Come ultimo passaggio per vedere che coincide con l'equazione di Newton, ponendo $L = T - V$, otteniamo

$$\frac{d}{dt}(m\dot{x}) = -\frac{\partial V}{\partial x}.$$

Possiamo ripetere il procedimento per n coordinate cartesiane e otterremo comunque il risultato giusto, un'osservazione che va fatta è che abbiamo posto V come indipendente dalla velocità, mentre in alcuni casi (come la forza di Lorentz) non lo è; vedremo più avanti come cambia L in questi casi (per fare questo ci liberiamo della condizione $L=T-V$ e pensiamo a L come una funzione delle x e delle \dot{x}). Le equazioni di Eulero Lagrange possono essere riscritte eguagliando il cambiamento nel tempo di

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i},$$

ovvero il momento canonico coniugato a q_i e la quantità

$$F_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i},$$

chiamata forza generalizzata coniugata a q_i . Le leggi di conservazione sono facilmente trovabili seguendo questo formalismo, se ad esempio la lagrangiana dipende dalla velocità, ma non dalla posizione, allora la posizione è chiamata coordinata ciclica e si conserva.

2.2 La lagrangiana elettromagnetica

La forza su di una carica sottoposta ad un campo elettromagnetico è data da

$$\mathbf{F} = q \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right).$$

Usando $L=T-V$ non troviamo le giuste equazioni del moto, cosa che invece accade se inseriamo

$$\mathcal{L}_{e.m} = \frac{1}{2} m \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} - q\phi + \frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}$$

nelle equazioni di Eulero-Lagrange, ottenendo

$$\frac{d}{dt}(m\mathbf{v}) = -q\nabla\phi + \frac{q}{c} \left[-\frac{d\mathbf{A}}{dt} + \nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \right].$$

Definiamo così anche il momento canonico

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + \frac{q\mathbf{A}}{c}.$$

Questa nuova lagrangiana differisce da quella usata prima per il termine potenziale

$$U = q\phi - (q/c)\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}$$

talvolta noto come potenziale generalizzato, che tuttavia non può essere inteso come un vero potenziale. Questo è dato dal fatto che in generale la forza impressa da un campo elettromagnetico non è conservativa, e anche quando lo è, se $q\phi$ può essere inteso come potenziale del campo elettrico, $[-q(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A})/c]$ non può essere inteso come potenziale del campo magnetico, che per giunta non compie neanche lavoro. Possiamo usare $L=T-V$ solo nei casi di forze conservative.

2.3 Il problema dei due corpi

Discutiamo adesso un problema comune della fisica. Abbiamo due corpi di massa m_1 e m_2 che esercitano forze uguali e opposte l'uno sull'altro. In questo caso (in assenza di forze esterne), il potenziale dipende solo dalla distanza tra i due corpi $V(r_1, r_2) = V(r_1 - r_2)$, diminuendo il numero di variabili da 6 a 3. In questi casi è bene definire anche il centro di massa

$$\mathbf{r}_{CM} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}$$

e riscrivere la lagrangiana in termini di due punti fittizi ($r = r_1 - r_2$ e r_{cm})

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) |\dot{\mathbf{r}}_{CM}|^2 + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} |\dot{\mathbf{r}}|^2 - V(\mathbf{r}).$$

La facilitazione è che questi due corpi fittizi non interagiscono tra di loro e r_{CM} è ciclica, quindi il suo momento si conserva. Un'ulteriore semplificazione avviene ponendoci nel sistema di riferimento del centro di massa $R_{CM} = 0$. Infine il secondo corpo fittizio ha una massa ridotta $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$.

2.4 Quanto è intelligente una particella?

Dal formalismo lagrangiano si potrebbe assumere che una particella sia "intelligente", ovvero che questa calcoli tutte le traiettorie dall'evento I all'evento F e poi scelga quella di minima azione, ma così non è. Tutto ciò che deve fare la particella è seguire le leggi di E-L che, come abbiamo visto, corrispondono a guardare il potenziale punto per punto e andare nella direzione che porta al maggiore cambiamento. Con la meccanica quantistica vedremo che la particella è ancora più "stupida" e essa va in tutte le direzioni con eguale peso, ma come è possibile che allora segue sempre quella descritta da E-L nella fisica classica? Questa domanda verrà risposta con il formalismo dei path integrals.

2.5 Formalismo Hemiltoniano

Nel formalismo Lagrangiano le variabili indipendenti sono q_i e \dot{q}_i . Il momento derivato da queste quantità è dato da

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}$$

Nel formalismo Hamiltoniano, vengo scambiati i ruoli di \dot{q} e p e della lagrangiana L con l'hamiltoniana H , allora

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}.$$

Per fare questo passaggio tra Hamiltoniana e Lagrangiana, usiamo la trasformata di Legendre. Immaginiamo di avere una funzione $f(x)$ con

$$u(x) = \frac{df}{dx}$$

e che esiste l'inverso di $u(x)$ (ovvero $x(u)$), allora definiamo

$$g(u) = x(u)u - f(x(u)),$$

segue

$$\frac{dg}{du} = \frac{dx}{du} \cdot u + x(u) - \frac{df}{dx} \cdot \frac{dx}{du} = x(u).$$

Più in generale

$$g(u_1, \dots, u_j, x_{j+1}, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^j u_i x_i - f(x_1, \dots, x_n)$$

e f e g sono chiamate trasformate l'una dell'altra. Otteniamo così

$$\mathcal{H}(q, p) = \sum_{i=1}^n p \dot{q}_i - \mathcal{L}(q, \dot{q})$$

e possiamo anche definire le equazioni canoniche di Hamilton come

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = \dot{p}_i.$$

Come per L, nel caso di forze conservative $L=T-V$, allora nel caso di energia indipendente dal tempo

$$\mathcal{H} = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} = T + V.$$

La seguente tabella riassume alcune delle differenze tra formalismo lagrangiano ed hamiltoniano.

Lagrangian formalism	Hamiltonian formalism
(1) The state of a system with n degrees of freedom is described by n coordinates (q_1, \dots, q_n) and n velocities $(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n)$, or in a more compact notation by (q, \dot{q}) .	(1) The state of a system with n degrees of freedom is described by n coordinates and n momenta $(q_1, \dots, q_n; p_1, \dots, p_n)$ or, more succinctly, by (q, p) .
(2) The state of the system may be represented by a point moving with a definite velocity in an n -dimensional configuration space.	(2) The state of the system may be represented by a point in a $2n$ -dimensional phase space, with coordinates $(q_1, \dots, q_n; p_1, \dots, p_n)$.
(3) The n coordinates evolve according to n second-order equations.	(3) The $2n$ coordinates and momenta obey $2n$ first-order equations.
(4) For a given \mathcal{L} , several trajectories may pass through a given point in configuration space depending on \dot{q} .	(4) For a given \mathcal{H} only one trajectory passes through a given point in phase space.

2.6 La forza elettromagnetica nel formalismo Hamiltoniano

Prendendo la corretta Lagrangiana, il procedimento per trovare l'hamiltoniana è lo stesso per tutte le funzioni, avendo

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + \frac{q\mathbf{A}}{c}$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{e.m} &= \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - \mathcal{L}_{e.m} \\ &= \frac{1}{2} m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + q\phi = T + q\phi \end{aligned}$$

e con un cambio di variabili

$$\mathcal{H}_{e.m} = \frac{|\mathbf{p} - q\mathbf{A}/c|^2}{2m} + q\phi$$

2.7 Coordinate cicliche, parentesi di Poisson e trasformazioni canoniche

Come abbiamo visto nel formalismo Lagrangiano, anche qua è facile trovare le quantità che si conservano. Se ad esempio q_i non è esplicita in H, allora

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = 0.$$

Un metodo per caratterizzare le coordinate cicliche è la parentesi di Poisson, sia $\omega(p, q)$ una funzione senza dipendenza esplicita dal tempo, allora

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{dt} &= \sum_i \left(\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \\ &= \sum_i \left(\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) \\ &\equiv \{\omega, \mathcal{H}\}. \end{aligned}$$

Segue che ogni variabile la cui parentesi di Poisson svanisce con H è costante nel tempo (conservata). Due proprietà importanti sono

$$\begin{aligned}\{q_i, q_j\} &= \{p_i, p_j\} = 0 \\ \{q_i, p_j\} &= \delta_{ij},\end{aligned}$$

queste si dimostrano facilmente sapendo che

$$\frac{\partial q_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial p_j}{\partial p_k} = \delta_{ik} \delta_{jk} \quad \& \quad \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{\partial q_i}{\partial p_k} = 0 \cdot 0.$$

Un'altra proprietà molto importante non scritta nel testo è l'identità di Jacobi:

$$\{\{\omega, \lambda\}, \xi\} + \{\{\lambda, \xi\}, \omega\} + \{\{\xi, \omega\}, \lambda\} = 0.$$

Infine le equazioni di Hamilton possono essere riscritte in termini di PB (Poisson bracket)

$$\begin{aligned}\dot{q}_i &= \{q_i, \mathcal{H}\} \\ \dot{p}_i &= \{p_i, \mathcal{H}\}.\end{aligned}$$

2.7.1 Trasformazioni canoniche

Le trasformazioni di E-L sono invarianti sotto ogni cambio di coordinate (questo da un punto di vista numerico (L=k) ma la forma in cui sono scritte può cambiare), se prendiamo il cambio di coordinate

$$q \rightarrow \bar{q}(q)$$

allora le velocità trasformano come

$$\dot{q}_i = \bar{\dot{q}}_i = \frac{d\bar{q}_i}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial q_j} \right) \dot{q}_j$$

e il momento canonico come

$$\bar{p}_i = \sum_j \left(\frac{\partial q_j}{\partial \bar{q}_i} \right) p_j.$$

L'invarianza numerica di E-L implica l'invarianza funzionale (della forma) di H sotto lo stesso cambio di coordinate, con le sue equazioni che diventano

$$\dot{\bar{q}}_i = \partial \mathcal{H} / \partial \bar{p}_i, \quad \dot{\bar{p}}_i = -(\partial \mathcal{H} / \partial \bar{q}_i).$$

Una trasformazione di questo tipo è chiamata trasformazione puntuale. Guardando però direttamente il formalismo Hamiltoniano, senza passare da quello Lagrangiano, ci è possibile usare un cambio di coordinate più generale

$$\begin{aligned}q &\rightarrow \bar{q}(q, p) \\ p &\rightarrow \bar{p}(q, p).\end{aligned}$$

In questo caso però non tutti i cambi di coordinate mantengono la forma di H invariata, le coordinate che lo fanno sono chiamate coordinate canoniche e le loro trasformazioni sono le trasformazioni canoniche (la trasformazione puntuale è solo un caso particolare di trasformazione canonica). Come possiamo quindi dire quando una trasformazione è canonica? Si dimostra con facilità che la condizione sufficiente è

$$\begin{aligned}\{\bar{q}_j, \bar{q}_k\} &= 0 = \{\bar{p}_j, \bar{p}_k\} \\ \{\bar{q}_j, \bar{p}_k\} &= \delta_{jk}.\end{aligned}$$

Infatti le PB sono invarianti sotto trasformazioni canoniche, quindi usando le PB con due funzioni scritte con diverse coordinate canoniche è uguale

$$\{\omega, \sigma\}_{q,p} = \{\omega, \sigma\}_{\bar{q},\bar{p}}.$$

Generalmente una di queste due funzione è proprio H

$$\{\omega, \mathcal{H}\}_{q,p} = \{\omega, \mathcal{H}\}_{\bar{q},\bar{p}}.$$

2.7.2 Trasformazioni attive

Le trasformazioni di cui abbiamo appena discusso sono passive: (q, p) e (\bar{q}, \bar{p}) si riferiscono allo stesso punto in due sistemi di coordinate diversi (trasformazione passiva). Prendiamo adesso un tipo di trasformazione particolare, detto trasformazione regolare, che preserva il dominio delle coordinate (ad esempio una traslazione o rotazione delle cartesiane è una trasformazione regolare, una trasformazione da cartesiane a polari no perché il dominio passa da $(-\infty, +\infty)$ a $[0, 2\pi]$). Possiamo vedere le trasformazioni regolari come un nuovo punto nello stesso sistema di coordinate di prima, questo corrisponde ad una trasformazione attiva, un tipo di trasformazione più generale di quella passiva. Sotto questa trasformazione, il valore numerico di una funzione $\omega(p, q)$ in generale cambierà, ma non la sua forma. Diciamo che ω è invariante sotto trasformazione regolare se

$$\omega(q, p) = \omega(\bar{q}, \bar{p}).$$

Come vedremo solo le trasformazioni regolari canoniche sono fisicamente interessanti.

2.8 Simmetrie e le loro conseguenze

La simmetria di un oggetto implica la sua invarianza sotto una certa trasformazione. Una simmetria può essere continua (come la rotazione di un cerchio), o discreta (come la rotazione di 60° di un esagono). La trasformazione è continua se è invariante la sua trasformazione infinitesima (trasformazione infinitesimamente vicina all'identità). Le funzioni possono essere anch'esse simmetriche, ovvero cambiando una variabile, di una certa quantità, il valore della funzione non cambia. Consideriamo la funzione $H(q, p)$, data una trasformazione regolare canonica:

- Se H è invariante sotto trasformazioni infinitesime

$$\begin{aligned} q_i &\rightarrow \bar{q}_i = q_i + \varepsilon \frac{\partial g}{\partial p_i} \equiv q_i + \delta q_i \\ p_i &\rightarrow \bar{p}_i = p_i - \varepsilon \frac{\partial g}{\partial q_i} \equiv p_i + \delta p_i \end{aligned}$$

dove $g(q, p)$ è una variabile, allora g è conservata ed è chiamata generatore della trasformazione;

- Se H è invariante sotto la trasformazione $(q, p) \rightarrow (\bar{q}, \bar{p})$ ma non necessariamente sotto trasformazioni infinitesime e $(q(t), p(t))$ è una soluzione alle equazioni del moto, allora lo è anche (\bar{q}, \bar{p}) .

Questo porta a due conseguenze, la prima è che data una qualsiasi trasformazione infinitesimale canonica

$$\delta\omega = \varepsilon\{\omega, g\}$$

possiamo trovare la corrispondente trasformazione integrandola. La seconda conseguenza è che se la traiettoria $(q(t), p(t))$ nello spazio delle fasi soddisfa le equazioni del moto, allora anche la traiettoria descritta da (\bar{q}, \bar{p}) le soddisfa:

$$\dot{\bar{q}}_j = \frac{\partial \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})}{\partial \bar{p}_j}, \quad \dot{\bar{p}}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}(\bar{q}, \bar{p})}{\partial \bar{q}_j}$$

e

$$\dot{\bar{q}}_j = \left\{ \bar{q}_j, \mathcal{H}(q, p) \right\}_{q, p}$$

Un'utile relazione tra S e E

Una relazione che ci tornerà utile nel capitolo 16 è

$$\frac{\partial S_{cl}(x_f, t_f; x_i, t_i)}{\partial t_f} = -\mathcal{H}(t_f),$$

dove $S_{cl}(x_f, t_f; x_i, t_i)$ è l'azione della traiettoria classica da x_i, t_i a x_f, t_f . Dato che lavoreremo con problemi dove l'energia si conserva, possiamo scrivere

$$\frac{\partial S_{cl}(x_f, t_f; x_i, t_i)}{\partial t_f} = -E.$$

Capitolo 3

I problemi della fisica classica

Nella fisica, nel momento in cui viene osservato un nuovo fenomeno, dobbiamo controllare che le precedenti equazioni lo spieghino; se non lo fanno dobbiamo trovare nuove leggi che lo facciano. In questo capitolo verranno mostrati alcuni esperimenti che violano le leggi classiche e che hanno posto la necessità di trovare nuove leggi adeguate.

3.1 Onde e particelle in fisica classica

In fisica classica esistono due entità: particelle e onde. Le prime sono insiemi di energia e momento localizzati e descritti da q e \dot{q} che descrivono la traiettoria $q(t)$. Le onde invece sono un disturbo nello spazio. Sono descritti da una funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ e rispondono all'equazione

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}.$$

Un tipo d'onda particolarmente interessante è l'onda piana (onda periodica nello spazio e nel tempo), descritta da

$$\Psi(x, t) = A \exp \left[i \left(\frac{2\pi}{\lambda} x - \frac{2\pi}{T} t \right) \right] = A \exp [i(kx - \omega t)] \equiv A \exp[i\phi].$$

L'onda viaggia a velocità $v = \omega/k$, la sua intensità è $I = |\Psi|^2$ che nel caso delle onde piane è pari a $|A|^2$. Infine la generalizzazione dell'onda piana in 3 dimensioni è

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad \omega = |\mathbf{k}|v.$$

3.2 Un esperimento con le onde e le particelle (classiche)

Le onde esibiscono un fenomeno chiamato interferenza, per osservarlo prendiamo un'onda piana che incide normalmente su una parete con due fessure, S_1 e S_2 , ad una distanza a l'una dall'altra. Se inizialmente teniamo solo S_1 aperta, possiamo immaginare S_1 come la sorgente. Se teniamo entrambe aperte e poniamo una seconda parete a distanza d , otteniamo che le due intensità I si sommano in quadratura $I = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$. Avremo un massimo per $d_2 - d_1 = n\lambda$, ovvero dove le onde sono esattamente in fase, e un minimo per $d_2 - d_1 = (2n + 1)\lambda/2$, ovvero dove le onde sono esattamente fuori fase. Lo spazio tra un massimo e l'altro è $\Delta x = \lambda d/a$. La cosa interessante è che nei punti di minimo abbiamo meno intensità di quanta ne avremmo con solo Ψ_1 .

Consideriamo lo stesso esperimento con le particelle classiche.

Se solo S_1 è aperto, allora avremo ciò che accadeva per le onde con S_1 aperto. Se invece sono aperte tutti e due, la meccanica classica dice $I = I_1 + I_2$ che è ovviamente diverso dal caso con le onde. Anche ipotizzando che ci fossero vari scontri che modificano la direzione, comunque le particelle arriverebbero come una gaussiana.

3.3 Esperimento di Young

Montiamo lo stesso apparato della precedente sezione, mandando un'onda di luce otteniamo il pattern sinusoidale dato dall'interferenza. Apriamo adesso solo S_1 e riduciamo al massimo l'intensità dell'onda, ci accorgiamo che l'energia arriva a pacchetti della stessa intensità. Facendo un istogramma della

posizione di arrivo di ogni pacchetto, dopo un sufficiente periodo di tempo otteniamo la stessa conformazione di prima con solo S_1 aperto. Ci accorgiamo che ogni pacchetto porta la stessa energia, lo stesso momento e che $E = pc$, quindi da $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ deduciamo che le particelle hanno massa 0. Infine se variamo la frequenza vediamo che

$$E = \hbar\omega$$

$$p = \hbar k$$

dove $\hbar = h/2\pi$ e h è la costante di Planck che vale

$$\frac{h}{2\pi} = \hbar \simeq 10^{-27} \text{ ergsec} = 6.58 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$$

Un erg vale $g \text{ cm}^2/\text{s}^2$ Nella realtà dei fatti il primo esperimento a rivelare la natura quantistica dell'universo è stato l'effetto fotoelettrico. Non è stato però questo a smontare la meccanica classica, ma il fatto che se ripetiamo l'esperimento con entrambe le fessure aperte, allora osserviamo che componendo lo stesso istogramma di prima osserviamo la forma caratteristica data dall'interferenza dell'onda che è inconcepibile per una particella nella meccanica classica.

Da queste scoperte sperimentali, Born dedusse che ogni fotone è associato ad un'onda Ψ , chiamata ampiezza o probabilità di ampiezza, il cui modulo al quadrato $|\Psi|^2$ dà la probabilità di trovare la particella in un determinato punto x sullo schermo. L'onda Ψ associata al fotone ha $\omega = E/\hbar$ e $k = p/\hbar$, motivo per cui quando la somma delle onde associate ai fotoni si schianta sullo schermo, allora noi osserviamo un'onda come è conosciuta in meccanica classica.

3.4 Onde di materia (onde di De Broglie)

De Broglie fu il primo a sostenere che i fotoni non fossero le sole entità ad avere una propria onda associata, ma che questa era una caratteristica propria di tutta la materia e che quindi ogni oggetto presentasse una propria onda con $k = p/\hbar$. Questa congettura venne provata poi da Davisson e Germer per gli elettroni ed è oggi ritenuta vera per tutta la materia. Il motivo per cui non viene notato è che la lunghezza d'onda di un oggetto macroscopico è infinitesimale, prendiamo ad esempio un sassolino di massa 1g che si muove ad 1 cm/s, allora

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} \simeq 10^{-26} \text{ cm}$$

che è 10^{-13} volte il raggio del protone.

3.5 Conclusioni

Riassumiamo tutto dicendo che le varie entità della natura si comportano come particella, nel senso che portano una definita quantità di carica, energia e momento in forma localizzata, e diversamente da una particella nel senso che non seguono traiettorie definite. Questo definisce la dualità particella-onda della natura. Nel prossimo capitolo guarderemo le dinamiche della particella studiano $\Psi(t)$ (o meglio il suo ket $|\Psi(t)\rangle$), l'esperimento di Young è stato presentato poiché, benché non mostri tutte le caratteristiche della natura quantistica, mostra quelle più centrali e ci rende plausibili e concrete le altre che vedremo.

Due esperimenti non trattati nel testo che secondo me colgono l'essenza della meccanica quantistica sono l'esperimento di Bell (ci mostra come non esistano che ci riportino ad un pensiero classico deterministico, ma che il mondo è effettivamente probabilistico seguendo la funzione d'onda) e l'esperimento della bomba di Elitzur-Vaidman (che mostra come il concetto di traiettoria vada effettivamente a perdersi nella meccanica quantistica).

Capitolo 4

I postulati: discussione generale

In questo capitolo verranno discussi i postulati della meccanica quantistica e messi a confronto con quelli già visti nella meccanica classica. Tutti i successivi capitoli saranno applicazioni e risoluzione di problemi di tali postulati.

4.1 I postulati

Vediamo i postulati della meccanica quantistica non relativistica. Consideriamo un sistema con un grado di libertà, ovvero una particella in una dimensione.

Meccanica classica	Meccanica quantistica
Lo stato di una particella ad un dato momento è specificato dalle due variabili $x(t)$ e $p(t)$ come un punto in uno spazio delle fasi.	Lo stato di una particella è rappresentato da un vettore $ \Psi(t)\rangle$ nello spazio di Hilbert.
Ogni variabile dinamica ω è una funzione di x e p .	Le corrispondenti di x e p sono date da operatori hermitiani X (la stessa che abbiamo già visto nel capitolo introduttivo) e P (data da $P = \hbar K$ dove anche K è quella già vista), i cui elementi della matrice con autobase X sono $\langle x X x'\rangle = x\delta(x-x'),$ $\langle x P x'\rangle = -i\hbar\delta'(x-x').$ <p>Gli operatori corrispondenti a $\omega(x, p)$ sono dati dall'operatore hermitiano</p> $\Omega(X, P) = \omega(x \rightarrow X, p \rightarrow P).$
Se la particella è in un particolare stato dato da x e p , misurare la quantità $\omega(x, p)$ non cambia il suo stato.	Se la particella è nello stato $ \Psi\rangle$, la misura di Ω avrà come risultato uno degli autovalori ω con una probabilità $P(\omega) \propto \langle\omega \Psi\rangle ^2$. Lo stato del sistema cambierà da $ \Psi\rangle \rightarrow \omega\rangle$ come risultato della misurazione.
Le variabili di stato sono date dalle equazioni di Hamilton $\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$ $\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x}$	Il vettore di stato $ \Psi(t)\rangle$ obbedisce all'equazione di Shrödinger $i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t)\rangle = H \Psi(t)\rangle$ <p>dove $H(X, P) = \mathcal{H}(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$ è l'operatore quantistico hamiltoniano e \mathcal{H} è l'hamiltoniana per il corrispondente problema classico.</p>

4.2 Discussione dei postulati I-III

I primi 3 postulati ci dicono come è costituito un sistema ad un dato momento, il quarto ci dice come evolverà.

Il primo postulato ci dice che una particella è descritta da $|\Psi\rangle$ in uno spazio di Hilbert (uno spazio con vettori propri normalizzabili e con vettori impropri normalizzabili alla delta di Dirac). Passiamo quindi da due variabili p e q , ad un vettore con un numero infinito di componenti, questo vettore inoltre descrive l'ampiezza di probabilità che una misurazione ci dia certi valori del vettore (verrà spiegato meglio al punto 4 del elenco qui sotto). Inoltre essendo $|\Psi\rangle$ un vettore nello spazio di Hilbert, dati due stati possibili $|\Psi\rangle$ e $|\Psi'\rangle$, allora è possibile lo stato $\alpha|\Psi\rangle + \beta|\Psi'\rangle$ (principio di sovrapposizione).

In meccanica classica, se misuriamo la grandezza $\omega(x, p)$ otteniamo ω , dal secondo e terzo postulato possiamo vedere l'analogo in quantistica:

1. Costruiamo il corrispondente operatore quantistico $\Omega = \omega(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$
2. Troviamo gli autovettori (autostati) ortonormali $|\omega_i\rangle$ e i corrispondenti autovalori di Ω .
3. Espandiamo $|\Psi\rangle$ in base

$$|\Psi\rangle = \sum_i |\omega_i\rangle \langle \omega_i | \Psi \rangle$$

4. La probabilità $P(\omega)$ che si ottenga il risultato ω è proporzionale alla proiezione di $|\Psi\rangle$ lungo gli autovettori, in termini di proiettore abbiamo $P(\omega) \propto |\langle \omega | \Psi \rangle|^2 = \langle \mathbb{P}_\omega \Psi | \mathbb{P}_\omega \Psi \rangle$.

Tutto questo ci da varie informazioni, la teoria fa solo predizioni probabilistiche per il risultato della misura di Ω , i cui unici valori possibili sono gli autovalori di Ω che sono tutti reali. Noi abbiamo solo un fattore di proporzionalità della probabilità, per ottenere quella assoluta, dobbiamo normalizzare

$$P(\omega_i) = \frac{|\langle \omega_i | \Psi \rangle|^2}{\sum_j |\langle \omega_j | \Psi \rangle|^2} = \frac{|\langle \omega_i | \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle}.$$

Se $|\Psi\rangle$ è un vettore proprio, allora non abbiamo problemi; tuttavia se questo è un vettore improprio, allora $\langle \Psi | \Psi \rangle = \delta(0)$ e non più possibile un'interpretazione probabilistica (e nella teoria standard della meccanica quantistica questi stati sono solo un espediente matematico).

Quando la probabilità relativa corrispondente agli stati

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

viene normalizzata, allora le due probabilità relative si riducono alla stessa probabilità assoluta; questo vuol dire che per ogni stato esiste, non un vettore ma un versore dello spazio di Hilbert.

Quando due stati $|\omega_1\rangle$ e $|\omega_2\rangle$ sono sovrapposti a formare uno stato del tipo

$$|\Psi\rangle = \frac{\alpha |\omega_1\rangle + \beta |\omega_2\rangle}{(|\alpha|^2 + |\beta|^2)^{1/2}},$$

allora le probabilità di avere 1 sono $|\alpha|^2 / (|\alpha|^2 + |\beta|^2)$ e di avere 2 sono $|\beta|^2 / (|\alpha|^2 + |\beta|^2)$. Infine se abbiamo uno stato $|\Psi\rangle$ con solo un autostato $|\omega_i\rangle$ allora quell'autostato sarà l'unico valore possibile e avremo uno stato in senso classico. Facendo un esempio se

$$|\omega\rangle = \frac{1}{2} |\omega_1\rangle + \frac{1}{2} |\omega_2\rangle + \frac{1}{2^{1/2}} |\omega_3\rangle$$

allora gli stati possibili sono $\omega_{1,2,3}$ e con probabilità $1/4$, $1/4$ e $1/2$.

Vediamo adesso alcune complicazioni che vengono fuori dai postulati.

Complicazione 1: L'equazione $\Omega = \omega(x \rightarrow X, p \rightarrow P)$ è ambigua.

Se per esempio non sappiamo se $\Omega = XP$ o PX dal momento che sono uguali nel senso classico. Non c'è un modo universale di risolvere questa ambiguità. Noi useremo convenzionalmente $\Omega = (XP + PX)/2$, questa simmetrizzazione rende inoltre Ω hermitiana. Se tuttavia Ω contiene prodotti di potenze ≥ 2 di X con potenze ≥ 2 di P allora ciò non è possibile e l'unico modo per risolvere l'ambiguità è con una prova sperimentale.

Complicazione 2: L'operatore Ω è degenere.

Diciamo che $\omega_1 = \omega_2 = \omega$, quanto vale $P(\omega)$ in questo caso? Prendiamo una base ortonormale $|\omega, 1\rangle$ e $|\omega, 2\rangle$ nel autospazio V_ω , allora

$$P(\omega) = |\langle \omega, 1 | \Psi \rangle|^2 + |\langle \omega, 2 | \Psi \rangle|^2.$$

Complicazione 3: Lo spettro di autovalori di Ω è continuo.
In questo caso espandiamo $|\Psi\rangle$ come

$$|\Psi\rangle = \int |\omega\rangle \langle\omega|\Psi\rangle d\omega$$

e ci aspettiamo che $\langle\omega|\Psi\rangle$ sia regolare quanto la funzione $\Psi(\omega)$. Per visualizzare questa funzione introduciamo lo spazio ausiliario ω dove $\Psi(\omega)$ è chiamata funzione d'onda nello spazio ω . La funzione $\Psi(\omega)$ è anche chiamata probabilità di ampiezza di trovare la particella con $\Omega = \omega$. Non possiamo però interpretare $|\langle\omega|\Psi\rangle|^2$ come la probabilità di trovare la particella con un valore ω di Ω ma solo come la densità di probabilità di ottenere un risultato ω tra ω e $\omega + d\omega$, inoltre

$$\begin{aligned} \int P(\omega) d\omega &= \int |\langle\omega|\Psi\rangle|^2 d\omega = \int \langle\Psi|\omega\rangle \langle\omega|\Psi\rangle d\omega \\ &= \langle\Psi|I|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1. \end{aligned}$$

Se $\langle\Psi|\Psi\rangle = \delta(0)$ è l'unica normalizzazione possibile, allora lo stato non può essere normalizzato all'unità e $P(\omega)$ deve essere interpretato come la densità relativa di probabilità. Un importante esempio di spettro continuo è l'operatore X corrispondente alla posizione x . La funzione d'onda in base X è solitamente chiamata LA funzione d'onda (e corrisponde a quella di cui abbiamo parlato durante la trattazione dell'esperimento di Young). Infatti, se una particella classica ha in un definito momento, una definita posizione, allora una particella quantistica prima di una misura è descritta da tutte le possibili probabilità di stato. Queste possibilità possono essere lette tramite $\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$. $|\Psi\rangle$ è un vettore molto comodo, infatti a differenza della meccanica classica non dobbiamo avere un vettore per il momento ma è sufficiente fare il prodotto scalare con la funzione d'onda.

Complicazione 4: La variabile quantistica Ω non ha controparti nella meccanica classica. Ci sono quantità che non possono essere descritte classicamente, lo spin è una di queste. Questa grandezza appartiene a particelle puntiformi ed è un momento angolare caratteristico della particella e privo di correlazioni con il suo movimento.

4.2.1 Collasso del vettore di stato

Dal postulato III, sappiamo che la misura della variabile Ω cambia lo stato del vettore. Dato lo stato

$$|\Psi\rangle = \sum_{\omega} |\omega\rangle \langle\omega|\Psi\rangle$$

esso collassa nell'autostato $|\omega\rangle$, questo fenomeno conosciuto come collasso del vettore di stato ed è indipendente dalla qualità della misura che facciamo.

Prendiamo per esempio l'autostato del momento $|p\rangle$, se misuriamo lo stato siamo sicuri di ottenere una misura p . Un modo per misurare la quantità di moto è tramite lo scattering di Compton, prendiamo una particella che si muova sull'asse delle x e inviamo un fotone di energia $\hbar\omega$ sullo stesso asse. Usando la conservazione del momento e dell'energia, possiamo trovare il momento della particella ricevendo il fotone che rimbalza. Inoltre è ovvio che il fotone perde energia durante lo scontro e quindi la frequenza angolare ω' del fotone che riceviamo è $<$ di quella del fotone inviato. Ovviamente la particella assorbe un po' dell'energia del fotone ma inviando un fotone con $\omega \rightarrow 0$ possiamo minimizzare l'energia trasferita (che però non sarà mai 0). Da ora in poi quando parleremo di misurazione ci riferiremo ad una misurazione ideale quantistica, ovvero una misurazione che minimizza il cambiamento di stato della misura osservata (in quantistica tutte le grandezze misurabili vengo chiamate osservabili); assumeremo anche che esista una procedura di misura ideale per ogni variabile dinamica. Supponiamo ora di voler misurare la posizione di una particella con un autostato del momento $|p\rangle$, dato

$$|p\rangle = \int |x\rangle \langle x|p\rangle dx$$

la misurazione forzerà il sistema a collapsare in uno stato $|x\rangle$. Questo è dato dal fatto che la misurazione della posizione richiede l'invio di fotoni ad alta energia (quindi è il contrario di quella di momento). Questa è un'importante differenza rispetto alla meccanica classica dove una misurazione ideale lascia tutti gli osservabili invariati, mentre in quantistica una misurazione ideale lascia solo l'osservabile misurato invariante (la misura del momento cambia la posizione, la misura della posizione cambia il momento). Possiamo riassumere tutto in maniera schematica come

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\Omega \text{ misurato, } \omega \text{ ottenuto}} = \frac{\mathbb{P}_{\omega}|\Psi\rangle}{\langle\mathbb{P}_{\omega}\Psi|\mathbb{P}_{\omega}\Psi\rangle^{1/2}}$$

Un caso particolare è dato quando lo stato $|\Psi\rangle$ è sconosciuto e ω è degenere, in tal caso non sapremmo quale è lo stato dopo la misurazione ma solo che è un vettore (versore) dell'autospazio V_ω . Se per esempio conosciamo lo stato

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2}|\omega, 1\rangle + \frac{1}{2}|\omega, 2\rangle + \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2} |\omega_3\rangle$$

e la misura ci dà ω degenere, allora semplicemente

$$|\Psi\rangle = 2^{-1/2}(|\omega, 1\rangle + |\omega, 2\rangle);$$

Se invece non sappiamo $|\Psi\rangle$ allora

$$|\Psi\rangle = \frac{\alpha|\omega, 1\rangle + \beta|\omega, 2\rangle}{(\alpha^2 + \beta^2)^{1/2}}$$

e quindi sappiamo solo che lo stato giace nell'autospazio V_ω .

4.2.2 Come testare la teoria quantistica

La principale differenza tra meccanica classica e meccanica quantistica è che se mentre la prima, fa perdizioni deterministiche, la seconda fa predizioni statistiche di uno stato $|\Psi\rangle$ e dice che questo stato evolve secondo l'equazione di Shrödinger. Per testare queste predizioni dobbiamo avere le particelle in uno stato $|\Psi\rangle$ ben definito e controllare le predizioni probabilistiche ad ogni istante. Il collasso del vettore di stato è un modo di preparare uno stato ben definito (assumendo che non sia degenere), infatti in meccanica quantistica una misura ci dice lo stato di una particella DOPO la misurazione. Supponiamo di misurare lo stato $|\omega\rangle$ e supponiamo di misurare una variabile Λ subito dopo, di modo che lo stato non sia cambiato, allora

$$|\omega\rangle = \frac{1}{3^{1/2}} |\lambda_1\rangle + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} |\lambda_2\rangle + 0 \cdot (altri)$$

la teoria quantistica ci dice che le probabilità di ottenere λ_1 e λ_2 sono rispettivamente $1/3$ e $2/3$. Una singola misura non può confermarci la teoria ma abbiamo bisogno di un ensemble quantistico, ovvero un numero N di particelle che siano tutte nello stesso stato ω . Un esempio di ensemble quantistico è dato nell'esperimento di Young. Possiamo mandare i fotoni uno per volta oppure insieme come un raggio di luce (ipotizzando che non interagiscano fra di loro).

Vediamo adesso un esempio per confrontare la descrizione probabilistica quantistica e quella classica. Prendiamo un dado a 6 facce come esempio classico, chiudiamo gli occhi, tiriamo il dado e nascondiamolo sotto una tazza. In analogia con la statistica quantistica:

- Lo stato del dado è descritto da una funzione di probabilità $P(n)$ prima che la tazza sia sollevata.
- Abbiamo un numero discreto di possibilità (1,2,3,4,5 e 6).
- Se la tazza viene sollevata, allora la funzione $P(n)$ collassa al valore ottenuto.
- Se tiriamo un ensemble di N dadi sufficientemente grande, allora $NP(n)$ daranno il risultato n .

Diversamente dalla descrizione quantistica però:

- Data posizione, velocità, momento angolare, ecc..., allora è possibile dedurre il risultato in principio.
- Se otteniamo il risultato n allora possiamo assumere che n fosse sempre stato sotto la tazza, anche prima della misura.

4.2.3 Valore di aspettazione

Dato un grosso ensemble di N particelle in uno stato $|\Psi\rangle$ se vogliamo sapere soltanto il valore medio che assumeranno le particelle non c'è bisogno di calcolare gli autovalori, è sufficiente calcolare il valore di aspettazione (la media) $\langle\Omega\rangle$

$$\begin{aligned}\langle\Omega\rangle &= \sum_i P(\omega_i) \omega_i = \sum_i |\langle\omega_i | \Psi\rangle|^2 \omega_i \\ &= \sum_i \langle\Psi | \omega_i\rangle \langle\omega_i | \Psi\rangle \omega_i = \langle\Psi | \Omega | \Psi\rangle.\end{aligned}$$

Questo facilita il lavoro perché è sufficiente conoscere lo stato e l'operatore Ω . Se abbiamo solo una particella, allora il valore di aspettazione corrisponde a uno degli autovalori, ma se abbiamo un grosso ensemble, allora il risultato potrebbe essere diverso da uno degli autovalori e quindi non essere un risultato possibile per una singola particella.

4.2.4 Incertezza

Dato un sistema descritto probabilisticamente, una quantità molto utile è la deviazione standard. Essa è definita come

$$\Delta\Omega = \langle (\Omega - \langle\Omega\rangle)^2 \rangle^{1/2} = \left[\langle \Psi | (\Omega - \langle\Omega\rangle)^2 | \Psi \rangle \right]^{1/2} = \langle \Omega^2 \rangle - \langle \Omega \rangle^2$$

notiamo come anche in questo caso abbiamo solo bisogno dello stato e dell'operatore. In meccanica quantistica viene semplicemente chiamata l'incertezza di Ω . Se Ω ha uno spettro discreto, allora

$$(\Delta\Omega)^2 = \sum_i P(\omega_i) (\omega_i - \langle\Omega\rangle)^2,$$

mentre se ha uno spettro continuo abbiamo

$$(\Delta\Omega)^2 = \int P(\omega) (\omega - \langle\Omega\rangle)^2 d\omega.$$

4.2.5 Variabili compatibili e incompatibili

Data una particella in uno stato $|\Psi\rangle$ non si può assegnare a priori, in generale, un valore definito ad una variabile dinamica Ω . Un'eccezione a questa regola sono gli stati $\psi = \sum_a |\omega_a\rangle \langle\omega_a|\psi\rangle \equiv |\omega\rangle$, ovvero gli stati corrispondenti ad un autostato (dunque non abbiamo degenerazione dell'autovalore) e tutte le $|\omega_a\rangle \langle\omega_a|$ sono zero con l'esclusione di una. Un esempio è quando prepariamo un ensemble in uno stato e poi andiamo a misurarlo.

Proviamo ad estendere questa idea a più di una variabile (guarderemo il caso di due variabili, la generalizzazione a più variabili è banale). Fare due misure in successione è generalmente inutile, infatti una misurazione cambia lo stato della particella; di conseguenza, fatta una prima misura, la seconda cambierà l'effettivo valore della prima. Un'eccezione è data quando $|\omega\rangle$ (stato della particella dopo la prima misurazione) è un autostato anche di Λ (operatore della seconda misura), in questo caso la seconda misurazione non cambia il valore della prima. Avere un autovettore comune per due operatori significa avere un autovettore che soddisfa simultaneamente le equazioni secolari con un autovalore $\omega\lambda$. La condizione necessaria (ma non sufficiente), affinché questo autovalore possa esistere, è che $[\Omega, \Lambda]$ commutino. In questo caso le due misurazioni sono dette compatibili ed è possibile trovare una base completa di autovettori simultanei. Se i due operatori non commutano, allora non è possibile effettuare due misure successive, un esempio è proprio il principio di indeterminazione di Heisenberg che dice che non si possono sapere accuratamente posizione e momento nello stesso istante, infatti

$$[X, P] = i\hbar.$$

Vediamo adesso, nel caso di misure compatibili, quale è la probabilità di ottenere un autostato $|\omega\lambda\rangle$ prima di fare misure. Nel caso di non degenerazione abbiamo che la probabilità di ottenere la misura $\omega\lambda$ è

$$P(\omega, \lambda) = |\langle\omega\lambda | \Psi\rangle|^2 = P(\lambda, \omega).$$

Infatti, fatta la prima misura e ottenuto ω , la misura Λ darà sicuramente λ e viceversa.

Nel caso di degenerazione di un autovalore, l'autovalore rimane lo stesso dopo la seconda misurazione, ma l'autovettore in generale sarà uno di quelli dell'autospazio. Supponiamo di avere l'autospazio dato da $\lambda_1 = \lambda_2$, allora misurata Ω che ci dà ω , la probabilità di ottenere λ alla seconda misurazione è unitaria,

$$P(\omega, \lambda) = |\langle\omega\lambda | \Psi\rangle|^2 \cdot 1 = |\langle\omega\lambda | \Psi\rangle|^2 = \beta^2.$$

Invertiamo l'ordine delle misurazioni, ottenendo λ lo stato del vettore collasserà in $|\Psi'\rangle$ (la proiezione di $|\Psi\rangle$ sull'autospazio di λ), quindi

$$|\Psi'\rangle = \frac{\mathbb{P}_\lambda |\Psi\rangle}{|\langle\mathbb{P}_\lambda \Psi | \mathbb{P}_\lambda \Psi\rangle|^{1/2}} = \frac{\beta |\omega\lambda\rangle + \gamma |\omega_2\lambda\rangle}{(\beta^2 + \gamma^2)^{1/2}}$$

la probabilità è dunque $P(\lambda) = \beta^2 + \gamma^2$. Misuriamo adesso Ω , la probabilità di ottenere ω è

$$P(\lambda, \omega) = (\beta^2 + \gamma^2) \cdot \frac{\beta^2}{\beta^2 + \gamma^2} = \beta^2 = P(\omega, \lambda).$$

Quindi è la stessa ma questa volta la seconda misurazione cambia lo stato della particella. Questo è il motivo per cui la condizione era necessaria ma non sufficiente, in generale la compatibilità implica l'invarianza sotto seconda misurazione del primo autovalore ma non del suo autovettore.

4.2.6 La matrice densità

Fin'ora sono stati considerati ensemble di N sistemi nello stesso stato $|\Psi\rangle$, vediamo adesso se questi hanno uno stato generalmente diverso $|i\rangle$. Il modo più conveniente per raggruppare tutta l'informazione è attraverso la matrice densità

$$\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|$$

dove $p_i = n_i/N$ è la probabilità che un sistema nello stato $|i\rangle$ sia scelto casualmente tra quelli dell'ensemble.

Gli ensemble studiati fin'ora sono detti puri e hanno $p=0$ per tutti gli stati eccetto uno. Consideriamo ora l'ensemble medio di Ω

$$\langle \bar{\Omega} \rangle = \sum_i p_i \langle i | \Omega | i \rangle$$

dove la barra su Ω indica che è stata fatta la media quantistica $\langle i | \Omega | i \rangle$ e quella classica (sommatoria pesata dalla probabilità). Si può dimostrare che

$$\text{Tr}(\Omega \rho) = \langle \bar{\Omega} \rangle.$$

La matrice densità contiene tutte le informazioni statistiche dell'ensemble, supponiamo per esempio di volere la probabilità di ottenere un particolare valore ω facendo una misura sull'ensemble, allora la probabilità di ottenere proprio quel valore è pari alla media delle probabilità di ogni sistema. Abbiamo visto che per un puro ensemble

$$P(\omega) = \langle \mathbb{P}_\omega \rangle,$$

dunque se combinato con Eq. 4.30 ci da

$$\overline{P(\omega)} = \text{Tr}(\mathbb{P}_\omega \rho).$$

Si possono anche dimostrare le seguenti proprietà della matrice densità:

- $\rho^\dagger = \rho$;
- $\text{Tr} \rho = 1$;
- $\rho^2 = \rho$ per un ensemble puro;
- $\rho = (1/k)I$ per un ensemble in cui gli stati sono distribuiti uniformemente;
- $\text{Tr} \rho^2 \leq 1$ che diventa un'eguaglianza nel caso di ensemble puro.

4.2.7 Generalizzazione a più gradi di libertà

Fin ora abbiamo sempre considerato un solo grado di libertà. Passando a più gradi di libertà, l'unico a variare tra i postulati è il secondo:

Postulato II. Corrispondentemente alle N coordinate cartesiane x_1, \dots, x_N che descrivono il sistema classico, esistono nella teoria quantistica N operatori X_1, \dots, X_N che commutano tra di loro. Nella autobase simultanea $|x_1, x_2, \dots, x_N\rangle$ di questi operatori, chiamata base delle coordinate e normalizzata come

$$\langle x_1, x_2, \dots, x_N | x'_1, x'_2, \dots, x'_N \rangle = \delta(x_1 - x'_1) \dots \delta(x_N - x'_N)$$

(il prodotto di funzioni delta non si annulla a meno che tutti gli argomenti siano nulli), abbiamo:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\rightarrow \langle x_1, \dots, x_N | \psi \rangle = \psi(x_1, \dots, x_N) \\ X_i |\psi\rangle &\rightarrow \langle x_1, \dots, x_N | X_i | \psi \rangle = x_i \psi(x_1, \dots, x_N) \\ P_i |\psi\rangle &\rightarrow \langle x_1, \dots, x_N | P_i | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(x_1, \dots, x_N) \end{aligned}$$

dove P_i è l'operatore del momento corrispondente al momento classico p_i . Le variabili dinamiche dipendenti $\omega(x_i, p_j)$ sono rappresentate dagli operatori $\Omega = \omega(x_i \rightarrow X_i, p_j \rightarrow P_j)$.

4.3 L'equazione di Shrödinger

Il postulato IV ci dice come uno stato evolva nel tempo, ovvero obbedendo all'equazione di Shrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle.$$

4.3.1 Costruzione dell'hamiltoniana

La costruzione dell'hamiltoniana quantistica è molto semplice, è sufficiente prendere l'hamiltoniana classica dello stesso problema e sostituire x e p con gli operatori X e P dello stesso problema. È bene ricordarsi che spesso gli operatori non commutano, ad esempio nel caso di una carica in un campo elettromagnetico l'hamiltoniana classica è

$$\mathcal{H} = \frac{|\mathbf{p} - (q/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2}{2m} + q\phi(\mathbf{r}, t)$$

risolvendo il quadrato del binomio dobbiamo tenere conto del fatto che \mathbf{A} è dipendente della posizione e quindi non commuta con \mathbf{P} , dunque l'hamiltoniana quantistica è

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} \cdot \mathbf{P} - \frac{q}{c} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \frac{q^2}{c^2} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A} \right) + q\phi$$

4.3.2 Approccio generale alla soluzione

Vediamo prima il caso in cui non c'è dipendenza esplicita dal tempo, allora

$$i\hbar|\dot{\Psi}\rangle = H|\Psi\rangle.$$

A questo punto troviamo gli autovettori e autovalori di H e costruiamo il propagatore $U(t)$, di modo che

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle,$$

non è necessario fare assunzioni su $|\Psi(0)\rangle$ poiché l'equazione di Shrodinger è di primo ordine rispetto al tempo (dunque $|\Psi(0)\rangle$ è sufficiente per risolverla). Proviamo a costruire il propagatore in termini di $|E\rangle$, ovvero gli autovettori di H normalizzati

$$H|E\rangle = E|E\rangle;$$

questa è detta equazione di Shrödinger indipendente dal tempo. Assumiamo di aver trovato gli autovettori e espandiamo $|\Psi\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum |E\rangle \langle E | \Psi(t) \rangle \equiv \sum a_E(t) |E\rangle$$

da cui si ricava

$$i\hbar \dot{a}_E = E a_E,$$

di soluzione

$$a_E(t) = a_E(0) e^{-iEt/\hbar}.$$

Segue

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_E |E\rangle \langle E | \Psi(0) \rangle e^{-iEt/\hbar}$$

da cui estraiamo il propagatore

$$U(t) = \sum_E |E\rangle \langle E | e^{-iEt/\hbar}.$$

La trattazione ha assunto che lo spettro di autovalori dell'energia fosse discreto e non degenerare, se così non fosse possiamo sostituire le sommatorie con integrali per il continuo e specificare il vettore dell'autospazio nel degenerare.

I modi normali

$$|E(t)\rangle = |E\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

sono anche chiamati stati stazionari, questo perché la distribuzione di probabilità su tali stati è indipendente dal tempo:

$$P(\omega, t) = P(\omega, 0).$$

Esiste un'altra espressione per $U(t)$ ed è

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar}.$$

L'operatore H (l'operatore dell'energia) è hermitiano, segue che $U(t)$ è unitario (la norma è invariante). Questo vuol dire che possiamo vedere l'evoluzione nel tempo di uno stato come una rotazione in uno spazio di Hilbert (interpretazione di Shrödinger). Possiamo anche prendere una base che ruota alla

stessa velocità dei vettori di stato, allora gli stati sembreranno non evolvere nel tempo (interpretazione di Heisenberg).

Consideriamo adesso il caso in cui H sia dipendente esplicitamente dal tempo. Non esiste una strategia generale per questi problemi, in futuro vedremo un caso e faremo uso dell'approssimazione

$$H(t) = H^0 + H^1(t)$$

dove H^0 è la parte grossa di H ed è indipendente dal tempo, mentre $H^1(t)$ è una parte piccola di H che è dipendente dal tempo. Vediamo quanto vale $U(t)$ nel caso dipendente dal tempo. Suddividiamo l'intervallo $[0, t]$ in $N-1$ parti uguali $\Delta = t/N$, in questo modo possiamo usare Taylor ottenendo

$$|\Psi(\Delta)\rangle = \exp\left[\frac{-i\Delta}{\hbar}H(0)\right]|\Psi(0)\rangle.$$

Mettendo insieme tutti i pezzettini uno per volta

$$|\Psi(t)\rangle = \prod_{n=0}^{N-1} e^{-i\Delta H(n\Delta)/\hbar} |\Psi(0)\rangle.$$

È bene ricordare che non possiamo metterli tutti assieme nel limite $N \rightarrow \infty$ come

$$U(t) = \exp\left[-(i/\hbar) \int_0^t H(t') dt'\right]$$

perché potremmo incontrare dei casi in cui l'hamiltoniana H non commuta con se stessa

$$[H(t_1), H(t_2)] \neq 0.$$

In questi casi si usa la seguente simbologia

$$T\left\{\exp\left[-(i/\hbar) \int_0^t H(t') dt'\right]\right\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=0}^{N-1} \exp[-(i/\hbar)H(n\Delta)\Delta],$$

chiamata integrale ordinato nel tempo.

Che H sia dipendente o meno dal tempo, queste sono sempre vere

$$U(t_3, t_2)U(t_2, t_1) = U(t_3, t_1)$$

$$U^\dagger(t_2, t_1) = U^{-1}(t_2, t_1) = U(t_1, t_2).$$

4.3.3 Scelta di una base per la risoluzione dell'equazione di Shrodinger

Da un punto di vista matematico tutte le basi sono uguali. Dal punto di vista della risoluzione però abbiamo delle basi preferite che ci rendono la vita più facile. Essendo $H(X, P)$ dipendente da X e da P sono proprio queste le due basi più usate e generalmente ci si basa sulla forma del potenziale, se ha termini x con grado più basso rispetto ad x è preferibile usare la base p , altrimenti x .

Capitolo 5

Problemi semplici in una dimensione

5.1 La particella libera

Il problema più semplice possibile è una particella che si muove in una dimensione. L'equazione di Shrodinger è

$$i\hbar|\dot{\Psi}\rangle = H|\Psi\rangle = \frac{P^2}{2m}|\Psi\rangle,$$

inserendo in essa i modi normali $|\Psi\rangle = |E\rangle e^{-iEt/\hbar}$, otteniamo

$$H|E\rangle = \frac{P^2}{2m}|E\rangle = E|E\rangle.$$

Possiamo risolvere questo problema senza troppi calcoli andando nella base degli impulsi. Notiamo che P ed E sono due stati compatibili ($[P, P^2] = 0$), questo significa che la misura di uno dà in automatico il valore dell'altra, allora osservando che gli autostati di P sono autostati di P^2 possiamo usare $|p\rangle$ come autovettore di $|E\rangle$

$$\frac{P^2}{2m}|p\rangle = E|p\rangle \rightarrow \left(\frac{p^2}{2m} - E\right)|p\rangle = 0$$

$|p\rangle$ non è nullo, dunque

$$p = \pm(2mE)^{1/2}.$$

Abbiamo quindi due autostati ortogonali per ogni autovalore di E ,

$$|E, +\rangle = |p = (2mE)^{1/2}\rangle$$

$$|E, -\rangle = |p = -(2mE)^{1/2}\rangle$$

gli autovalori di E corrispondono a uno autospazio di due dimensioni generato dai vettori qua sopra. Fisicamente questo significa che la particella di energia E può muoversi a destra a sinistra con un momento p ma anche che può muoversi a destra e a sinistra in contemporanea

$$|E\rangle = \beta |p = (2mE)^{1/2}\rangle + \gamma |p = -(2mE)^{1/2}\rangle$$

La base completa ortonormale di H è data da $|E, +\rangle$ e $|E, -\rangle$. Il propagatore è

$$\begin{aligned} U(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle\langle p| e^{-iE(p)t/\hbar} dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle\langle p| e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp \end{aligned}$$

che in base X diventa

$$\begin{aligned} U(x, t; x') &\equiv \langle x|U(t)|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|p\rangle\langle p|x'\rangle e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(x-x')/\hbar} \cdot e^{-ip^2 t/2m\hbar} dp \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar it}\right)^{1/2} e^{im(x-x')^2/2\hbar t}, \end{aligned}$$

dove ricordiamo $\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$, segue che $\langle x|p\rangle\langle p|x'\rangle$ equivale a fare una trasformata di Fourier. Il propagatore in base X è la probabilità che una particella che parta da (x', t') arrivi in (x, t) . Il propagatore può essere più facilmente usato per funzioni nella forma

$$\Psi(x, t) = \int U(x, t; x', t') \Psi(x', t') dx'$$

Potevamo raggiungere lo stesso risultato andando in base X. Avremmo trovato

$$\nabla^2 \psi_E(\mathbf{x}) + \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \right)^2 \psi_E(\mathbf{x}) = \nabla^2 \psi_E(\mathbf{x}) + k^2 \psi_E(\mathbf{x}) = 0,$$

da cui

$$\psi_E(\mathbf{x}, t) = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right).$$

5.1.1 Evoluzione temporale del pacchetto gaussiano

Per tradizione al seguito della scrittura del propagatore della particella libera, viene scritta la sua applicazione al pacchetto gaussiano. Consideriamo il pacchetto d'onda la cui funzione d'onda iniziale è

$$\Psi(x', 0) = e^{ip_0 x'/\hbar} \frac{e^{-x'^2/2\Delta^2}}{(\pi\Delta^2)^{1/4}}$$

Questo pacchetto ha una posizione media iniziale $\langle X \rangle = 0$ e un'incertezza $\Delta X = \Delta/2^{1/2}$, e un momento medio iniziale p_0 con un'incertezza $\hbar/2^{1/2}\Delta$. Usando Eq. (5.1) otteniamo

$$\Psi(x, t) = \left[\pi^{1/2} \left(\Delta + \frac{i\hbar t}{m\Delta} \right) \right]^{-1/2} \cdot \exp \left[\frac{-(x - p_0 t/m)^2}{2\Delta^2 (1 + i\hbar t/m\Delta^2)} \right] \cdot \exp \left[\frac{ip_0}{\hbar} \left(x - \frac{p_0 t}{m} \right) \right]$$

che corrisponde alla probabilità di densità

$$P(x, t) = \frac{1}{\pi^{1/2} (\Delta^2 + \hbar^2 t^2/m^2 \Delta^2)^{1/2}} \cdot \exp \left\{ \frac{-[x - (p_0/m)t]^2}{\Delta^2 + \hbar^2 t^2/m^2 \Delta^2} \right\}.$$

La posizione media evolve come

$$\langle X \rangle = \frac{p_0 t}{m} = \frac{\langle P \rangle t}{m},$$

osserviamo che è la stessa del caso classico (conseguenza del teorema di Ehrenfest che studieremo nel prossimo capitolo); la larghezza invece

$$\Delta X(t) = \frac{\Delta(t)}{2^{1/2}} = \frac{\Delta}{2^{1/2}} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \Delta^4} \right)^{1/2}.$$

La crescente incertezza della posizione è una riflessione dell'incertezza sulla posizione iniziale.

5.1.2 Alcune caratteristiche generali delle autofunzioni dell'energia

Consideriamo le autofunzioni dell'energia in un potenziale $V(x)$, queste obbediscono

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

dove l'apostrofo denota la derivata spaziale. In un certo punto x_0 abbiamo $\Psi(x_0)$ e $\Psi'(x_0)$, se pretendiamo che x_0 sia il tempo e Ψ la coordinata, allora la ricerca di Ψ è come la ricerca della traiettoria di una particella data la sua posizione e la sua velocità ad un certo momento e la sua accelerazione in funzione di tempo e posizione. Otterremo allora che Ψ' e Ψ sono continue indipendentemente da come varia Ψ'' , quindi la variazione di energia è sempre continua.

5.2 La particella in una scatola

Consideriamo una particella libera di muoversi in un tubo (scatola monodimensionale) di lunghezza L , dunque impostando il sistema di riferimento con $x = 0$ al centro del tubo abbiamo $V(x) = 0$, $|x| < L/2$ e $V(x) = \infty$, $|x| \geq L/2$. L'equazione degli autovalori in base X ci da

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi = 0,$$

la mossa più conveniente è separare il tubo in 3 regioni in base al valore di V e per semplificare ancora supponiamo che fuori dal tubo (zona I e III) $V = V_0$. Risolviamo zona III (uguale a I)

$$\frac{d^2\Psi_{III}}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\Psi_{III} = 0 \rightarrow \Psi_{III} = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$$

dove $\kappa = [2m(V_0 - E)/\hbar^2]^{1/2}$ e $B=0$ perché siamo in uno spazio di Hilbert. Se riprendiamo ora $V_0 = \infty$ otteniamo

$$\Psi_I = \Psi_{III} \equiv 0$$

Se invece prendiamo II, allora $V=0$ e riabbiamo le soluzioni della particella libera (generalmente qui $B \neq 0$ perché $x \rightarrow \infty$)

$$\Psi_{II} = A \exp\left[i\left(2mE/\hbar^2\right)^{1/2} x\right] + B \exp\left[-i\left(2mE/\hbar^2\right)^{1/2} x\right]$$

Dobbiamo richiedere adesso che Ψ_{II} sia continuo al limite. Dopo qualche calcolo che non riporto, questa richiesta ci porta a dei valori quantizzati dell'energia

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}.$$

Questa quantizzazione dell'energia è dovuta al fatto che abbiamo imposto 4 restrizioni mentre avevamo solo 3 parametri liberi ed è una caratteristica comune degli stati legati, ovvero gli stati in cui il potenziale impedisce ad una particella di scappare all'infinito.

Vediamo anche che l'energia più bassa possibile non è zero. Nella zona II abbiamo

$$H = \frac{P^2}{2m} \rightarrow \langle H \rangle = \frac{\langle P^2 \rangle}{2m},$$

inoltre essendo questo uno stato legato $\langle P \rangle = 0$ con una certa deviazione standard associata ΔP . Riscriviamo quindi la precedente equazione come

$$\langle H \rangle = \frac{\langle (P - \langle P \rangle)^2 \rangle}{2m} = \frac{(\Delta P)^2}{2m},$$

dal principio di indeterminazione $\Delta P \cdot \Delta X \geq \hbar/2$, dunque

$$\langle H \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta X)^2}$$

con ΔX che non può superare $L/2$. Infine abbiamo

$$\langle H \rangle = E \geq \hbar^2/2mL^2.$$

Questo significa che E_{min} non è 0 e lo stato base dell'energia E_1 è π^2 più grande.

Finiamo il lo studio della particella in una scatola con il calcolo del propagatore in base X

$$\begin{aligned} \langle x|U(t)|x' \rangle &= U(x, t; x') \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n(x) \Psi_n^*(x') \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}\right) t\right]. \end{aligned}$$

5.3 L'equazione di continuità per la probabilità

Interrompiamo la discussione su sistemi monodimensionali per studiare il concetto di densità di corrente di probabilità e la sua equazione di continuità. Come suggerisce il nome, questo concetto è l'analogo della conservazione globale della carica e l'equazione di continuità dell'elettromagnetismo.

In meccanica quantistica la quantità che si conserva globalmente è la probabilità totale di trovare una particella in uno spazio qualsiasi dell'universo. Osserviamo che

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(0) | U^\dagger(t) U(t) | \Psi(0) \rangle = \langle \Psi(0) | \Psi(0) \rangle$$

implica

$$\text{costante} = \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \iiint P(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r},$$

dunque la probabilità su tutto lo spazio è conservata ed indipendente dal tempo. ciò non significa che non possa cambiare in certe zone dello spazio, per vedere il suo fluire usiamo l'equazione di Shrodinger e la sua coniugata

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi \\ -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + V\Psi^*. \end{aligned}$$

Moltiplichiamo la prima per Ψ^* e la seconda per Ψ e poi sottraiamo una a l'altra, otterremo

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= -\nabla \cdot \mathbf{j} \end{aligned}$$

dove

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

è la densità di corrente di probabilità.

5.4 Il problema del potenziale a scalino, un problema di scattering

Considera un potenziale a scalino

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \quad x < 0 \quad (\text{regione I}) \\ &= V_0 \quad x > 0 \quad (\text{regione II}) \end{aligned}$$

Considera ora una particella classica che viene sparata dalla sinistra contro lo scalino. Classicamente ci aspettiamo che se $E > V_0$ la particella passerà oltre lo scalino, se $E < V_0$ la particella verrà respinta. Vediamo ora cosa succede quantisticamente.

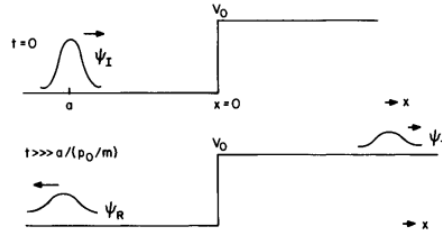
Sostituiamo la particella con un pacchetto d'onda che supponiamo gaussiano per semplicità. Il pacchetto d'onda gaussiano centrato in a è

$$\psi_I(x, 0) = \psi_I(x) = (\pi\Delta^2)^{-1/4} e^{ik_0(x+a)} e^{-(x+a)^2/2\Delta^2}$$

Questo pacchetto ha un momento medio $p_0 = \hbar k_0$ e una posizione media $\langle X \rangle = -a$ che supponiamo lontana dal gradino; le incertezze sono

$$\Delta X = \frac{\Delta}{2^{1/2}}, \quad \Delta P = \frac{\hbar}{2^{1/2}\Delta}.$$

Ci interessiamo al caso in cui il momento $\hbar k_0$ è ben definito (abbiamo quindi $E_0 \simeq a[p_0/m]^{-1}$), e quindi Δ è molto grande. Consideriamo il caso in cui $E_0 > V_0$. Dopo un tempo $t \simeq a[p_0/m]^{-1}$ il pacchetto colpirà il gradino e in generale si romperà in due pacchetti: il pacchetto riflesso ψ_R e quello trasmesso ψ_T .



Passato un tempo sufficiente (di modo che gran parte dell'onda abbia urtato lo scalino) Avremo che l'area sotto $|\psi_R|^2$ è rappresenta la probabilità che il pacchetto sia riflesso, mentre $|\psi_T|^2$ è la probabilità che questo sia trasmesso (nel caso classico questa sarebbe 0). Definiamo così il coefficiente di riflessione

$$R = \int |\psi_R|^2 dx, \quad t \rightarrow \infty$$

e quello di trasmissione

$$T = \int |\psi_T|^2 dx, \quad t \rightarrow \infty,$$

inoltre per l'equazione di continuità della probabilità $R + T = 1$. In generale R e T dipendono dalla forma della funzione d'onda, ma nel limite in cui il momento iniziale è ben definito (e quindi l'onda nello spazio delle X ha una larghezza infinita) questa dipendenza viene a mancare.

Per capire cosa succede alla funzione d'onda successivamente all'urto procediamo come segue (4 passi):

Passo 1. Ricerca della autofunzione normalizzata $\psi_E(x)$. Nella regione I la soluzione è la solita di sempre

$$\psi_E(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \quad k_1 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2},$$

mentre nella regione II sostituiamo E con $E - V_0$

$$\psi_E(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, \quad k_2 = \left[\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \right]^{1/2},$$

inoltre poniamo $D = 0$ perché a destra va solo l'onda trasmessa. Imponiamo ora le condizioni di continuità di ψ e ψ' allo scalino, ottenendo

$$\begin{aligned} A + B &= C \\ ik_1(A - B) &= ik_2C. \end{aligned}$$

Riscrivendo le costanti in termini di A possiamo scrivere la soluzione con energia E

$$\psi_E(x) = A \left[\left(e^{ik_1x} + \frac{B}{A} e^{-ik_1x} \right) \theta(-x) + \frac{C}{A} e^{ik_2x} \theta(x) \right],$$

dove $\theta(x)$ è la funzione gradino. Per semplicità possiamo scrivere tutto in termini di $k_1 = + (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ anziché E e k_2 in termini di k_1 :

$$\psi_{k_1}(x) = A \left[\left(\exp(ik_1x) + \frac{B}{A} \exp(-ik_1x) \right) \theta(-x) + \frac{C}{A} \exp \left[i \left(k_1^2 - 2mV_0/\hbar^2 \right)^{1/2} x \right] \theta(x) \right].$$

Infine poniamo $A = (2\pi)^{-1/2}$ in modo da normalizzare ψ_k .

Passo 2. Proiezione di ψ_{k_1} su ψ_I . Il prodotto scalare è

$$\begin{aligned} a(k_1) &= \langle \psi_{k_1} | \psi_I \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-ik_1x} + \left(\frac{B}{A} \right)^* e^{ik_1x} \right] \theta(-x) \psi_I(x) dx \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{C}{A} \right)^* e^{-ik_2x} \theta(x) \psi_I(x) dx \right\}, \end{aligned}$$

dove secondo integrale e il secondo termine del primo sono nulli. Abbiamo allora

$$\begin{aligned} a(k_1) &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_1 x} \psi_I(x) dx \\ &= \left(\frac{\Delta^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-(k_1-k_0)^2 \Delta^2/2} e^{ik_1 a} \end{aligned}$$

che è la trasformata di Fourier di ψ_I . Osserviamo che per ampie Δ anche la proiezione è molto piccata a $k_1 = k_0$.

Passo 3. Ricerca dell'evoluzione temporale. Dobbiamo propagare la proiezione $a(E)$, quindi

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k_1) e^{-iE(k_1)t/\hbar} \psi_{k_1}(x) dk_1,$$

che possiamo riscrivere come

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\Delta^2}{4\pi^3}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{-i\hbar k_1^2 t}{2m}\right) \cdot \exp\left[\frac{-(k_1-k_0)^2 \Delta^2}{2}\right] \exp(ik_1 a) \\ &\times \left\{ e^{ik_1 x} \theta(-x) + \left(\frac{B}{A}\right) e^{-ik_1 x} \theta(-x) \right. \\ &\left. + \left(\frac{C}{A}\right) \exp\left[i\left(k_1^2 - 2mV_0/\hbar^2\right)x\right] \theta(x) \right\} dk_1. \end{aligned}$$

Passo 4. Ricerca di R e T . Osserviamo che se non avessimo i termini $\theta(-x)$ allora staremmo propagando la gaussiana iniziale, allora il primo termine può essere scritto come

$$\theta(-x) G(-a, k_0, t),$$

dove G è la gaussiana e moltiplicata per $\theta(-x)$ svanisce a $x > 0$. Questo è intuibile, infatti ci aspettiamo che urtato lo scalino l'onda si divida in riflessa e trasmessa. Se invece sostituiamo B/A con $(B/A)_0$ (il valore del rapporto a $k_1 = k_0$), allora otteniamo la propagazione libera del pacchetto d'onda gaussiano a meno di un fattore $(B/A)_0$ $\psi_R = \theta(-x) G(a, -k_0, t) (B/A)_0$. Questo è giustificabile dato che $a(k_1)$ è piccatissima a $k_1 = k_0$. Inoltre per $t \rightarrow \infty$ possiamo sostituire $\theta(-x)$ con 1. Dato che G è normalizzato otteniamo

$$R = \int |\psi_R|^2 dx = \left|\frac{B}{A}\right|_0^2 = \left|\frac{E_0^{1/2} - (E_0 - V_0)^{1/2}}{E_0^{1/2} + (E_0 - V_0)^{1/2}}\right|^2.$$

Questa formula è esatta quando l'onda ha un'energia E_0 ben definita, ma è comunque un'ottima approssimazione per ogni pacchetto d'onda abbastanza piccato nello spazio dei momenti. Abbiamo trovato R , ora per trovare T possiamo fare lo stesso ragionamento per il terzo pezzo, oppure più semplicemente usare $R + T = 1$ e ottenere

$$T = 1 - R = \frac{4E_0^{1/2}(E_0 - V_0)^{1/2}}{\left[E_0^{1/2} + (E_0 - V_0)^{1/2}\right]^2} = \left|\frac{C}{A}\right|_0^2 \frac{(E_0 - V_0)^{1/2}}{E_0^{1/2}}$$

Ci chiediamo adesso se era possibile trovare i due coefficienti in modo diverso a partire da $\psi_E(x)$ normalizzato. Un altro metodo infatti è considerare che l'onda piana incidente $Ae^{ik_0 x}$ ha una corrente di probabilità

$$j_I = |A_0|^2 \frac{\hbar k_0}{m},$$

mentre quella riflessa ha

$$j_R = |B_0|^2 \frac{\hbar k_0}{m}$$

e quella trasmessa

$$j_T = |C_0|^2 \frac{\hbar(k_0^2 - 2mV_0/\hbar^2)^{1/2}}{m}.$$

In termini di correnti

$$R = \frac{j_R}{j_I} = \left|\frac{B_0}{A_0}\right|^2$$

e

$$T = \frac{j_T}{j_I} = \left| \frac{C_0}{A_0} \right|^2 \frac{(k_0^2 - 2mV_0/\hbar^2)^{1/2}}{k_0} = \left| \frac{C_0}{A_0} \right|^2 \frac{(E_0 - V_0)^{1/2}}{E_0^{1/2}}$$

Perché è valido anche questo secondo metodo? Ricordiamo che la larghezza della gaussiana tende ad infinito, allora mano a mano che la gaussiana viene presa più grande:

- Diventa impossibile dire quando viene colpito lo scalino;
- Anche il pacchetto riflesso ha larghezza infinita e inoltre questo coesiste con quello incidente;
- L'onda trasmessa diventa un'onda piana con numero d'onda $(k_0^2 - 2mV_0/\hbar^2)$ nella regione II.

In altre parole non sapendo quando lo scalino viene colpito, anziché avere un processo dinamico che cambia nel tempo abbiamo un processo statico descritto da

$$\psi_{k_0}(x) = [A_0 \exp(ik_0x) + B_0 \exp(-ik_0x)]\theta(-x) + C_0 \exp\left[i\left(k_0^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^{1/2} x\right]\theta(x)$$

A questo punto poi le aree sotto i pacchetti gaussiani sono infiniti, quindi non possiamo calcolare R e T usando il primo metodo.

Un fenomeno interessante è quello di quantum tunneling. Se classicamente abbiamo $E_0 < V_0$, allora sicuramente la particella viene riflessa. Quantisticamente invece esiste una probabilità esponenzialmente piccola che il pacchetto d'onda si trasmetta oltre la barriera di potenziale.

5.5 Esperimento di Young

In questa sezione viene rivisto l'esperimento a doppia fenditura con le conoscenze che abbiamo acquisito di meccanica quantistica. Non viene detto nulla di nuovo.

5.6 Alcuni teoremi

Vediamo due teoremi di cui non riportiamo la dimostrazione:

- Non c'è degenerazione degli autostati quando abbiamo uno stato legato unidimensionale;
- Le autofunzioni di H possono sempre essere scelte reali nella base delle coordinate (spaziali).

Capitolo 6

Il limite classico

Quando applicata a sistemi macroscopici, la meccanica quantistica deve poter riprodurre gli effetti della meccanica classica. In questo capitolo vedremo come ricavare alcune equazioni caratteristiche della meccanica classica applicando le regole della quantistica sulla media di sistemi molto grandi.

Cominciamo molto generalmente prendendo la media di un'osservabile, allora

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\Omega\rangle &= \frac{d}{dt}\langle\Psi|\Omega|\Psi\rangle \\ &= \langle\dot{\Psi}|\Omega|\Psi\rangle + \langle\Psi|\Omega|\dot{\Psi}\rangle + \langle\Psi|\dot{\Omega}|\Psi\rangle.\end{aligned}$$

Assumiamo che quest'osservabile non sia dipendente esplicitamente dal tempo, dunque $\langle\Psi|\dot{\Omega}|\Psi\rangle = 0$. Adesso prendiamo l'equazione di Shrodinger (ci da $|\dot{\Psi}\rangle$) e la sua aggiunta (ci da $\langle\dot{\Psi}|$) e sostituiamoli in Eq. (6.1), otterremo

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\Omega\rangle &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\langle\Psi|[\Omega, H]|\Psi\rangle \\ &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\langle[\Omega, H]\rangle\end{aligned}$$

che si chiama teorema di Ehrenfest. Osserviamo come la struttura di un'osservabile che evolve nel tempo sia simile a quella di una grandezza in meccanica classica

$$\frac{d\omega}{dt} = \{\omega, \mathcal{H}\}.$$

Continuiamo cercando due equazioni tipiche della meccanica hamiltoniana. Per fare questo usiamo come osservabile la posizione ($\Omega = X$) e prendiamo come hamiltoniana $H = \frac{p^2}{2m} + V(X)$, otterremo

$$\langle\dot{X}\rangle = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\langle[X, P^2/2m]\rangle.$$

Nel capitolo 1 abbiamo visto che

$$\begin{aligned}[X, P^2] &= P[X, P] + [X, P]P \\ &= 2i\hbar P,\end{aligned}$$

dunque

$$\langle\dot{X}\rangle = \frac{\langle P \rangle}{m}.$$

Questa equazione è molto simile a $\dot{x} = p/m$ e possiamo riscriverla anche come

$$\langle\dot{X}\rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial P} \right\rangle.$$

Prendiamo adesso come osservabile P , allora

$$\begin{aligned}\langle\dot{P}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[P, H]\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\langle[P, V(X)]\rangle\end{aligned}$$

Cerchiamo di capire quanto vale quel commutatore, andiamo dunque in base X

$$P \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx} \quad \text{and} \quad V(X) \rightarrow V(x).$$

Per ogni $\Psi(x)$

$$\left[-i\hbar \frac{d}{dx}, V(x) \right] \Psi(x) = -i\hbar \frac{dV}{dx} \Psi(x),$$

dunque

$$[P, V(X)] = -i\hbar \frac{dV}{dX}$$

da cui

$$\langle \dot{P} \rangle = \left\langle -\frac{\partial H}{\partial X} \right\rangle$$

Vediamo adesso un esempio di come le equazioni della meccanica quantistica, riproducano le equazioni di Hamilton per oggetti macroscopici (di massa per esempio 1[g]). Consideriamo uno stato iniziale che sia simile a quelli tipici della meccanica classica (posizione e momento ben definiti), chiamiamolo $|x_0 p_0 \Delta\rangle$ con $\langle X \rangle = x_0$ e $\langle P \rangle = p_0$, con incertezze $\Delta X = \Delta$ e $\Delta P \simeq \hbar/\Delta$ (entrambe piccole in scala microscopica). Lo stato è dunque

$$|x_0 p_0 \Delta\rangle \rightarrow \Psi_{x_0, p_0 \Delta} = \left(\frac{1}{\pi \Delta^2} \right)^{1/4} e^{ip_0 x / \hbar} e^{-(x-x_0)^2 / 2\Delta^2}$$

Scegliamo $\Delta \simeq 10^{-13}$ (raggio protone), dunque $\Delta P \simeq 10^{-14}$ [g cm/sec] e per una particella di massa 1 [g] abbiamo $\Delta V \simeq 10^{-14}$ [cm/sec]. In tale stato abbiamo visto che le Eq.(6.4,6.5) determinano l'evolvere nel tempo di $\langle X \rangle = x_0$ e $\langle P \rangle = p_0$ e sono approssimabili alle equazioni di Hamilton se l'incertezza è trascurabile. In tale caso potremo approssimare una funzione di X e P allo stesso modo

$$\langle \Omega(X, P) \rangle \simeq \Omega(x_0, p_0) = \omega(x_0, p_0).$$

Vediamo però che perdiamo alcuni pezzi (trascurabili nel caso macroscopico) approssimando, nel caso di

$$\dot{p}_0 = \langle \dot{P} \rangle = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial X} \right\rangle \simeq -\left. \frac{\partial H}{\partial X} \right|_{(X=x_0, P=p_0)} = -\frac{\partial \mathcal{H}(x_0, p_0)}{\partial x_0}$$

facciamo l'approssimazione $\langle \partial H / \partial X \rangle = \langle dV/dX \rangle = \langle V'(X) \rangle \rightarrow V'(X = x_0)$. Questa approssimazione è corretta se espandendo con Taylor

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

possiamo trascurare la serie dal terzo ordine in poi (il primo corrisponde alla seconda legge di Newton, il secondo è sempre nullo). I termini trascurati tengono conto delle forze dei punti vicini presenti solo in quantistica, infatti una particella a cui è associata una funzione d'onda ha un certo spessore (dunque viene applicata una forza in più punti e la forza varia da punto a punto).

Capitolo 7

L'oscillatore armonico

7.1 Perché studiare l'oscillatore armonico?

L'oscillatore armonico è un sistema che può essere risolto esattamente (sia nella teoria classica che quantistica) ed di grande importanza concettuale. Ogni sistema che fluttua vicino ad un punto di equilibrio può essere descritto da uno o più oscillatori armonici scoppiati. L'hamiltoniana per un singolo oscillatore è

$$\mathcal{H} = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

dove $\omega = (k/m)^{1/2}$ è la frequenza di oscillazione classica, che è l'hamiltoniana di un oscillatore armonico.

Vediamo adesso come ottenerla per il caso generale. Consideriamo una particella che si muove sotto un potenziale, se questa è piazzata al suo minimo, avremo un punto di equilibrio (ovunque vada il potenziale aumenta, quindi ha bisogno di energia per muoversi). Supponiamo adesso che questa particella si muova compiendo piccole oscillazioni, espandiamo allora il potenziale attorno al suo minimo

$$V(x) = V(x_0) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2!} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_0} (x - x_0)^2 + \dots$$

dove il primo termine è una costante e dunque trascurabile e il secondo è 0 (non ci sono forze e $x - x_0 = 0$). Questo potenziale ci dà l'hamiltoniana di Eq.7.1.

Prendiamo adesso un sistema con due oscillatori, allora ripetendo tutto

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 [x_1^2 + x_2^2 + (x_1 - x_2)^2] \\ &= \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \frac{1}{2}m\omega^2 (x_1 - x_2)^2. \end{aligned}$$

Come abbiamo detto però è possibile scoppiare l'hamiltoniana in due oscillatori separati, per farlo facciamo le sostituzioni

$$x_I = \frac{x_1 + x_2}{2^{1/2}}$$

e

$$x_{II} = \frac{x_1 - x_2}{2^{1/2}}.$$

Con queste coordinate abbiamo la seguente hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_I + \mathcal{H}_{II} = \frac{p_I^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_I^2 + \frac{p_{II}^2}{2m} + \frac{3}{2}m\omega^2 x_{II}^2$$

che possiamo riscrivere come

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 p_i \delta_{ij} p_j + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 x_i V_{ij} x_j$$

dove V è una matrice hermitiana di valori $V_{11} = V_{22} = 2m\omega^2$ e $V_{12} = V_{21} = -m\omega^2$. Questa espressione dell'hamiltoniana ci evidenzia come il cambio di coordinate che abbiamo fatto corrisponde ad un cambio base su cui V è diagonale.

Possiamo adesso generalizzare. Consideriamo un sistema a N gradi di libertà vicino all'equilibrio

$$V(x_1 \dots x_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \bigg|_0 x_i x_j + \dots$$

dunque vicino all'equilibrio

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{p_i \delta_{ij} p_j}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i V_{ij} x_j$$

dove

$$V_{ij} = \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \bigg|_0 = \frac{\partial^2 V}{\partial x_j \partial x_i} \bigg|_0 = V_{ji}$$

sono elementi della matrice hermitiana V (abbiamo assunto che le masse delle particelle fossero tutte uguali). Sappiamo dalla teoria matematica che esiste una base che diagonalizza V, dunque il problema con N gradi di libertà è equivalente a quello con uno solo. Due importanti esempi di oscillatori armonici sono gli atomi di un cristallo che oscillano attorno alla loro posizione media (fononi) e il campo elettromagnetico nel vuoto (fotoni).

7.2 Ripasso dell'oscillatore classico

Le equazioni del moto per l'oscillatore sono

$$\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = -m\omega^2 x,$$

derivando la prima e eguagliando \dot{p} otteniamo

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0$$

di soluzione

$$x(t) = A \cos \omega t + \beta \sin \omega t = x_0 \cos(\omega t + \phi)$$

L'energia conservata associata all'oscillatore è

$$E = T + V = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2,$$

essendo x_0 continua, lo è anche E. Il valore più basso di E è 0 e corrisponde alla particella a riposo.

Risolviendo \dot{x} in termini di x e E otteniamo

$$\dot{x} = (2E/m - \omega^2 x^2)^{1/2} = \omega (x_0^2 - x^2)^{1/2}$$

che ci dice che la particella parte da ferma nel punto di cambio verso e accelera fino al punto di equilibrio, dopodiché frena e si ferma all'altro punto di cambio di verso.

7.3 Quantizzazione dell'oscillatore (in base di coordinate)

Consideriamo ora l'oscillatore quantistico, ovvero una particella il cui vettore di stato $|\Psi\rangle$ obbedisce all'equazione di Shrodinger

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

con

$$H = \mathcal{H}(x \rightarrow X, p \rightarrow P) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2.$$

Prima di cominciare osserviamo che gli autovalori di H non possono essere negativi

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{1}{2m} \langle \Psi | P^2 | \Psi \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \Psi | X^2 | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \langle \Psi | P^\dagger P | \Psi \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \Psi | X^\dagger X | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \langle P\Psi | P\Psi \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle X\Psi | X\Psi \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

Adesso possiamo partire. Proiettiamo l'equazione secolare

$$\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2\right)|E\rangle = E|E\rangle$$

in base X , possiamo fare quindi le solite sostituzioni:

$$\begin{aligned} X &\rightarrow x \\ P &\rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx} \\ |E\rangle &\rightarrow \Psi_E(x). \end{aligned}$$

A questo punto riarrangiando l'equazione abbiamo

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\Psi = 0.$$

Per semplificare vediamo di risolvere l'equazione nella sua forma adimensionale, in questo modo otterremo anche le unità di misura naturali dell'oscillatore armonico quantistico (avere le unità di misura naturali di un sistema permette di identificare con facilità cosa è relativamente piccolo o grande). Facciamo quindi la sostituzione $x = by$, ottenendo dunque

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{2mEb^2}{\hbar^2}\Psi - \frac{m^2\omega^2 b^4}{\hbar^2}y^2\Psi = 0$$

che ci suggerisce $b = (\hbar/m\omega)^{1/2}$ e definiamo anche la seguente variabile

$$\varepsilon = \frac{mEb^2}{\hbar^2} = \frac{E}{\hbar\omega}.$$

Abbiamo adesso

$$\Psi'' + (2\varepsilon - y^2)\Psi = 0$$

dove gli apostrofi indicano la differenziazione rispetto ad y . Nel limite $y \rightarrow \infty$ la soluzione è

$$\Psi = Ay^m e^{\pm y^2/2}$$

dove come sempre scegliamo l'esponentiale negativo poiché quello positivo non fa parte dello spazio di Hilbert. Nel limite $y \rightarrow 0$ abbiamo la soluzione

$$\Psi = A \cos(2\varepsilon)^{1/2} y + B \sin(2\varepsilon)^{1/2} y$$

che espandiamo con Taylor fino al primo ordine (quando poniamo $y \rightarrow 0$ semplifichiamo y^2 dunque per coerenza dobbiamo eliminare tutti i termini di ordine ≥ 2)

$$\Psi \xrightarrow{y \rightarrow 0} A + cy + O(y^2)$$

dove $c = B(2\varepsilon)^{1/2}$. La forma di Ψ deve essere quindi

$$\Psi(y) = u(y)e^{-y^2/2}$$

dove u tende a $A + cy$ quando $y \rightarrow 0$ e a y^m quando $y \rightarrow \infty$. Per trovare u inseriamo Eq. (7.3) in Eq. (7.4) ottenendo

$$u'' - 2yu' + (2\varepsilon - 1)u = 0$$

La soluzione di questa equazione è scrivibile in forma di serie di potenze (CONDIZIONI IN ESERCIZIO 7.3.1)

$$u(y) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n y^n,$$

dove n comincia da 0. Inserendo la serie in (7.5) otteniamo

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n [n(n-1)y^{n-2} - 2ny^n + (2\varepsilon - 1)y^n] = 0.$$

Dopo qualche magheggio otteniamo

$$\sum_{n=0}^{\infty} y^n [C_{n+2}(n+2)(n+1) + C_n(2\varepsilon - 1 - 2n)] = 0$$

ma y^n è una base, dunque i termini sono linearmente indipendenti e per annullarsi deve annullarsi l'espressione dentro la parentesi, quindi

$$C_{n+2} = C_n \frac{(2n+1-2\varepsilon)}{(n+2)(n+1)}$$

che ci da

$$u(y) = C_0 \left[1 + \frac{(1-2\varepsilon)y^2}{(0+2)(0+1)} + \frac{(1-2\varepsilon)}{(0+2)(0+1)} \frac{(4+1-2\varepsilon)}{(2+2)(2+1)} y^4 + \dots \right] \\ + C_1 \left[y + \frac{(2+1-2\varepsilon)y^3}{(1+2)(1+1)} + \frac{(2+1-2\varepsilon)}{(1+2)(1+1)} \frac{(6+1-2\varepsilon)}{(3+2)(3+1)} y^5 + \dots \right]$$

con C_0 e C_1 arbitrari. Ma questo implica che l'energia è arbitraria, cosa non possibile dato che abbiamo dimostrato all'inizio che essa non può essere negativa, inoltre $u(y)$ non si comporta come y^m per $y \rightarrow \infty$. Ripartendo da

$$\Psi(y) \xrightarrow{y \rightarrow \infty} y^m e^{\pm y^2/2}$$

e ponendo $\Psi(y) = u(y)e^{-y^2/2}$ otteniamo che

$$u(y) \xrightarrow{y \rightarrow \infty} y^m \quad \text{oppure} \quad y^m e^{y^2},$$

abbiamo visto che non può essere la prima, dunque è la seconda (scelta confermata dal fatto che $u(y)$ cresce come $y^m e^{y^2}$ e quindi $\Psi(y) \simeq y^m e^{y^2/2}$).

Date queste soluzioni, gli unici valori possibili di ε sono

$$\varepsilon_n = \frac{2n+1}{2} \quad (\text{annullano } C_{n+2}).$$

FINE RIPASSO 20/04/23 Questa equazione ci dice che E è quantizzata

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

quando il valore di E è dato da un ε_n pari, allora scegliamo $C_1 = 0$ ($C_0 = 0$ quando è dispari) ottenendo

$$\Psi(y) = u(y)e^{-y^2/2} = \begin{Bmatrix} C_0 + C_2 y^2 + C_4 y^4 + \dots + C_n y^n \\ C_1 y + C_3 y^3 + C_5 y^5 + \dots + C_n y^n \end{Bmatrix} \cdot e^{-y^2/2}.$$

Ad ogni n corrisponde un polinomio di Hermite

$$H_0(y) = 1 \\ H_1(y) = 2y \\ H_2(y) = -2(1 - 2y^2) \\ H_3(y) = -12\left(y - \frac{2}{3}y^3\right) \\ H_4(y) = 12\left(1 - 4y^2 + \frac{4}{3}y^4\right).$$

La soluzione normalizzata diventa allora

$$\Psi_E(x) \equiv \Psi_{(n+1/2)\hbar\omega}(x) \equiv \Psi_n(x) \\ = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar 2^{2n}(n!)^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) H_n \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} x \right].$$

Apriamo una piccola parentesi sui polinomi di Hermite per dare un paio di relazioni utili

$$H'_n(y) = 2nH_{n-1} \\ H_{n+1}(y) = 2yH_n - 2nH_{n-1}$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(y) H_n(y) e^{-y^2} dy = \delta_{nn} (\pi^{1/2} 2^n n!)$$

che è la condizione di ortonormalità delle autofunzioni $\Psi_n(x)$ e $\Psi_{n'}(x)$.

Possiamo adesso scrivere il propagatore

$$U(x, t; x', t') = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) H_n(x) A_n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x'^2\right) H_n(x') \exp[-i(n+1/2)\omega(t-t')]$$

dove è stato tralasciata la ricerca della costante di normalizzazione

$$A_n = \left[\frac{m\omega}{\pi \hbar 2^{2n} (n!)^2} \right]^{1/4}$$

perché tediosa e verrà anche tralasciato come trovare la forma chiusa di (7.10)

$$U(x, t; x', t') = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{i m \omega (x^2 + x'^2) \cos \omega T - 2 x x'}{2 \sin \omega T} \right]$$

dove $T = t - t'$.

Abbiamo trovato la soluzione al problema degli autovalori, ora dovremo analizzare i risultati ma riporto prima un veloce riassunto di quanto fatto:

- Introdurre le variabili adimensionali naturali del sistema;
- Studio del comportamento di Ψ per $y \rightarrow \infty$ e $y \rightarrow 0$;
- Riscriviamo Ψ come il prodotto del suo comportamento asintotico e di una funzione u ;
- Trovare la serie di potenze che permette il corretto comportamento.

Veniamo ora all'analisi, come fatto dal libro suddivideremo l'analisi in 6 punti:

1. L'energia è quantizzata. Questa quantizzazione viene dalla richiesta di $|\Psi\rangle$ di appartenere allo spazio di Hilbert e dunque di tendere a 0 per $x \rightarrow \infty$. Ci potremmo chiedere per quale motivo l'oscillatore classico non è quantizzato, possiamo vederlo prendendo un oscillatore con una massetta 2 [g], $\omega = 1$ [rad/s] e ampiezza 1 [cm], allora

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 = 1 \text{ erg}$$

mentre il gap di energia quantistico è

$$n = \frac{E}{\hbar \omega} - \frac{1}{2} \simeq 10^{27}.$$

In termini di numero quantico

$$n = \frac{E}{\hbar \omega} - \frac{1}{2} \simeq 10^{27}$$

dove Δn tra livelli di energia adiacenti è 1; il principio di corrispondenza dice che quando il numero quantico tende ad infinito, allora meccanica quantistica e classica sono equivalenti.

2. I livelli sono equidistanti con distanza $\hbar \omega$. Possiamo associare ad un oscillatore con frequenza classica ω un quasiparticella chiamata quanto con tale energia, di conseguenza un oscillatore di energia $n \hbar \omega$ corrisponde ad un sistema di n quanti. Nell'esempio di oscillatore dei degli atomi del cristallo fatto ad inizio capitolo, i quanti sono chiamati fononi.
3. L'energia più bassa possibile è $\hbar \omega / 2$ ed è chiamata energia di punto 0. Per trovarla mettiamoci in condizioni simili a quelle per cui classicamente E è 0, ovvero con $x = p = 0$. Ovviamente avere proprio $x=0$ implica che p è molto larga e viceversa, quindi quella soluzione è sbagliata per trovare quella giusta prendiamo il valore medio dell'hamiltoniana

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle H \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle$$

usiamo le relazioni

$$(\Delta P)^2 = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2 \quad \& \quad (\Delta X)^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$$

e poniamo le medie $\langle P \rangle = \langle X \rangle = 0$. A questo punto ci ritroviamo con

$$\langle H \rangle = \frac{(\Delta P)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta X)^2$$

e, usando la relazione di incertezza $\Delta X \cdot \Delta P \geq \hbar/2$ dove l'uguale vale solo per una gaussiana, otteniamo

$$\langle H \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta X)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta X)^2 \rightarrow \langle H \rangle_{\text{Gaussiana}} = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta X)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta X)^2.$$

Quando si parla di gaussiana, intendiamo la famiglia di gaussiane dipendenti da ΔX ; ΔX che minimizza la gaussiana è

$$\frac{\partial \langle H \rangle_{\text{Gaussiana}}}{\partial (\Delta X)^2} = 0 = \frac{-\hbar^2}{8m(\Delta X)^4} + \frac{1}{2}m\omega^2 \rightarrow (\Delta X)^2 = \hbar/2m\omega.$$

Abbiamo dunque dimostrato che

$$\langle H \rangle_{\min} = \hbar\omega/2$$

la cui onda associata è

$$\Psi_{\min}(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right).$$

4. Le soluzioni della funzione d'onda $\Psi_n(x)$ contengono solo potenze pari o dispari di x dipendentemente da n , di conseguenza

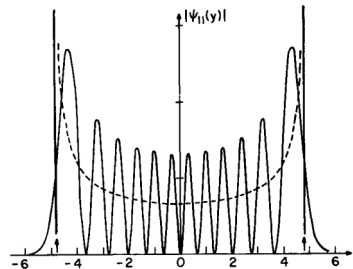
$$\begin{aligned} \Psi_n(-x) &= \Psi_n(x), & n \text{ pari} \\ &= -\Psi_n(x), & n \text{ dispari} \end{aligned}$$

questa simmetria verrà capita nel capitolo 11.

5. Differentemente dal caso classico, non ci sono punti di inversione di verso, ma la funzione d'onda muore esponenzialmente a $x \rightarrow \infty$.
6. La distribuzione di probabilità è molto diversa dal caso classico. Se ci poniamo la domanda: "Entrando in una stanza dove è posto un oscillatore armonico, dove possiamo trovare la massetta?" allora nel caso classico

$$P_{\text{cl}}(x) \propto \frac{1}{v(x)} = \frac{1}{\omega(x_0^2 - x^2)^{1/2}}.$$

Nel caso quantistico invece per l'energia minima abbiamo una gaussiana, quindi la distribuzione di probabilità è diametralmente opposta. Per il principio di corrispondenza però per $n \rightarrow \infty$ le due combaciano. Per $n=11$ abbiamo la seguente distribuzione



dove la linea tratteggiata è la distribuzione classica.

7.4 L'oscillatore nella base dell'energia

L'hamiltoniano è caratterizzato dai parametri m e ω ; congiuntamente con \hbar , questo set è l'intero insieme delle quantità fisiche che possiamo usare per costruire le scale del problema: quantità dimensionate che rappresentano l'ordine di grandezza su cui ci si aspetta una variabilità del problema (per fissare le idee, un scala di tempi fornisce l'ordine di grandezza di eventuali tempi caratteristici del sistema). Troviamo:

$$l_\omega = [\text{lunghezza}] = \sqrt{\frac{[\text{energia}] \cdot [\text{tempo}]}{[\text{massa}] \cdot [\text{tempo}]}} = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$$

$$p_\omega = [\text{impulso}] = \sqrt{[\text{energia}] \cdot [\text{massa}]} = (\hbar m\omega)^{1/2}$$

$$E_\omega = [\text{energia}] = \hbar\omega$$

L'importanza di queste scale sarà più chiara tra breve; possiamo sin da subito, però, intuire come queste scale ci possano guidare nell'approccio al sistema fisico: ci aspettiamo e.g. che una variazione dell'impulso dell'ordine di p_ω sia relativamente "pesante" all'interno dell'hamiltoniano, quindi p_ω rappresenti effettivamente una scala ragionevole per gli impulsi coinvolti nel sistema. Effettivamente le scale costruite sono sensate: se ridefiniamo

$$\hat{q} \equiv \frac{\hat{Q}}{l_\omega} \quad \hat{p} \equiv \frac{\hat{P}}{p_\omega} \quad \implies \quad [\hat{q}, \hat{p}] = i$$

ricaviamo una scrittura equivalente per \hat{H} :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left[\left(\frac{\hat{Q}}{l_\omega} \right)^2 + \left(\frac{\hat{P}}{p_\omega} \right)^2 \right] = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{q}^2 + \hat{p}^2)$$

che rende evidente come l'energia vari su una scala $\hbar\omega$, mentre le lunghezze e gli impulsi contribuiscano a tale variazione quando pesate con l_ω e p_ω . Definiamo ora l'operatore \hat{a}

$$\hat{a} \equiv \frac{\hat{q} + i\hat{p}}{\sqrt{2}} \quad \implies \quad \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{q} - i\hat{p}}{\sqrt{2}}$$

dove abbiamo utilizzato che \hat{q} e \hat{p} sono operatori hermitiani. Invertendo le relazioni, si trova

$$\hat{q} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \quad \hat{p} = -i \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}$$

In termini del nuovo operatore, l'hamiltoniano si scrive come

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left[\left(\frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \right)^2 + \left(-i \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \right)^2 \right] = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})$$

D'altronde, vale:

$$\begin{aligned} \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} &= [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger \\ &= \left[\frac{\hat{q} + i\hat{p}}{\sqrt{2}}, \frac{\hat{q} - i\hat{p}}{\sqrt{2}} \right] + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} \\ &= \frac{i}{2} [\hat{p}, \hat{q}] - \frac{i}{2} [\hat{q}, \hat{p}] + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} \\ &= 1 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} \end{aligned}$$

Abbiamo mostrato en passant che $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, vedremo in seguito come ciò si rivelerà utile. Segue dunque che

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

dove abbiamo definito l'operatore \hat{N} , hermitiano per costruzione

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$$

È evidente che $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$, quindi i due operatori devono condividere lo spettro. Cercare gli autostati $|\epsilon\rangle$ di \hat{N} si rivela equivalente a cercare gli autostati di \hat{H} .

Cosa stiamo cercando? L'analogia con la Meccanica Classica può essere usata per provare ad anticipare quanto troveremo più avanti: classicamente, l'oscillatore armonico unidimensionale può assumere qualsiasi energia, e sbadatamente si potrebbe pensare che non sia vincolato spazialmente; al contrario, per ogni energia finita l'oscillatore è vincolato in una regione finita di spazio. Ragionando per similitudine, possiamo quindi aspettarci che l'hamiltoniano abbia spettro discreto e infinito, in quanto un limite superiore allo spettro corrisponderebbe nella nostra analogia a una massima energia possibile per il sistema. Siccome ci aspettiamo uno spettro discreto, assumiamo che gli autostati $|\epsilon\rangle$ di \hat{N} siano normalizzabili a 1 : $\langle\epsilon|\epsilon\rangle = 1$.

Determiniamo gli autostati $|\epsilon\rangle$: a tal fine, studiamo l'azione degli operatori \hat{a}^\dagger, \hat{a} su di essi.

Calcoliamo innanzitutto i commutatori $[\hat{N}, \hat{a}^\dagger]$ e $[\hat{N}, \hat{a}]$, facendo uso della nota formula ⁶ :

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

Quindi, sviluppando:

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

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

dove ci siamo avvalsi della proprietà, già derivata, $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. L'utilità di a e a^\dagger è data dal fatto che dato un autostato di \hat{H} , ne generano degli altri:

$$\hat{H}a|\epsilon\rangle = (a\hat{H} - [a, \hat{H}]|\epsilon\rangle) = (a\hat{H} - a)|\epsilon\rangle = (\epsilon - 1)a|\epsilon\rangle,$$

quindi se $a|\epsilon\rangle$ è un autostato con autovalore $\epsilon - 1$, allora

$$a|\epsilon\rangle = C_\epsilon|\epsilon - 1\rangle$$

dove C_ϵ è una costante e $|\epsilon - 1\rangle$ e $|\epsilon\rangle$ sono autovettori normalizzati. Similarmente otteniamo

$$a^\dagger|\epsilon\rangle = C_{\epsilon+1}|\epsilon + 1\rangle.$$

Spesso ci si riferisce ad a e a^\dagger come operatori discesa/salita oppure operatori di distruzione/costruzione.

Come conseguenza abbiamo che se ϵ è un autovalore di \hat{H} , allora lo sono anche $\epsilon + 1, \dots, \epsilon + \infty$ e $\epsilon - 1, \dots, \epsilon - \infty$. Ma dallo studio in base X sappiamo che gli autovalori di H sono non negativi, dunque questa catena si deve interrompere ad un qualche ϵ_0 , per trovarlo poniamo

$$a|\epsilon_0\rangle = 0$$

e moltiplicando per a^\dagger otteniamo

$$\hat{N}|\epsilon_0\rangle = 0$$

$$(\hat{H} - 1/2)|\epsilon_0\rangle = 0$$

$$\hat{H}|\epsilon_0\rangle = \frac{1}{2}|\epsilon_0\rangle,$$

dunque

$$\epsilon_0 = \frac{1}{2}.$$

Nulla toglie che possiamo alzare lo stato di $|\epsilon_0\rangle$ tramite a^\dagger , otteniamo che l'oscillatore ha i seguenti livelli di energia accessibili

$$\epsilon_n = (n + 1/2) \rightarrow E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Questa famiglia di autovalori è unica perché siamo in una dimensione, dunque non c'è degenerazione. Possiamo adesso calcolare le costanti C_ϵ e $C_{\epsilon+1}$ (che per semplicità rinominiamo C_n), prendiamo

$$a|n\rangle = C_n|n - 1\rangle$$

e la sua aggiunta

$$\langle n|a^\dagger = \langle n - 1|C_n^*,$$

possiamo combinarle ottenendo

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n - 1|n - 1\rangle C_n^* C_n$$

$$\langle n|\hat{H} - \frac{1}{2}|n\rangle = C_n^* C_n \quad (|n - 1\rangle \text{ è normalizzato})$$

$$\langle n|n\rangle = |C_n|^2 \quad (\hat{H}|n\rangle = (n + 1/2)|n\rangle)$$

$$|C_n|^2 = n$$

$$C_n = (n)^{1/2} e^{i\phi} \quad (\phi \text{ è arbitrario})$$

per convenzione si pone $\phi = 0$. Abbiamo dunque

$$a|n\rangle = n^{1/2}|n-1\rangle$$

e allo stesso modo si dimostra

$$a^\dagger|n\rangle = (n+1)^{1/2}|n+1\rangle.$$

Combiniamo (7.23) e (7.24) ottenendo

$$a^\dagger a|n\rangle = a^\dagger n^{1/2}|n-1\rangle = n^{1/2} n^{1/2}|n\rangle = n|n\rangle \rightarrow N = a^\dagger a$$

dove è l'operatore numero (conta i quanti). Possiamo riscrivere ora \hat{H} come

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

Le equazioni (7.23) e (7.24) ci permettono inoltre di calcolare gli elementi di tutte le matrici (H , X e P) in base $|n\rangle$ (base E), prima guardiamo proprio le matrici a^\dagger e a

$$\begin{aligned}\langle n'|a|n\rangle &= n^{1/2}\langle n'|n-1\rangle = n^{1/2}\delta_{n',n-1} \\ \langle n'|a^\dagger|n\rangle &= (n+1)^{1/2}\langle n'|n+1\rangle = (n+1)^{1/2}\delta_{n',n+1}\end{aligned}$$

poi per trovare X e P invertiamo (7.12) e (7.13)

$$\begin{aligned}X &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} (a + a^\dagger) \\ P &= i\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{1/2} (a^\dagger - a)\end{aligned}$$

Otteniamo così le seguenti matrici:

• a^\dagger

$$\begin{array}{ccccc} & n=0 & n=1 & n=2 & \dots \\ \begin{array}{c} n=0 \\ n=1 \\ n=2 \\ . \\ . \end{array} & \left[\begin{array}{cccc} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1^{1/2} & 0 & 0 & \\ 0 & 2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 0 & 3^{1/2} & \\ \vdots & & & \end{array} \right] \end{array}$$

• a

$$\left[\begin{array}{cccc} 0 & 1^{1/2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 3^{1/2} & \\ \vdots & & & & \end{array} \right]$$

• X

$$\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \left[\begin{array}{cccc} 0 & 1^{1/2} & 0 & 0 & \dots \\ 1^{1/2} & 0 & 2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 2^{1/2} & 0 & 3^{1/2} & \\ 0 & 0 & 3^{1/2} & 0 & \\ \vdots & & & & \end{array} \right]$$

• P

$$i\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{1/2} \left[\begin{array}{cccc} 0 & -1^{1/2} & 0 & 0 & \dots \\ 1^{1/2} & 0 & -2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 2^{1/2} & 0 & -3^{1/2} & \\ 0 & 0 & 3^{1/2} & 0 & \\ \vdots & & & & \end{array} \right]$$

- H (ovviamente diagonale nella sua base)

$$\hbar\omega \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3/2 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 5/2 & & \\ \vdots & & & & \end{bmatrix}$$

Possiamo infine scrivere tutti gli autovettori normalizzati $|n\rangle$ in termini di uno stato base $|0\rangle$

$$|n\rangle = \frac{a^\dagger}{n^{1/2}} |n-1\rangle = \frac{a^\dagger}{n^{1/2}} \frac{a^\dagger}{(n-1)^{1/2}} |n-2\rangle \cdots = \frac{(a^\dagger)^n}{(n!)^{1/2}} |0\rangle.$$

Notiamo che tutto questo è stato possibile solo tramite la relazione di commutazione, infatti l'equivalente di

$$\{\omega(x, p), \lambda(x, p)\} = \gamma(x, p)$$

in quantistica è

$$[\Omega(X, P), \Lambda(X, P)] = i\hbar\Gamma(X, P)$$

che ci ha permesso di avere autovalori che ne generassero di nuovi.

7.5 Passaggio dalla base E a quella X

Abbiamo visto che la base E (o base $|n\rangle$, sono la stessa base) è perfetto per scrivere gli elementi delle matrici dei vari operatori, ma non siamo riusciti a calcolare l'ampiezza di probabilità di trovare una particella in uno stato $|n\rangle$ in un punto x , per farlo dovremmo trovare $\Psi_n(x) = \langle x | n \rangle$. Vediamo un modo più veloce per trovarlo anziché trovare gli autovettori di X e proiettare $\langle x | n \rangle$.

Proiettiamo l'equazione che definisce lo stato base dell'oscillatore

$$a|0\rangle = 0$$

sulla base X e poniamo $y = (m\omega/\hbar)^{1/2}x$, allora

$$a = \frac{1}{2^{1/2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right)$$

e, essendo d/dy anti-hermitiano

$$a^\dagger = \frac{1}{2^{1/2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right).$$

In base X (7.35) diventa

$$\left(y + \frac{d}{dy} \right) \Psi_0(y) = 0$$

che possiamo riscrivere come

$$\Psi_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right),$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo normalizzato. Adesso proiettiamo

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{(n!)^{1/2}} |0\rangle$$

sulla base X, ottenendo le autofunzioni normalizzate

$$\langle x | n \rangle = \Psi_n \left[x = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} y \right] = \frac{1}{(n!)^{1/2}} \left[\frac{1}{2^{1/2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \right]^n \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-y^2/2}.$$

Comparando poi con l'equazione successiva a (7.7) otteniamo

$$H_n(y) = e^{y^2/2} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2/2}.$$

Capitolo 8

La formulazione del path integral della teoria quantistica

Studieremo adesso una diversa formulazione della meccanica quantistica inventata da Feynman. Se la formulazione di Shrodinger derivava dalla meccanica Hamiltoniana, quella di Feynman deriva dalla meccanica Lagrangiana. Il nostro strumento principale sarà comunque la formulazione di Shrodinger, ma la formulazione di Feynman, oltre ad essere utile per alcuni problemi, potrebbe portare un secondo punto di vista e dunque una maggiore comprensione della meccanica quantistica.

8.1 La ricetta del path integral

Un problema di meccanica quantistica è risolto nel momento in cui viene trovato il propagatore. Fin qui prima si trovavano autovalori e autofunzioni di H , e poi si scriveva $U(t)$ in termini di questi. La formulazione dei path integral (o integrale sui cammini in italiano) ci permette di calcolare direttamente il propagatore. Per una particella in una dimensione, la procedura è la seguente:

1. Disegna tutte le traiettorie nel piano $x-t$ che collegano (x, t) a (x', t') ;
2. Trova l'azione per ogni traiettoria;
- 3.

$$U(x, t; x', t') = A \sum_{\text{all paths}} e^{iS[x(t)]/\hbar}$$

dove A è un fattore di normalizzazione

8.2 Analisi della ricetta

Studiamo la ricetta appena descritta. Possiamo notare che non è stato fatto riferimento ad una traiettoria classica, difatti tutte le traiettorie hanno lo stesso peso. Ma come si ottiene quindi quella classica? Per semplificare supponiamo di avere un insieme discreto di traiettorie (nella realtà dei fatti abbiamo un insieme continuo) e sommiamo il contributo $Z_a = e^{iS[x_a(t)]}$ di ogni cammino $x_a(t)$. Ogni cammino ha un'azione diversa e per sistemi macroscopici $S[x(t)] \gg \hbar$ dunque il fattore di fase (ci troviamo di fronte ad un numero complesso di norma unitaria) cambia velocemente anche per cammini vicini che mediamente si cancellano a vicenda. Tuttavia quando ci avviciniamo alla traiettoria classica S è stazionario e quindi anziché cancellarsi i cammini si sommano l'uno sull'altro. Si dice che i cammini continuano a sommarsi con interferenza costruttiva fin quando la fase differisce da S_{cl}/\hbar di π .

8.3 Approssimazione ad $U(t)$ per una particella libera

Abbiamo visto che è quindi possibile trascurare tutti i cammini lontani da quello classico. Possiamo quindi scrivere

$$U(t) = A' e^{iS_c/\hbar}$$

dove A' è il fattore di normalizzazione che "misura" il numero di cammini considerati vicino a quello classico. Troviamo il propagatore per la particella libera e vediamo che è coerente con quello trovato nel capitolo 5.

Il cammino classico della particella libera è una retta

$$x_{cl}(t'') = x' + (t'' - t') = x' + \frac{x - x'}{t - t'}(t'' - t'),$$

quindi la lagrangiana è $L = mv^2/2$ (costante). L'azione è

$$S_{cl} = \int_{t'}^t \mathcal{L} dt'' = \frac{1}{2} m \frac{(x - x')^2}{t - t'}$$

di modo che

$$U(x, t; x', t') = A' \exp \left[\frac{im(x - x')^2}{2\hbar(t - t')} \right].$$

Per trovare A' osserviamo che quando $t - t'$ tende a 0, allora U tende a $\delta(x - x')$. Tornando al capitolo 1 ricordiamo che una delle espressioni di $\delta(x - x')$ è

$$\delta(x - x') \equiv \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{(\pi\Delta^2)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(x - x')^2}{\Delta^2} \right],$$

quindi nel limite stabilito possiamo compararle ottenendo così

$$A' = \left[\frac{m}{2\pi\hbar i(t - t')} \right]^{1/2}.$$

Mettendo tutto assieme otteniamo

$$U(x, t; x', 0) \equiv U(x, t; x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i t} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{im(x - x')^2}{2\hbar t} \right]$$

che è quello che cercavamo.

8.4 Significato di propagazione sui cammini

Proviamo a ripetere i calcoli senza approssimazioni per illustrare l'integrazione sui cammini. Vogliamo calcolare l'integrale sui cammini

$$\int_{x_0}^{x_N} e^{iS[x(t)]/\hbar} \mathcal{D}[x(t)]$$

dove

$$\int_{x_0}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)]$$

è un metodo simbolico di dire "integra su tutti i cammini che connettono x_0 a x_n ". Possiamo dividere tutti i cammini in N ($N \rightarrow \infty$) intervalli temporali ϵ , in questo modo integrale su tutti i cammini significa integrare su tutti i possibili x_1, \dots, x_{n-1} che collegano x_0 a x_n (fissi). Avendo però fatto il passaggio al discreto possiamo sostituire

$$S = \int_{t_0}^{t_N} \mathcal{L}(t) dt = \int_{t_0}^{t_N} \frac{1}{2} m \dot{x}^2 dt$$

con

$$S = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon} \right)^2 \epsilon.$$

Calcoliamo adesso il propagatore

$$\begin{aligned} U(x_N, t_N; x_0, t_0) &= \int_{x_0}^{x_N} \exp\{iS[x(t)]/\hbar\} \mathcal{D}[x(t)] \\ &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} A \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{\epsilon} \right] dx_1 \dots dx_{N-1} \end{aligned}$$

Facciamo i due seguenti cambi di variabile (e costante)

$$y_i = \left(\frac{m}{2\hbar\epsilon} \right)^{1/2} x_i;$$

$$A' = A \left(\frac{2\hbar\varepsilon}{m} \right)^{(N-1)/2}.$$

Abbiamo dunque

$$\lim_{N \rightarrow \infty} A' \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[- \sum_{i=0}^{N-1} \frac{(y_{i+1} - y_i)^2}{i} \right] dy_1 \cdots dy_{N-1},$$

partiamo integrando y_1

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{i} \left[(y_2 - y_1)^2 + (y_1 - y_0)^2 \right] \right\} dy_1 = \left(\frac{i\pi}{2} \right)^{1/2} e^{-(y_2 - y_0)^2/2i}$$

e moltiplichiamo il risultato per l'integrazione di y_2

$$\begin{aligned} & \left(\frac{i\pi}{2} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(y_3 - y_2)^2/i} \cdot e^{-(y_2 - y_0)^2/2i} dy_2 \\ &= \left(\frac{i\pi}{2} \right)^{1/2} e^{-(2y_3^2 + y_0^2)/2i} \left(\frac{2\pi i}{3} \right)^{1/2} e^{(y_0 + 2y_3)^2/6i} \\ &= \left[\frac{(i\pi)^2}{3} \right]^{1/2} e^{-(y_3 - y_0)^2/3i} \end{aligned}$$

si capisce il pattern che alla fine dell'integrazione su tutti i termini ci darà

$$\frac{(i\pi)^{(N-1)/2}}{N^{1/2}} e^{-(y_N - y_0)^2/Ni}$$

o in termini di x e A

$$U = A \left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m} \right)^{N/2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i N \varepsilon} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{im(x_N - x_0)^2}{2\hbar N \varepsilon} \right].$$

Lasciando $N \rightarrow \infty, \varepsilon \rightarrow 0, N\varepsilon \rightarrow t_N - t_0$ otteniamo la risposta corretta se

$$A = \left[\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m} \right]^{-N/2} \equiv B^{-N}.$$

È convenzione associare un fattore $1/B$ ad ognuna delle $N - 1$ integrazioni e il rimanente fattore $1/B$ a tutto il processo. Otteniamo così la definizione quantitativa di "integrare su tutti i cammini":

$$\int \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \frac{1}{B} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1}{B} \cdot \frac{dx_2}{B} \cdots \frac{dx_{N-1}}{B}$$

dove

$$B = \left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m} \right)^{1/2}.$$

Sfortunatamente solo per potenziali del tipo $V = a + bx + cx^2 + d\dot{x} + e\ddot{x}$ è vero che $U(t) = A(t)e^{iS_{cl}/\hbar}$. Inoltre in generale non possiamo trovare $A(t)$ ponendo $U(x, 0; x') = \delta(x - x')$ dal momento che A può contenere funzioni adimensionali, qui $f \equiv 1$.

8.5 Equivalenza con l'equazione di Shrodinger

La relazione tra il formalismo di Shrodinger e quello di Feynman è simile a quella tra il formalismo Newtoniano e Lagrangiano: il primo è di tipo locale, analizza i potenziali in gioco e studia l'evoluzione temporale passo per passo, il secondo è di tipo globale e studia la propagazione direttamente su intervalli di tempo finiti.

Nel formalismo [S] il cambiamento in un intervallo infinitesimale del vettore di stato $|\psi\rangle$ è

$$|\psi(\varepsilon)\rangle - |\psi(0)\rangle = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} H |\psi(0)\rangle$$

o in base X

$$\psi(x, \varepsilon) - \psi(x, 0) = \frac{-i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, 0) \right] \psi(x, 0)$$

espandendo fino al primo ordine di ϵ .

Compariamo questo risultato con quello del formalismo [F]. Per trovare il risultato con [F] partiamo da

$$\psi(x, \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x, \epsilon; x') \psi(x', 0) dx',$$

il calcolo di $U(\epsilon)$ è facilitato dal fatto che essendo ϵ infinitesimale, non c'è bisogno di integrare (inizio e fine coincidono), quindi

$$U(x, \epsilon; x') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \epsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ i \left[\frac{m(x-x')^2}{2\epsilon} - \epsilon V \left(\frac{x+x'}{2}, 0 \right) \right] / \hbar \right\}$$

dove $(m/2\pi\hbar i \epsilon)^{1/2}$ è il fattore $1/B$. La funzione d'onda è dunque

$$\psi(x, \epsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \epsilon} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{im(x-x')^2}{2\epsilon\hbar} \right] \exp \left[-\frac{i\epsilon}{\hbar} V \left(\frac{x+x'}{2}, 0 \right) \right] \psi(x', 0) dx'.$$

Il primo esponenziale è un fattore di fase che oscilla molto velocemente avendo il denominatore molto piccolo, quindi se moltiplicato per una funzione molto regolare come $\psi(x', 0) dx'$ l'integrale ha media nulla ad esclusione dei punti stazionari e l'unico punto stazionario è $x = x'$. La regione che viene considerata come "vicina" al punto stazionario è

$$|\eta| \lesssim \left(\frac{2\epsilon\hbar\pi}{m} \right)^{1/2}$$

con $\eta = x' - x$. Possiamo ora considerare

$$\psi(x, \epsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \epsilon} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(im\eta^2/2\hbar\epsilon) \cdot \exp \left[-\left(\frac{i}{\hbar} \right) \epsilon V \left(x + \frac{\eta}{2}, 0 \right) \right] \psi(x + \eta, 0) d\eta,$$

ed espanderlo al primo ordine di η

$$\psi(x, \epsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \epsilon} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right) \left[\psi(x, 0) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x, 0) \psi(x, 0) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] d\eta.$$

Finiamo risolvendo l'integrale (un integrale gaussiano)

$$\psi(x, \epsilon) - \psi(x, 0) = \frac{-i\epsilon}{\hbar} \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, 0) \right] \psi(x, 0)$$

e osservando che coincide con (8.9).

8.6 Potenziali della forma $V = a + bx + cx^2 + d\dot{x} + ex\dot{x}$

Ancora una volta vogliamo calcolare

$$U(x, t; x') = \int_{x'}^x e^{iS[x(t')]/\hbar} \mathcal{D}[x(t'')].$$

Scriviamo ogni cammino come

$$x(t'') = x_{cl}(t'') + y(t'')$$

(ovviamente $y(t'') = 0$ nel punto iniziale e finale) da cui

$$\dot{x}(t'') = \dot{x}_{cl}(t'') + \dot{y}(t'').$$

Suddividiamo il tempo in N intervallini equispaziati, per le variabili di integrazioni intermedie abbiamo

$$x_i \equiv x(t_i'') = x_{cl}(t_i'') + y(t_i'') \equiv x_{cl}(t_i'') + y_i \rightarrow dx_i = dy_i$$

e

$$\int_{x'}^x \mathcal{D}[x(t'')] = \int_0^0 \mathcal{D}[y(t'')],$$

di modo che (8.11) diventi

$$U(x, t; x') = \int_0^0 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x_{cl}(t'') + y(t'')] \right\} \mathcal{D}[y(t'')].$$

Espandiamo con Taylor su x_{cl} e otteniamo

$$\begin{aligned} S[x_{cl} + y] &= \int_0^t \mathcal{L}(x_{cl} + y, \dot{x}_{cl} + \dot{y}) dt'' \\ &\equiv \int_0^t \left[\mathcal{L}(x_{cl}, \dot{x}_{cl}) + \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} \Big|_{x_{cl}} y + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \Big|_{x_{cl}} \dot{y} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2} \Big|_{x_{cl}} y^2 + 2 \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x \partial \dot{x}} \Big|_{x_{cl}} y \dot{y} + \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \dot{x}^2} \Big|_{x_{cl}} \dot{y}^2 \right) \right] dt'' \end{aligned}$$

con la serie che termina qua dal momento che L è un polinomio quadratico. Imponendo

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - a - bx - cx^2 - d\dot{x} - ex\dot{x}$$

otteniamo

$$\begin{aligned} U(x, t; x') &= \exp \left(\frac{i S_{cl}}{\hbar} \right) \int_0^0 \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{1}{2} m \dot{y}^2 - cy^2 - ey\dot{y} \right) dt'' \right] \\ &\quad \times \mathcal{D}[y(t'')] \end{aligned}$$

dove

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x^2} &= -c; \\ \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x \partial \dot{x}} &= -e; \\ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \dot{x}^2} &= m. \end{aligned}$$

L'integrale dei cammini non è dipendente da l cammino classico, ma solo da t , quindi

$$U(x, t; x') = e^{i S_{cl}/\hbar} A(t)$$

che è l'equazione da cui siamo partiti per la particella libera; imponendo infatti $c = e = 0$ abbiamo

$$A(t) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i t} \right)^{1/2}$$

(uguale al caso con $b \neq 0$). Per l'oscillatore armonico abbiamo $c = 1/2 m \omega^2$ e

$$A(t) = \int_0^0 \exp \left[i/\hbar \int_0^t \frac{1}{2} m (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) \right] dt'' \mathcal{D}[y(t'')].$$

La risoluzione di questo integrale è discussa in "Path Integrals and Quantum Mechanics" di Feynman e Hibbs. Osserviamo che anche senza sapere il fattore di normalizzazione A , abbiamo comunque tutta la possibile informazione probabilistica su ψ ad un momento t .

Capitolo 9

Relazioni di indeterminazione di Heisenberg

9.1 Introduzione

In meccanica quantistica, dato uno stato $|\psi\rangle$, uno può solo dare le probabilità $P(\omega)$ per i possibili risultati della misurazione di Ω . La distribuzione di probabilità avrà un valore di aspettazione

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

con incertezza

$$(\Delta\Omega) = \left[\langle\psi|(\Omega - \langle\Omega\rangle)^2|\psi\rangle \right]^{1/2}.$$

Esistono comunque degli stati per i quali $\Delta\Omega = 0$, nominalmente gli autostati $|\omega\rangle$ di Ω .

Consideriamo due operatori hermitiani Λ e Ω , essi avranno generalmente delle incertezze. Nella prossima sezione deriveremo le relazioni di incertezza di Heisenberg, che danno il minimo valore del prodotto $\Delta\Omega \cdot \Delta\Lambda$. In generale questo prodotto è dipendente anche dallo stato in cui vengono fatte le misure, ma i casi più interessanti sono proprio quelli dove non lo fa.

9.2 Derivazione delle relazioni di incertezza

Siano Ω e Λ due operatori hermitiani con commutatore

$$[\Omega, \Lambda] = i\Gamma,$$

allora anche Γ è hermitiano. Il prodotto delle incertezze nello stato $|\psi\rangle$ normalizzato è

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 = \langle\psi|(\Omega - \langle\Omega\rangle)^2|\psi\rangle\langle\psi|(\Lambda - \langle\Lambda\rangle)^2|\psi\rangle.$$

Definiamo

$$\hat{\Omega} = \Omega - \langle\Omega\rangle$$

$$\hat{\Lambda} = \Lambda - \langle\Lambda\rangle$$

che hanno gli stessi commutatori di Ω e Γ e inseriamoli in (9.1)

$$\begin{aligned} (\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 &= \langle\psi|\hat{\Omega}^2|\psi\rangle\langle\psi|\hat{\Lambda}^2|\psi\rangle \\ &= \langle\hat{\Omega}\psi|\hat{\Omega}\psi\rangle\langle\hat{\Lambda}\psi|\hat{\Lambda}\psi\rangle. \end{aligned}$$

Applichiamo la disequazione di Cauchy

$$|V_1|^2|V_2|^2 \geq |\langle V_1 | V_2 \rangle|^2$$

ottenendo

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq |\langle\hat{\Omega}\psi|\hat{\Lambda}\psi\rangle|^2$$

che riscriviamo come

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq |\langle\psi|\hat{\Omega}\hat{\Lambda}|\psi\rangle|^2.$$

Sappiamo che in qualche modo il commutatore deve entrare nella costruzione delle relazioni, dunque scriviamo l'identità

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}\hat{\Lambda} &= \frac{\hat{\Omega}\hat{\Lambda} + \hat{\Lambda}\hat{\Omega}}{2} + \frac{\hat{\Omega}\hat{\Lambda} - \hat{\Lambda}\hat{\Omega}}{2} \\ &= \frac{1}{2}[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ + \frac{1}{2}[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]\end{aligned}$$

dove $[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+$ è l'anticommutatore. Inserendo (9.3) in (9.2) otteniamo

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq \left| \left\langle \psi \left| \frac{1}{2}[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ + \frac{1}{2}[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}] \right| \psi \right\rangle \right|^2.$$

Osserviamo adesso che:

- il valore di aspettazione di $[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}] = i\Gamma$ è puramente immaginario;
- il valore di aspettazione di $[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+$ (hermitiano) è reale.

Possiamo quindi scrivere

$$\begin{aligned}(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 &\geq \frac{1}{4} \left| \left\langle \psi \left| [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ \right| \psi \right\rangle + i \left\langle \psi \left| \Gamma \right| \psi \right\rangle \right|^2 \\ &\geq \frac{1}{4} \left\langle \psi \left| [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ \right| \psi \right\rangle^2 + \frac{1}{4} \left\langle \psi \left| \Gamma \right| \psi \right\rangle^2\end{aligned}$$

considerando che $|a+ib|^2 = a^2+b^2$. (9.4) è la relazione di incertezza generale tra due operatori hermitiani ed è dipendente dallo stato.

Consideriamo adesso due operatori coniugati, per cui $\Gamma = \hbar$. In questo caso abbiamo

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq \frac{1}{4} \left\langle \psi \left| [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ \right| \psi \right\rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4}$$

ed essendo il primo termine definito positivo, per ogni $|\psi\rangle$ abbiamo

$$\Delta\Omega \cdot \Delta\Lambda \geq \hbar/2.$$

Notiamo che (9.5) diventa un'uguaglianza se e solo se

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}|\psi\rangle &= c\hat{\Lambda}|\psi\rangle \\ \langle \psi | [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]_+ | \psi \rangle &= 0.\end{aligned}$$

9.3 La minima incertezza del pacchetto

Proviamo adesso a trovare la funzione d'onda $\psi(x)$ che rende la relazione di incertezza un'uguaglianza. Partiamo scrivendo le condizioni (9.6) in termini di $X(\Omega)$ e $P(\Lambda)$ in base X , ottenendo

$$\frac{d\psi(x)}{\psi(x)} = \frac{i}{\hbar} [\langle P \rangle + c(x - \langle X \rangle)] dx.$$

Mettendoci nel sistema di riferimento $x = \langle X \rangle$ (di modo che $\langle X \rangle = 0$) la soluzione di (9.7) è

$$\psi(x) = \psi(0) e^{i\langle P \rangle x / \hbar} e^{icx^2 / 2\hbar}.$$

Usando la prima condizione (9.6) e la sua coniugata nella seconda condizione otteniamo

$$\begin{aligned}\langle \psi | c^* X^2 + c X^2 | \psi \rangle &= 0 \\ (c + c^*) \langle \psi | X^2 | \psi \rangle &= 0\end{aligned}$$

da cui segue che c è immaginario puro. A questo punto poniamo $\Delta^2 = \hbar/|c|$ e riscriviamo (9.8)

$$\psi(x) = \psi(0) e^{i\langle P \rangle x / \hbar} e^{-x^2 / 2\Delta^2}.$$

Questa è una gaussiana. Se non avessimo posto $\langle X \rangle = 0$ avremmo ottenuto

$$\psi(x) = \psi(\langle X \rangle) e^{i\langle P \rangle (x - \langle X \rangle) / \hbar} e^{-(x - \langle X \rangle)^2 / 2\Delta^2}$$

che è una gaussiana di larghezza e centro arbitrari. Questo risultato è stato usato nel capitolo 7 nella ricerca del propagatore dell'oscillatore armonico in base E .

9.4 Applicazioni del principio di incertezza

Illustriamo adesso l'uso del principio di indeterminazione stimando la grandezza dell'energia minima di un sistema e la forma dell'onda in presenza di tale energia. Prendiamo come sistema campione un atomo di idrogeno con hamiltoniana

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}{2m} - \frac{e^2}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}}.$$

Ricopiamo i passaggi che abbiamo fatto per l'oscillatore. Cominciamo prendendo $\langle H \rangle$ in uno stato normalizzato $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{\langle P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 \rangle}{2m} - e^2 \left\langle \frac{1}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}} \right\rangle. \\ &= \frac{\langle P_x^2 \rangle + \langle P_y^2 \rangle + \langle P_z^2 \rangle}{2m} \end{aligned}$$

Facciamo le seguenti approssimazioni:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}} \right\rangle &\simeq \frac{1}{\langle (X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2} \rangle}; \\ \langle (X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2} \rangle &\simeq (\langle X^2 \rangle + \langle Y^2 \rangle + \langle Z^2 \rangle)^{1/2}. \end{aligned}$$

Il passo successivo è lavorare esclusivamente con stati per i quali $\langle P_i \rangle = 0$ e $\langle X \rangle = \langle Y \rangle = \langle Z \rangle = 0$, quindi usando le relazioni $\langle P_x^2 \rangle = (\Delta P_x)^2 + \langle P_x \rangle^2$ e $\langle X^2 \rangle = (\Delta X)^2 + \langle X \rangle^2$ otteniamo

$$\langle H \rangle \simeq \frac{\Delta P_x^2 + \Delta P_y^2 + \Delta P_z^2}{2m} - \frac{e^2}{[(\Delta X)^2 + (\Delta Y)^2 + (\Delta Z)^2]^{1/2}}.$$

Osserviamo che il nostro problema presenta una simmetria sferica, dunque nella configurazione di minima energia è lecito porre

$$(\Delta X)^2 = (\Delta Y)^2 = (\Delta Z)^2$$

e

$$(\Delta P_x)^2 = (\Delta P_y)^2 = (\Delta P_z)^2.$$

Possiamo adesso usare $\Delta P_x \Delta X \geq \hbar/2$, ci ritroviamo con la seguente disequazione

$$\langle H \rangle \gtrsim \frac{3\hbar^2}{8m(\Delta X)^2} - \frac{e^2}{3^{1/2}\Delta X}.$$

Per trovare il minimo differenziamo rispetto a ΔX e poniamo uguale a 0

$$\frac{-6\hbar^2}{8m(\Delta X)^3} + \frac{e^2}{3^{1/2}(\Delta X)^2} = 0 \rightarrow \Delta X = \frac{3(3^{1/2})\hbar^2}{4me^2} \simeq 1.3 \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Otteniamo finalmente

$$\langle H \rangle \gtrsim \frac{-2me^4}{9\hbar^2}.$$

Quello che ci impedisce di dire che l'energia minima è $\frac{-2me^4}{9\hbar^2}$ o che l'onda dello stato base è gaussiana sono le approssimazioni fatte. Infatti l'energia dello stato base esatta è

$$E_g = -me^4/2\hbar^2$$

che differisce dalla nostra stima per un fattore $\simeq 2$, stesso fattore che ci separa dalla corretta incertezza

$$\Delta X = \hbar^2/me^2.$$

Inoltre la funzione d'onda dello stato base non è una gaussiana ma un'esponenziale

$$\psi(x, y, z) = c \exp \left[- (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} / a_0 \right],$$

dove

$$a_0 = \hbar^2/me^2$$

è il raggio di Bohr.

9.5 La relazione di indeterminazione di tempo ed energia

La relazione di indeterminazione

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$$

non proviene da (9.4) non essendo t una variabile dinamica. Questa relazione significa che l'energia di un sistema esistente da un tempo finito Δt , ha un'incertezza ΔE . Per darle un senso logico osserviamo che gli autovalori dell'energia hanno una dipendenza temporale $e^{-iEt/\hbar}$ e ad una definita energia è associata una definita frequenza $\omega = E/\hbar$; per il principio di monocromaticità, solo un'onda che esiste da tempo infinito ha una frequenza ben definita, ma se esiste da tempo finito allora il principio è violato. Un secondo modo di descrivere questa relazione è : la legge di conservazione dell'energia della meccanica classica può essere violata da un fattore ΔE lungo un periodo $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$.

Capitolo 10

Sistemi con N gradi di libertà

10.1 Sistemi di N particelle in una dimensione

Fin ora abbiamo studiato sistemi ad un grado di libertà (una particella, una dimensione). In questa sezione studieremo sistemi di N particelle in una dimensione, partendo dal caso $N = 2$.

10.1.1 Lo spazio di Hilbert per due particelle

Consideriamo due particelle descritte classicamente da (x_1, p_1) e (x_2, p_2) e promuoviamole a operatori che obbediscono alle seguenti relazioni di commutazione

$$\begin{aligned}[X_i, P_j] &= i\hbar \{x_i, p_j\} = i\hbar \delta_{ij} \\ [X_i, X_j] &= i\hbar \{x_i, x_j\} = 0 \\ [P_i, P_j] &= i\hbar \{p_i, p_j\} = 0.\end{aligned}$$

Come per l'oscillatore, occasionalmente è possibile estrarre tutta l'informazione unicamente dai commutatori. Di solito si lavora in base X composta dagli autovettori simultanei $|x_1 x_2\rangle$ degli operatori X_1 e X_2 (commutano). Questi autovettori hanno norma

$$\langle x'_1 x'_2 | x_1 x_2 \rangle = \delta(x'_1 - x_1) \delta(x'_2 - x_2).$$

Inoltre in questa base valgono

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &\rightarrow \langle x_1 x_2 | \psi \rangle = \psi(x_1, x_2) \\ X_i &\rightarrow x_i \\ P_i &\rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}.\end{aligned}$$

Possiamo interpretare

$$P(x_1, x_2) = |\langle x_1 x_2 | \psi \rangle|^2$$

come la distribuzione di probabilità di trovare le due particelle vicine, ovviamente è prima necessario normalizzare $|\psi\rangle$

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \int |\langle x_1 x_2 | \psi \rangle|^2 dx_1 dx_2 = \int P(x_1, x_2) dx_1 dx_2.$$

Esistono altre basi possibili come quella dei momenti simultanei o in generale degli autovalori $|\omega_1 \omega_2\rangle$ di due qualsiasi operatori che commutano.

Chiamiamo $\mathbb{V}_{1\otimes 2}$ lo spazio di Hilbert delle due particelle generato dalla base scelta.

10.1.2 $\mathbb{V}_{1\otimes 2}$ come spazio di un prodotto diretto

Vediamo adesso un secondo modo per arrivare a $\mathbb{V}_{1\otimes 2}$. Consideriamo un sistema di due particelle dove gli operatori obbediscono a

$$[X_i, P_i] = i\hbar I$$

Gli autovettori di X_1 formano una base completa dello spazio di Hilbert \mathbb{V}_1 per la particella 1 e analogamente abbiamo \mathbb{V}_2 per la 2. Quando andiamo a misurare la posizione delle particelle avremo che 1 vale

$|x_1\rangle$ e 2 che vale $|x_2\rangle$. Denotiamo $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ (prodotto diretto) come il prodotto di vettori di due spazi diversi e che tiene l'informazione su entrambe le misure. Il prodotto diretto è un'operazione lineare

$$(\alpha |x_1\rangle + \alpha' |x'_1\rangle) \otimes (\beta |x_2\rangle) = \alpha \beta |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle + \alpha' \beta |x'_1\rangle \otimes |x_2\rangle$$

e la dimensione di $\mathbb{V}_1 \otimes \mathbb{V}_2$ è il prodotto delle dimensioni degli spazi di partenza. Anche se i vettori $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ generano $\mathbb{V}_1 \otimes \mathbb{V}_2$ non tutti gli elementi di $\mathbb{V}_1 \otimes \mathbb{V}_2$ sono un prodotto diretto, per esempio:

$$|\psi\rangle = |x'_1\rangle \otimes |x'_2\rangle + |x''_1\rangle \otimes |x''_2\rangle$$

non può essere scritto come

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle.$$

Il prodotto interno di $|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle$ e $|x'_1\rangle \otimes |x'_2\rangle$ è

$$\begin{aligned} (\langle x'_1 | \otimes \langle x'_2 |) (|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle) &= \langle x'_1 | x_1 \rangle \langle x'_2 | x_2 \rangle \\ &= \delta(x'_1 - x_1) \delta(x'_2 - x_2) \end{aligned}$$

e l'operatore X_1 che agisce sul prodotto diretto degli spazi 1 e 2 è

$$X_1^{(1) \otimes (2)} |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle = x_1 |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle.$$

Infine le reazioni di commutazione sono

$$\begin{aligned} [X_i^{(1) \otimes (2)}, P_j^{(1) \otimes (2)}] &= i\hbar \delta_{ij} I^{(1)} \otimes I^{(2)} = i\hbar \delta_{ij} I^{(1) \otimes (2)} \\ [X_i^{(1) \otimes (2)}, X_j^{(1) \otimes (2)}] &= [P_i^{(1) \otimes (2)}, P_j^{(1) \otimes (2)}] = 0 \quad j = 1, 2 \end{aligned}$$

10.1.3 Rivisitazione del prodotto diretto

Rivisitiamo quanto detto nella precedente sezione usando adesso delle basi generali. Sia Ω_1 un operatore di V_1 con autofunzioni non degeneri $\psi_{\omega_1}(x_1) \equiv \omega_1(x_1)$ che formano una base completa e un operatore analogo Ω_2 che genera V_2 . Consideriamo adesso una funzione $\psi(x_1, x_2)$ che rappresenta il vettore $|\psi\rangle$ di $V_{1 \otimes 2}$, teniamo fisso x_1 ad un valore \bar{x}_1 di modo che ψ sia solo funzione di x_2 e espandiamo ψ

$$\psi(\bar{x}_1, x_2) = \sum_{\omega_2} C_{\omega_2}(\bar{x}_1) \omega_2(x_2).$$

Osserviamo che i coefficienti dell'espansione sono dipendenti di \bar{x} , dunque espandiamo la funzione $C_{\omega_2}(\bar{x}_1)$ in base $\omega_1(\bar{x}_1)$

$$C_{\omega_2}(\bar{x}_1) = \sum_{\omega_1} C_{\omega_1, \omega_2} \omega_1(\bar{x}_1)$$

e reinseriamola in (10.10) levando l'imposizione su x_1

$$\psi(x_1, x_2) = \sum_{\omega_1} \sum_{\omega_2} C_{\omega_1, \omega_2} \omega_1(x_1) \omega_2(x_2)$$

che è la versione nello spazio delle coordinate della forma generale

$$|\psi\rangle = \sum_{\omega_1} \sum_{\omega_2} C_{\omega_1, \omega_2} |\omega_1\rangle \otimes |\omega_2\rangle.$$

L'equazione (10.11) implica proprio che $\mathbb{V}_{1 \otimes 2} = \mathbb{V}_1 \otimes \mathbb{V}_2$.

10.1.4 Evoluzione del vettore di stato di due particelle

Il vettore di stato di un sistema a due particelle è un elemento di $V_{1 \otimes 2}$ che evolve seguendo la seguente equazione

$$i\hbar |\dot{\psi}\rangle = \left[\frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + V(X_1, X_2) \right] |\psi\rangle = H |\psi\rangle.$$

Possiamo dividere i problemi in due classi:

- Classe A: H è separabile

$$H = H_1 + H_2$$

corrispondente a due particelle che non interagiscono tra di loro.

- Classe B: H non è separabile

$$V(X_1, X_2) \neq V_1(X_1) + V_2(X_2)$$

$$H \neq H_1 + H_2$$

Classe A

Se possiamo separare l'hamiltoniana, allora le energie si conservano separatamente e $E = E_1 + E_2$. Dato uno stato stazionario

$$|\psi(t)\rangle = |E\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

(10.17) diventa

$$[H_1(X_1, P_1) + H_2(X_2, P_2)]|E\rangle = E|E\rangle.$$

Dal momento che le due hamiltoniane commutano possiamo trovare degli autostati simultanei $|E_1\rangle \otimes |E_2\rangle = |E_1 E_2\rangle$ dove $|E_1\rangle$ e $|E_2\rangle$ sono soluzioni di

$$H_1^{(1)}|E_1\rangle = E_1|E_1\rangle$$

$$H_2^{(2)}|E_2\rangle = E_2|E_2\rangle.$$

Possiamo riscrivere (10.13) come

$$|\psi(t)\rangle = |E_1\rangle e^{-iE_1 t/\hbar} \otimes |E_2\rangle e^{-iE_2 t/\hbar}$$

che in base X diventa

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V_1(x_1) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_2(x_2) \right] \psi_E(x_1, x_2) = E \psi_E(x_1, x_2).$$

Assumiamo

$$\psi_E(x_1, x_2) = \langle x_1 x_2 | E \rangle = \psi_{E_1}(x_1) \psi_{E_2}(x_2)$$

e risolvendo la predente equazione differenziale con il metodo delle variabili separate otteniamo

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi_{E_1}(x_1)} \left[\frac{-\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V_1(x_1) \right] \psi_{E_1}(x_1) \\ + \frac{1}{\psi_{E_2}(x_2)} \left[\frac{-\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_2(x_2) \right] \psi_{E_2}(x_2) = E. \end{aligned}$$

Chiaramente

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi_{E_1}(x_1)} \left[\frac{-\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V_1(x_1) \right] \psi_{E_1}(x_1) &= E_1 \\ \frac{1}{\psi_{E_2}(x_2)} \left[\frac{-\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_2(x_2) \right] \psi_{E_2}(x_2) &= E_2 \end{aligned}$$

con $E_1 + E_2 = E$, dunque

$$\begin{aligned} \psi_E(x_1, x_2, t) &= \psi_E(x_1, x_2) e^{-iEt/\hbar} \\ &= \psi_{E_1}(x_1) e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_{E_2}(x_2) e^{-iE_2 t/\hbar} \end{aligned}$$

dove ψ_{E_1} e ψ_{E_2} sono autofunzioni dell'equazione di Shrodinger con autovalori E_1 e E_2 .

Classe B

In questo caso abbiamo due particelle interagenti. La soluzione in realtà la abbiamo già vista nel capitolo 2 con il problema dei due corpi ($V(x_1, x_2) = V(x_1 - x_2)$). Ci è sufficiente trasformare il sistema in due coordinate fittizie: quella del centro di massa

$$x_{CM} = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

con massa $M = m_1 + m_2$ e momento $p_{CM} = M \dot{x}_{CM} = m_1 \dot{x}_1 + m_2 \dot{x}_2$, e quella relativa

$$x = x_1 - x_2$$

con massa $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ e momento $p = \mu \dot{x}$ che si muove sotto il potenziale $V(x)$. La nuova hamiltoniana è

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(x_1, p_1; x_2, p_2) &\rightarrow \mathcal{H}_{(x_{CM}, p_{CM}; x, p)} \\ &= \mathcal{H}_{CM} + \mathcal{H}_{relative} = \frac{p_{CM}^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(x).\end{aligned}$$

La trasformazione è canonica regolare e i nuovi operatori hanno

$$\begin{aligned}[X_{CM}, P_{CM}] &= i\hbar \\ [X, P] &= i\hbar\end{aligned}$$

e tutti gli altri commutatori uguali a 0. Nella teoria quantistica H e le sue autofunzioni vengono fattorizzate

$$\begin{aligned}H &= \frac{p_{CM}^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(X) \\ \psi_E(x_{CM}, x) &= \frac{e^{ip_{CM} \cdot x_{CM}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \cdot \psi_{E_{rel}}(x) \\ E &= \frac{p_{CM}^2}{2M} + E_{rel}.\end{aligned}$$

Come per il caso classico è conveniente mettersi nel sistema di riferimento del CM.

10.1.5 Generalizzazione ad N particelle in una dimensione

Tutti i risultati possono essere generalizzati facilmente ad N dimensioni ad esclusione dell'ultimo. In generale non è possibile rendere le particelle indipendenti usando le particelle fittizie CM e relative. Esistono alcune eccezioni come gli oscillatori armonici, ma non esiste una regola generale per risolvere tutti i casi.

10.2 Generalizzazione ad N dimensioni

Matematicamente non c'è differenza tra una particella in N dimensioni e N particelle in una dimensione. Comunque generalmente si cambiano i nomi delle variabili, numerando le particelle e chiamando x, y e z (oppure in polari) le dimensioni.

10.3 Particelle identiche

Quando il formalismo sviluppato in questo capitolo viene applicato a due particelle identiche, allora vengono fuori dei risultati inusuali. Con particelle identiche si intende due particelle per cui non esiste alcun esperimento capace di rivelare proprietà intrinseche distinte. Identico significa la stessa cosa sia nella teoria classica che in quella quantistica, ma vediamo quali conseguenze portano nei due casi.

10.3.1 Caso classico

Immaginiamo di trovarci di fronte ad biliardo e di vedere due palle identiche. Le chiamiamo 1 e 2, osservando la posizione sappiamo quale è una e quale è l'altra e anche in un secondo momento seguendo le traiettorie possiamo distinguerle. Un osservatore che arriva in un secondo momento non può distinguerle, ma rinominandole a suo piacere può distinguerle in un momento futuro. Possiamo dunque dire che in meccanica classica la "storia" di due particelle identiche è ciò che ci permette di distinguerne una dall'altra.

In meccanica quantistica non esiste il concetto di traiettoria, dunque anche osservandole dall'inizio non ci è possibile distinguere due configurazioni sotto lo scambio di coordinate.

10.3.2 Il sistema a due particelle, stato simmetrico e antisimmetrico

Supponiamo di avere un sistema a due particelle distinte, la misura del sistema mostra la particella 1 ad a e 2 a b . Scriviamo allora lo stato come

$$|\psi\rangle = |x_1 = a, x_2 = b\rangle = |ab\rangle.$$

Essendo le particelle distinguibili, scambiarle significa che lo stato diventa

$$|\psi\rangle = |ba\rangle.$$

Ripetiamo l'esperimento con due particelle identiche e misuriamo di nuovo 1 in a e 2 in b, il vettore di stato è $|ab\rangle$ o $|ba\rangle$? Ricordiamo dal capitolo 4 che $|\psi\rangle$ e $\alpha|\psi\rangle$ sono fisicamente equivalenti, quindi si richiede

$$|\psi(a, b)\rangle = \alpha|\psi(b, a)\rangle.$$

Ma i due vettori $|ab\rangle$ e $|ba\rangle$ non sono multipli l'uno dell'altro, dunque nessuno dei due va bene. Il problema è che la nostra misura è composta da due numeri non ordinati. Per risolvere questo problema possiamo dire che lo stato è dato da $X_1 + X_2$ con autovalori $a + b$. Anche se $|ab\rangle$ e $|ba\rangle$ sono autovettori diversi hanno lo stesso autovalore, lo stato cercato sarà quindi un vettore parte della degenerazione a due dimensioni creata da questi due vettori, quindi ricordando la richiesta di prima abbiamo

$$\beta|ab\rangle + \gamma|ba\rangle = \alpha[\beta|ba\rangle + \gamma|ab\rangle]$$

da cui $\alpha = \pm 1$. Abbiamo quindi 2 stati possibili:

- Lo stato simmetrico (o vettore simmetrico)

$$|ab, S\rangle = |ab\rangle + |ba\rangle;$$

- Lo stato antisimmetrico (o vettore antisimmetrico)

$$|ab, A\rangle = |ab\rangle - |ba\rangle;$$

Entrambi questi stati non sono normalizzati

10.3.3 Bosoni e fermioni

Anche se sia lo stato S che A sono fisicamente accettabili, è ovvio che bisogna scegliere uno dei due per ogni specie di particelle, se infatti esistesse un tipo di particella che può esistere in entrambi li stati, allora esisterebbe anche

$$|\psi\rangle = \alpha|\omega_1\omega_2, S\rangle + \beta|\omega'_1\omega'_2, A\rangle$$

che non è né S né A.

La natura sembrerebbe rispettare questa separazione tra le particelle. Ci sono particelle come pioni, fotoni e gravitoni che sono sempre trovati in stati simmetrici (queste particelle sono chiamate bosoni) e particelle come elettrone, protone e neutrone che sono sempre trovate in stati antisimmetrici (questi sono i fermioni).

Vediamo adesso un proprietà fondamentale dei fermioni. Consideriamo lo stato di due fermioni

$$|\omega_1\omega_2, A\rangle = |\omega_1\omega_2\rangle - |\omega_2\omega_1\rangle,$$

se $\omega_1 = \omega_2 = \omega$ allora

$$|\omega\omega, A\rangle = |\omega\omega\rangle - |\omega\omega\rangle = 0.$$

Questo è il famoso principio di esclusione di Pauli che dice che due fermioni non possono essere nello stesso stato quantistico.

Rimane una domanda, come possiamo dire se una particella è un fermione o un bosone? Esistono due modi:

- Il primo viene dalla teoria dei campi quantistica e ne citiamo qui solo i risultati: "Se una particella ha spin multiplo pari di $\hbar/2$ allora è un bosone, se ha uno spin multiplo dispari di $\hbar/2$ allora è un fermione"
- Il secondo metodo è osservare la funzione d'onda della particella: se è simmetrica allora abbiamo un bosone, se antisimmetrica abbiamo un fermione.

Prima di vedere un esperimento che ci dia la forma dell'onda delle particelle studiamo gli spazi di Hilbert di bosoni e fermioni.

10.3.4 Spazio di Fock

Il titolo di questa sezione sarebbe "Spazi di Hilbert bosonici e fermionici" ma sono un caso particolare degli spazi di Fock studiati nella teoria dei campi quantistici.

Dati due bosoni (fermioni) identici, essi saranno sempre rappresentati da vettori stato simmetrici (antisimmetrici). Chiamiamo lo spazio dei vettori bosonici simmetrici \mathbb{V}_S e quello dei vettori fermionici antisimmetrici \mathbb{V}_A . Per studiare la relazione tra questi due spazi osserviamo che lo spazio $V_{1\otimes 2}$ è formato da vettori della forma $|\omega_1\omega_2\rangle = |\omega_1\rangle \otimes |\omega_2\rangle$ e per ogni suo vettore esiste una proiezione nello spazio bosonico ($|\omega_1 = a, \omega_2 = b\rangle + |\omega_1 = b, \omega_2 = a\rangle$) e una nello spazio fermionico ($|\omega_1 = a, \omega_2 = b\rangle - |\omega_1 = b, \omega_2 = a\rangle$). Si giunge velocemente alla conclusione che

$$\mathbb{V}_{1\otimes 2} = \mathbb{V}_S \oplus \mathbb{V}_A.$$

Questi due spazi sono quindi ortogonali e un sistema esistente in V_S (V_A) rimane in V_S (V_A), quindi è sufficiente studiare i sistemi in uno dei due spazi. Dobbiamo però sempre normalizzare questi vettori. Osserviamo che $|\omega_1\omega_2\rangle$ e $|\omega_2\omega_1\rangle$ costituiscono una base ortonormale di $V_{1\otimes 2}$, quindi il fattore di normalizzazione è $2^{-1/2}$. Qualora $\omega_1 = \omega_2$, il vettore è già normalizzato. Abbiamo quindi una base completa su cui poter espandere gli stati $|\psi_S\rangle$.

La probabilità assoluta di trovare un sistema nello stato $|\omega_1\omega_2, S\rangle$ è

$$P_S(\omega_1, \omega_2) = |\langle \omega_1\omega_2, S | \psi_S \rangle|^2$$

e la condizione di normalizzazione è

$$\begin{aligned} 1 = \langle \psi_S | \psi_S \rangle &= \sum_{\text{dist}} |\langle \omega_1\omega_2, S | \psi_S \rangle|^2 \\ &= \sum_{\text{dist}} P_S(\omega_1, \omega_2), \end{aligned}$$

dove "dist" indica stati distinti, quindi dobbiamo dividere per 2 per non contare due volte $\omega_1\omega_2 = \omega_2\omega_1$. Se avessimo una variabile continua (come X), allora ci è sufficiente prendere la proiezione di $|\psi_S\rangle$ sull'autovalore normalizzato della variabile per ottenere

$$P_S(x_1, x_2) = |\langle x_1x_2, S | \psi_S \rangle|^2$$

con condizione di normalizzazione

$$1 = \iint P_S(x_1, x_2) \frac{dx_1 dx_2}{2} = \iint |\langle x_1x_2, S | \psi_S \rangle|^2 \frac{dx_1 dx_2}{2}.$$

In questo caso può essere conveniente scrivere la funzione d'onda come

$$\psi_S(x_1, x_2) = 2^{-1/2} \langle x_1x_2, S | \psi_S \rangle$$

di modo che la normalizzazione sia

$$1 = \iint |\psi_S(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2.$$

Tuttavia così facendo

$$P_S(x_1, x_2) = 2 |\psi_S(x_1, x_2)|^2.$$

10.3.5 Determinazione della statistica della particella

Vediamo adesso l'esperimento che avevamo preannunciato per vedere se una determinata particella è un bosone o un fermione. Per rendere il tutto più concreto facciamo un esempio.

Abbiamo due pioni non interagenti e vogliamo vedere se sono bosoni o fermioni. Mettiamoli in una scatola monodimensionale e misuriamo l'energia che troviamo negli stati quantistici $n = 3$ e $n = 4$. Dipendentemente dalla loro statistica (funzione d'onda simmetrica o antisimmetrica), la distribuzione nello spazio è

$$\begin{aligned} P_{S/A}(x_1, x_2) &= 2 |\psi_{S/A}(x_1, x_2)|^2 \\ &= 2 |2^{-1/2} [\psi_3(x_1)\psi_4(x_2) \pm \psi_4(x_1)\psi_3(x_2)]|^2 \\ &= |\psi_3(x_1)|^2 |\psi_4(x_2)|^2 + |\psi_4(x_1)|^2 |\psi_3(x_2)|^2 \\ &\quad \pm [\psi_3^*(x_1)\psi_4(x_1)\psi_4^*(x_2)\psi_3(x_2) + \psi_4^*(x_1)\psi_3(x_1)\psi_3^*(x_2)\psi_4(x_2)]. \end{aligned}$$

Compariamo questa distribuzione con quella di due particelle distinte e chiamate 1 e 2: il primo termine è lo stesso e rappresenta la probabilità che la particella 1 nello stato 3 (distribuzione $|\psi_3(x)|^2$) sia a x_1 e che la particella 2 in stato 4 (distribuzione $|\psi_4(x)|^2$) sia ad x_2 , il secondo è la stessa ma con posizioni invertite; la loro somma ci dà $P_D(x_1, x_2)$ (probabilità particelle distinte). I due successivi termini sono chiamati i termini di interferenza e sono dati dal fatto che in meccanica quantistica due particelle identiche sono la stessa particella e a differenza della meccanica classica non sono etichettabili. I termini di interferenza ci dicono se una particella è un bosone o un fermione. Preso un ensemble di particelle in stato $n = 3$ e $n = 4$ otterremo una distribuzione

$$P_A(x_1 \rightarrow x, x_2 \rightarrow x) \rightarrow 0$$

per i fermioni (principio di esclusione di Pauli) e una distribuzione

$$P_S(x_1 \rightarrow x, x_2 \rightarrow x) = 2 \left[|\psi_3(x)|^2 |\psi_4(x)|^2 + |\psi_4(x)|^2 |\psi_3(x)|^2 \right]$$

per i bosoni (che è il doppio più grande di P_D). Spesso viene detto che i fermioni si evitano seguendo la statistica di "Fermi-Dirac" e i bosoni tendono a conglomerarsi seguendo la statistica di "Bose-Einstein".

La distribuzione ci dice anche se le particelle sono veramente identiche (e dunque se esistono altre proprietà distinte tra particelle della stessa specie di cui non sappiamo l'esistenza). Se le particelle non sono esattamente uguali troveremo una distribuzione di probabilità $P_A(x_1 \rightarrow x, x_2 \rightarrow x) > 0$ per i fermioni e una distribuzione di probabilità $P_S(x_1 \rightarrow x, x_2 \rightarrow x) < 2P_D$ se sono bosoni.

10.3.6 Sistemi di N particelle identiche

Il caso $N = 2$ ha una caratteristica che è trovata a N grandi. Prendiamo il caso di 3 particelle identiche in una scatola. Misuriamo l'energia e troviamo n_1 , n_2 e n_3 , ma dal momento che le 3 particelle sono identiche possiamo solo dire che l'energia totale è

$$E = \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right) (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2).$$

Ci sono $3! = 6$ stati possibili con questa energia, quindi gli stati sono elementi dell'autospazio generato da questi vettori dove lo scambio di due variabili porta ad un cambio dello stato di un fattore a . Dal momento che due scambi equivalgono a non farne alcuno, $a = \pm 1$. Esistono quindi solo 2 stati con questa proprietà:

- Stato completamente simmetrico ($a = 1$)

$$|n_1 n_2 n_3, S\rangle = \frac{1}{(3!)^{1/2}} [|n_1 n_2 n_3\rangle + |n_1 n_3 n_2\rangle + |n_2 n_3 n_1\rangle + |n_2 n_1 n_3\rangle + |n_3 n_2 n_1\rangle + |n_3 n_1 n_2\rangle]$$

- Stato completamente antisimmetrico ($a = -1$)

$$|n_1 n_2 n_3, A\rangle = \frac{1}{(3!)^{1/2}} [|n_1 n_2 n_3\rangle - |n_1 n_3 n_2\rangle + |n_2 n_3 n_1\rangle - |n_2 n_1 n_3\rangle + |n_3 n_1 n_2\rangle - |n_3 n_2 n_1\rangle]$$

I bosoni sceglieranno sempre gli stati S, mentre i fermioni lo stato A. Come per N due possiamo esprimere la funzione d'onda in base X già normalizzata come

$$\psi_{S/A}(x_1, x_2, x_3) = (3!)^{-1/2} \langle x_1 x_2 x_3, S/A | \psi_{S/A} \rangle = \langle x_1 x_2 x_3 | \psi_{S/A} \rangle$$

con

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{S/A}|^2 dx_1 dx_2 dx_3 = 1.$$

10.3.7 Quando è possibile ignorare la simmetrizzazione e antisimmetrizzazione?

Un'assunzione tipica dei fisici è la possibilità di poter ignorare una zona dell'universo e isolare un sistema per poterlo studiare con maggiore facilità. In meccanica classica questa possibilità è data matematicamente dalla possibilità di poter separare l'hamiltoniana

$$\mathcal{H}_{\text{universe}} = \mathcal{H}_{\text{sys}} + \mathcal{H}_{\text{rest}}.$$

Un esempio è ignorare l'attrazione gravitazionale di Plutone nella misura del peso di un oggetto.

In meccanica quantistica la separabilità dell'hamiltoniana porta ad una fattorizzazione della funzione d'onda dell'universo

$$\psi_{\text{universe}} = \psi_{\text{sys}} \cdot \psi_{\text{rest}}.$$

La possibilità di fattorizzare la funzione d'onda ci porta a poter escludere ψ_{rest} dalla distribuzione di probabilità; se ad esempio voglia la probabilità che il sistema abbia una certa coordinata x_s :

$$\begin{aligned} P(x_s) &= \int |\psi_{\text{universe}}(x_s, x_{\text{rest}})|^2 dx_{\text{rest}} \\ &= |\psi_{\text{sys}}(x_s)|^2 \int |\psi(x_{\text{rest}})|^2 dx_{\text{rest}} \\ &= |\psi_{\text{sys}}(x_s)|^2. \end{aligned}$$

Le cose si fanno complicate quando abbiamo particelle uguali nel sistema e nel resto dell'universo. Anche se tra i due non c'è interazione non è permesso avere particelle in S ed A contemporaneamente e quindi quando la funzione d'onda non è fattorizzabile non potremmo più avere

$$P(x_s, x_{\text{rest}}) = P(x_s) P(x_{\text{rest}}).$$

È ragionevole pensare che in alcuni casi sia possibile poter ignorare le condizioni di simmetrizzazione e antisimmetrizzazione. Per esempio, immaginiamo di avere due oscillatori, uno sulla terra e uno sulla luna, con pioni ad energia minima. Le loro funzioni d'onda saranno due gaussiane $G_E(x_E)$ (earth) e $G_M(x_M)$ (moon). Se troviamo un pione sulla terra è ragionevole pensare che sia quello che già stava sulla terra poiché le probabilità che esso sia quello proveniente dalla luna sono infinitesime. Possiamo quindi assumere che

$$\psi(x_E, x_M) = G_E(x_E) G_M(x_M)$$

dunque

$$\begin{aligned} P(x_E) &= |G_E(x_E)|^2 \int |G_M(x_M)|^2 dx_M \\ &= |G_E(x_E)|^2 \end{aligned}$$

e

$$P(x_M) = |G_M(x_M)|^2$$

Verifichiamo ora che se avessimo considerato la simmetrizzazione della funzione d'onda avremmo trovato pressoché la solita probabilità.

Capitolo 11

Conseguenze delle simmetrie

11.1 Introduzione

Nel capitolo 2 abbiamo visto l'importanza delle simmetrie nella meccanica hamiltoniana. In particolare:

- Se H è invariante sotto trasformazione infinitesima generata dalla trasformazione $g(q, p)$, allora g è conservata;
- Ogni trasformazione canonica che lascia H invariante genera nuove soluzioni alle equazioni del moto.

11.2 Invarianza sotto traslazioni nella teoria quantistica

Consideriamo una particella in una dimensione, vogliamo definire l'invarianza sotto traslazioni. A differenza della meccanica classica, qua non abbiamo una posizione o un momento ben definiti (e neanche un'energia). Abbiamo osservato tuttavia che i valori di aspettazione coincidono spesso con quanto osservato classicamente, definiamo quindi le due seguenti trasformazioni:

- Traslazione infinitesimale della posizione media

$$\langle X \rangle \rightarrow \langle X \rangle + \varepsilon;$$

- Conservazione del momento medio

$$\langle P \rangle \rightarrow \langle P \rangle.$$

Possiamo interpretare queste trasformazioni in due modi: come trasformazioni attive o come trasformazioni passive.

Partiamo dalle trasformazioni attive. Sotto una traslazione infinitesimale lo stato $|\psi\rangle$ diventa $|\psi_\varepsilon\rangle$ (stato traslato), di modo che

$$\begin{aligned}\langle \psi_\varepsilon | X | \psi_\varepsilon \rangle &= \langle \psi | X | \psi \rangle + \varepsilon; \\ \langle \psi_\varepsilon | P | \psi_\varepsilon \rangle &= \langle \psi | P | \psi \rangle.\end{aligned}$$

In termini di operatore di traslazione

$$T(\varepsilon)|\psi\rangle = |\psi_\varepsilon\rangle$$

(11.3) diventa

$$\begin{aligned}\langle \psi | T(\varepsilon)^\dagger X T(\varepsilon) | \psi \rangle &= \langle \psi | X | \psi \rangle + \varepsilon \\ \langle \psi | T(\varepsilon)^\dagger P T(\varepsilon) | \psi \rangle &= \langle \psi | P | \psi \rangle.\end{aligned}$$

Vediamo adesso come interpretare queste trasformazioni come passive. Questa volta sono gli operatori X e P ad essere modificati da $T(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned}X &\rightarrow T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) \\ P &\rightarrow T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon).\end{aligned}$$

In questo modo

$$\begin{aligned}T^\dagger(\varepsilon) X T(\varepsilon) &= X + \varepsilon I \\ T^\dagger(\varepsilon) P T(\varepsilon) &= P.\end{aligned}$$

A questo punto possiamo vedere come costruire l'operatore $T(\varepsilon)$, ma prima definiamo le trasformazioni (fin ora abbiamo solo visto come interpretarle ma non le abbiamo definite). Cominciamo da

$$T(\varepsilon)|x\rangle = |x + \varepsilon\rangle$$

e ricordandoci che la base X non è unica modifichiamo in

$$T(\varepsilon)|x\rangle = e^{i\varepsilon g(x)/\hbar}|x + \varepsilon\rangle,$$

in questo modo rendiamo T unitaria e che agisce sulla base completa e^{ikx} , dove $k = \varepsilon g(x)/\hbar$. Se non avessimo fatto questa modifica andando avanti con i calcoli avremmo trovato che $\langle P \rangle$ è sempre conservato sotto traslazioni infinitesime, cosa non vera. Osserviamo che $T(\varepsilon)$ è un operatore unitario perché manda basi ortonormali in basi ortonormali, segue che la sua azione su un vettore $|\psi\rangle$ è

$$\begin{aligned} |\psi_\varepsilon\rangle &= T(\varepsilon)|\psi\rangle = T(\varepsilon) \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int_{-\infty}^{\infty} |x + \varepsilon\rangle \langle x | \psi \rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle \langle x' - \varepsilon | \psi \rangle dx' \quad (x' = x + \varepsilon) \end{aligned}$$

e dato $\langle x | \psi \rangle = \psi(x)$, allora

$$\langle x | T(\varepsilon) | \psi \rangle = \psi(x - \varepsilon)$$

Segue che

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &\xrightarrow{T(\varepsilon)} \langle X \rangle + \varepsilon \\ \langle P \rangle &\rightarrow \langle P \rangle + \varepsilon \langle f(X) \rangle \end{aligned}$$

dove $f = g'$ e la seconda trasformazione viene trovata risolvendo $\langle \psi_\varepsilon | P | \psi_\varepsilon \rangle$. A questo punto con la richiesta che $\langle P \rangle$ sia conservato otteniamo che $g = \text{costante}$.

Vogliamo ora dare una definizione ben precisa di invarianza sotto traslazioni. Poniamo

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi_\varepsilon | H | \psi_\varepsilon \rangle.$$

Per procedere definiamo esplicitamente $T(\varepsilon)$: osserviamo che quando $\varepsilon = 0$ non c'è traslazione (quindi $T(\varepsilon) = I$), segue

$$T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} G$$

dove la costante $-i/\hbar$ è introdotta per fare tornare le cose alla fine e G è il generatore di traslazioni. Per trovare G prendiamo (11.10) ed espandiamo entrambi i lati

$$\langle x | I | \psi \rangle - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle x | G | \psi \rangle = \psi(x) - \frac{d\psi}{dx} \varepsilon,$$

otteniamo

$$\langle x | G | \psi \rangle = -i\hbar \frac{d\psi}{dx} \rightarrow G = P$$

e

$$T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P.$$

Come nella meccanica classica il momento è il generatore di traslazioni e dall'invarianza sotto traslazione segue la conservazione del momento:

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \langle \psi_\varepsilon | H | \psi_\varepsilon \rangle \\ &= \langle T(\varepsilon) \psi | H | T(\varepsilon) \psi \rangle = \langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) H T(\varepsilon) | \psi \rangle \\ &= \left\langle \psi \left| \left(I + \frac{i\varepsilon}{\hbar} P \right) H \left(I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P \right) \right| \psi \right\rangle \\ &= \langle \psi | H | \psi \rangle + \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle \psi | [P, H] | \psi \rangle + O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

troviamo così

$$\langle \psi | [P, H] | \psi \rangle = 0.$$

A questo punto dal teorema di Ehrenfest segue

$$\langle [P, H] \rangle = 0 \rightarrow \langle \dot{P} \rangle = 0.$$

11.2.1 Traslazione in termini di trasformazioni passive

Nella precedente discussione abbiamo definito l'invarianza sotto traslazioni guardando la traslazione sotto trasformazione attiva, facciamo ora la stessa cosa guardando la traslazione come trasformazione passiva.

Inserendo (11.13) nella prima equazione di (11.7) otteniamo

$$\left(I + \frac{i\varepsilon}{\hbar}G\right)X\left(I - \frac{i\varepsilon}{\hbar}G\right) = X + \varepsilon I \rightarrow [X, G] = i\hbar I,$$

segue

$$G = P + f(X).$$

ripetendo i calcoli con la seconda equazione di (11.7) otteniamo

$$[P, G] = 0,$$

dunque $f(X) = 0$, ottenendo di nuovo

$$T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon P}{\hbar}.$$

Abbiamo appena definito la traslazione in termini di trasformazione passiva, adesso per definire l'invarianza sotto trasformazioni poniamo

$$T^\dagger(\varepsilon)HT(\varepsilon) = H.$$

Possiamo riscrivere questa equazione usando il seguente teorema:

Per ogni operatore $\Omega(X, P)$ che può essere espanso come una serie di potenze, e per ogni operatore unitario U , vale

$$U^\dagger\Omega(X, P)U = \Omega(U^\dagger XU, U^\dagger PU).$$

Ponendo $U = T(\varepsilon)$ otteniamo

$$\Omega(X, P) \rightarrow T^\dagger\Omega(X, P)T = \Omega(T^\dagger XT, T^\dagger PT) = \Omega(X + \varepsilon I, P),$$

quindi Ω trasformato è trovato sostituendo X con $X + \varepsilon I$ e P con P . Applicando questo teorema a (11.19) otteniamo

$$H(X + \varepsilon I, P) = H(X, P)$$

che ha la forma della sua controparte classica ed è soddisfatto ogni volta che lo è la sua controparte classica.

La conservazione del momento segue se scriviamo $T(\varepsilon)$ in termini di P ed espandiamo al primo ordine di ε

$$\begin{aligned} 0 &= T^\dagger(\varepsilon)HT(\varepsilon) - H = (I + i\varepsilon P/\hbar)H(I - i\varepsilon P/\hbar) - H \\ &= \frac{-i\varepsilon}{\hbar}[H, P] \end{aligned}$$

che significa $\langle \dot{P} \rangle = 0$ per il teorema di Ehrenfest.

11.2.2 Digressione sull'analogia con la meccanica classica

. Riscrivendo il tutto in termini di trasformazione passiva abbiamo trovato che se nella meccanica classica avevamo

$$\mathcal{H}(x + \varepsilon, p) = \mathcal{H}(x, p),$$

nella meccanica quantistica abbiamo

$$H(X + \varepsilon I, P) = H(X, P).$$

Ma le similitudini non finiscono qui. La trasformazione infinitesima unitaria $T(\varepsilon)$ generata da P è la controparte della trasformazione infinitesimale canonica generata da p : se definiamo i cambiamenti δX e δP sotto come

$$\delta X = T^\dagger(\varepsilon)XT(\varepsilon) - X$$

$$\delta P = T^\dagger(\varepsilon)PT(\varepsilon) - P$$

otteniamo che

$$\delta X = \frac{-i\varepsilon}{\hbar}[X, P] = \varepsilon I$$

$$\delta P = \frac{-i\varepsilon}{\hbar}[P, P] = 0$$

o più in generale

$$\delta\Omega = \frac{-i\varepsilon}{\hbar}[\Omega, P] = \Omega(X + \varepsilon I, P) - \Omega(X, P)$$

che sono le controparti della trasformazione canonica generata da p :

$$\begin{aligned}\delta x &= \varepsilon\{x, p\} = \varepsilon \\ \delta p &= \varepsilon\{p, p\} = 0 \\ \delta\omega &= \varepsilon\{\omega, p\} = \omega(x + \varepsilon, p) - \omega(x, p).\end{aligned}$$

Se il problema è invariante sotto traslazioni abbiamo

$$\delta H = \frac{-i\varepsilon}{\hbar}[H, P] = 0 \rightarrow \langle \dot{P} \rangle = 0$$

mentre classicamente

$$\delta\mathcal{H} = \varepsilon\{\mathcal{H}, p\} = 0 \rightarrow \dot{p} = 0 \quad \text{by } \dot{p} = \{p, \mathcal{H}\}.$$

In generale la trasformazione infinitesima generata da $g(x, p)$,

$$\delta\omega = \varepsilon\{\omega, g\},$$

ha come controparte quantistica la trasformazione unitaria infinitesima $U_G(\varepsilon) = I - i\varepsilon G/\hbar$,

$$\delta\Omega = \frac{-i\varepsilon}{\hbar}[\Omega, G].$$

Un ultima corrispondenza è quella con la conservazione delle PB tra x e p quando $g(x, p)$ è canonica. Nella teoria quantistica, la quantità che si conserva è la commutazione tra le X e le P : se

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}I$$

allora sotto trasformazione unitaria

$$[U^\dagger X_i U, U^\dagger P_j U] = i\hbar\delta_{ij}I,$$

dunque le nuove X e P trasformate hanno la stessa relazione di commutazione delle vecchie. Questa corrispondenza si mantiene anche per trasformazioni finite (sequenza di trasformazioni infinitesime) e per trasformazioni canoniche regolari (che non hanno forme infinitesime).

Ritorniamo sul problema dell'invarianza sotto traslazione e osserviamo che in tal caso ci è possibile trovare un'autobase simultanea per P e H . Questi si può vedere osservando che

$$[P, H] = 0 \rightarrow [P, U(t)] = 0$$

essendo il propagatore una funzione di H (che non deve essere dipendente dal tempo, se lo è c'è bisogno che il commutatore tra P e H sia sempre 0).

11.2.3 Trasformazioni finite

Vediamo come scrivere l'operatore $T(a)$ corrispondente ad una trasformazione finita. Dividiamo a in N parti con $N \rightarrow \infty$, in questo modo sappiamo che

$$T(a/N) = I - \frac{ia}{\hbar N}P.$$

Sommiamo N traslazioni e otteniamo

$$T(a) = \lim_{N \rightarrow \infty} (T(a/N))^N = e^{-iaP/\hbar}.$$

Andando in base X

$$T(a) \xrightarrow{\text{Base } X} e^{-ad/dx}$$

troviamo

$$\langle x|T(a)|\psi\rangle = \psi(x) - \frac{d\psi}{dx}a + \frac{d^2\psi}{dx^2}\frac{a^2}{2!} + \dots$$

che è la serie di Taylor per $\psi(x-a)$ nel punto x .

11.2.4 Digressione sulle trasformazioni canoniche e unitarie finite

Anche se è ovvio che la corrispondenza tra trasformazioni canoniche e unitarie continui nel caso finito, vediamo come accade. Per concretezza consideriamo il caso delle traslazioni.

Nella teoria quantistica abbiamo

$$\Omega \rightarrow T^\dagger(a)\Omega T(a) = e^{iaP/\hbar}\Omega e^{-iaP/\hbar}$$

che usando l'identità

$$e^{-A} B e^{+A} = B + [B, A] + \frac{1}{2!} [[B, A], A] + \frac{1}{3!} \dots$$

diventa

$$\Omega \rightarrow \Omega + a \left(\frac{-i}{\hbar} \right) [\Omega, P] + \frac{1}{2!} a^2 \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 [[\Omega, P], P] + \dots$$

Nel caso classico sotto uno spostamento δa

$$\delta \omega = \delta a \{ \omega, p \} \rightarrow \frac{d\omega}{da} = \{ \omega, p \}$$

che applicato a $d\omega/da$ diventa

$$\frac{d}{da} (d\omega/da) = d^2 \omega / da^2 = \{ d\omega/da, p \} = \{ \{ \omega, p \}, p \}.$$

La corrispondenza può essere osservata espandendo con Taylor

$$\omega \rightarrow \omega + a \{ \omega, p \} + \frac{a^2}{2!} \{ \{ \omega, p \}, p \} + \dots$$

11.2.5 Sistemi di particelle

Riscriviamo l'analogo della invarianza dell'hamiltoniana sotto traslazioni per N particelle. Partiamo da

$$\langle x_1, \dots, x_N | T(\varepsilon) | \psi \rangle = \psi(x_1 - \varepsilon, \dots, x_N - \varepsilon)$$

Espandiamo all'ordine ε entrambi i lati

$$\left\langle x_1, \dots, x_N \left| I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P \right| \psi \right\rangle = \psi(x_1, \dots, x_N) - \sum_{i=1}^N \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial x_i},$$

segue

$$T(\varepsilon) = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=1}^N P_i = I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P$$

dove P è l'operatore del momento totale. Abbiamo inoltre

$$\begin{aligned} T(\varepsilon)^\dagger X_i T(\varepsilon) &= X_i + \varepsilon I \\ T(\varepsilon)^\dagger P_i T(\varepsilon) &= P_i, \quad i = 1, \dots, N \end{aligned}$$

e l'invarianza sotto traslazione

$$H(X, P) = T(\varepsilon)^\dagger H(X, P) T(\varepsilon) = H(X + \varepsilon I, P)$$

in questo caso significa che H (V per essere precisi) deve essere una funzione della differenza tra le coordinate (ovvero le particelle interagiscono tra di loro ma non con l'esterno).

11.2.6 Implicazione dell'invarianza sotto traslazioni

Consideriamo un sistema con un'invarianza sotto traslazioni. Moltiplichiamo entrambe le parti di (11.21) per T ed usando la sua unitarietà otteniamo

$$[T(a), H] = 0$$

segue che

$$[T(a), U(t)] = 0.$$

Per vedere la conseguenza della commutazione tra il propagatore e la traslazione vediamo un esempio. Al tempo $t = 0$ due osservatori hanno due identici sistemi centrati in $x = 0$ (A) e $x = a$ (B): se $|\psi\rangle$ è lo stato del sistema di A, allora $T(a)|\psi\rangle$ è lo stato di B. Al tempo t il sistema di A è diventato $U(t)|\psi(0)\rangle$ e quello di B è $U(t)T(a)|\psi(0)\rangle = T(a)U(t)|\psi(0)\rangle$ che è lo stesso di A ma traslato, quindi i due sistemi al tempo t differiranno per la stessa distanza per cui differivano al tempo $t = 0$.

Fortunatamente ogni interazione conosciuta (debole, forte, elettromagnetica e gravitazionale) è invariante sotto traslazioni, quindi ogni esperimento ripetuto in siti diversi avrà lo stesso risultato.

11.3 Invarianza sotto traslazione temporale

L'omogeneità dello spazio ci assicura che un esperimento ripetuto in luoghi diversi ci darà gli stessi risultati, allo stesso modo l'omogeneità del tempo ci assicura che lo stesso esperimento ripetuto in momenti diversi ci darà gli stessi risultati. Vediamo adesso da quale legge di conservazione essa deriva.

Prepariamo al tempo t_1 un sistema con stato $|\psi_0\rangle$ e lasciamolo evolvere per un istante ε , otterremo

$$|\psi(t_1 + \varepsilon)\rangle = \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(t_1) \right] |\psi_0\rangle.$$

Lo stesso stato al tempo t_2 lasciato evolvere per lo stesso istante diventerà

$$|\psi(t_2 + \varepsilon)\rangle = \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(t_2) \right] |\psi_0\rangle.$$

Abbiamo che lo stato evoluto è lo stesso se

$$\begin{aligned} 0 &= |\psi(t_2 + \varepsilon)\rangle - |\psi(t_1 + \varepsilon)\rangle \\ &= \left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \right) [H(t_2) - H(t_1)] |\psi_0\rangle \end{aligned}$$

che implica

$$H(t_2) = H(t_1).$$

Dal momento che t_1 e t_2 sono arbitrari, segue che H è indipendente dal tempo. Usando il teorema di Ehrenfest per un operatore che non ha dipendenza temporale

$$i\hbar\langle\dot{\Omega}\rangle = \langle[\Omega, H]\rangle$$

e ponendo $\Omega = H$ otteniamo

$$\langle\dot{H}\rangle = 0$$

che è la legge di conservazione dell'energia.

Nello studio dell'evoluzione di un sistema, se l'energia è conservata abbiamo una grande semplificazione. L'equazione di Shrodinger ammette le soluzioni della forma

$$|\psi(t)\rangle = |E\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

dove il vettore $|E\rangle$ indipendente dal tempo soddisfa

$$H|E\rangle = E|E\rangle.$$

Le considerazioni fatte per le traslazioni spaziali si applicano anche qua, in particolare le 4 interazioni sono invarianti sotto traslazione temporale. L'invarianza delle 4 interazioni sotto traslazione spazio-temporale sono ciò che ci permette di studiare la natura, senza di esse gli esperimenti darebbero risultati casuali.

11.4 Invarianza pari

A differenza delle traslazioni spazio-temporali e delle rotazioni (che studieremo nel prossimo capitolo), l'invarianza pari è una trasformazione discreta. Classicamente essa significa

$$\begin{aligned} x &\xrightarrow{\text{parità}} -x; \\ p &\xrightarrow{\text{parità}} -p. \end{aligned}$$

Nella teoria quantistica l'azione dell'operatore sulla base X è

$$\Pi|x\rangle = |-x\rangle,$$

dunque su un vettore arbitrario

$$\begin{aligned}\Pi|\psi\rangle &= \Pi \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle \langle -x'|\psi\rangle dx',\end{aligned}$$

segue che dato $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$ allora

$$\langle x|\Pi|\psi\rangle = \psi(-x).$$

Applicando (11.47) all'autostato del momento otteniamo

$$\Pi|p\rangle = |-p\rangle$$

dunque in quantistica, differentemente dalla teoria classica, è sufficiente definire l'azione su X .

Osserviamo che

$$\Pi^2|x\rangle = | -(-x)\rangle = |x\rangle$$

e dal momento che questo è vero per tutta la base

$$\Pi^2 = I,$$

segue che:

- $\Pi = \Pi^{-1}$;
- Gli autovalori di Π sono ± 1 ;
- Π è unitario e hermitiano;
- $\Pi^{-1} = \Pi^\dagger = \Pi$.

Gli autovalori con valore ± 1 sono detti pari o dispari. In base X e P i vettori pari hanno funzioni d'onda pari e i vettori dispari funzioni d'onda dispari, questa cosa non è vero in generale per una base Ω .

Possiamo definire Π anche in funzione della sua azione sugli operatori:

$$\Pi^\dagger X \Pi = -X$$

$$\Pi^\dagger P \Pi = -P,$$

dunque $H(X, P)$ è invariante sotto parità se

$$\Pi^\dagger H(X, P) \Pi = H(-X, -P) = H(X, P).$$

In questo caso

$$[\Pi, H] = 0$$

e una base comune di autovalori di Π e H esiste. In particolare per gli stati legati (la scatola) in una dimensione, ogni autovettore di H è automaticamente un autovettore di Π . Inoltre se H è pari invariante, allora

$$\Pi U(t) = U(t) \Pi.$$

Infine è stato dimostrato da Lee, Yang e Wu (sia matematicamente che sperimentalmente) che tutte le 4 interazioni fondamentali sono invarianti sotto parità ad eccezione delle interazioni deboli.

11.5 Simmetria temporale

Come la parità, questa è una simmetria discreta. Vediamo prima cosa significa inversione temporale (TRI=time-reversed symmetry) in meccanica classica.

Supponiamo di avere un pianeta in orbita intorno al sole con velocità positiva per θ crescente (anti-oraria). Siano $x(0), p(0)$ le condizioni iniziali, definiamo lo stato di inversione temporale come quello in cui la posizione è la stessa ma il momento è invertito

$$x_r(t) = x(t) \quad p_r(t) = -p(t).$$

In generale le quantità che hanno una potenza pari di t (come la posizione o l'energia cinetica) nella loro definizione, sono lasciate invarianti. Proviamo a dimostrare la TRI per il caso del pianeta. Poniamo $t = 0$ al punto di inversione temporale. Quando la traiettoria viene invertita otteniamo

$$x_r(t) = x(-t)$$

e la velocità diventa

$$\dot{x}_r(t) = \frac{dx(-t)}{dt} = -\frac{dx(-t)}{d(-t)} = -\dot{x}(-t).$$

Queste equazioni soddisfano la seconda legge di Newton proprio come lo fa $x_r(t)$

$$m \frac{d^2 x_r(t)}{dt^2} = m \frac{d^2 x(-t)}{dt^2} = m \frac{d^2 x(-t)}{d(-t)^2} = F(x(-t)) = F(x_r(t)).$$

Non tutti i problemi hanno simmetria temporale e neanche tutte le interazioni (non è specificato quali non l'hanno).

Vediamo come si traduce la richiesta che un problema abbia simmetria temporale in meccanica quantistica. Consideriamo una particella in una dimensione con un'hamiltoniana indipendente dal tempo. In base X l'equazione d'onda è

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

Osserviamo che l'operazione di inversione temporale si ottiene semplicemente prendendo il coniugato dell'onda

$$\psi \rightarrow \psi^*,$$

infatti p cambia segno e la distribuzione di probabilità delle coordinate rimane la stessa. Seguendo questi passaggi

$$\psi(x, 0) \rightarrow e^{-iH(x)T/\hbar} \psi(x, 0) \rightarrow e^{iH^*(x)T/\hbar} \psi^*(x, 0) \rightarrow e^{-iH(x)T/\hbar} e^{iH^*(x)T/\hbar} \psi^*(x, 0)$$

è chiaro abbiamo simmetria temporale se e solo se

$$H(x) = H^*(x),$$

ovvero H è reale.

Capitolo 12

Invarianza rotazionale e momento angolare

L'invarianza dell'hamiltoniana sotto rotazioni è talmente importante da necessitare un capitolo tutto suo. Se l'invarianza sotto traslazioni significa che la particella è libera, l'invarianza sotto rotazioni comporta delle dinamiche particolari. Studieremo prima il caso in 2 dimensioni e poi ci espanderemo alla terza (dimensioni spaziali).

12.1 Traslazioni in due dimensioni

Prima di guardare le rotazioni vediamo velocemente le traslazioni in due dimensioni.

Si deduce facilmente che i generatori delle traslazioni infinitesimali lungo x e y sono

$$\begin{aligned} P_x &\xrightarrow{\text{base delle coordinate}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \\ P_y &\xrightarrow{\text{base delle coordinate}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}. \end{aligned}$$

In termini di vettore operatore

$$\mathbf{P} = P_x \mathbf{i} + P_y \mathbf{j},$$

P_x e P_y sono il suo prodotto scalare con le direzioni i e j . Più in generale

$$\hat{n} \cdot \mathbf{P} \equiv P_{\hat{n}}.$$

Gli operatori di traslazioni finite sono trovati come nel capitolo precedente

$$T(\mathbf{a}) = e^{-iaP_{\hat{a}}/\hbar} = e^{-ia\hat{a} \cdot \mathbf{P}/\hbar} = e^{-i\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}/\hbar}.$$

Infine come sempre abbiamo

$$[P_x, P_y] = 0.$$

12.2 Rotazioni in due dimensioni

Nella meccanica classica l'effetto di una rotazione $\phi_0 \mathbf{k}$ ha il seguente effetto sullo stato della particella: prendendo $\mathbf{k} = z$ abbiamo

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} &\rightarrow \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi_0 & -\sin \phi_0 \\ \sin \phi_0 & \cos \phi_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \end{bmatrix} &\rightarrow \begin{bmatrix} \bar{p}_x \\ \bar{p}_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi_0 & -\sin \phi_0 \\ \sin \phi_0 & \cos \phi_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Chiamiamo questo operatore $R(\phi_0 \mathbf{k})$. Come $T(\mathbf{a})$ era l'operatore nello spazio di Hilbert associato alla traslazione \mathbf{a} , allora chiamiamo $U[R(\phi_0 \mathbf{k})]$ l'operatore dello spazio di Hilbert associato alla rotazione $R(\phi_0 \mathbf{k})$. Vedendo la trasformazione come una trasformazione attiva

$$|\psi\rangle \xrightarrow{U[R]} |\psi_R\rangle = U[R]|\psi\rangle.$$

Lo stato ruotato $|\psi_R\rangle$ deve essere tale che

$$\begin{aligned}\langle X \rangle_R &= \langle X \rangle \cos \phi_0 - \langle Y \rangle \sin \phi_0 \\ \langle Y \rangle_R &= \langle X \rangle \sin \phi_0 + \langle Y \rangle \cos \phi_0 \\ \langle P_x \rangle_R &= \langle P_x \rangle \cos \phi_0 - \langle P_y \rangle \sin \phi_0 \\ \langle P_y \rangle_R &= \langle P_x \rangle \sin \phi_0 + \langle P_y \rangle \cos \phi_0.\end{aligned}$$

Definiamo infine l'azione di $U[R]$ sugli autovettori della posizione:

$$U[R]|x, y\rangle = |x \cos \phi_0 - y \sin \phi_0, x \sin \phi_0 + y \cos \phi_0\rangle.$$

12.2.1 Costruzione esplicita di $U[R]$

Come abbiamo fatto per le traslazioni, costruiamo l'operatore $U[R]$. I passaggi sono i soliti del precedente capitolo, quindi riporto solo i risultati.

Considerando la rotazione infinitesimale $\varepsilon_z \mathbf{k}$, allora l'operatore è ovviamente

$$U[R(\varepsilon_z \mathbf{k})] = I - \frac{i\varepsilon_z L_z}{\hbar},$$

dove L_z , il generatore infinitesimale delle rotazioni, vale

$$L_z \xrightarrow{\text{base delle coordinate}} x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

oppure

$$L_z = XP_y - YP_x.$$

Vedendo la trasformazione come passiva

$$\begin{aligned}U^\dagger[R]XU[R] &= X - Y\varepsilon_z; \\ U^\dagger[R]YU[R] &= X\varepsilon_z + Y; \\ U^\dagger[R]P_xU[R] &= P_x - P_y\varepsilon_z; \\ U^\dagger[R]P_yU[R] &= P_x\varepsilon_z + P_y;\end{aligned}$$

si possono ottenere i vari commutatori

$$\begin{aligned}[X, L_z] &= -i\hbar Y; \\ [Y, L_z] &= i\hbar X; \\ [P_x, L_z] &= -i\hbar P_y; \\ [P_y, L_z] &= i\hbar P_x.\end{aligned}$$

L'operatore della trasformazione finita è

$$U[R(\phi_0 \mathbf{k})] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i}{\hbar} \frac{\phi_0}{N} L_z \right)^N = \exp(-i\phi_0 L_z / \hbar).$$

Possiamo usare anche le coordinate polari rendendo il tutto più facile, in tal caso abbiamo

$$L_z \xrightarrow{\text{base delle coordinate}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

da cui

$$\exp(-\phi_0 \partial / \partial \phi) \psi(\rho, \phi) = \psi(\rho, \phi - \phi_0).$$

Identifichiamo L_z come l'operatore del momento angolare, questo è conservato in un problema con invarianza rotazionale se:

$$U^\dagger[R]H(X, P_x; Y, P_y)U[R] = H(X, P_x; Y, P_y),$$

segue

$$[L_z, H] = 0.$$

Notiamo che H è invariante rotazionale se lo è \mathcal{H} . Infine osserviamo che la conservazione di $\langle L_z \rangle$ implica:

- Un esperimento e la sua versione ruotata, daranno lo stesso risultato se H è un invariante sotto rotazione;
- Esiste una base comune per L_z e H .

12.2.2 Operatori vettori

Chiamiamo $\mathbf{V} = V_x \mathbf{i} + V_y \mathbf{j}$ un operatore vettore se V_x e V_y trasformano come componenti di un vettore sotto la trasformazione passiva generata da $U[R]$

$$U^\dagger[R] V_i U[R] = \sum_j R_{ij} V_j$$

dove R_{ij} è la matrice di rotazione.

Digressione: insieme completo di osservabili compatibili

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

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

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

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

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

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

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

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

12.3 Autovalori di L_z

Come abbiamo visto H e L_z , in un problema con invarianza rotazionale, condividono una base.

Per vedere come sfruttare questo fatto cerchiamo prima le autofunzioni di L_z , come sempre cominciamo da

$$L_z |l_z\rangle = l_z |l_z\rangle$$

che nella base delle coordinate polari è

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_{l_z}(\rho, \phi)}{\partial \phi} = l_z \psi_{l_z}(\rho, \phi)$$

di soluzione

$$\psi_{l_z}(\rho, \phi) = R(\rho) e^{il_z \phi / \hbar},$$

dove $R(\rho)$ è una funzione normalizzabile rispetto a $\int_0^\infty \rho d\rho$. Affinché la soluzione abbia senso gli autovalori devono essere reali, dunque

$$\langle \psi_1 | L_z | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | L_z | \psi_1 \rangle^*$$

che nella base delle coordinate

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \psi_1^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi_2 \rho d\rho d\phi = \left[\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \psi_2^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi_1 \rho d\rho d\phi \right]^* \rightarrow \psi(\rho, 0) = \psi(\rho, 2\pi).$$

Troviamo che

$$1 = e^{2\pi i l_z / \hbar}$$

e dunque

$$l_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

chiamiamo m il numero magnetico quantistico. Osserviamo che $l_z = m\hbar$ implica che ψ è una funzione iniettiva di ϕ .

Guardiamo adesso la funzione $R(\rho)$, la sua presenza implica che l'autovalore l_z non è unico ma bensì costituisce un sottospazio (autospazio) V_m di valori. La soluzione di questo problema è introdurre un operatore che commuti con L_z le cui autofunzioni scelgano una base in ogni V_m .

Abbiamo già visto che L_z commuta con H , dunque in un problema con invarianza rotazionale lo stato è specificato dal momento angolare e dall'energia. Continueremo ora questa discussione, ma prima introduciamo una famiglia di funzioni

$$\Phi_m(\phi) = (2\pi)^{-1/2} e^{im\phi}$$

che indicano la parte angolare di $\psi_{l_z} = R(\rho)e^{il_z\phi/\hbar}$; queste funzioni obbediscono alla condizione di ortonormalità

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\phi) \Phi_{m'}(\phi) d\phi = \delta_{mm'}.$$

12.3.1 Soluzione ai problemi invarianti sotto rotazioni

Considera un problema dove $V(\rho, \phi) = V(\rho)$ (invariante rotazionale). L'equazione degli autovalori di H è

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(\rho) \right] \psi_E(\rho, \phi) = E \psi_E(\rho, \phi)$$

dove μ indica la massa dal momento che m denota il numero quantistico del momento angolare. In un problema di questo tipo $[H, L_z] = 0$, cerchiamo quindi le autofunzioni di H e L_z . Abbiamo visto che la forma più generale di autofunzione di L_z con autovalore $m\hbar$ è

$$\psi_m(\rho, \phi) = R(\rho)(2\pi)^{-1/2} e^{im\phi} = R(\rho)\Phi_m(\phi)$$

dove $R(\rho)$ in generale è da determinare. Nel caso presente R è determinata dalla condizione

$$\psi_{Em}(\rho, \phi) = R_{Em}(\rho)\Phi_m(\phi),$$

ovvero è un'autofunzione di H con autovalore E . Ricaviamo quindi l'equazione radiale che determina $R_{Em}(\rho)$ e i valori permessi di E :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) + V(\rho) \right] R_{Em}(\rho) = E R_{Em}(\rho).$$

Osserviamo quindi che cambiando il potenziale solo la parte radiale R_{Em} cambia, la parte angolare Φ_m no.

12.4 Momento angolare in 3 dimensioni

Passando a 3 dimensioni, il momento angolare guadagna 2 componenti, L_x e L_y . Si generalizzano tutte le conclusioni trovate per L_z , in particolare

$$L_x = YP_z - ZP_y$$

$$L_y = ZP_x - XP_z$$

$$L_z = XP_y - YP_x$$

Possiamo comporre rotazioni su diversi assi, ad esempio

$$U[R(-\varepsilon_y \mathbf{j})] U[R(-\varepsilon_x \mathbf{i})] U[R(\varepsilon_y \mathbf{j})] U[R(\varepsilon_x \mathbf{i})] = U[R(-\varepsilon_x \varepsilon_y \mathbf{k})].$$

I commutatori sono

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y.$$

Possiamo riassumere queste espressioni in forma compatta come

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L}$$

o

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} L_k,$$

dove ϵ_{ijk} è il tensore antisimmetrico di Levi-Civita.

Definiamo poi l'operatore del momento angolare quadrato

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2,$$

che commuta con il momento angolare

$$[L^2, L_i] = 0.$$

Avendo

$$[H, L_i] = 0,$$

segue

$$[H, L^2] = 0,$$

dunque in un problema con invarianza rotazionale L^2 e le 3 L vengono conservate.

Le rotazioni su uno stesso asse commutano, quindi possiamo vedere una rotazione finita come una sequenza di rotazioni infinitesimali che possiamo scrivere

$$U[R(\theta)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i}{\hbar} \frac{\theta}{N} \hat{\theta} \cdot \mathbf{L} \right)^N = e^{-i\theta \hat{\theta} \cdot \mathbf{L} / \hbar} = e^{-i\theta \cdot \mathbf{L} / \hbar},$$

dove $\hat{\theta}$ è un asse generico.

Vediamo adesso come trovare una base comune tra L^2 e L_i (per convenzione si sceglie L_z , non è possibile trovare una base che commuta tra L^2 e tutti e 3 gli L dato che questi non commutano tra di loro); dopodiché vedremo come trovare una base comune tra L^2 , L_z e H .

12.5 Il problema degli autovalori tra L^2 e L

Il problema che affronteremo è simile a quello affrontato per l'oscillatore armonico. Assumiamo che esista una base $|\alpha, \beta\rangle$ comune di L^2 e L_z :

$$L^2 |\alpha, \beta\rangle = \alpha |\alpha, \beta\rangle;$$

$$L_z |\alpha, \beta\rangle = \beta |\alpha, \beta\rangle.$$

Definiamo ora gli operatori di salita e discesa

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y$$

che soddisfano

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}$$

e ovviamente

$$[L^2, L_{\pm}] = 0.$$

L'operatore L_{\pm} alza o abbassa gli autovalori di L_z di \hbar lasciando L^2 invariato.

Dato un autostato $|\alpha, \beta\rangle$ esistono anche gli autostati $|\alpha, \beta+1\rangle, |\alpha, \beta+2\rangle, \dots$ e $|\alpha, \beta-1\rangle, |\alpha, \beta-2\rangle, \dots$. Ma se L^2 viene lasciato invariato allora deve esistere un limite a quanto possa essere alzato o abbassato l'autovalore, infatti dalla meccanica classica

$$|l_z| \leq (l^2)^{1/2}.$$

Per trovare questo limite nella meccanica quantistica poniamo

$$\langle \alpha, \beta | L^2 - L_z^2 | \alpha, \beta \rangle = \langle \alpha, \beta | L_x^2 + L_y^2 | \alpha, \beta \rangle$$

che implica

$$\alpha - \beta^2 \geq 0,$$

segue che esiste uno stato $|\alpha\beta_{\max}\rangle$ che non può essere alzato:

$$L_+ |\alpha\beta_{\max}\rangle = 0.$$

Usando $L_-L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$ troviamo

$$\begin{aligned} (L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) |\alpha\beta_{\max}\rangle &= 0 \\ (\alpha - \beta_{\max}^2 - \hbar\beta_{\max}) |\alpha\beta_{\max}\rangle &= 0 \\ \alpha &= \beta_{\max}(\beta_{\max} + \hbar), \end{aligned}$$

equivalentemente

$$\alpha = \beta_{\min}(\beta_{\min} - \hbar)$$

segue

$$\beta_{\min} = -\beta_{\max}$$

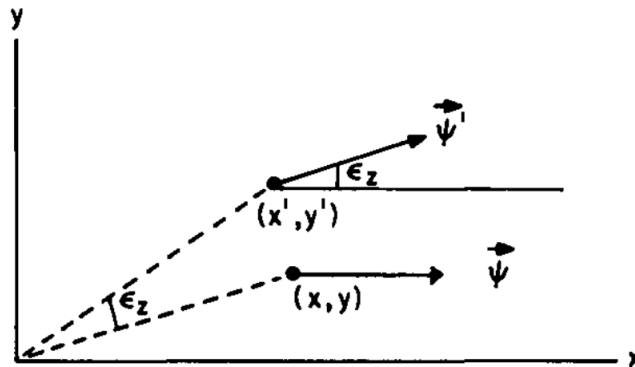
e

$$\begin{aligned} \beta_{\max} - \beta_{\min} &= 2\beta_{\max} = \hbar k \\ \beta_{\max} &= \frac{\hbar k}{2}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \\ \alpha &= (\beta_{\max})(\beta_{\max} + \hbar) = \hbar^2 \left(\frac{k}{2}\right) \left(\frac{k}{2} + 1\right). \end{aligned}$$

Chiamiamo $(k/2) = (\beta_{\max}/\hbar)$ il momento angolare dello stato.

Osserviamo che per k dispari, abbiamo degli autovalori che sono multipli di $\hbar/2$, ma due sezioni fa avevamo detto che L_z aveva come autovalori solo multipli m di \hbar . La metà in più che osserviamo non è un errore, ma una conseguenza matematica del fatto che senza volerlo abbiamo risolto un problema generale di quello tra L_x , L_y e L_z . Vediamo quale è.

Fin ora abbiamo sempre avuto a che fare con funzioni scalari ma esistono anche funzione vettoriali. Quando ruotiamo una funzione scalare ci è sufficiente assegnare il valore del punto (x, y) al punto (x', y') , mentre nel caso di una funzione vettoriale abbiamo un vettore ad ogni punto (x, y) e dopo aver assegnato quel valore a (x', y') , dobbiamo anche ruotare il vettore della stessa quantità di cui abbiamo ruotato il punto. La seguente immagine può chiarire meglio le idee



Gli operatori L faranno solo la rotazione del punto (sufficiente per le scalari) ma non quella del vettore. In questi casi la rotazione è data dall'operatore

$$J_i = L_i + S_i,$$

L_i è il momento angolare orbitale, S_i è il momento angolare di spin e J_i è il momento angolare totale. Noi non sappiamo ancora che forma hanno J_i e S_i , quello che sappiamo è che J_i deve obbedire alle stesse leggi di commutazione di L_i , quindi

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\hbar \mathbf{J}$$

infatti il caso di L era un caso particolare per le funzioni scalari. I multipli di $\hbar/2$ vengo quindi da S .

Ritorniamo alla discussione principale e riesprimiamo tutto in termini di J :

$$\begin{aligned} J^2 |jm\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle, \quad j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots \\ J_z |jm\rangle &= m\hbar |jm\rangle, \quad m = j, j-1, j-2, \dots, -j. \end{aligned}$$

Ricordandoci che stiamo studiando il caso di $J = L$ chiamiamo questi stati $|lm\rangle$

$$L^2|lm\rangle = l(l+1)\hbar^2|lm\rangle, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$$L_z|lm\rangle = m\hbar|lm\rangle, \quad m = l, l-1, \dots, -l$$

Il nostro lavoro non è finito, dobbiamo ancora trovare gli autovettori, ergo trovare le matrici che rappresentano gli operatori presenti nelle relazioni di commutazione. Per farlo scriviamo

$$J_{\pm}|jm\rangle = C_{\pm}(j, m)|j, m \pm 1\rangle,$$

dove abbiamo sostituito L_{\pm} , α e β con J_{\pm} , j e m e con $C_{\pm}(j, m)$ da determinare. Prendiamo l'equazione con l'operatore di salita la moltiplichiamo per il suo aggiunto

$$\langle jm|J_-J_+|jm\rangle = |C_+(j, m)|^2 \langle j, m+1|j, m+1\rangle$$

da cui otteniamo

$$C_+(j, m) = \hbar[(j-m)(j+m+1)]^{1/2}.$$

Ripetendo per l'operatore di discesa otteniamo

$$C_-(j, m) = \hbar[(j+m)(j-m+1)]^{1/2}.$$

Segue

$$J_{\pm}|jm\rangle = \hbar[(j \mp m)(j \pm m + 1)]^{1/2}|j, m \pm 1\rangle.$$

A questo punto possiamo scrivere le matrici di J_x e J_y in questa base:

$$\begin{aligned} \langle j'm'|J_x|jm\rangle &= \left\langle j'm' \left| \frac{J_+ + J_-}{2} \right| jm \right\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \left\{ \delta_{jj'} \delta_{m', m+1} [(j-m)(j+m+1)]^{1/2} + \delta_{jj'} \delta_{m', m-1} [(j+m)(j-m+1)]^{1/2} \right\} \end{aligned}$$

e

$$\langle j'm'|J_y|jm\rangle = \frac{\hbar}{2i} \left\{ \delta_{jj'} \delta_{m', m+1} [(j-m)(j+m+1)]^{1/2} - \delta_{jj'} \delta_{m', m-1} [(j+m)(j-m+1)]^{1/2} \right\}.$$

Otteniamo così le seguenti matrici:

- J^2

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{4}\hbar^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & \frac{3}{4}\hbar^2 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 2\hbar^2 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\hbar^2 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\hbar^2 & \\ \vdots & & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

- J_z è anch'essa diagonale con elementi $m\hbar$.

- J_x

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \hbar/2 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & \hbar/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \hbar/2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \hbar/2^{1/2} & 0 & \hbar/2^{1/2} & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \hbar/2^{1/2} & 0 & \\ \vdots & & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

- J_y

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -i\hbar/2 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & i\hbar/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -i\hbar/2^{1/2} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & i\hbar/2^{1/2} & 0 & -i\hbar/2^{1/2} & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i\hbar/2^{1/2} & 0 & \\ \vdots & & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

Osserviamo che J_x e J_y sono diagonali a blocchi e quindi quando vengono moltiplicate per altre matrici, gli elementi non si mischiano tra di loro, inoltre $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ sarà soddisfatta per ogni blocco.

12.5.1 Rotazioni finite

Vediamo come costruire la matrice $U[R]$ di una rotazione finita. Come sempre la forma finita è $\exp(-i\theta \cdot J/\hbar)$ ma c'è un problema, adesso abbiamo una matrice infinito dimensionale, quindi esponenziare può essere complicato. Fortunatamente le J_i sono diagonali a blocchi, quindi anche $\theta \cdot J$ lo è e pure il risultato dell'esponenziazione. I blocchi hanno dimensione $(2j+1)$ e il blocco ad una data j sarà chiamato $D^{(j)}[R]$. Ogni vettore nel sottospazio V_j generato dai vettori $(2j+1)$ ruoterà nell'elemento $|\psi'\rangle$ di V , quindi per ruotare $|\psi\rangle$ ci serve solo $D^{(j)}$. Fatte queste considerazioni per j piccolo ci è possibile calcolare la sua rappresentazione esponenziale

$$D^{(j)} = \sum_0^{2j} f_n(\theta) (\hat{\theta} \cdot \mathbf{J}^{(j)})^n,$$

dove le f_n sono funzioni trigonometriche.

Ritorniamo a parlare dei sottospazi V_j . Questi sottospazi sono chiamati sottospazi invarianti. Ogni sottospazio contiene stati con intensità definita del momento angolare quadrato $j(j+1)\hbar^2$ e una rotazione non può cambiarla, questo perché $[J^2, U[R]] = 0$ e $U[R]$ non può quindi cambiare gli autovalori di J^2 . Inoltre questi sottospazi invarianti sono irriducibili, ovvero non contengono altri sottospazi invarianti. Per questo motivo le matrici diagonali a blocchi che rappresentano $U[R]$ sono dette rappresentazione matriciale irriducibile.

Consideriamo adesso una matrice in questa base che rappresenti un'hamiltoniana invariante rotazionalmente. Dal momento che $[H, J] = 0$, H ha la stessa forma di J^2 che commuta a sua volta con tutti i generatori, dunque:

- H è diagonale ($[H, J^2] = 0$, $[H, J_z] = 0$);
- Dato un blocco H ha tutti gli autovalori di quel blocco uguali ($[H, J_{\pm}] = 0$).

Ma questo significa che V_j è un autospazio di H con autovalore E_j , quindi tutti gli stati di un dato j sono degeneri in un problema con invarianza rotazionale. Questo è vero anche in meccanica classica ma per motivi diversi. Classicamente dati due stati con la stessa intensità di momento angolare ma diversa orientazione, essi sono degeneri perché possiamo ruotarne uno sull'altro senza che l'energia cambi. In meccanica quantistica invece dati due elementi di V_j non è sempre vero che possono essere ruotati l'uno sull'altro ma:

- Uno può essere raggiunto dall'azione combinata di $U[R]$ con J_{\pm} ;
- Gli operatori commutano con H .

12.5.2 Autofunzioni del momento angolare nella base delle coordinate

Vediamo adesso come costruire le autofunzioni di L^2 e L_z nella base delle coordinate dati i vettori $|lm\rangle$. Consideriamo i vettori corrispondenti ad un dato l . Lo stato "più alto" soddisfa

$$L_+ |ll\rangle = 0.$$

Scriviamo l'operatore L_{\pm} in coordinate sferiche

$$L_{\pm} \xrightarrow{\text{base delle coordinate sferiche}} \pm e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

chiamiamo $\psi_l^l(r, \theta, \phi)$, l'autofunzione corrispondente a $|ll\rangle$, allora

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi_l^l(r, \theta, \phi) = 0$$

e essendo ψ_l^l un'autofunzione di L_z con autovalore $l\hbar$, ponendo

$$\psi_l^l(r, \theta, \phi) = U_l^l(r, \theta) e^{il\phi}$$

otteniamo

$$U_l^l(r, \theta) = R(r)(\sin \theta)^l,$$

dove $R(r)$ è una funzione (normalizzabile) arbitraria di r che ci sarà data direttamente da H in un problema con invarianza rotazionale quando cerchiamo le autofunzioni simultanee di H , L^2 e L_z .

Vediamo adesso la soluzione in assenza di della coordinata radiale:

$$Y_l^l(\theta, \phi) = (-1)^l \left[\frac{(2l+1)!}{4\pi} \right]^{1/2} \frac{1}{2^l l!} (\sin \theta)^l e^{il\phi}.$$

con

$$\int |Y_l^l|^2 d\Omega \equiv \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} |Y_l^l|^2 d(\cos \theta) d\phi = 1,$$

per $m < 0$ ci basti sapere che

$$Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^*.$$

Usando l'operatore di discesa, ci è possibile ottenere Y_l^l , in particolare otteniamo (per $m \geq 0$)

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^l \left[\frac{(2l+1)!}{4\pi} \right]^{1/2} \frac{1}{2^l l!} \left[\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!} \right]^{1/2} e^{im\phi} (\sin \theta)^{-m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l}$$

Queste funzioni sono chiamate armoniche sferiche e soddisfano la condizione di ortonormalità. Se cerchiamo autofunzioni della forma $f(\theta)e^{im\theta}$ (regolari per $\theta \in [0, \pi]$), troviamo che L^2 ha autovalori della forma $l(l+1)\hbar^2$, $l = 0, 1, 2, \dots$ dove $l \geq |m|$. Possiamo espandere ogni funzione $\psi(r, \theta, \phi)$ in termini di $Y_l^m(\theta, \phi)$ usando coefficienti dipendenti da r

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_l^m(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

dove

$$C_l^m(r) = \int Y_l^{m*}(\theta, \phi) \psi(r, \theta, \phi) d\Omega.$$

Calcolando $\langle \psi | L^2 | \psi \rangle$ (assumendo che ψ sia normalizzata all'unità) vediamo che

$$P(L^2 = l(l+1)\hbar^2, L_z = m\hbar) = \int_0^{\infty} |C_l^m(r)|^2 r^2 dr,$$

è chiaro che C_l^m è l'ampiezza di probabilità di trovare la particella ad una distanza r con momento angolare (l, m) . Inoltre (12.58) ci dice come ruotare ogni funzione $\psi(r, \theta, \phi)$ di un angolo θ :

- Costruiamo le matrici diagonali a blocchi $\exp(-i\theta \cdot \mathbf{L}/\hbar)$.
- Ogni blocco ruota C_l^m in combinazioni lineari l'uno dell'altro.

I polinomi Y sono strettamente legati ai polinomi di Legendre.

12.6 Soluzione di problemi con invarianza rotazionale

Consideriamo adesso una classe di problemi molto frequenti, quelli con invarianza rotazionale. In questo caso $V(r, \theta, \phi) = V(r)$, è allora conveniente usare le coordinate sferiche. L'equazione di Shrodinger è

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(r) \right] \psi_E(r, \theta, \phi) = E \psi_E(r, \theta, \phi)$$

Per risolvere tale equazione andiamo a cercare le autofunzioni simultanee di H , L^2 e L_z ($[H, L] = 0$):

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{Elm}(r) Y_l^m(\theta, \phi).$$

Ricordando che la parte angolare di ∇^2 è L^2 otteniamo l'equazione radiale

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} R_{El} = E R_{El},$$

nota che questa equazione non è dipendente da m . Troviamo così la degenerazione di dimensione $(2l+1)$ di H .

Introduciamo adesso la funzione U_{El} , definita come $R_{El} = \frac{U_{El}}{r}$ per cui vale

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] \right\} U_{El} = 0.$$

Questa equazione è uguale a quella di Shrodinger in una dimensione con alcune differenze:

- La variabile va da 0 a ∞ e non da $-\infty$ a ∞ ;
- In aggiunta al termine potenziale $V(r)$, è presente una barriera centrifuga repulsiva $(l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2)$;
- Diverse condizioni di bordo.

Per trovarle scriviamo (12.63) come un'equazione degli autovalori

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] U_{El} \equiv D_l(r) U_{El} = E U_{El}$$

e richiediamo che D_l sia hermitiana rispetto a U_{El}

$$\int_0^\infty U_1^* (D_l U_2) dr = \left[\int_0^\infty U_2^* (D_l U_1) dr \right]^* \equiv \int_0^\infty (D_l U_1)^* U_2 dr \rightarrow \left(U_1^* \frac{dU_2}{dr} - U_2 \frac{dU_1^*}{dr} \right) \Big|_0^\infty = 0.$$

Una condizione necessaria affinché $\int_0^\infty |R_{El}|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |U_{El}|^2 dr$ sia normalizzabile all'unità oppure alla delta di Dirac è che

$$U_{El} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad \text{oppure} \quad U_{El} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikr}$$

dove il primo corrisponde agli stati legati e il secondo agli unbound states (stati non legati). Dal primo capitolo ricordiamo che U_{El} si annulla in entrambi i casi per $r \rightarrow \infty$ e quindi l'hermitianeità di D_l è soddisfatta solo se $U \rightarrow c$ per $r \rightarrow 0$. Osserviamo tuttavia che è necessario $c = 0$ perché se $c \neq 0$, allora

$$R \sim \frac{U}{r} \sim \frac{c}{r}$$

diverge all'origine e $\psi \sim \frac{c}{r} Y_0^0$ non soddisfa l'equazione di Shrodinger all'origine.

12.6.1 Proprietà generali di U_{El}

Vogliamo avere più informazioni su U_{El} . Consideriamo il limite $r \rightarrow 0$, assumiamo che $V(r)$ sia meno singolare di r^{-2} , di modo che l'equazione sia dominata dalla barriera centrifuga

$$U_l'' \simeq \frac{l(l+1)}{r^2} U_l.$$

Cerchiamo una soluzione della forma $U_l \sim r^a$, allora deve essere

$$\alpha(\alpha-1) = l(l+1) \quad \text{oppure} \quad \alpha = l+1 \text{ o } (-l)$$

e abbiamo due possibili soluzioni

$$U_l \sim \begin{cases} r^{l+1} & \text{(regolare)} \\ r^{-l} & \text{(irregolare)} \end{cases};$$

dove la soluzione irregolare non va bene dal momento che $U(0) \neq 0$. Tutto questo è vero solo se $l \neq 0$, altrimenti la barriera centrifuga è assente e la soluzione è dipendente al potenziale.

Consideriamo ora il limite $r \rightarrow \infty$. Ovviamente se $V(r) \not\rightarrow 0$ (come nel caso dell'oscillatore isotropo), allora il potenziale dominerà l'equazione e non possiamo dire nulla in generale. Consideriamo quindi il caso $rV(r) \rightarrow 0$ (dove la moltiplicazione per r è lì per indicare che V deve tendere a 0 più velocemente di r). Per grandi r avremo

$$\frac{d^2 U_E}{dr^2} = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} U_E$$

e abbiamo due possibili casi:

- $E > 0$: la particella scappa (classicamente) all'infinito e ci aspettiamo che U_E oscilli per $r \rightarrow \infty$;
- $E < 0$: La particella è intrappolata. Ci aspettiamo che U_E cada esponenzialmente a $r \rightarrow \infty$.

Partiamo dal primo caso. Le soluzioni a (12.69) hanno la forma

$$U_E = A e^{ikr} + B e^{-ikr}, \quad k = \left(2\mu E / \hbar^2 \right)^{1/2},$$

il che significa che le particelle si comportano come particelle libere lontano dall'origine (il rapporto A/B non è arbitrario).

Nel secondo caso abbiamo una soluzione della stessa forma ma dobbiamo fare la sostituzione

$$k \rightarrow i\kappa, \quad \kappa = \left(2\mu |E| / \hbar^2 \right)^{1/2}.$$

Come prima A/B non è arbitrario.

Nel caso $E < 0$ le autofunzioni dell'energia sono normalizzabili, vedremo tra un attimo il caso $E > 0$.

12.6.2 La particella libera in coordinate sferiche

Partiamo da

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{El}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

e trasformiamola in modo da esplicitare U_{El} :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] U_{El} = 0, \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

dividiamo entrambe le parti per k^2 in modo da avere $\rho = kr$

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] U_l = U_l.$$

Questo problema è molto simile a quello dell'oscillatore armonico, eccetto per il fatto che abbiamo un potenziale $1/\rho^2$ invece che $1/\rho$. Definiamo gli operatori (tipo) di salita e discesa:

$$d_l = \frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho}$$

e il suo aggiunto

$$d_l^\dagger = -\frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho}.$$

In questo modo se troviamo U_0 possiamo trovare tutte le altre U_l usando gli operatori di salita e discesa. Da (12.70) è chiaro che per $l = 0$ abbiamo due soluzioni indipendenti:

$$U_0^A(\rho) = \sin \rho, \quad U_0^B = -\cos \rho,$$

di cui la seconda è inaccettabile se consideriamo l'equazione all'origine, ma valida altrimenti. Usando

$$U_{l+1} = d_l^\dagger U_l$$

e facendo la sostituzione $R_l = U_l/\rho$, troviamo

$$R_l = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^l R_0.$$

Abbiamo due possibili condizioni per R_0 :

$$R_0^A = \frac{\sin \rho}{\rho};$$

$$R_0^B = \frac{-\cos \rho}{\rho};$$

queste generano:

- Le funzioni sferiche di Bessel di ordine l

$$R_l^A \equiv j_l = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right);$$

- Le funzioni sferiche di Neumann di ordine l

$$R_l^B \equiv n_l \equiv (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right)^l \left(\frac{-\cos \rho}{\rho} \right)$$

Per $\rho \rightarrow k$ si comportano come

$$j_l \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \sin \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right);$$

$$n_l \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} -\frac{1}{\rho} \cos \left(\rho - \frac{l\pi}{2} \right);$$

mentre per $\rho \rightarrow 0$ abbiamo

$$j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!};$$

$$n_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}};$$

per $\rho \rightarrow 0$ le funzioni di Neumann sono singolari e corrispondono alla soluzione irregolare trovata nella precedente sottosezione. Le soluzioni per la particella libera in tutto lo spazio sono allora

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = j_l(kr)Y_l^m(\theta, \phi), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu},$$

queste soddisfano

$$\iiint \psi_{Elm}^* \psi_{E'l'm'} r^2 dr d\Omega = \frac{2}{\pi k^2} \delta(k-k') \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

12.6.3 Connessione con le coordinate cartesiane

Se avessimo usato le coordinate cartesiane invece di quelle sferiche avremmo ottenuto

$$\psi_E(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar}, \quad E = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}.$$

Consideriamo ora il caso di una particella che si muova con momento p lungo l'asse z . Il termine esponenziale è $\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar = (pr \cos \theta)/\hbar = kr \cos \theta$ e otteniamo allora

$$\psi_E(r, \theta, \phi) = \frac{e^{ikr \cos \theta}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}.$$

Vogliamo esprimere questa soluzione come combinazione delle ψ_{Elm} di energia E . Dato che il primo membro è indipendente da ϕ , allora solo i termini con $m = 0$ sono rilevanti, questo fisicamente significa che una particella che si muove lungo l'asse z non ha momento angolare in quella direzione. Facendo i calcoli esplicitamente abbiamo

$$Y_l^0(\theta) = \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} P_l(\cos \theta)$$

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(kr) P_l(\cos \theta), \quad C_l = C_l^0 \cdot \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

e dato che è dimostrabile che $C_l = i^l (2l+1)$ otteniamo

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta).$$

7.2 L'OSCILLATORE ARMONICO TRIDIMENSIONALE

Analogamente alla Meccanica Classica, in cui il Teorema di Bertrand assicura che gli unici potenziali centrali a garantire (per stati legati) orbite chiuse e limitate sono quello armonico ($\propto r^2$) e quello coulombiano ($\propto r^{-1}$), anche in Meccanica Quantistica è di interesse fondamentale studiare il modello dell'oscillatore armonico tridimensionale. Per banale estensione di quanto già visto nel Cap. 4, l'hamiltoniano di tale sistema si può scrivere come

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{\mathbf{r}}^2$$

D'altronde, la fattorizzazione in tre hamiltoniani indipendenti ³ è immediata: poiché $\hat{\mathbf{r}}^2 = \sum \hat{x}_j^2$, $\hat{\mathbf{p}}^2 = \sum \hat{p}_j^2$, si ha che

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}_j^2 \right) \equiv \sum_{j=1}^3 \hat{H}_j$$

Ci si aprono due strade: studiare il problema in coordinate cartesiane, sfruttando il naturale disaccoppiamento dell'hamiltoniano, oppure sferiche, facendo uso dei risultati già noti sulla forma degli autostati dell'hamiltoniano di una particella in un potenziale centrale. Nella prossima sezione tratteremo il problema nelle coordinate cartesiane, mentre per quanto riguarda la trattazione angolare rimandiamo alla Sez. 10.2 per una discussione dettagliata.

7.2.1 Spettro dell'hamiltoniano e principio di indeterminazione

Iniziamo ricordando quanto già sappiamo su ciascuno dei singoli oscillatori unidimensionali: dato un hamiltoniano della forma

$$\hat{H}_j = \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}_j^2$$

l'equazione agli autovalori, come ampiamente discusso nel Cap. 4, è risolta da:

$$\hat{H}_j |n_j\rangle = E_{n_j} |n_j\rangle \quad E_{n_j} = \hbar\omega \left(n_j + \frac{1}{2}\right) \quad n_j \in \mathbb{N}$$

Si dimostra immediatamente che gli stati $|n_1 n_2 n_3\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle$, dove $|n_j\rangle$ sono gli autostati dell'hamiltoniano \hat{H}_j , sono autostati di \hat{H} :

$$\hat{H} |n_1 n_2 n_3\rangle = \sum_{j=1}^3 \hat{H}_j |n_1 n_2 n_3\rangle = (E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3}) |n_1 n_2 n_3\rangle$$

Deduciamo subito la forma dello spettro di \hat{H} :

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

Com'era lecito aspettarsi, lo spettro dell'oscillatore armonico tridimensionale è ancora infinito e discreto.

Abbiamo già discusso la soluzione algebrica al problema dell'oscillatore armonico unidimensionale, passando attraverso gli operatori di creazione e di distruzione (che in modo meno violento avevamo ai tempi chiamato di salita e di discesa):

$$\hat{a}_j \equiv \frac{\hat{q}_j + i\hat{k}_j}{\sqrt{2}} \quad \hat{a}_j^\dagger \equiv \frac{\hat{q}_j - i\hat{k}_j}{\sqrt{2}} \quad \hat{q}_j \equiv \frac{\hat{x}_j}{l_\omega} \quad \hat{k}_j \equiv \frac{\hat{p}_j}{p_\omega}$$

dove $l_\omega = (\hbar/m\omega)^{1/2}$ e $p_\omega = (\hbar m\omega)^{1/2}$, attraverso i quali l'hamiltoniano assume la forma particolarmente semplice:

$$\hat{H}_j = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}_j^2 + \hat{k}_j^2)$$

Si può mostrare facilmente che l'oscillatore armonico unidimensionale minimizza il Principio di indeterminazione: infatti, dimenticandoci per un attimo dell'indice j sulle componenti tridimensionali, vale (con ovvio significato della notazione)

$$\hat{x} = l_\omega \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \quad \hat{p} = p_\omega \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}$$

e ricordando che, per costruzione, $\hat{a}|0\rangle = 0$ e quindi $\langle 0|\hat{a}^\dagger = 0$, si ricava:

$$\langle 0|\hat{x}|0\rangle = \frac{l_\omega}{\sqrt{2}} [\langle 0|\hat{a}|0\rangle + \langle 0|\hat{a}^\dagger|0\rangle] = 0$$

e analogamente per l'impulso $\langle 0|\hat{p}|0\rangle = 0^4$. Ci serve quindi calcolare solamente $\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle, \langle 0|\hat{p}^2|0\rangle$. Poiché $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, si trova che

$$\begin{aligned} \langle 0|\hat{x}^2|0\rangle &= \frac{l_\omega^2}{2} [\langle 0|\hat{a}^2|0\rangle + \langle 0|(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle + \langle 0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0\rangle + \langle 0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle] \\ &= \frac{l_\omega^2}{2} \langle 0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0\rangle \\ &= \frac{l_\omega^2}{2} \langle 0|[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]|0\rangle + \frac{l_\omega^2}{2} \langle 0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle = \frac{l_\omega^2}{2} \end{aligned}$$

e in modo analogo si verifica

$$\langle 0 | \hat{p}^2 | 0 \rangle = \frac{p_\omega^2}{2}$$

Reintroduciamo adesso l'indice j : ovviamente quanto ricavato vale per ciascuna coordinata. Ne deduciamo immediatamente che:

$$\begin{aligned} \langle 000 | \hat{\mathbf{r}}^2 | 000 \rangle &= \langle 000 | \hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2 + \hat{x}_3^2 | 000 \rangle \\ &= \frac{l_\omega^2}{2} + \frac{l_\omega^2}{2} + \frac{l_\omega^2}{2} = \frac{3}{2} l_\omega^2 \end{aligned}$$

e analogamente

$$\langle 000 | \hat{\mathbf{p}}^2 | 000 \rangle = \frac{3}{2} p_\omega^2$$

Questo permette di concludere che per l'oscillatore armonico tridimensionale si ha, sullo stato fondamentale:

$$\Delta_r \Delta_p = \frac{3}{2} \hbar$$

essendo $l_\omega p_\omega = \hbar$. Nella sezione appena precedente abbiamo visto che questo numero era il minimo possibile sostenibile dal Principio di indeterminazione: in questo senso, diciamo che

L'oscillatore armonico isotropo n -dimensionale realizza stati fondamentali di minima indeterminazione.

Questa affermazione dovrebbe evidenziare come, fra tutti i sistemi fisici, l'oscillatore armonico abbia un ruolo "speciale". Possiamo facilmente intuire il motivo di questa specialità, notando che l'hamiltoniana di un oscillatore armonico unidimensionale è puramente quadratica sia negli impulsi che nelle posizioni, evidenziando una lampante simmetria che non può non avere ripercussioni fisiche.

7.2.3 Degenerazione dei livelli energetici

Abbiamo visto che gli autostati e gli autovalori dell'oscillatore tridimensionale sono particolarmente semplici:

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

per cui, se vogliamo calcolare la funzione d'onda ad essi associata:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\hat{\mathbf{x}}) = \langle \mathbf{x} | n_1 n_2 n_3 \rangle = \langle x_1 | n_1 \rangle \langle x_2 | n_2 \rangle \langle x_3 | n_3 \rangle$$

Consideriamo, per esempio, lo stato $|000\rangle$. Naturalmente, in questo caso

$$E_{000} = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

e, ricordando la forma degli autostati dell'oscillatore armonico unidimensionale, si ha subito

$$\langle x_1 | 0 \rangle \langle x_2 | 0 \rangle \langle x_3 | 0 \rangle = C^3 \exp \left(-\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{2l_\omega^2} \right) = C_0^3 e^{-r^2/2l_\omega^2}$$

con C_0 costante di normalizzazione. Lo stato fondamentale è non degenerare, come era lecito aspettarsi. Nel caso dei potenziali unidimensionali avevamo derivato un teorema (Cap. 4, Sez. 4.4) che connetteva spettro discreto e non degenerazione: è importante notare che nel caso tridimensionale tale risultato smette di funzionare. Infatti, nella dimostrazione, si faceva uso di ragionamenti spiccatamente unidimensionali (tra cui la soluzione a variabili separate) che non possono essere estesi al caso multidimensionale. Per convincersene, basta guardare i primi stati eccitati dell'oscillatore tridimensionale:

$$E_{100} = E_{010} = E_{001} = \frac{5}{2} \hbar \omega$$

Ricavare le autofunzioni associate è immediato:

$$\begin{aligned}\psi_{100}(\mathbf{x}) &= C_0^2 C_1 \frac{x_1}{l_\omega} \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{2l_\omega^2}\right) \\ \psi_{010}(\mathbf{x}) &= C_0^2 C_1 \frac{x_2}{l_\omega} \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{2l_\omega^2}\right) \\ \psi_{001}(\mathbf{x}) &= C_0^2 C_1 \frac{x_3}{l_\omega} \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}{2l_\omega^2}\right)\end{aligned}$$

D'altronde è del tutto naturale che insorga questo tipo di degenerazione: volendo fare un paragone classico, proprio nel caso dell'oscillatore armonico tridimensionale, una particella in oscillazione può avere la stessa energia oscillando lungo ciascuna delle tre direzioni nel momento in cui sussiste un'invarianza per scambio tra esse. Detto in altri termini, i modi normali di oscillazione nelle tre direzioni di oscillazione in un oscillatore tridimensionale classico invariante per scambio sono invarianti per scambio.

Analogamente, all'energia $7\hbar\omega/2$ sono associati 6 stati, perché esistono 6 modi diversi in cui tre numeri naturali n_1, n_2 e n_3 possono sommare a 2. In generale, possiamo notare che l'oscillatore armonico isotropo in 3 dimensioni è caratterizzato dalla degenerazione

$$\text{Deg}(n) = \binom{n+2}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}$$

Come mai? Un argomento grafico semplice è il seguente: immaginiamo di avere n elementi, che rappresentiamo nella figura seguente come \bullet

• • • • •

e di volerli separare in tre sottoinsiemi:

Il problema è equivalente a posizionare due separatori, s in figura, e assegnare al primo gruppo gli n_1 elementi a sinistra, al secondo gli n_2 al centro e al terzo gli n_3 a destra. Il numero delle possibili combinazioni di queste tre popolazioni coincide col numero \mathcal{N} di modi in cui possiamo posizionare i separatori s . Le posizioni possibili sono $n + 2$ (possiamo anche posizzionarli agli estremi o sovrapporli!) per cui

$$\mathcal{N} = \binom{n+2}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}$$

Naturalmente il numero totale di elementi non dipende dal partizionamento: $n_1 + n_2 + n_3 = n$. Questo problema è equivalente a chiedersi quante combinazioni di interi sommino allo stesso intero, che è quello che vogliamo sapere per calcolare la degenerazione dei livelli energetici. Naturalmente questo argomento può essere esteso a un numero superiore di dimensioni.

Capitolo 13

L'ATOMO DI IDROGENO

13.1 Il problema degli autovalori

Abbiamo un problema dei due corpi, l'elettrone con carica $-e$ e massa m e il protone con carica e e massa M . In un problema dei due corpi è logico andare nel CM con una massa ridotta e una coordinata relativa, tuttavia il rapporto $m/M \simeq 2000$ quindi la coordinata relativa è essenzialmente la coordinata dell'elettrone e la massa ridotta è m . Risolviamo quindi il problema nel limite $M \rightarrow \infty$, ovvero un protone fisso e poi più avanti ritorneremo al vero protone. L'energia potenziale dell'elettrone nel potenziale di Coulomb è $V = -e^2/r$, da cui l'equazione di Shrodinger

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] \right\} U_{El} = 0$$

che determina i livelli di energia nel sistema di riferimento dell'atomo e le funzioni d'onda

$$\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{El}(r) Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{U_{El}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi).$$

Introduciamo le scale caratteristiche:

- il raggio di Bohr come lunghezza caratteristica:

$$r_B = \frac{\hbar}{m_e c \alpha} = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2} \simeq 0.5 \text{Å}$$

pari a λ_e^C/α , dove λ_e^C è la lunghezza d'onda Compton dell'elettrone.

- un impulso caratteristico:

$$p_B = m_e c \alpha = \frac{\hbar}{r_B}$$

- una energia tipica E_B , corrispondente alla costante di Rydberg:

$$E_B = \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 = 1 \text{Ry} \simeq 13.6 \text{eV}$$

- un periodo caratteristico T_B :

$$T_B = \frac{\hbar}{E_B} \sim 10^{-17} \text{s}$$

Ridefiniamo quindi le variabili adimensionali

$$\bar{r} = \frac{r}{r_B} \quad \bar{E} = \frac{E}{E_B}$$

In questo modo, l'equazione (6.16) è scritta in unità naturali

$$\left[\partial_{\bar{r}}^2 + \frac{2}{\bar{r}} \partial_{\bar{r}} - \frac{l(l+1)}{\bar{r}^2} + 2 \left(\bar{E} + \frac{1}{\bar{r}} \right) \right] R(\bar{r}) = 0$$

Definiamo poi

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2\bar{E}}} \quad \rho = \frac{2\bar{r}}{n}$$

dove assumiamo $\bar{E} < 0 \implies E < 0$. Stiamo infatti studiando degli stati legati, relativi a moti limitati ed aventi evidentemente energia negativa. Per fare un'analogia, in Meccanica Classica avremmo potuto affermare di stare analizzando il caso di orbite chiuse. Com'è ovvio, abbiamo posto al livello $E = 0$ l'energia del sistema nella condizione in cui l'elettrone è libero, asintotica nel limite $r \rightarrow \infty$. Moltiplicando per $n^2/4$ l'equazione appena riportata, è facile giungere a

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{2}{\rho} \partial_\rho + \left(-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} \right) \right] R(\rho) = 0$$

dove il termine $1/4$ compreso nella parentesi è tutto ciò che resta dell'autovalore E dopo la riscrittura in unità naturali.

13.1.1 Comportamento asintotico

Analizziamo le soluzioni a grandi e piccole distanze, in modo da semplificare la struttura delle soluzioni.

- Per $\rho \ll 1$ si trova, in modo analogo a quanto visto per l'equazione (6.17), che la soluzione è approssimata con

$$R(\rho) \propto \rho^l$$

- Per $\rho \gg 1$ l'equazione differenziale si riduce a

$$\partial_\rho^2 R(\rho) - \frac{1}{4} R(\rho) = 0$$

risolta da

$$R(\rho) \propto \exp\left(\pm \frac{\rho}{2}\right)$$

Per moti limitati, solo la soluzione con il segno - è accettabile. Come Ansatz possiamo porre

$$R(\rho) = C \rho^l e^{-\rho/2} L(\rho)$$

forzando la compatibilità con gli andamenti asintotici appena trovati e restringendo la nostra ricerca alla sola $L(\rho)$. Chiaramente, un vincolo sulle possibili soluzioni $L(\rho)$ è che esse non compromettano i risultati relativi ai due comportamenti asintotici: ad esempio, $L(\rho) = \exp(-\rho/3)$ o $L(\rho) = \rho^2$ non sono accettabili.

Come equazione differenziale per $L(\rho)$ abbiamo

$$\left[\rho \partial_\rho^2 + (2l+2-\rho) \partial_\rho + (n-l-1) \right] L(\rho) = 0$$

risolta da funzioni note con il nome poco rassicurante di ipergeometriche confluenti

$$L(\rho) = F(-n+l+1, 2(l+1), \rho)$$

In tale insieme funzionale si trovano, come casi particolari, anche le funzioni di Bessel e i polinomi di Hermite, che abbiamo già incontrato. Non tutte queste funzioni costituiscono delle soluzioni accettabili al problema, poiché deve essere rispettata la condizione energetica

$$n \in \mathbb{N} \wedge n \geq l+1$$

che riduce le F ai polinomi generalizzati di Laguerre.

I polinomi di Laguerre semplici sono

$$L_k(\rho) = e^\rho \frac{d^k}{d\rho^k} (\rho^k e^{-\rho})$$

mentre quelli generalizzati derivano dai semplici secondo la definizione

$$L_k^{(s)}(\rho) = \frac{d^s}{d\rho^s} L_k(\rho)$$

Al solito, per ottenere la soluzione completa delle autofunzioni di \hat{H} , dobbiamo moltiplicare la soluzione radiale $R_{El}(r)$ per le armoniche sferiche, che contengono la dipendenza dalle variabili angolari θ, ϕ : ponendo tutto assieme

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = -\sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{(nr_B)^3 n[(n+l)!]^3}} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{(2l+1)}(\rho) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

dove abbiamo sostituito il pedice E con n , essendo questi in corrispondenza biunivoca secondo la definizione

$$E_n = -\frac{m_e \alpha^2 c^2}{2n^2}$$

13.1.2 Lo stato fondamentale e la sua normalizzazione

Osservando l'equazione (7.2), risulta naturale definire la minima energia del sistema come

$$E_1 = -\frac{m_e \alpha^2 c^2}{2}$$

dunque anche la funzione d'onda associata a tale stato, che secondo l'equazione (7.1) sarà

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} e^{-r/r_B}$$

dove ricordiamo in particolare che, dovendo essere $n \geq l+1$ e $|m| \leq l$ ed avendo fissato $n = 1$, le uniche possibilità per i numeri quantici rimanenti sono $l = 0$ e $m = 0$.

Per esercizio, mostriamo che la funzione d'onda appena ottenuta è effettivamente normalizzata. Per fare ciò - e per rendere agevole il calcolo di integrali simili in futuro - sarà utile ricavare il risultato del seguente integrale

$$\int_0^\infty x^k e^{-\alpha x} dx$$

dove assumeremo - per i nostri scopi - di avere $k, \alpha \in \mathbb{N}$.¹ Calcolando la derivata

$$\frac{d^k}{d\alpha^k} e^{-\alpha x} = (-x)^k e^{-\alpha x} = (-1)^k x^k e^{-\alpha x}$$

riconosciamo l'integrando interessato; invertendo questa espressione ed inserendola nell'integrale da risolvere otteniamo

$$\begin{aligned} \int_0^\infty (-1)^k \frac{d^k}{d\alpha^k} e^{-\alpha x} dx &= (-1)^k \frac{d^k}{d\alpha^k} \left[\frac{e^{-\alpha x}}{-\alpha} \right]_0^\infty \\ &= (-1)^k \frac{d^k}{d\alpha^k} \frac{1}{\alpha} \end{aligned}$$

e quindi infine

$$\int_0^\infty x^k e^{-\alpha x} dx = \frac{k!}{\alpha^{k+1}}$$

Questa tecnica risolutiva viene informalmente definita Trucco di Feynman. Lo stesso risultato si può ottenere riconoscendo nell'integrale da calcolare la Funzione Gamma di Eulero:

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^{+\infty} t^{z-1} e^{-t} dt \quad z\Gamma(z) = \Gamma(z+1)$$

per cui si ha

$$\Gamma(n+1) = n! \quad \text{con } n \in \mathbb{N}$$

Basta infatti eseguire un cambio di variabile nell'integrale da calcolare:

$$\int_0^\infty x^k e^{-\alpha x} dx = \frac{1}{\alpha^{k+1}} \int_0^\infty (\alpha x)^k e^{-\alpha x} d(\alpha x) = \frac{\Gamma(k+1)}{\alpha^{k+1}} = \frac{k!}{\alpha^{k+1}}$$

che è lo stesso risultato di prima.

Imponendo la condizione di normalizzazione per la funzione d'onda in Eq. (7.3), giungiamo a

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_{100}|^2 d^3\mathbf{x} = \int_0^{4\pi} d\Omega \int_0^\infty r^2 |\psi_{100}|^2 dr = 1$$

dove abbiamo separato l'integrazione su tutto l'angolo solido Ω da quella sul raggio r , vista la dipendenza della funzione d'onda dalla sola variabile r . Sostituendo l'espressione per l'autofunzione otteniamo

$$\begin{aligned} 4\pi \int_0^\infty r^2 \frac{1}{\pi r_B^3} e^{-2r/r_B} dr &= 4 \int_0^\infty \frac{1}{r_B^3} r^2 e^{-2r/r_B} dr \\ &= 4 \int_0^\infty s^2 e^{-2s} ds \end{aligned}$$

avendo considerato il cambiamento di variabile $s = r/r_B$, in modo da ridurci alle condizioni dell'integrale sopra ricavato, dal quale otteniamo quindi

$$4 \int_0^\infty s^2 e^{-2s} ds = 4 \frac{2!}{2^3} = 1$$

come atteso.

Similmente si può verificare che l'autofunzione corrispondente alla terna $n = 2, l = 0, m = 0$, risulta normalizzata se espressa nella forma

$$\psi_{200}(r, \theta, \phi) = R_{20}(r) Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{8\pi r_B^3}} e^{-r/2r_B} \left(1 - \frac{r}{2r_B}\right)$$

13.2 Considerazioni sui risultati e analisi

In questa sezione ci occuperemo di analizzare più nel dettaglio i risultati ottenuti, ricavando innanzitutto la degenerazione dei livelli energetici. Passeremo poi a valutare la velocità tipica del moto dell'elettrone: il calcolo che proponiamo è svolto sul livello fondamentale, ma è concettualmente analogo al calcolo dal svolgere su qualsiasi altro livello. Infine passeremo a valutare la bontà della definizione di r_B come raggio atomico: scopriremo che, svolgendo il calcolo nel formalismo quantistico, risulterà fisicamente inesatto definire il raggio di Bohr come raggio atomico. Nell'ultima parte ci occuperemo di derivare la forma delle autofunzioni nella rappresentazione degli impulsi.

13.2.1 Degenerazione delle autofunzioni

Come abbiamo già avuto modo di constatare, se $n \geq 2$, allora ad un dato valore di n (quindi di energia E_n) possono corrispondere in generale diversi valori (interi) di l , compresi tra 0 e $n-1$; a sua volta, il numero quantico m può assumere valori interi tra $-l$ ed l , per ogni l fissato. Tuttavia, ogni terna nlm individua univocamente un'autofunzione dell'energia nella rappresentazione delle coordinate. Il passaggio a tale rappresentazione corrisponde alla classificazione in orbitali atomici degli stati occupabili da un elettrone nel sistema legato considerato (qui il semplice atomo di idrogeno), e che di solito vengono brutalmente presentati nei programmi scolastici di Chimica o di Chimica Generale all'Università.

Per l'atomo di idrogeno in particolare, riconosciamo gli orbitali di tipo s in tutti gli stati a simmetria sferica, ovvero con autofunzioni della forma

$$\psi_{n00}(r, \theta, \phi) = Y_{00}(\theta, \phi) R_{n0}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{n0}(r)$$

ossia tali da avere $l = 0$. Riconosciamo invece gli orbitali di tipo p nelle autofunzioni della forma

$$\psi_{n1m}(r, \theta, \phi) = R_{n1}(r) Y_{1m}(\theta, \phi)$$

ovvero con $l = 1$ e tripla degenerazione per via dei valori di $m = -1, 0, 1$ corrispondenti ai tre orbitali p_x, p_y e p_z , per una data scelta degli assi spaziali; e così via. Possiamo quindi concludere che ad un qualsiasi autovalore dell'hamiltoniano \hat{H} diverso da quello fondamentale, corrispondono un certo

numero di autostati degeneri. Proviamo a formalizzare la questione, chiedendoci quale debba essere il livello di degenerazione - che indichiamo con $\text{Deg}(n)$ - a n fissato: dato che per ogni $l \in (0, n-1)$ si hanno $2l+1$ valori possibili per m , la risposta è formalmente la seguente

$$\text{Deg}(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)$$

Spezzando la somma e rammentando qualche risultato di base sulle serie numeriche, si ottiene

$$\text{Deg}(n) = 2 \sum_{l=0}^{n-1} l + \sum_{l=0}^{n-1} 1 = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n$$

da cui infine

$$\text{Deg}(n) = n^2$$

Anche l'atomo di idrogeno presenta delle degenerazioni accidentali. Nel precedente capitolo abbiamo visto come una simmetria implichi la conservazione di una quantità. Classicamente il potenziale di Coulomb conserva il vettore di Runge-Lenz

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{l}}{m} - \frac{e^2}{r} \mathbf{r}$$

La conservazione di \mathbf{n} implica che l'orbita è confinata su un piano perpendicolare al prodotto angolare e che è chiusa. Nella teoria quantistica esisterà in operatore \mathbf{N} che commuta con H , dato da

$$\mathbf{N} = \frac{1}{2m} [\mathbf{P} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{P}] - \frac{e^2 \mathbf{R}}{(X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2}}.$$

Abbiamo visto che la conservazione di \mathbf{L} implica che $[L_{\pm}, H] = 0$ (che alza o abbassa m) dunque esisterà un operatore che alza o abbassa l dato dalle componenti di \mathbf{N} che commuta con H .

Capitolo 14

Spin

14.1 Introduzione

In questo capitolo tratteremo un fenomeno quantistico che non può essere trattato come un'applicazione diretta dei quattro postulati. Il motivo è che questo fenomeno aggiunge un grado di libertà, chiamato spin, che non ha una controparte classica. In questo capitolo studieremo solo lo spin di elettrone, ma la trattazione per tutte le altre particelle è simile con l'eccezione del fotone che ha bisogno di una trattazione relativistica.

14.2 Quale è la natura dello spin?

Il modo migliore di descrivere lo spin è come una forma di momento angolare, tuttavia non è il momento angolare L che conosciamo. Per capire meglio vediamo il seguente esperimento: abbiamo un elettrone con carica $-e$ la cui funzione d'onda ha momento 0 (ed è quindi piatta per Heisenberg). Se il momento è zero, allora anche il momento angolare sarà zero. Tuttavia è possibile misurare un momento magnetico, il che vuol dire che qualcosa compie orbite chiuse. Dato che noi sappiamo che l'elettrone è fermo, allora deve per forza esistere un momento angolare, non orbitale, intrinseco dell'elettrone. Noi chiamiamo questo momento angolare spin e immaginiamo che l'elettrone giri su se stesso come una trottola di momento angolare $\pm\hbar/2$.

14.3 Cinematica dello spin

Nella sezione 12.5 abbiamo visto che se una particella è descritta da una funzione d'onda con n componenti, i generatori di rotazione infinitesima sono dati da $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. \mathbf{L} si occupa di trasformare ogni punto della funzione d'onda nel suo ruotato, mentre \mathbf{S} si occupa di trasformare le componenti della funzione d'onda in loro combinazioni lineari (gira i vettori). Sull'asse z abbiamo $J_z = L_z + S_z$, segue

$$|\psi'\rangle = \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} J_z \right] |\psi\rangle = \left[I - \frac{i\varepsilon}{\hbar} (L_z + S_z) \right] |\psi\rangle$$

e

$$\begin{bmatrix} \psi'_1 \\ \vdots \\ \psi'_n \end{bmatrix} = \left(\begin{bmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{bmatrix} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \begin{bmatrix} -i\hbar\partial/\partial\phi & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & -i\hbar\partial/\partial\phi \end{bmatrix} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} S_z \right) \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix}.$$

Per consistenza con \mathbf{L} e \mathbf{J} abbiamo

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar\mathbf{L} \rightarrow [S_i, S_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_k.$$

Proviamo adesso a costruire la matrice come abbiamo fatto per \mathbf{J} nel capitolo 12 (dove l'avevamo costruita usando blocchi $(2j+1) \times (2j+1)$). Abbiamo visto empiricamente che S_z può avere solo autovalori $\pm\hbar/2$, quindi abbiamo i seguenti blocchi 2×2 (chiamate matrici di Pauli):

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Per descrivere un elettrone avremo dunque bisogno di una funzione d'onda con $n = 2$ componenti chiamata spinore:

$$\begin{aligned}\psi &= \begin{bmatrix} \psi_+(x, y, z) \\ \psi_-(x, y, z) \end{bmatrix} \\ &\equiv \psi_+ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \psi_- \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}\end{aligned}$$

Se $\psi_- = 0$, allora $\psi_+ \neq 0$ (e viceversa) e abbiamo un autostato di S_z con autovalore $\hbar/2$; mentre se $\psi_+ = 0$, allora $\psi_- \neq 0$ (e viceversa) e abbiamo un autostato di S_z con autovalore $-\hbar/2$.

Vediamo adesso come interpretare il precedente esperimento. Abbiamo detto che il momento è 0, dunque la sua azione su $|\psi\rangle$ deve essere 0, segue

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} -i\hbar\nabla & 0 \\ 0 & -i\hbar\nabla \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -i\hbar\nabla\psi_+ \\ -i\hbar\nabla\psi_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Dunque ψ_+ e ψ_- sono indipendenti dalla posizione (il che è consistente con il principio di indeterminazione di Heisenberg), segue che L_z su ψ da 0. Tuttavia S_z no, e abbiamo una certa ampiezza di probabilità di ottenere $\pm\hbar/2$. Una differenza significativa tra spin e momento angolare è che: mentre possiamo variare l'ampiezza del momento angolare, non possiamo variare l'ampiezza di spin.

Lo spinore dell'elettrone è un mix tra uno scalare (che possiede una sola componente) e un vettore (che ne ha tre).

L'operatore S^2 è

$$S^2 = \hbar^2 \begin{bmatrix} \left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}+1\right) & 0 \\ 0 & \left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}+1\right) \end{bmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Per ogni particella l'ampiezza dalle spin dipende dalle componenti della sua funzione d'onda ed è invariante.

Se adesso andiamo a studiare questo risultato nello spazio di Hilbert. Osserviamo che la dimensione di questo spazio raddoppia, dunque se prima dicevamo che era ∞ -dimensionale, ora è 2∞ -dimensionale. Il vettore di stato $|\psi\rangle$ è ora una colonna 2∞ dimensionale

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{Base } \mathbf{R}, S_z} \langle xyzs_z | \psi \rangle = \begin{bmatrix} \psi(x=-\infty, y=-\infty, z=-\infty, s_z=+\hbar/2) \\ \vdots \\ \psi(x, y, z, s_z=+\hbar/2) \\ \vdots \\ \psi(x=\infty, y=\infty, z=\infty, s_z=+\hbar/2) \\ \psi(x=-\infty, y=-\infty, z=-\infty, s_z=-\hbar/2) \\ \vdots \\ \psi(x, y, z, s_z=-\hbar/2) \\ \vdots \\ \psi(x=\infty, y=\infty, z=\infty, s_z=-\hbar/2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_+(x, y, z) \\ \psi_-(x, y, z) \end{bmatrix},$$

dove R indica la base delle coordinate x, y, z e il vettore $|xyzs_z\rangle$ diagonalizza X, Y, Z e S_z . Osserviamo che questa notazione unisce due notazioni usate fin ora: se il vettore ha indice discreto usiamo un vettore colonna, se l'indice è continuo usiamo la funzione d'onda $\psi(x)$. La condizione di normalizzazione è

$$\begin{aligned}1 = \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_{s_z} \int \langle \psi | xyzs_z \rangle \langle xyzs_z | \psi \rangle dx dy dz \\ &= \int (|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) dx dy dz\end{aligned}$$

Possiamo vedere lo spazio di Hilbert dell'elettrone \mathbb{V}_e come prodotto diretto dello spazio ∞ -dimensionale e lo spazi bidimensionale \mathbb{V}_s dei gradi di libertà di spin.

Abbiamo già visto come trattare i gradi di libertà del momento angolare orbitale. Assumiamo adesso che il momento orbitale e quello di spin siano indipendenti, in questo caso per avere una trattazione completa è sufficiente sapere come trattare i gradi di libertà di spin (vedremo più avanti come trattare i casi dove questa assunzione non è possibile). Tutto questo significa che l'hamiltoniana è separabile

$$H = H_0 + H_s$$

e il vettore di stato viene fattorizzato in

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_0(t)\rangle \otimes |\chi_s(t)\rangle,$$

dove $|\psi_0\rangle$ è un vettore di \mathbb{V}_0 e $|\chi_s\rangle$ è un vettore di \mathbb{V}_s .

Vediamo come trattare $|\chi_s\rangle$. Abbiamo uno spazio (complesso) bidimensionale di Hilbert \mathbb{V}_s . Una base completa è data dai vettori $|s, s_z\rangle = |s, m\hbar\rangle \equiv |s, m\rangle$. Questi sono

$$\begin{aligned} |s, m\rangle = |1/2, 1/2\rangle &\xrightarrow{\text{base } S_z} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ |s, m\rangle = |1/2, -1/2\rangle &\xrightarrow{\text{base } S_z} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Dunque possiamo espandere ogni ket $|\chi\rangle$ di \mathbb{V}_s su questi vettori come

$$|\chi\rangle = \alpha|1/2, 1/2\rangle + \beta|1/2, -1/2\rangle \xrightarrow{\text{base } S_z} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix},$$

segue che la condizione di normalizzazione è

$$1 = \langle \chi | \chi \rangle \xrightarrow{\text{base } S_z} 1 = (\alpha^*, \beta^*) \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = |\alpha|^2 + |\beta|^2.$$

Se calcoliamo $\langle S \rangle$ in termini di autostati di S_z , troviamo

$$\langle 1/2, \pm 1/2 | \mathbf{S} | 1/2, \pm 1/2 \rangle = \pm(\hbar/2)\mathbf{k}$$

o più generalmente

$$\langle \hat{n}, \pm | \mathbf{S} | \hat{n}, \pm \rangle = \pm(\hbar/2)\hat{n}.$$

Diciamo che \hat{n} punti nella direzione (θ, ϕ) , allora

$$\begin{aligned} \hat{n}_z &= \cos \theta \\ \hat{n}_x &= \sin \theta \cos \phi \\ \hat{n}_y &= \sin \theta \sin \phi \end{aligned}$$

e i ket $|\hat{n}, \pm\rangle$ sono autovettori di

$$\hat{n} \cdot \mathbf{S} = n_x S_x + n_y S_y + n_z S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{bmatrix}.$$

A questo punto possiamo in tranquillità trovare la forma esplicita dei due autovettori che chiamiamo up e down:

$$\begin{aligned} |\hat{n} \text{ up} \rangle \equiv |n+\rangle &= \begin{bmatrix} \cos(\theta/2)e^{-i\phi/2} \\ \sin(\theta/2)e^{i\phi/2} \end{bmatrix} \\ |\hat{n} \text{ down} \rangle \equiv |n-\rangle &= \begin{bmatrix} -\sin(\theta/2)e^{-i\phi/2} \\ \cos(\theta/2)e^{i\phi/2} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Osserviamo che non solo possiamo calcolare $\langle S \rangle$ dato uno stato, ma possiamo anche fare il procedimento inverso: dato $\langle S \rangle$, trovare lo stato. Un interessante corollario è che ogni spinore in \mathbb{V}_s è un autostato di un operatore di spin $\hat{n} \cdot \mathbf{S}$ con autovalore $\hbar/2$.

Trovati gli autovettori in questo spazio, ci chiediamo come sono formati gli operatori. Cominciamo con S_x , S_y e S_z . È conveniente usare le matrici di Pauli σ (già introdotte) e definite come

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}.$$

Queste matrici hanno varie importanti proprietà:

- Sono anticommutative

$$[\sigma_i, \sigma_j]_+ = 0 \quad \text{or} \quad \sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i \quad (i \neq j);$$

- Vale

$$\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z \quad \text{e le loro permutazioni cicliche};$$

- Sono senza traccia

$$\text{Tr } \sigma_i = 0, \quad i = x, y, z;$$

- Vale

$$\sigma_i^2 = I,$$

o più generalmente

$$(\hat{n} \cdot \sigma)^2 = I;$$

- Vale

$$[\sigma_i, \sigma_j]_+ = 2\delta_{ij}I;$$

- Vale

$$(\mathbf{A} \cdot \sigma)(\mathbf{B} \cdot \sigma) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}I + i(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \sigma,$$

dove \mathbf{A} e \mathbf{B} sono operatori vettori che commutano con σ ;

- Sia I la quarta matrice di Pauli (chiamata σ_0), vale

$$\text{Tr}(\sigma_\alpha \sigma_\beta) = 2\delta_{\alpha\beta} \quad (\alpha, \beta = x, y, z, 0)\mathbb{S},$$

questo implica che le matrici di Pauli sono linearmente indipendenti.

14.3.1 Spin 1

In realtà abbiamo visto il caso di spin 1/2, lo spin che descrive i fermioni; ma esiste anche lo spin 1 per i bosoni.

I sistemi con spin 1 sono descritti da spinori a 3 componenti, poiché per $s = 1$:

$$|s, \sigma\rangle = \begin{cases} |1, +1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \end{cases}$$

Adesso \hat{S} è rappresentato da matrici 3×3 hermitiane. In modo analogo al caso 1/2, definiamo

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad S_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \quad S_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

ovviamente in unità di \hbar .

14.3.2 Forma esplicita degli operatori di rotazione

il fatto che $(\hat{n} \cdot \sigma)^2 = I$ semplifica tantissimo i calcoli che altrimenti sarebbero intrattabili e ci permetterebbe di calcolare in forma chiusa vari operatori come $U(t) = \exp(-iHt/\hbar)$, $U[R(\theta)] = \exp(-i\theta \cdot \mathbf{S}/\hbar)$. In questa sezione tratteremo l'operatore di rotazione, nella prossima il propagatore:

$$\begin{aligned} U[R(\theta)] &= \exp(-i\theta \cdot \mathbf{S}/\hbar) = \exp(-i\theta \cdot \sigma/2) \\ &= I + \left(-\frac{i\theta}{2}\right) \hat{\theta} \cdot \sigma + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i\theta}{2}\right)^2 I + \frac{1}{3!} \left(-\frac{i\theta}{2}\right)^3 (\hat{\theta} \cdot \sigma) + \dots \end{aligned}$$

raggruppando i coefficienti di I e $\hat{\theta} \cdot \sigma$, otteniamo

$$U[R(\theta)] = \cos(\theta/2)I - i \sin(\theta/2) \hat{\theta} \cdot \sigma$$

$$U[R(\theta)] = \exp(-i\theta \cdot \mathbf{S}/\hbar) = \exp(-i\theta \cdot \sigma/2)$$

14.4 FORMA MATRICIALE DELLE ROTAZIONI TRIDIMENSIONALI

In questa sezione di occupiamo di dare una forma esplicita (matriciale) agli operatori di rotazione tridimensionale, in particolare introducendo gli Angoli di Eulero (un'utile riscrittura delle rotazioni tridimensionali) e poi derivando le Matrici di Wigner, che rappresentano completamente le rotazioni.

14.4.1 Angoli di Eulero e Matrici di Wigner

L'equazione (8.4) esprime, con la convenzione $\hbar = 1$, la forma generale di una rotazione sullo spazio degli spinori a $N = 2s + 1$ componenti. Benché questa parametrizzazione della rotazione sia valida, non mostra in modo semplice la connessione tra gli elementi di matrice ed i parametri θ . Normalmente si introduce una seconda parametrizzazione, per mezzo degli angoli di Eulero. Ogni rotazione può essere identificata da 3 rotazioni in successione. Consideriamo inizialmente un sistema di assi ortogonali x, y, z :

- Ruotiamo il sistema di un angolo α attorno a z . L'asse y è trasformato nell'asse v .
- Effettuiamo una rotazione di angolo β attorno a v , in modo tale che z si trasformi nell'asse ζ .
- Terminiamo ruotando di γ attorno a ζ . L'asse ruotato di x è ζ .

Quindi la rotazione generale si scrive come

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R(\zeta, \gamma)R(v, \beta)R(z, \alpha)$$

a cui corrisponde l'operatore sullo spazio di Hilbert

$$\hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\gamma\hat{\zeta} \cdot \hat{\mathbf{J}})\exp(-i\beta\hat{v} \cdot \hat{\mathbf{J}})\exp(-i\alpha\hat{z} \cdot \hat{\mathbf{J}})$$

Il difetto di questa espressione è che le rotazioni non sono riferite rispetto al sistema di assi originario. Con alcune manipolazioni, è possibile però arrivare a

$$\hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\alpha\hat{J}_z)\exp(-i\beta\hat{J}_y)\exp(-i\gamma\hat{J}_z)$$

dove \hat{J}_y, \hat{J}_z sono -finalmente e per nostra fortuna- riferiti agli assi posti all'inizio. Calcoliamo gli elementi di matrice di \hat{U}_R :

$$\langle j'm' | \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) | jm \rangle$$

La base degli stati $|jm\rangle$ diagonalizza simultaneamente $\hat{\mathbf{J}}^2$ e \hat{J}_z :

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle \quad \hat{J}_z |jm\rangle = m|jm\rangle$$

Non è difficile notare che, siccome $[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_k] = 0$ per ogni componente k del momento angolare totale, allora

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma)] = 0$$

Dal momento che $\hat{\mathbf{J}}^2$ e $\hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma)$ commutano, l'autospazio di uno costituisce un sottospazio invariante per l'altro³, per cui gli elementi di matrice di \hat{U}_R relativi ad una base di autostati di $\hat{\mathbf{J}}^2$, se sono calcolati tra autospazi diversi ($j \neq j'$), risultano nulli. Possiamo scrivere cioè

$$\begin{aligned} \langle j'm' | \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) | jm \rangle &= \delta_{jj'} \langle j'm' | \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) | jm \rangle \\ &= \delta_{jj'} \langle j'm' | \hat{U}_R(\alpha, \beta, \gamma) | jm \rangle \\ &\equiv \delta_{jj'} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \end{aligned}$$

In altri termini, partendo da uno stato nell'autospazio relativo all'autovalore j , una rotazione non può mappare tale stato al di fuori dell'autospazio: questo fatto è rappresentato dalla presenza del termine $\delta_{jj'}$, che rende nulla la "proiezione" su $|j'm'\rangle$ del ruotato di $|jm\rangle$ se $j' \neq j$. Questo chiaramente è un fatto generale delle rotazioni⁴: non abbiamo ancora specificato se stiamo trattando di momento angolare orbitale, di spin o altro ancora. Inoltre, da qui segue naturalmente che, utilizzando una base come $|j, m\rangle$ di autovettori per $\hat{\mathbf{J}}^2$, la matrice rotazionale assume una forma diagonale a blocchi, con ciascun blocco relativo all'autospazio j di $\hat{\mathbf{J}}^2$.

Poiché la base $|jm\rangle$ diagonalizza \hat{J}_z , scrivendo la rotazione \hat{U}_R come trovato precedentemente e applicando a sinistra e a destra gli operatori \hat{J}_z esponenziati, giungiamo a

$$\begin{aligned} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle jm' | \exp(-i\alpha\hat{J}_z) \exp(-i\beta\hat{J}_y) \exp(-i\gamma\hat{J}_z) | jm \rangle \\ &= \exp(-i\alpha m' - i\gamma m) \langle jm' | \exp(-i\beta\hat{J}_y) | jm \rangle \end{aligned}$$

dove definiamo

$$\langle jm' | \exp(-i\beta\hat{J}_y) | jm \rangle \equiv d_{m'm}^{(j)}(\beta)$$

Le matrici $D^{(j)}$ e $d^{(j)}$ prendono il nome di matrici di Wigner. Le matrici di Wigner sono a tutti gli effetti le rappresentazioni matriciali, dette rappresentazioni di spin- j , delle rotazioni tridimensionali⁵ per oggetti a $(2j + 1)$ componenti. In altri termini, per ogni famiglia di autostati a j fissato, poiché una rotazione -come abbiamo visto poco fa- non può variarne il j , si può immaginare di eseguire una rotazione del vettore a $(2j + 1)$ componenti applicandogli la rispettiva matrice di Wigner di spin $-j$. La prossima sezione è dedicata a capire meglio questa affermazione.

14.4.2 Rotazione degli spinori

La legge di rotazione degli spinori a $N = 2s + 1$ componenti è

$$U_R \psi_\sigma(\mathbf{x}) = D_{\sigma\sigma'}^{(j)} \psi_{\sigma'}(R^{-1}\mathbf{x})$$

dove sottintendiamo la somma su σ' e omettiamo la dipendenza dagli angoli α, β, γ . Questa equazione è di fatto la riscrittura, in termini di singola componente, della (8.2), ma possiamo dare anche la seguente

Dimostrazione. Innanzitutto, chiariamo che, sotto una rotazione $R(\theta, \bar{\mathbf{n}})$, una componente dello spinore trasforma per definizione come

$$U_R \psi_\sigma(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{U}_R | \Psi \rangle$$

dove \hat{U}_R è l'operatore di rotazione nello spazio di Hilbert \mathcal{H} :

$$\hat{U}_R = \exp(-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) = \exp(-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{L}}) \exp(-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}})$$

tenendo $\hbar = 1$. Possiamo quindi trovare la soluzione osservando come agisce tale operatore sul bra. Sappiamo che vale

$$\begin{aligned} \hat{U}_R |\mathbf{x}, \sigma\rangle &= \hat{D}_R |R\mathbf{x}, \sigma\rangle \\ &= \sum_{\sigma'} |\sigma'\rangle \langle \sigma' | e^{-i\theta \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}} | \sigma \rangle |R\mathbf{x}\rangle \\ &= \sum_{\sigma'} D_{R|\sigma'\sigma}^{(j)} |R\mathbf{x}, \sigma'\rangle \end{aligned}$$

dove prima compare l'operatore di rotazione \hat{D}_R , agente solamente su \mathcal{H}_s , poi riconosciamo la matrice di Wigner $D_{R|\sigma'\sigma}^{(j)}$. Nel pedice indichiamo separatamente sia la rotazione R cui si fa riferimento, sia gli indici matriciali. Usando la convenzione della somma sugli indici ripetuti, scriviamo

$$\hat{U}_R |\mathbf{x}, \sigma\rangle = D_{R|\sigma'\sigma}^{(j)} |R\mathbf{x}, \sigma'\rangle$$

da cui segue subito la versione

$$\langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{U}_R^\dagger = \left(D_{R|\sigma'\sigma}^{(j)} \right)^* \langle R\mathbf{x}, \sigma' | = D_{R|\sigma\sigma'}^{(j)\dagger} \langle R\mathbf{x}, \sigma' |$$

Dobbiamo ricordare che \hat{U}_R è unitario:

$$\hat{U}_R = \hat{U}_{R^{-1}}^\dagger \quad \text{o equivalentemente} \quad \hat{U}_{R^{-1}} = \hat{U}_R^\dagger$$

e che la stessa cosa vale per \hat{D}_R .⁶ Allora

$$\langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{U}_R = \langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{U}_{R^{-1}}^\dagger = D_{R^{-1}|\sigma\sigma'}^{(j)} \langle R^{-1}\mathbf{x}, \sigma' | = D_{R|\sigma\sigma'}^{(j)} \langle R^{-1}\mathbf{x}, \sigma' |$$

e da qui si ottiene che

$$\langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{U}_R | \Psi \rangle = \psi'_\sigma(\mathbf{x}) = D_{R|\sigma\sigma'}^{(j)} \langle R^{-1}\mathbf{x}, \sigma' | \Psi \rangle = D_{R|\sigma\sigma'}^{(j)} \psi_{\sigma'}(R^{-1}\mathbf{x})$$

Nel caso $j = 1/2$, con $l = 0$ e spin $s = 1/2$, possiamo quindi sostituire $\hat{J}_y = \hat{\sigma}_y/2$, ottenendo

$$\begin{aligned} d^{(1/2)}(\beta) &= \exp\left(-i\frac{\sigma_y}{2}\beta\right) = \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - i\sigma_y \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ &= \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

dove abbiamo usato l'identità (8.9). Esiste più di un modo per computare le matrici di Wigner, e in particolare è degno di nota che, a partire dalla matrice $d^{(1/2)}$, è possibile trovare, armati di sufficiente pazienza, tutte le $d^{(j)}$ che desideriamo. A tempo debito (Sez. 9.2.2), quando avremo imparato a eseguire una composizione di momenti angolari, potremo tornare su questo argomento. Dalla forma di $d^{(1/2)}$ possiamo notare che emerge un fatto nuovo, puramente quantistico e che porterà (come vedremo nella prossima sezione) a conseguenze davvero controintuitive; questo fenomeno è la base stessa della moderna Fisica delle Interazioni Fondamentali e delle Particelle, permettendo la classificazione in fermioni (particelle di spin semi-intero) e bosoni (spin intero). Nel caso spin 1/2, ad esempio, si vede immediatamente come una rotazione di angolo $\beta = 2\pi$ produca la matrice

$$d^{(1/2)}(2\pi) = -1$$

In altri termini, nel mondo quantistico esistono spinori tali che le rotazioni di 2π e l'identità non sono lo stesso operatore

$$\hat{R}_{2\pi} \neq \mathbb{I}$$

anzi, sono opposti! Ciò significa che applicare una rotazione di 2π radianti a tale particella corrisponde a moltiplicare il suo stato di spin per una fase globale -1 . Tuttavia, ancora una volta, la Fisica è salva: non basta ruotare attorno a un fermione per cambiarne lo stato di spin, è infatti necessario rammentare che consideriamo spazi di Hilbert proiettivi, in cui gli stati sono definiti a meno di fasi globali. In questo modo possiamo apprezzare che, fisicamente, ruotare di 2π un fermione è comunque equivalente a non ruotarlo affatto.

14.5 ROTAZIONI DI ANGOLO 2π : FERMIONI E BOSONI

Abbiamo visto come sulle particelle di spin 1/2 la trasformazione $\hat{R}_{2\pi}$ agisca come $-\mathbb{I}$. Questo è un fatto sicuramente sorprendente, ma non deve confondere: non significa che eseguire una misura su un elettrone ruotato di angolo 2π dia risultati diversi da una misura su un elettrone non ruotato, solo che esiste una trasformazione che agisce come una fase $e^{i\pi}$ sullo stato dell'elettrone. D'altra parte, se così fosse, in che modo potremmo stabilire "quanto è stato ruotato l'elettrone"? Non esiste un sistema di riferimento assoluto rispetto a cui abbia senso porsi questa domanda. Dobbiamo toglierci il cappello da matematici e indossare le pantofole da fisici: la teoria necessita di alcuni vincoli.

In queste sezioni ci occupiamo di aggiungere delle condizioni alla teoria che stiamo sviluppando in modo da includere l'inevitabile evidenza fisica che gli esiti delle misure sono indipendenti da rotazioni di angolo 2π attorno a qualsiasi asse. Questo avrà due effetti: otterremo una restrizione sul concetto di osservabile, e a partire da questa deriveremo un fatto generale che scinde fisicamente lo spazio a spin intero da quello a spin semintero.

Iniziamo dai fondamenti: dobbiamo dimostrare che $\hat{R}_{2\pi} = \mathbb{I}$ su tutti gli autostati di \hat{J}^2 con j intero, e $\hat{R}_{2\pi} = -\mathbb{I}$ sugli autostati di \hat{J}^2 con j frazionario.

Dimostrazione. Sia $\hat{R}(\bar{\mathbf{n}}, 2\pi)$ una rotazione di angolo 2π attorno al generico asse $\bar{\mathbf{n}}$:

$$\hat{R}(\bar{\mathbf{n}}, 2\pi) = e^{-i2\pi\bar{\mathbf{n}}\cdot\hat{\mathbf{J}}}$$

Senza perdita di generalità, supponiamo $\bar{\mathbf{n}} = \bar{\mathbf{z}}$

$$\hat{R}_{2\pi} \equiv \hat{R}(\bar{\mathbf{z}}, 2\pi) = e^{-i2\pi\hat{J}_z}$$

Lavoriamo con la base degli autostati del momento angolare $\{|jm\rangle\}$: questa è completa e ortonormale, per cui descrive tutto lo spazio di Hilbert e quindi l'azione di $\hat{R}_{2\pi}$ su \mathcal{H} è completamente specificata dalla sua azione su questa base. Deduciamo che la rotazione applicata a questi stati può essere scritta come

$$\hat{R}_{2\pi}|jm\rangle = e^{-i2\pi\hat{J}_z}|jm\rangle = e^{-i2\pi m}|jm\rangle$$

Ora, poiché m varia tra $-j$ e j con passi di 1, è vero che

$$j \text{ intero} \implies m \text{ intero} \quad j \text{ semintero} \implies m \text{ semintero}$$

per cui

$$\hat{R}_{2\pi}|jm\rangle = (-1)^{2j}|jm\rangle$$

che è la tesi. Abbiamo scoperto che l'operatore $\hat{R}_{2\pi}$ agisce in modo non banale sul nostro spazio di Hilbert \mathcal{H} , e lo decompone completamente in due sottospazi:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_B \oplus \mathcal{H}_F$$

dove B indica lo spazio "bosonico" e F quello "fermionico":

$$\forall |B\rangle \in \mathcal{H}_B : \hat{R}_{2\pi}|B\rangle = |B\rangle \quad \forall |F\rangle \in \mathcal{H}_F : \hat{R}_{2\pi}|F\rangle = -|F\rangle$$

In virtù della completezza e l'ortogonalità⁹ del set $\{|jm\rangle\}$, possiamo dire che gli autostati del momento angolare a j intero sono autostati di $\hat{R}_{2\pi}$ relativi all'autospazio \mathcal{H}_B con autovalore $+1$, quelli con j semintero all'autospazio \mathcal{H}_F con autovalore -1 .

14.5.1 Una condizione sulle osservabili

Dal momento che la Fisica osservata è necessariamente invariante sotto rotazioni di angolo 2π , dobbiamo imporre che ogni distribuzione statistica associata a un qualsiasi osservabile \hat{O} debba, in ciascuno dei suoi momenti, essere invariante sotto applicazione della trasformazione $\hat{R}_{2\pi}$. In formule, questo si traduce in:

$$\langle \phi' | \hat{O}^k | \phi' \rangle = \langle \phi | \hat{O}^k | \phi \rangle$$

dove

$$|\phi'\rangle = \hat{R}_{2\pi}|\phi\rangle$$

e $\langle \phi | \hat{O}^k | \phi \rangle$ è il momento k -esimo della distribuzione di probabilità. Questa affermazione fisica è equivalente alla seguente affermazione algebrica: $\hat{R}_{2\pi}$ commuta con qualsiasi operatore associato a una buona osservabile.

Dimostrazione. Dimostriamo inizialmente che, se vale l'Eq. (8.12), allora necessariamente $[\hat{R}_{2\pi}, \hat{O}] = 0$. Per ipotesi vale

$$\langle \phi' | \hat{O}^k | \phi' \rangle = \langle \phi | \hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O}^k \hat{R}_{2\pi} | \phi \rangle$$

Da qui segue che

$$\langle \phi | (\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O}^k \hat{R}_{2\pi} - \hat{O}^k) | \phi \rangle = 0$$

Siccome questo deve valere in generale per ogni stato $|\phi\rangle$, l'operatore differenza deve essere l'operatore nullo:

$$\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O}^k \hat{R}_{2\pi} - \hat{O}^k = 0$$

cioè, banalmente componendo a sinistra con $\hat{R}_{2\pi}$, vale

$$[\hat{O}^k, \hat{R}_{2\pi}] = 0$$

per qualsiasi scelta di k , da cui la tesi. Dimostriamo che l'assunzione inversa implica l'Eq. (8.12). Se $[\hat{R}_{2\pi}, \hat{O}] = 0$, allora (ricordando che $\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{R}_{2\pi} = 1$):

$$\begin{aligned} \langle \phi' | \hat{O}^k | \phi' \rangle &= \langle \phi | \hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O}^k \hat{R}_{2\pi} | \phi \rangle \\ &= \underbrace{\langle \phi | (\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O} \hat{R}_{2\pi}) (\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O} \hat{R}_{2\pi}) \cdots (\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O} \hat{R}_{2\pi}) | \phi \rangle}_{k \text{ termini}} = \langle \phi | \hat{O}^k | \phi \rangle \end{aligned}$$

come atteso. Possiamo quindi concludere che le due condizioni (8.12) e (8.13) sono equivalenti. Ci soffermiamo su questo punto per chiarire la logica della derivazione: siamo tenuti, da fisici, a compiere affermazioni fisiche, riferite a quantità che siamo capaci di misurare. I postulati devono avere il supporto di solide prove sperimentali. Al contrario, un'affermazione puramente algebrica sulla teoria può avere solo sostegno a posteriori. Questa dimostrazione serve a collegare l'enunciato (fisico) "nel nostro mondo tridimensionale misuriamo solo quantità che non variano se eseguiamo una rotazione di angolo 2π ", che vediamo verificato e imponiamo come postulato nella teoria, con l'enunciato (algebrico) "le buone osservabili sono operatori autoaggiunti che commutano con la trasformazione $\hat{R}_{2\pi}$ ". Siccome le due affermazioni si implicano a vicenda, possiamo usare quella algebrica - operativamente molto più comoda - con la stessa forza argomentativa di quella fisica.

Vediamo la prima conseguenza di quanto abbiamo raggiunto: se le osservabili sono operatori autoaggiunti che commutano con $\hat{R}_{2\pi}$, allora qualsiasi fase relativa in una sovrapposizione di stati fermionici e bosonici non è misurabile.

Dimostrazione. Sia $|\psi\rangle$ lo stato

$$|\psi\rangle = |B\rangle + e^{i\phi}|F\rangle$$

e sia O una buona osservabile, quindi esista il relativo operatore autoaggiunto \hat{O} che realizzi $[\hat{R}_{2\pi}, \hat{O}] = 0$, calcolandone il valore atteso sullo stato

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle B | \hat{O} | B \rangle + e^{i\phi} \langle B | \hat{O} | F \rangle + e^{-i\phi} \langle F | \hat{O} | B \rangle + \langle F | \hat{O} | F \rangle$$

È pur vero che $\hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O} \hat{R}_{2\pi} = \hat{O}$: questo implica che

$$\langle B | \hat{O} | F \rangle = \langle B | \hat{R}_{2\pi}^\dagger \hat{O} \hat{R}_{2\pi} | F \rangle = -\langle B | \hat{O} | F \rangle \implies \langle B | \hat{O} | F \rangle = 0$$

Ogni buona osservabile ha elementi di matrice nulli tra uno stato bosonico e uno stato fermionico, quindi

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle B | \hat{O} | B \rangle + \langle F | \hat{O} | F \rangle$$

cioè tutta l'informazione sulla fase relativa è sparita! Possiamo dire che a tutti gli effetti l'operatore $\hat{R}_{2\pi}$ realizza una scissione internamente a \mathcal{H} tra gli stati di tipo $|B\rangle$ e gli stati di tipo $|F\rangle$. Questa scissione è tale per cui, dal punto di vista di qualsiasi buona osservabile fisica:

- sono equivalenti e (fisicamente) indistinguibili gli stati:

$$\forall \phi \in \mathbb{R} \quad : \quad |B\rangle + e^{i\phi} |F\rangle \quad \overset{\hat{O}}{\sim} \quad |B\rangle + |F\rangle$$

pur essendo (matematicamente) stati diversi (non differiscono per una pura fase globale!);

- le distribuzioni statistiche associate a stati del tipo $|B\rangle + |F\rangle$ si sommano incoerentemente sui due spazi, cioè sono nulli tutti i possibili effetti di interferenza:

$$\langle O \rangle_{|B\rangle+|F\rangle} = \langle O \rangle_{|B\rangle} + \langle O \rangle_{|F\rangle}$$

14.6 Dinamiche dello spin

Dal momento che la ricerca dell'hamiltoniana di spin, si basa su un'analogia con alcune grandezze classiche, ripassiamo alcune idee di base della magnetostatica classica. Consideriamo un loop quadrato con corrente I , in un campo magnetico \mathbf{B} . Il momento della forza sul loop è

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B},$$

dove $\boldsymbol{\mu}$ è il momento magnetico e vale

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{I \cdot A}{c} \mathbf{e}_\perp.$$

L'effetto di \mathbf{T} è l'allineamento di $\boldsymbol{\mu}$ e \mathbf{B} . Classicamente possiamo scrivere l'hamiltoniana di questo sistema in termini di energia potenziale associata al momento della forza:

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \int T(\theta) d\theta = \int \mu B \sin \theta d\theta = -\mu B \cos \theta = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B},$$

dove θ è l'angolo tra $\boldsymbol{\mu}$ e \mathbf{B} . Questa non è vera solo per un loop quadro, ma per un qualsiasi loop piano dove il campo magnetico è costante.

Immaginiamo ora una particella di massa m , carica q che orbita con raggio r . La corrente associata è

$$I = \frac{qv}{2\pi r}$$

e il momento magnetico ha ampiezza

$$\mu = \frac{qv}{2\pi r} \cdot \frac{\pi r^2}{c} = \frac{qvr}{2c} = \left(\frac{q}{2mc} \right) mvr = \frac{q}{2mc} \cdot l \implies \boldsymbol{\mu} = \left(\frac{q}{2mc} \right) \mathbf{l},$$

dove \mathbf{l} è il momento angolare. Il rapporto tra momento magnetico e angolare è detto rapporto giromagnetico γ :

$$\gamma = \frac{q}{2mc}.$$

Se nel caso del loop, l'effetto di \mathbf{T} è quello di allineare $\boldsymbol{\mu}$ e \mathbf{B} , in questo caso il momento della forza causa la precessione di $\boldsymbol{\mu}$ attorno a \mathbf{B} . L'equazione del moto è

$$\mathbf{T} = \frac{d\mathbf{l}}{dt} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B} = \gamma (\mathbf{l} \times \mathbf{B}),$$

dunque in un breve tempo

$$\Delta \mathbf{l} = \gamma (\mathbf{l} \times \mathbf{B}) \Delta t$$

e la frequenza di precessione è

$$\omega_0 = -\gamma \mathbf{B}$$

14.6.1 Momento magnetico orbitale nella teoria quantistica

Utilizziamo ora lo stesso approccio nella teoria quantistica. L'hamiltoniana di una particella di massa m e carica q in un campo magnetico è

$$H = \frac{(\mathbf{P} - q\mathbf{A}/c)^2}{2m} = \frac{|\mathbf{P}|^2}{2m} - \frac{q}{2mc}(\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{P}) + \frac{q^2|\mathbf{A}|^2}{2mc^2},$$

sia

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y\mathbf{i} + x\mathbf{j})$$

di modo che

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B} = B\mathbf{k}$$

è costante sull'asse delle z . Assumiamo che B sia molto piccolo e quindi trascuriamo l'ultimo termine (quadratico in B). Quando il termine di mezzo agisce su $|\psi\rangle$ abbiamo

$$(\mathbf{P} \cdot \mathbf{A})|\psi\rangle \rightarrow -i\hbar\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) = -i\hbar[(\nabla \cdot \mathbf{A})\psi + \mathbf{A} \cdot \nabla\psi] = (-i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla)\psi \rightarrow (\mathbf{A} \cdot \mathbf{P})|\psi\rangle,$$

quindi l'hamiltoniana di interazione è

$$H_{\text{int}} = -\frac{q}{2mc}(2\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}) = -\frac{q}{mc}\frac{B}{2}(-Y P_x + X P_y) = -\frac{q}{2mc}\mathbf{L} \cdot \mathbf{B} \equiv -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}.$$

In questo modo otteniamo

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2mc}\mathbf{L},$$

come nel caso classico (qui μ indica sia la variabile classica che quella quantistica). Proiettiamo tutto lungo l'asse delle z e otteniamo

$$\mu_z = \frac{q}{2mc}L_z = \frac{q\hbar}{2mc}(0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

La grandezza $\frac{q\hbar}{2mc}$ è chiamata magnetone di Bohr della particella.

14.6.2 Momento magnetico di spin

Vediamo adesso come l'elettrone interagisce con un campo magnetico esterno. Assumiamo ancora una volta che esista un operatore del momento magnetico $\boldsymbol{\mu}$ associato con il momento angolare di spin. Dal momento che ogni operatore che agisce su \mathbb{V}_s è una combinazione lineare dell'identità e degli operatori di spin e dal momento che $\boldsymbol{\mu}$ è un vettore operatore, concludiamo che

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma\mathbf{S}$$

dove μ è una costante. Dato che nel caso orbitale $\gamma = -e/2mc$ scriviamo

$$\boldsymbol{\mu} = g(-e/2mc)\mathbf{S}$$

dove g è una costante. Assumiamo anche che

$$H_{\text{int}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{ge}{2mc}\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \frac{ge\hbar}{4mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$$

Il momento magnetico intrinseco dato dallo spin è $g/2$ magnetoni. Con il formalismo qua usato, non c'è modo di trovare g se non empiricamente, tuttavia con l'equazione di Dirac si trova $g = 2$ e poi con l'elettromagnetismo quantistico troviamo che ci sono alcune piccole correzioni date dall'emissione e assorbimento di fotoni, per cui

$$g = 2[1.0011596521884(\pm 43)] \approx 2 \text{ per l'elettrone.}$$

Ritornando all'hamiltoniana, se ora prendiamo uno stato iniziale $|\psi(0)\rangle$, dopo un tot di tempo avremo

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle,$$

dove

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} = e^{+i\gamma t(\mathbf{S} \cdot \mathbf{B})/\hbar}.$$

Dal momento che $\exp(-i\theta \cdot \mathbf{S}/\hbar)$ è l'operatore che ruota di θ , l'effetto del propagatore è quello di roteare lo stato di un angolo

$$\boldsymbol{\theta}(t) = -\gamma\mathbf{B}t,$$

dove $\gamma = \frac{-e}{mc}$. Segue che $\langle S \rangle$ avrà una precessione attorno a \mathbf{B} con frequenza $\omega_0 = -\gamma\mathbf{B}$.

14.6.3 Risonanza paramagnetica

Consideriamo un momento magnetico μ in un campo $\mathbf{B}_0 = B_0 \mathbf{k}$. Questo avrà una precessione attorno a \mathbf{B}_0 con frequenza

$$\omega_0 = -\gamma \mathbf{B}_0.$$

Mettiamoci in un sistema di riferimento che ruoti ad una frequenza ω parallela al campo magnetico (va bene anche se non parallela ma i calcoli saranno più difficili). La frequenza del momento magnetico in questo sistema di riferimento sarà

$$\omega_r = \omega_0 - \omega = -\gamma \mathbf{B}_0 - \omega = -\gamma (\mathbf{B}_0 + \omega/\gamma)$$

e il campo magneti percepito

$$\mathbf{B}_r = \mathbf{B}_0 + \omega/\gamma.$$

Supponiamo ora che nel sistema di riferimento del laboratorio si abbia un campo

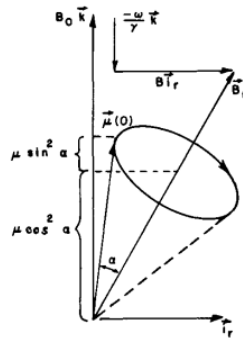
$$\mathbf{B} = B \cos \omega t \mathbf{i} - B \sin \omega t \mathbf{j} + B_0 \mathbf{k} \quad (B \ll B_0),$$

vogliamo sapere l'evoluzione temporale di $\mu(t)$ dato $\mu(0) = \mu \mathbf{k}$. Dato che \mathbf{B} dipende dal tempo (sta roteando), è conveniente andare in un sistema che ruoti alla stessa frequenza $\omega = -\omega \mathbf{k}$. In questo sistema di riferimento

$$\mathbf{B}_r = B \mathbf{i}_r + (B_0 - \omega/\gamma) \mathbf{k}$$

e μ precesserà attorno a \mathbf{B}_r ad una frequenza

$$\omega_r = -\gamma \mathbf{B}_r.$$



Dalla figura si osserva che μ_z oscilla come:

$$\begin{aligned} \mu_z(t) &= \mu \cos^2 \alpha + \mu \sin^2 \alpha \cos \omega_r t \\ &= \mu_z(0) \left[\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 B^2} + \frac{\gamma^2 B^2 \cos \omega_r t}{(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 B^2} \right], \end{aligned}$$

questa formula si applica anche nel sistema del laboratorio dato che μ_z è invariante sotto rotazioni attorno all'asse z . Si dice che siamo a risonanza paramagnetica quando $\omega = \omega_0$, $\mathbf{B}_r = B \mathbf{i}_r$, $\alpha = \pi/2$. A risonanza paramagnetica il cono diventa un cerchio nel piano $y-z$ e μ_z oscilla con la maggiore ampiezza possibile μ ad una frequenza γB . Questi effetti si possono applicare a $\langle \mu \rangle$ nella teoria quantistica.

14.7 Ritorno dei gradi di libertà orbitali

Consideriamo ora anche i gradi di libertà orbitali. Il caso più semplice è quando H è separabile:

$$H = H_0 + H_s$$

così che gli autostati dell'energia sono fattorizzabili

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |\chi_s\rangle.$$

Un esempio di questo tipo è l'atomo di idrogeno dove l'interazione coulombiana è indipendente dallo spin che è costante nel tempo. Se quindi χ è un autostato di S_z abbiamo

$$\begin{aligned} |nlmm_s = 1/2\rangle &\rightarrow \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \chi_+ & \chi_+ &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ |nlmm_s = -1/2\rangle &\rightarrow \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \chi_- & \chi_- &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

I livelli di energia rimangono dunque gli stessi, tutto ciò che accade è uno sdoppiamento degli stati (lo spin può essere up o down). Se oltre all'interazione di Coulomb, abbiamo un debole campo magnetico $B\mathbf{k}$, allora

$$H = H_{\text{Coulomb}} - \left(\frac{-eB}{2mc}\right)L_z - \left(\frac{-eB}{mc}\right)S_z.$$

I due termini aggiuntivi commutano con H_{Coulomb} , L^2 , L_z e S_z e possiamo diagonalizzare H come prima. Gli autovalori sono quindi:

$$H|nlmm_s\rangle = \left[\frac{-Ry}{n^2} + \frac{eB\hbar}{2mc}(m + 2m_s) \right] |nlmm_s\rangle$$

La degenerazione è diminuita da B e la degenerazione due dello stato fondamentale viene separata in due livelli:

$$E_{n=1} = -Ry \pm \frac{e\hbar B}{2mc}.$$

il secondo livello che aveva degenerazione otto viene separato in cinque livelli e così via.

In un atomo multielettronico la separazione dei livelli causa un incremento delle linee spettrali, questo fenomeno è detto effetto Zeeman.

Rimane il caso in cui momento angolare e spin non sono separabili, lo vedremo nel prossimo capitolo.

14.7.1 L'esperimento di Stern-Gerlach

Consideriamo l'esperimento SG in forma semplificata, questo ci rende chiara la quantizzazione del momento angolare. L'apparato consiste in due poli magnetici (sull'asse z) tra cui è presente un campo magnetico non omogeneo. Un raggio di particelle con momento magnetico viene inviato lungo l'asse y passante tra i due poli. Sia \mathbf{B} predominantemente lungo l'asse delle z e sia $\partial B_z / \partial z < 0$. Calcolando la forza associata con il gradiente dell'energia abbiamo

$$\mathbf{F} = -\nabla \mathcal{H} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) = (\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla)\mathbf{B} = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \mathbf{k}$$

che significa che ogni inhomogeneità in \mathbf{B} può portare ad uno sbilanciamento di forze sul dipolo. Classicamente, dal momento che μ_z è continuo dovremmo osservare il raggio curvi e lasciando una traccia continua, ma quello che osserviamo è una serie di punti discreti. In termini semi classici diciamo che μ_z è discreto e dunque lo è anche il momento angolare lungo l'asse z .

L'esperimento di SG può essere usato anche per preparare un ensemble puro di spin up/down.

Capitolo 15

Unione di spin e momento angolare

LA COMPOSIZIONE DEI MOMENTI ANGOLARI

In questo capitolo discuteremo il modo in cui si compongono i momenti angolari. Questa procedura è necessaria per una vasta gamma di applicazioni, come per esempio la corretta trattazione di sistemi in cui oltre al momento angolare orbitale si consideri lo spin delle particelle, ma ha validità ancor più generale. Discuteremo i coefficienti di Clebsch-Gordan, necessari per descrivere il momento angolare di un sistema composto partendo da basi dei momenti angolari delle sue parti. Torneremo poi sulla composizione delle matrici di Wigner, problema lasciato in sospeso, e faremo un piccolo approfondimento sulla simmetria per scambio dei coefficienti di Clebsch-Gordan.

È di interesse generale determinare le regole generali di composizione dei momenti angolari: prendiamo, e.g., un sistema composto da due parti che sia invariante per rotazioni. In questo caso è conservato il momento angolare totale $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$ e non necessariamente quelli "parziali" $\hat{\mathbf{J}}_1$ e $\hat{\mathbf{J}}_2$. Tipicamente, questo è il caso in cui i due sottosistemi sono in interazione.

Un discorso analogo si può fare per un sistema con momento angolare di spin non zero: la conservazione di $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ non ci dice nulla sulla conservazione separata di $\hat{\mathbf{L}}$ e $\hat{\mathbf{S}}$.

Risulta quindi fondamentale rispondere alla domanda: noti i valori possibili di j_1, j_2 , quali sono i possibili valori di j ?

9.1 LA BASE DEL MOMENTO ANGOLARE TOTALE

Consideriamo un sistema composto da due sottosistemi, ciascuno descritto dalla rispettiva base completa

$$\mathcal{B}_1 = \{|j_1, m_1\rangle\} \quad \mathcal{B}_2 = \{|j_2, m_2\rangle\}$$

Come al solito, una buona base per lo spazio $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ è data da $\mathcal{B} = \mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_2$. Il numero di elementi di questa base si trova banalmente:

$$\#\mathcal{B} = (2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$$

Su tale base, l'azione degli operatori relativi ai singoli spazi ¹ sarà data da

$$\begin{aligned} \hat{J}_1^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= j_1(j_1 + 1) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ \hat{J}_2^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= j_2(j_2 + 1) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ \hat{J}_{1z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= m_1 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ \hat{J}_{2z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= m_2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \end{aligned}$$

Il nostro obiettivo è trovare una trasformazione che connetta la base degli autostati di $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z}$ con quella degli autostati di $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$. In presenza di invarianza globale per rotazioni, infatti, è decisamente più comodo lavorare con una base che includa gli autostati del momento angolare totale:

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \rightarrow |j_1, j_2, j, m\rangle$$

La scelta delle grandezze da includere nella base finale non è casuale: stiamo infatti cercando una nuova base simultanea, per cui è necessario cercare operatori commutanti per assicurarci che condividano una base di autostati. D'altronde, è abbastanza intuitivo che l'"informazione" persa passando da

$\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z}$ alla loro somma sia recuperata integrando nel nostro set di grandezze $\hat{\mathbf{J}}^2$, che ovviamente non è accessibile conoscendo solamente $\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2$.

Abbiamo quindi scelto $\hat{\mathbf{J}}^2$, che commuta con $\hat{\mathbf{J}}_1^2$:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}^2] &= [\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_1^2] + [\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2] + [\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2] + [\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2 \cdot \hat{\mathbf{J}}_1] \\ &= 2[\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1x}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1y}\hat{J}_{2y} + \hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z}] \\ &= 2[\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1x}]\hat{J}_{2x} + 2[\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1y}]\hat{J}_{2y} + 2[\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1z}]\hat{J}_{2z} = 0 \end{aligned}$$

dove abbiamo usato la definizione di $\hat{\mathbf{J}}^2$

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2)^2 = \hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{J}}_2^2 + \hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 + \hat{\mathbf{J}}_2 \cdot \hat{\mathbf{J}}_1$$

la commutatività tra $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2$ e tutte le loro componenti, vera perché i due operatori agiscono in sottospazi differenti, e la condizione valida in ciascuno spazio $[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i] = 0$.² Ovviamente, con la stessa derivazione si mostra che $[\hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{\mathbf{J}}^2] = 0$.

D'altronde, la stessa condizione implica che $[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z] = 0$, e naturalmente (ma questo lo sapevamo sin dall'inizio) $[\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2] = 0$. In conclusione, è possibile cercare una base che sia simultaneamente diagonalizzante per ciascuno di questi operatori.

La legge di composizione delle proiezioni del momento angolare segue direttamente dalla definizione: essendo

$$\hat{J}_z \equiv \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$$

si ha immediatamente che è possibile definire il numero quantico m come, banalmente, $m = m_1 + m_2$:

$$\hat{J}_z |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = (\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = (m_1 + m_2) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Più complicato è il caso della composizione dei quadrati dei momenti angolari. Per cominciare, ci chiediamo quanti siano i valori che può assumere la coppia j, m a fissati valori di j_1, j_2 : poiché stiamo semplicemente cambiando base, deve ancora essere

$$N = (2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$$

Consigliamo di seguire questo cambio di base avendo sott'occhio le Figure 9.1 e 9.2, che permettono di visualizzare quanto stia accadendo.

Vogliamo innanzitutto determinare valori minimi e massimi possibili per j , il momento angolare totale. Per il massimo, il ragionamento è semplice: dal momento che m_1 e m_2 sono superiormente limitati, rispettivamente, da j_1 e j_2 , dovrà essere

$$j \leq j_1 + j_2$$

Il minimo può essere affrontato nel seguente modo: cominciamo saturando lo stato con massimi valori possibili di m e j , i.e. iniziamo guardando lo stato (usiamo i suffissi "old" e "new" riferendoci alle basi di partenza e di arrivo per chiarezza)

$$|\vec{\alpha}, j_{\max}, m_{\max}\rangle_{\text{new}} \equiv |\vec{\alpha}, j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle_{\text{new}}$$

dove, per non appesantire eccessivamente la notazione, abbiamo incluso all'interno di $\vec{\alpha}$ la dipendenza da j_1, j_2 - che di qui in avanti non giocherà alcun ruolo e può essere sottintesa in favore delle altre quantità.

Quanti sono i possibili autostati della base di partenza tali che $m_1 + m_2 = m_{\max}$? Uno solo:

$$|\vec{\alpha}, m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle_{\text{old}} \rightarrow |\vec{\alpha}, j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle_{\text{new}}$$

Infatti, la condizione $m = m_{\max}$ può realizzarsi unicamente nel caso in cui il limite superiore a m stesso sia il massimo possibile, i.e. $j = j_{\max}$. D'ora in avanti sottintenderemo le uguaglianze interne agli stati ricordando che la terza e la quarta posizione degli stati "old" sono occupate da m_1 e m_2 , mentre negli stati "new" da j e m rispettivamente.

Scendiamo di un'unità in m , ossia: ci chiediamo in quanti possibili stati della nuova base possa comparire $m = m_{\max} - 1$. Ci sono due possibilità: che il relativo j sia saturato (i.e. $j = j_{\max}$), e quindi che stiamo trattando lo stato con m non saturato, o che j sia non saturato e che invece lo sia m .

D' altronde, è anche vero che

$$m_1 + m_2 = j_1 + j_2 - 1 \iff \begin{cases} m_1 = j_1 - 1 & m_2 = j_2, \\ m_1 = j_1 & m_2 = j_2 - 1 \end{cases} \text{ oppure}$$

Non sono possibili altre combinazioni: deve essere $m_1 \leq j_1, m_2 \leq j_2$. Concludiamo che

$$\left\{ \begin{array}{l} |\vec{\alpha}, j_1 - 1, j_2\rangle_{\text{old}} \\ |\vec{\alpha}, j_1, j_2 - 1\rangle_{\text{old}} \end{array} \right\} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} |\vec{\alpha}, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle_{\text{new}} \\ |\vec{\alpha}, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle_{\text{new}} \end{array} \right\}$$

Come anticipato, il secondo degli stati della nuova base satura j , ma non m , dato che il j a cui fa riferimento è $j_{\text{max}} = j_1 + j_2$. Il terzo invece satura m , ma non j : possiede infatti un valore di m che corrisponde al massimo possibile per $j = j_1 + j_2 - 1$. Questo stato diventa il precursore di una torre di stati con momento angolare $j = j_1 + j_2 - 1$.

Ragionando nello stesso modo, si trova che

$$m_1 + m_2 = j_1 + j_2 - 2 \iff \begin{cases} m_1 = j_1 - 2 & m_2 = j_2 \\ m_1 = j_1 - 1 & m_2 = j_2 - 1 \\ m_1 = j_1 & m_2 = j_2 - 2 \end{cases}$$

il che implica

$$\left\{ \begin{array}{l} |\vec{\alpha}, j_1 - 2, j_2\rangle_{\text{old}} \\ |\vec{\alpha}, j_1 - 1, j_2 - 1\rangle_{\text{old}} \\ |\vec{\alpha}, j_1, j_2 - 2\rangle_{\text{old}} \end{array} \right\} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} |\vec{\alpha}, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle_{\text{new}} \\ |\vec{\alpha}, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle_{\text{new}} \\ |\vec{\alpha}, j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2\rangle_{\text{new}} \end{array} \right\}$$

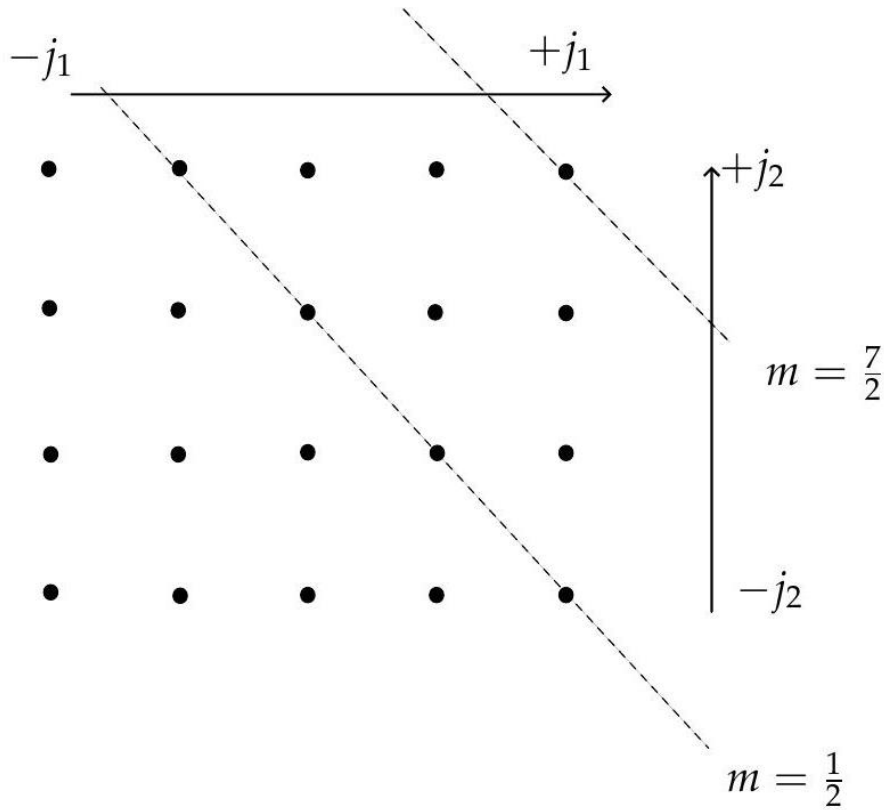


Figura 9.1: Una utile visualizzazione delle possibili coppie (m_1, m_2) nel caso in cui abbiamo $j_1 = 2, j_2 = 3/2$. Procedendo lungo una riga da sinistra verso destra, aumenta m_1 , mentre m_2 cresce, sempre in passi unitari, avanzando dal basso verso l'alto a colonna fissata. Gli stati del sistema si dispongono a formare un rettangolo di dimensioni $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$. Le rette tratteggiate in diagonale, tra le quali abbiamo voluto evidenziare le due più rilevanti, uniscono gli stati a cui corrispondono valori di m costanti.

Qui il primo degli stati della nuova base appartiene alla linea di stati per cui $j = j_{\text{max}}$, il secondo alla linea $j = j_{\text{max}} - 1$ e il terzo è il capostipite di una nuova linea $j = j_{\text{max}} - 2$.

Le linee, è ovvio, non sono infinite: il minimo tra j_1 e j_2 limita questa proliferazione di nuove torri di stati, e quindi di nuovi valori di j . Dopo aver eseguito un numero di passi pari a $2 \min\{j_1, j_2\} + 1$, compreso quello di partenza, non possiamo più generare una nuova linea e troviamo il minimo valore di j , ovvero $j_{\min} = j_{\max} - \min\{j_1, j_2\}$, che equivale a scrivere

$$j_{\min} = |j_2 - j_1|$$

Dimostrazione. Un modo semplice di dimostrare che j_{\min} è esattamente $|j_1 - j_2|$ è contare gli stati. Abbiamo a disposizione le seguenti informazioni:

- esiste lo stato $|\vec{\alpha}, j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle$;
- essendo \hat{J} lineare in entrambi \hat{J}_1 e \hat{J}_2 , esiste l'operatore di discesa \hat{J}_- . Questo implica che esista l'intera torre di $2j + 1$ stati associati al momento angolare j ;
- dovendo j variare con passo unitario, devono esistere tutti i possibili j compresi tra j_{\max} e j_{\min} .

Allora mettendo insieme queste informazioni, possiamo impostare la seguente equazione: per chiarezza chiamiamo $b \equiv j_{\max} = j_1 + j_2$ e $a \equiv j_{\min}$, e scriviamo

$$\sum_{k=a}^b \underbrace{(2k+1)}_{k\text{-esima torre}} = t \text{ dove } t = \underbrace{(2j_1+1)(2j_2+1)}_{\dim \mathcal{B}} = 4j_1j_2 + 2b + 1$$

Questa equazione può essere sviluppata come segue:

$$\begin{aligned} 4j_1j_2 + 2b + 1 &= 2 \sum_{k=a}^b k + \sum_a^b 1 \\ &= 2 \sum_{k=0}^{b-a} (a+k) + (b-a+1) \\ &= 2a(b-a+1) + 2 \frac{(b-a)(b-a+1)}{2} + (b-a+1) \\ &= (b-a+1)(b+a+1) \\ &= (b+1)^2 - a^2 = b^2 + 2b + 1 - a^2 \end{aligned}$$

da cui segue immediatamente che:

$$a^2 = b^2 - 4j_1j_2 = (j_1 + j_2)^2 - 4j_1j_2 = (j_1 - j_2)^2$$

e quindi la tesi:

$$j_{\min} = a = |j_1 - j_2|$$

essendo ovviamente $j_{\min} \geq 0$.

Abbiamo quindi scoperto che

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

Nel formalismo della Teoria delle Rappresentazioni si raggiunge una notazione molto comoda per denotare la composizione dei momenti angolari, che qui non spiegheremo nei dettagli:

$$j_1 \otimes j_2 = |j_1 - j_2| \oplus |j_1 - j_2| + 1 \oplus \dots \oplus j_1 + j_2 - 1 \oplus j_1 + j_2$$

la quale sintetizza sostanzialmente quanto abbiamo derivato: la rappresentazione data dal prodotto tensore di due diverse rappresentazioni del momento angolare è data dalla somma diretta delle rappresentazioni da $|j_1 - j_2|$ a $j_1 + j_2$, cioè ogni stato generato dal prodotto tensore dei due momenti angolari "vive" in una delle rappresentazioni presenti in tale somma.

9.2 I COEFFICIENTI DI CLEBSCH-GORDAN

Nelle sezioni precedenti abbiamo dimostrato che è possibile eseguire un cambio di base

$$\mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_2 \equiv \{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\} \leftrightarrow \mathcal{B} \equiv \{|j_1, j_2, j, m\rangle\}$$

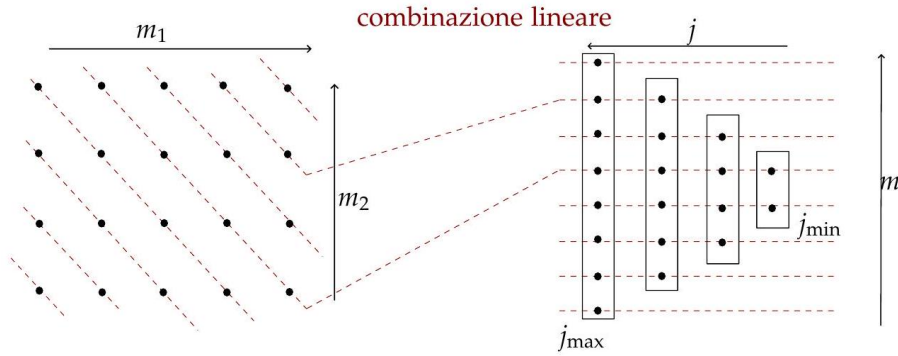


Figura 9.2: Cambiare base nel modo che abbiamo appena esposto equivale a eseguire delle combinazioni lineari opportune fra stati accomunati dallo stesso m e riorganizzare gli stati risultanti come mostrato sul lato destro, dove li raggruppiamo in famiglie. Ognuna di queste raccoglie $2j + 1$ stati corrispondenti a un comune valore di j , che si differenziano tra loro per il numero quantico m . Se prima la catalogazione degli stati della base era effettuata utilizzando m_1, m_2 , ora li stiamo disponendo per mezzo di j, m . Le diagonali tracciate a sinistra riuniscono stati con lo stesso m , che in questa nuova disposizione si allineano orizzontalmente. Le combinazioni lineari opportune citate sopra sono relative ai Coefficienti di Clebsch-Gordan. Notiamo infine che il singoletto $j = 0, m = 0$ è uno stato accessibile solo se sommiamo momenti angolari identici, cioè nel caso $j_1 = j_2$.

Le due basi sono legate da una relazione di completezza:

$$\begin{aligned} |j_1, j_2, j, m\rangle &= \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} C_{m|m_1 m_2}^{j j_1 j_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \sum_{j, m} |j_1, j_2, j, m\rangle \langle j_1, j_2, j, m | j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ &= \sum_{j, m} C_{m_1 m_2 | m}^{j_1 j_2 j} |j_1, j_2, j, m\rangle \end{aligned}$$

I coefficienti introdotti $C_{m|m_1 m_2}^{j j_1 j_2}$ sono detti Coefficienti di Clebsch-Gordan (CG per gli amici) e si può mostrare che sono reali, il che motiva entrambe le sommatorie appena riportate. Tra questi coefficienti, alcuni sono nulli: basta pensare a tutti quelli tali che $j \geq j_1 + j_2$ oppure $j \leq |j_1 - j_2|$. Sono nulli anche tutti i coefficienti tali che $m \neq m_1 + m_2$. Tali regole di selezione sui ClebschGordan saranno molto utili più avanti, quando utilizzeremo il Teorema di Wigner-Eckart.

Questi coefficienti collegano le due basi $\mathcal{B}_1 \otimes \mathcal{B}_2$ e \mathcal{B} , entrambe complete e ortogonali; inoltre, soddisfano la relazione

$$\sum_{j, m} C_{m|m'_1 m'_2}^{j j_1 j_2} C_{m|m_1 m_2}^{j j_1 j_2} = \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2}$$

che può essere banalmente dimostrata per sostituzione:

$$\begin{aligned} \sum_{j, m} C_{m|m'_1 m'_2}^{j j_1 j_2} C_{m|m_1 m_2}^{j j_1 j_2} &= \sum_{j, m} \langle j_1, j_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, j, m\rangle \langle j_1, j_2, j, m | j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ &= \langle j_1, j_2, m'_1, m'_2 | \mathbb{I} | j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2} \end{aligned}$$

Analogamente si mostra che deve essere soddisfatta anche la relazione

$$\sum_{m_1, m_2} C_{m'|m_1 m_2}^{j' j_1 j_2} C_{m|m_1 m_2}^{j j_1 j_2} = \delta_{j j'} \delta_{m m'}$$

Riportiamo alcune tavole di coefficienti di Clebsch-Gordan nella Figura ??, presente nell'Appendice.

9.2.1 Un esempio: composizione di due spin 1/2

A titolo di esempio, proviamo ad applicare ciò al caso di due sistemi di spin 1/2; si potrebbe pensare all'accoppiamento degli spin di elettrone e protone nell'atomo di idrogeno, nel suo stato fondamentale. Difatti, in tale stato elettrone e protone non posseggono momento angolare orbitale, per cui la composizione dei momenti angolari si riduce a

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

I due sistemi in questione fissano dunque

$$j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$$

per cui, saranno ammessi i valori di spin

$$\sigma_1 = \pm \frac{1}{2} \quad \sigma_2 = \pm \frac{1}{2}$$

dove chiamiamo σ_1 ed σ_2 gli autovalori degli operatori $\hat{J}_{z,1}$ e $\hat{J}_{z,2}$, indicati fin ora con m_1 e m_2 . Analogamente, scriviamo qui $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2$ al posto di $m = m_1 + m_2$. Data dunque la relazione

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m \right\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} C_{\sigma|\sigma_1\sigma_2}^{j\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \sigma_1, \sigma_2 \right\rangle$$

vogliamo estrarre i coefficienti $C_{\sigma|\sigma_1\sigma_2}^{j\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$. In particolare ricordiamo che, dovendo valere le seguenti due relazioni per il momento angolare totale

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad \sigma \in (-j, j), \forall j$$

in questo caso andremo a determinare i quattro - come atteso - elementi di base

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle \quad \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1 \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0 \right\rangle \quad \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, -1 \right\rangle \quad \text{della forma } |j_1, j_2, j, \sigma\rangle$$

in relazione agli elementi di base di partenza

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

della forma $|j_1, j_2, \sigma_1, \sigma_2\rangle$

Partiamo dai più semplici tra questi, notando che per avere $\sigma = \pm 1$ nella nuova base, le uniche possibilità sono date da $\sigma_1 = \sigma_2 = \pm 1/2$. Per cui, assumendo normalizzate le basi di partenza e quelle di arrivo, devono valere le due corrispondenze biunivoche

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1 \right\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, -1 \right\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Per ricavare le altre due relazioni, iniziamo col considerare l'operatore di discesa \hat{J}_- del momento angolare totale, che in questo caso agirà sul generico elemento di base prodotto nel seguente modo

$$\hat{J}_- |j_1, j_2, j, \sigma\rangle = |j_1, j_2\rangle \otimes (\sqrt{(j - \sigma + 1)(j + \sigma)} |j, \sigma - 1\rangle)$$

agendo come identità sul ket $|j_1, j_2\rangle$.

D'altronde ricordiamo la definizione di questo operatore

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$$

da cui possiamo ottenere immediatamente che

$$\hat{J}_- = \hat{J}_{1,-} + \hat{J}_{2,-}$$

osservando in particolare che gli operatori $\hat{J}_{1,-}$ e $\hat{J}_{2,-}$ agiranno come identità sul pezzo di autostato $|j, \sigma\rangle$.

Usiamo questi due risultati per sviluppare l'equazione

$$\hat{j}_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1 \right\rangle = (\hat{j}_{1,-} + \hat{j}_{2,-}) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

dove il membro sinistro si riduce quindi a

$$\hat{j}_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1 \right\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \sqrt{2} |1, 0\rangle = \sqrt{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0 \right\rangle$$

e riconosciamo nel risultato uno tra gli elementi di base cercati. Non ci resta che sviluppare il membro destro, ottenendo

$$\begin{aligned} (\hat{j}_{1,-} + \hat{j}_{2,-}) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \hat{j}_{1,-} \left| j_1 = \frac{1}{2}, \sigma_1 = \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| j_2 = \frac{1}{2}, \sigma_2 = \frac{1}{2} \right\rangle \\ &+ \left| j_1 = \frac{1}{2}, \sigma_1 = \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \hat{j}_{2,-} \left| j_2 = \frac{1}{2}, \sigma_2 = \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo volutamente esplicitato il significato di ciascun 1/2, onde evitare fraintendimenti nel calcolo. Otteniamo infine, reinserendo tutto nell'equazione di partenza

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

Resta ora da ricavare l'ultimo elemento di base rimasto, in funzione di quelli di partenza, vale a dire

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = a \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + b \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

dove fissiamo la dipendenza dai soli stati con spin antiparallelo, che garantiscono $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 = 1$.

Dato che sia la base di partenza che quella di arrivo sono ortonormali, otteniamo agevolmente

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \mid \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = a^2 + b^2 = 1$$

D'altronde, notiamo che lo stato con $j = 1, \sigma = 0$ calcolato sopra, dipende dagli stessi elementi di base di $j = 0, \sigma = 0$, per cui abbiamo, sempre per l'ortonormalità

$$0 = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0 \mid \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + b)$$

Notiamo quindi che sono possibili

$$a = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$b = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \mid \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}$$

esiste un convenzione, nota come convenzione della fase, che risolve tale ambiguità tramite la relazione

$$\langle j_1, j_2, j_1, j - j_1 \mid j_1, j_2, j, j \rangle > 0$$

per cui fissiamo $b > 0$, nel nostro caso. Quindi otteniamo infine

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

Possiamo sintetizzare quanto ottenuto in una forma matriciale, che rende più elegante l'elenco dei - in realtà - sedici coefficienti ottenuti

$$\begin{bmatrix} |0, 0\rangle \\ |1, 1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{bmatrix}$$

dove abbiamo evitato di riportare i ridondanti $j_1 = 1/2$ e $j_2 = 1/2$, all'interno dei ket di partenza e di arrivo. Osserviamo - come atteso - che questa matrice C così ottenuta è unitaria; si può verificare facilmente che vale la relazione $CC^\dagger = \mathbb{I}$.

15.1 OPERATORI TENSORIALI E ROTAZIONI

In questa sezione approfondiremo la classificazione degli operatori finora incontrati, in analogia con ciò che concerne le quantità fisiche associate ad essi. Abbiamo introdotto operatori e vettori di operatori, senza tuttavia citare esplicitamente come questi trasformino sotto le rotazioni, che se vogliamo rappresentano delle ottime trasformazioni test, utili ad indagare una buona parte dei sistemi fisici tridimensionali di nostro interesse.

D'ora in avanti diremo che un generico operatore può essere classificato come scalare, vettore o tensore di rango superiore, a seconda di come esso trasformi sotto rotazioni. Questa può essere una definizione comoda per la maggior parte dei nostri scopi, ma precisiamo che non si tratta di una definizione universale: basti pensare, ad esempio, che una grandezza fisica - i.e. un operatore in meccanica quantistica - si definisce scalare rispetto ad una specifica trasformazione.

Recuperiamo quanto visto nei capitoli precedenti: un operatore \hat{O} (semplice, vettoriale o matriciale che sia) trasforma, sotto una rotazione infinitesima di angolo $\delta\theta$ attorno ad un asse $\bar{\mathbf{n}}$, secondo la relazione

$$\hat{O}' = \hat{O} + \frac{i}{\hbar} \delta\theta [\hat{O}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}]$$

dove $\hat{\mathbf{J}}$ è l'operatore vettoriale momento angolare, che genera la trasformazione in questione.

Dimostrazione. Ricordando che gli operatori trasformano sotto una rotazione (unitaria) \hat{U}_R come $\hat{O}' = \hat{U}_R \hat{O} \hat{U}_R^\dagger$, e che una rotazione infinitesima di angolo ε si scrive $\hat{U}_R = \mathbb{1} - i\varepsilon \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}$, al primo ordine

$$\begin{aligned} \hat{O}' &= (\mathbb{1} - i\varepsilon \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) \hat{O} (\mathbb{1} + i\varepsilon \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) \\ &\simeq \hat{O} + i\varepsilon \hat{O} \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}} - i\varepsilon \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}} \hat{O} \\ &= \hat{O} + i\varepsilon [\hat{O}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}] \end{aligned}$$

si ha la tesi usando $\varepsilon = \delta\theta$ e reintroducendo \hbar . Diciamo che \hat{O} è un operatore scalare se è invariante per rotazioni, ovvero se si ha

$$[\hat{O}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}] = 0 \quad \forall \bar{\mathbf{n}}$$

dunque se

$$\hat{O}' = \hat{O}$$

Diciamo invece che \hat{O} è un operatore vettoriale se i suoi operatori componenti trasformano - sempre per rotazioni infinitesime - come le componenti di un vettore in \mathbb{R}^3 , ovvero se

$$[\hat{O}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{J}}] = i\hbar \bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{O}}$$

dunque se

$$\hat{O}' = \hat{O} - \delta\theta \bar{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{O}}$$

Per questa ultima tipologia, possiamo definire le componenti sferiche dell'operatore vettoriale, a partire dalle componenti cartesiane x, y, z

$$\hat{O}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{O}_x \pm i\hat{O}_y) \quad \hat{O}_0 = \hat{O}_z$$

Come per scalari e vettori associati alle grandezze fisiche, diciamo che gli operatori scalari e vettoriali sono più in generale operatori tensoriali, rispettivamente di rango $k = 0$ e $k = 1$. Non solo, dei discorsi analoghi si possono avere in dimensioni diverse da 3. Più in generale, un operatore tensoriale di rango k in uno spazio di dimensione N , avrà N^k componenti. Quanto segue riguarda ai tensori, verrà quindi esteso agli operatori.

10.1.1 Tensori irriducibili

Si può dimostrare che un tensore cartesiano (dunque $N = 3$) di rango k è sempre decomponibile in una certa combinazione di tensori di rango inferiore; così facendo, si possono sempre individuare $2k + 1$ componenti associabili ad un tensore di rango k , che dunque satura il proprio rango a quello del tensore madre. Il tensore in questione viene detto irriducibile, ed è di nostro interesse in ciò che seguirà.

A titolo d'esempio, consideriamo un tensore cartesiano di rango $k = 2$, che sappiamo essere rappresentabile da una matrice. Esso può essere sempre scritto nel seguente modo

$$\hat{T} = \frac{\hbar}{3} \text{Tr}(\hat{T}) + \hat{T}_A + \left(\hat{T}_S - \frac{\hbar}{3} \text{Tr}(\hat{T}) \right)$$

ovvero in una somma di tensori di rango 0,1 e 2 . Infatti il termine $\frac{1}{3} \text{Tr}(\hat{T})$ è una quantità scalare, ossia invariante sotto rotazioni. Per notazione, indichiamo questo termine con

$$\hat{T}^{(0)} = \frac{\hbar}{3} \text{Tr}(\hat{T})$$

dove 0 indica quindi il rango effettivo di questo tensore. Il secondo termine si esprime come

$$\hat{T}_A = \frac{1}{2} (\hat{T} - \hat{T}^t)$$

ovvero - in prima battuta - un tensore anti-simmetrico di rango 2, ma che in realtà ha solo tre componenti indipendenti tra di loro. Queste tre componenti trasformano come un vettore una volta fissata una base per questa matrice. Per cui fissiamo una nomenclatura anche per questo termine

$$\hat{T}^{(1)} = \frac{1}{2} (\hat{T} - \hat{T}^t)$$

dove, come prima, l'apice indica il rango al quale è stato ridotto questo pezzo del tensore di partenza. Non ci resta che considerare l'ultimo termine; sarà chiaro ora che con \hat{T}_S indichiamo la parte simmetrica

$$\hat{T}_S = \frac{1}{2} (\hat{T} + \hat{T}^t)$$

L'ultimo termine viene quindi indicato come

$$\hat{T}^{(2)} = \left(\hat{T}_S - \frac{\hbar}{3} \text{Tr}(\hat{T}) \right)$$

dal momento che l'oggetto in questione è un tensore di rango 2, il cui rango non è riducibile, dato che questo possiede cinque gradi di libertà; si tratta infatti di una matrice simmetrica a traccia nulla, che abbassa quindi il numero di gradi di libertà tipico delle matrici simmetriche 3×3 da 6 a 5 . Questo ultimo termine è proprio il tensore irriducibile di rango k avente $2k + 1$ componenti indipendenti, menzionato all'inizio di questa sezione. Chiaramente possiamo dire che sono irriducibili - ulteriormente - anche i tensori $\hat{T}^{(0)}$ e $\hat{T}^{(1)}$. Riscriviamo il tensore di partenza nella nuova notazione

$$\hat{T} = \hat{T}^{(0)} + \hat{T}^{(1)} + \hat{T}^{(2)}$$

come somma di tensori irriducibili. Questi vengono anche detti tensori sferici irriducibili.

Se consideriamo ora un operatore tensoriale di rango $k = 1$, ci accorgiamo che le coordinate sferiche definite in equazione (10.1)

$$\hat{T}_{\pm 1} = \mp (\hat{T}_x \pm i \hat{T}_y) \quad \hat{T}_0 = \hat{T}_z$$

possono essere intese come componenti di un tensore irriducibile di componenti

$$\hat{T}_q = \hat{T}_q^{(1)} \quad \text{con } q \in [-1, 1]$$

Focalizziamo ora la nostra attenzione sul tensore che satura il rango di quello di partenza, vale a dire quello con $2k + 1$ componenti. Tornando - per naturale estensione - allo spazio degli operatori, introduciamo l'operatore tensoriale sferico irriducibile di rango k , avente $2k + 1$ componenti

$$\hat{T}_q^{(k)} \quad \text{con } q \in [-k, k]$$

come quel tensore per il quale valga la seguente legge di trasformazione

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) \hat{T}_q^{(k)} \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)^\dagger = \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} D_{q'q}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma)$$

dove

$$D_{q'q}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle k, q' | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | k, q \rangle$$

Questa legge di trasformazione può essere dimostrata a partire dalle regole di commutazione tra questi tensori e il momento angolare $\hat{\mathbf{J}}$, che riportiamo per completezza e in riferimento a quanto introdotto all'inizio di questo paragrafo

$$\left[\hat{T}_q^{(k)}, \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{j}} \right] = - \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \bar{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{j}} | k, q \rangle$$

Osservando l'equazione (10.2), notiamo che ci è familiare; abbiamo incontrato questa espressione in una forma meno involuta, nello studio delle rotazioni applicate agli autostati del momento angolare. Valeva infatti la relazione

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) |j, m\rangle = \sum_{m'=-j}^j D_{m'm}^{(j)} |j, m'\rangle$$

dove osserviamo che questa vale per ogni valore di j fissato. In questo senso, la rotazione \hat{R} non è in grado di esplorare valori di j diversi da quello fissato; ciò è consistente con il fatto che una rotazione non è classicamente in grado di cambiare il modulo di un vettore.

10.1.2 Teorema di Wigner-Eckart

Il teorema di Wigner-Eckart - che non dimostreremo - stabilisce che le componenti di un operatore tensoriale sferico rispetto alla base degli autostati del momento angolare sono date dalla relazione

$$\langle j' m' | \hat{T}_q^{(k)} | j m \rangle = C_{m' m q}^{j' j k} \langle j' | \hat{T}^{(k)} | j \rangle$$

In questa equazione, il Coefficiente di Clebsch-Gordan $C_{m' m q}^{j' j k}$ che contiene le informazioni sulla geometria/orientazione del sistema, mentre $\langle j' | \hat{T}^{(k)} | j \rangle$ è detto elemento di matrice ridotto dell'operatore tensoriale $\hat{T}^{(k)}$ e non dipende dall'orientazione spaziale, dunque dai numeri quantici m, m', q : possiamo dire che esso contiene la sola informazione sulla dinamica del sistema.

Proviamo ad applicare il teorema ad un operatore scalare sferico $\hat{T}^{(0)}$; abbiamo $k = 0$ e banalmente soltanto $q = 0$ (ricordiamo che q varia tra $-k$ e $+k$) per cui:

$$\begin{aligned} \langle j' m' | \hat{T}^{(0)} | j m \rangle &= C_{m' m 0}^{j' j 0} \langle j' | \hat{T}^{(0)} | j \rangle \\ &= \langle j' | \hat{T}^{(0)} | j \rangle \delta_{j' j} \delta_{m' m} \end{aligned}$$

dovendo essere

$$|j - k| \leq j' \leq j + k \quad m' = m + q$$

Come avevamo anticipato, dalle proprietà dei CG seguono importanti regole di selezione sugli elementi di matrice di operatori tensoriali sferici, in questo caso di $\hat{T}^{(0)}$: per operatori scalari sferici, gli elementi di matrice tra diversi j e m sono nulli. Si deriva in modo analogo un'altra regola di selezione, sugli operatori vettoriali, ossia di rango $k = 1$:

$$\langle j' m' | \hat{T}^{(1)} | j m \rangle = C_{m' m \{0, \pm 1\}}^{j' j 1} \langle j' | \hat{T}^{(1)} | j \rangle$$

per cui gli unici elementi di matrice ammessi sono quelli tali che

$$|j' - j| = 0, \pm 1$$

tranne il caso $j' = j = 0$, in quanto se $j = 0$ allora $j' \geq |0 - 1| = 1$. Di queste, sono non nulli i soli elementi di matrice con $m' = m + q$.

Capitolo 16

Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo

16.1 Il formalismo

La teoria delle perturbazioni indipendente dal tempo è un'approssimazione nello studio di sistemi, applicabile nel caso in cui l'hamiltoniana è scrivibile come $H = H^0 + H^1$ e noi sappiamo risolvere esattamente H^0 che deve essere molto maggiore di H^1 . H^0 è chiamata hamiltoniana imperturbata e H^1 perturbazione.

Procediamo come segue. Assumiamo che per ogni autovettore $|E_n^0\rangle \equiv |n^0\rangle$ (non degeneri, vedremo più avanti come trattare il caso degeneri) di H^0 esista un autovettore $|n\rangle$ di H . Assumiamo che gli autovettori di H possano essere scritti come serie di perturbazioni

$$|n\rangle = |n^0\rangle + |n^1\rangle + |n^2\rangle + \dots$$
$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots$$

dove la seconda fila sono gli autovalori. Il superscript indica la potenza dell'elemento matriciale di H^1 . Un termine con superscript k è detto di k -ordine. Man mano che l'ordine aumenta i termini diventano più piccoli.

Adesso vogliamo trovare i termini dell'espansione di $|n\rangle$ e E_n , cominciamo con

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

La ricerca dei termini si basa sull'assunzione che $|n\rangle$ sia normalizzato e sia indipendente da H (questa non è un'assunzione). Possiamo quindi risolvere prima

$$H^0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle$$

e poi i termini di primo ordine

$$H^0|n^1\rangle + H^1|n^0\rangle = E_n^0|n^1\rangle + E_n^1|n^0\rangle$$

per cui otteniamo

$$E_n^1 = \langle n^0|H^1|n^0\rangle$$

e

$$|n\rangle = |n^0\rangle e^{i\alpha} + \sum'_m \frac{|m^0\rangle \langle m^0|H^1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \rightarrow |n^0\rangle + |n^1\rangle,$$

dove il $'$ indica che $m \neq n$ e il fattore di fase $e^{i\alpha}$ è totalmente arbitrario fino al primo ordine, dunque possiamo scegliere 1. Osserviamo che $|n^1\rangle$ è ortogonale a $|n^0\rangle$ e proporzionale alla prima potenza di H^1 . Possiamo determinare E_n^2 dal secondo ordine

$$H^0|n^2\rangle + H^1|n^1\rangle = E_n^0|n^2\rangle + E_n^1|n^1\rangle + E_n^2|n^0\rangle,$$

da cui

$$E_n^2 = \sum'_m \frac{|\langle n^0|H^1|m^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}.$$

Decidiamo di fermarci al secondo ordine.

Osserviamo che l'energia di un dato ordine è determinata dallo vettore di stato dell'ordine precedente. La condizione sotto quale l'espansione delle perturbazioni è una buona approssimazione è data da (15.2):

$$\left| \frac{\langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \right| \ll 1,$$

ovvero dipende dalle dimensioni di H^1 , gli elementi matriciali di H^1 tra stati imperturbati e la differenza tra i livelli di energia (indicano la "rigidità" del sistema).

16.2 Alcuni esempi

Consideriamo una particella di massa m , carica q in un oscillatore armonico con potenziale $V = 1/2 m \omega^2 x^2$. Supponiamo di applicare un campo elettrico esterno di ampiezza f lungo l'asse delle x con direzione positiva (potenziale elettrico $\phi = -fx \rightarrow$ energia potenziale $V = -qfx$). Quindi

$$H = H^0 + H^1 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 - qfX.$$

Calcoliamo la variazione di energia al primo ordine

$$E_n^1 = \langle n^0 | H^1 | n^0 \rangle = -qf \langle n^0 | X | n^0 \rangle$$

dove $|n^0\rangle$ è l' n -esimo stato dell'oscillatore imperturbato. Andando nella base delle coordinate osserviamo che E^1 è nullo, infatti

$$E_n^1 = -qf \int (\psi_n^0)^* x \psi_n^0 dx = -qf \int |\psi_n^0|^2 x dx$$

abbiamo una funzione con parità $(-1)^n$ (essendo l'autofunzione imperturbata) e il potenziale esterno è una funzione dispari, dunque l'integrale è nullo. Questo significa che la particella è tanto probabile di stare nella regione con potenziale $-\phi$ quanto in quella con potenziale ϕ . Procediamo a calcolare l'autovettore perturbato

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n^0\rangle + \sum_m' \frac{|m^0\rangle \langle m^0 | -qf(\hbar/2m\omega)^{1/2} (a + a^\dagger) | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \\ &= |n^0\rangle + qf \left(\frac{1}{2m\hbar\omega^3} \right)^{1/2} \left[(n+1)^{1/2} |(n+1)^0\rangle - n^{1/2} |(n-1)^0\rangle \right], \end{aligned}$$

osserviamo che al primo ordine la perturbazione mischia lo stato $|n^0\rangle$ con gli stati immediatamente sotto o sopra. La rigidità del sistema è proporzionale a ω che nel caso oscillatore massa-molla, misura la costante di forza. Ci chiediamo come possa essere la funzione d'onda e ci aspettiamo che questa sia spostata verso le x positive. Il cambiamento del secondo ordine di energia è (anche se al primo ordine non avevamo cambi non è detto che non ne abbiamo al secondo, questo perché la configurazione del sistema ora è $|n^0\rangle + |n^1\rangle$)

$$\begin{aligned} E_n^2 &= \langle n^0 | H^1 | n^1 \rangle = \sum_m' \frac{|\langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \\ &= q^2 \cdot f^2 \cdot \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\frac{n+1}{-\hbar\omega} + \frac{n}{\hbar\omega} \right) = \frac{-q^2 f^2}{2m\omega^2} \end{aligned}$$

Questo esercizio è comodo per studiare la teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo perché può essere risolto anche esattamente. Data l'hamiltoniana

$$\begin{aligned} H &= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 - qfX \\ &= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(X - \frac{qf}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{q^2 f^2}{m\omega^2} \end{aligned}$$

questa è l'hamiltoniana di un oscillatore con frequenza ω , centrato a $x = qf/m\omega^2$, dove ogni stato ha un'energia costante $-q^2 f^2 / 2m\omega^2$ aggiunta. Quindi le autofunzioni di H sono semplicemente le autofunzioni di H^0 spostate di $qf/m\omega^2$ e gli autovalori sono $E_n = E_n^0 - q^2 f^2 / 2m\omega^2$.

Consideriamo quindi E_n . Dato che H^1 è proporzionale a qf la potenza di qf deve essere anche l'ordine dei termini, ecco perché non avevamo cambiamenti di energia al primo termine ma al secondo si e andando avanti non ne avremmo trovati altri.

Consideriamo ora i vettori di stato. Il risultato esatto è

$$|n\rangle = T(qf/m\omega^2)|n^0\rangle$$

dove T è l'operatore di traslazione finito. Dal momento che stiamo lavorando al primo ordine di qf

$$\begin{aligned} T(qf/m\omega^2) &= e^{-i(qf/m\omega^2\hbar)P} \simeq I - i\left(\frac{qf}{m\omega^2\hbar}\right)P \\ &= I - i\left(\frac{qf}{m\omega^2\hbar}\right)\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{1/2} \cdot \frac{a - a^\dagger}{i}, \end{aligned}$$

di modo che

$$\begin{aligned} |n\rangle &= \left[I - \left(\frac{qf}{m\omega^2\hbar}\right)\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{1/2} (a - a^\dagger) \right] |n^0\rangle \\ &= |n^0\rangle + qf \left(\frac{1}{2m\hbar\omega^3}\right)^{1/2} \left[(n+1)^{1/2} |(n+1)^0\rangle - n^{1/2} |(n-1)^0\rangle \right]. \end{aligned}$$

Anche in questo caso i risultati esatti concordano perfettamente con quelli approssimati. Andando in entrambi i casi ad ordini maggiori (sia con la teoria perturbativa che con l'espansione di Taylor dell'operatore) avremmo visto che anche questi sono equivalenti.

16.2.1 Regole di selezione

Come abbiamo visto sono presenti varie sommatorie infinite, è quindi logico cercare di ridurre la quantità di calcoli da eseguire. Un modo per ridurre i calcoli è capire quali elementi matriciali di H^1 sono 0, senza aver bisogno di calcolarli. Esistono alcune regole di selezione, utili a questo scopo, che si basano sull'idea che se

$$[\Omega, H^1] = 0,$$

allora

$$\langle \alpha_2 \omega_2 | H^1 | \alpha_1 \omega_1 \rangle = 0 \quad \text{a meno che} \quad \omega_1 = \omega_2$$

dove α è un numero quantico che etichetta lo stato. Oltre alla breve dimostrazione matematica possiamo intuire il precedente teorema come: quando H^1 agisce su uno stato, non conferisce nessuna quantità della grandezza Ω ; ovvero sono ortogonali.

Questa interpretazione ci permette di estendere le regole di selezione. Supponiamo H^1 abbia invece una certa quantità di Ω , ad esempio H^1 è il tensore T_k^q che porta momento angolare (k, q) , allora da Wigner-Eckart

$$\langle \alpha_2 j_2 m_2 | T_k^q | \alpha_1 j_1 m_1 \rangle = 0 \quad \text{a meno che} \quad \begin{cases} j_1 + k \geq j_2 \geq |j_1 - k| \\ m_2 = m_1 + q, \end{cases}$$

ovvero l'elemento matriciale è nullo a meno che $|\alpha_2 j_2 m_2\rangle$ riceva momento angolare da H^1 pari alla somma di $j_1 m_1$ con kq .

Un'altra regola è la seguente. Se

$$\Pi^\dagger \Omega \Pi = -\Omega,$$

allora gli elementi matriciali tra due autostati di parità sono nulli a meno che questi non abbiano parità opposta.

Possiamo ottenere altre regole combinando quelle già trovate, ad esempio la regola di selezione del dipolo (combinazione di quella del momento angolare con quella di parità e valida in caso di spin nullo):

$$\begin{aligned} \langle \alpha_2 l_2 m_2 | Z | \alpha_1 l_1 m_1 \rangle &= 0 \quad \text{a meno che} \quad \begin{cases} l_2 = l_1 \pm 1 \\ m_2 = m_1 \end{cases} \\ \langle \alpha_2 l_2 m_2 | X \text{ or } Y | \alpha_1 l_1 m_1 \rangle &= 0 \quad \text{a meno che} \quad \begin{cases} l_2 = l_1 \pm 1 \\ m_2 = m_1 \pm 1. \end{cases} \end{aligned}$$

Vediamo ora un esempio. Studiamo il caso dell'interazione di un campo elettrico costante $\mathbf{E} = \xi \mathbf{k}$ con l'atomo di idrogeno (effetto Stark). L'hamiltoniana è

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^1 &= -e\phi(\mathbf{r}_1) + e\phi(\mathbf{r}_2) = e[\phi(\mathbf{r}_2) - \phi(\mathbf{r}_1)] \\ &= e(\mathbf{e}_1 - \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{E} = e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} \quad (\text{da } \mathbf{E} = -\nabla\phi = e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E},\end{aligned}$$

dove r_1 e r_2 sono le coordinate dell'elettrone e del protone e r è quella relativa. \mathcal{H} è chiamata interazione del dipolo in termini di $\mu_e = e(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = -e\mathbf{r}$ (il momento del dipolo elettrico). Quindi $H^1 = eZ\xi$. Lo shift dell'energia di primo ordine dello stato fondamentale $|100\rangle$ è

$$E_{100}^1 = \langle 100 | eZ\xi | 100 \rangle$$

che è zero per vari motivi (teorema di Wigner-Eckart, distribuzione di probabilità $\phi(-r) = \phi(r)$). Ci aspettiamo che il secondo ordine non sia zero, infatti il campo elettrico avrà shiftato la distribuzione elettronica verso il Basso e indotto un momento del dipolo che interagisce con \mathbf{E} . Abbiamo

$$E_{100}^2 = \sum'_{nlm} \frac{e^2 \xi^2 |\langle nlm | Z | 100 \rangle|^2}{E_{100}^0 - E_{nlm}^0}$$

dove la differenza di energia (per l'atomo di idrogeno lo stato fondamentale è chiamato nml) è $\text{Ry}(\frac{1-n^2}{n^2})$. Usando le regole di selezione possiamo ridurre questa somma da una somma infinita a

$$E_{100}^2 = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{e^2 \xi^2 |\langle n10 | Z | 100 \rangle|^2}{E_1^0 - E_n^0}.$$

Vediamo come:

- Metodo 1. Abbiamo visto che il denominatore cresce con n , dunque vale

$$|E_{100}^2| \leq \frac{e^2 \xi^2}{|E_1^0 - E_2^0|} \sum'_{nlm} |\langle nlm | Z | 100 \rangle|^2$$

ma dato che $\sum'_{nlm} |\langle nlm | Z | 100 \rangle|^2 = \alpha_0^2$, abbiamo

$$|E_{100}^2| \leq \frac{e^2 \xi^2}{|(e^2/2a_0)(1 - \frac{1}{4})|} a_0^2 \leq \frac{8a_0^3 \xi^2}{3},$$

in alternativa possiamo prendere come limite inferiore il primo termine della serie: $|E_{100}^2| \geq \frac{e^2 \xi^2}{3e^2/8a_0} |\langle 210 | Z | 100 \rangle|^2$. Ora, $|\langle 210 | Z | 100 \rangle|^2 = \frac{2^{15} a_0^2}{3^{10}} \simeq 0.55 a_0^2$, quindi $|E_{100}^2| \geq (0.55) \frac{8}{3} \xi^2 a_0^3$ e in conclusione

$$\frac{8}{3} \xi^2 a_0^3 \geq |E_{100}^2| \geq 0.55 \left(\frac{8}{3}\right) \xi^2 a_0^3$$

- Metodo 2. Consideriamo

$$E_n^2 = \sum'_m \frac{\langle n^0 | H^1 | m^0 \rangle \langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}.$$

Supponiamo esista un operatore Ω tale che $H^1 = [\Omega, H^0]$, allora varrebbe

$$E_n^2 = \langle n^0 | H^1 \Omega | n^0 \rangle - \langle n^0 | H^1 | n^0 \rangle \langle n^0 | \Omega | n^0 \rangle.$$

E non avremmo problemi, il problema è che non è facile trovare Ω , ma è molto più facile trovare

$$H^1 |n^0\rangle = [\Omega, H^0] |n^0\rangle,$$

dato $|n^0\rangle$. In questo caso cerchiamo $H^1 |100\rangle = [\Omega, H^0] |100\rangle$. Scriviamo tutto in base delle coordinate e assumiamo che Ω sia unicamente una funzione delle coordinate e non del momento, possiamo mostrare

$$\Omega \xrightarrow{\text{base delle coordinate}} -\frac{ma_0 e \xi}{\hbar^2} \left(\frac{r^2 \cos \theta}{2} + a_0 r \cos \theta \right).$$

Lo shift di secondo ordine è esattamente

$$|E_{100}^2| = \left| \langle 100 | H^1 \Omega | 100 \rangle - 0 \right| = (0.84) \frac{8}{3} a_0^3 \xi^2.$$

Ci chiediamo ora quanto sia grande il momento indotto dallo shift di secondo ordine, per farlo possiamo calcolare $\langle \mu \rangle$ nello stato fondamentale perturbato, oppure estrarlo da E_{100}^2 (faremo questo). Dal momento che comincia la perturbazione il momento cresce da 0 a μ . Supponiamo ora di avere delle cariche $\pm q$ separate da una distanza x lungo E , il lavoro fatto sul sistema al variare di x è

$$dW = -q\mathcal{E}dx = -\mathcal{E}d\mu.$$

Assumiamo che il momento indotto sia proporzionale a E ($\mu = \alpha E$, dove α è la polarizzabilità), allora

$$dW = -\alpha\mathcal{E}d\mathcal{E}.$$

Identifichiamo W con E_1^2 e determiniamo la polarizzabilità

$$\alpha = \frac{18}{4}a_0^3 \simeq \frac{18}{4}(0.5\text{\AA})^3 \simeq 0.56\text{\AA}^3.$$

Osserviamo infine che E_1^2 è negativo e lo è sempre a meno che non sia nullo, questo perché quando il sistema subisce una perturbazione allo stato fondamentale, allora il sistema cambia la sua configurazione per minimizzare l'energia di interazione con il campo esterno.

16.3 Teoria delle perturbazioni degenerate

Consideriamo ora il caso in cui abbiamo una degenerazione $E_n^0 = E_m^0$, la condizione per la validità della teoria delle perturbazioni

$$\left| \frac{\langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \right| \ll 1$$

non può essere valida (la trattazione che segue non è valida solo per il caso degenerare ma per tutti quei casi in cui la condizione qua sopra non è valida).

Consideriamo il caso in cui H^0 e $H^0 + H^1$ sono degeneri. Immaginiamo che H^1 sia data da un campo esterno che possa essere aumentato in modo continuo da 0 al valore finale, in questo caso l'hamiltoniana cresce da H^0 a $H^0 + H^1$ e l'autobase cambia in modo continuo da $|n^0\rangle$ a $|n\rangle$. È proprio questa continua variazione dell'autobase che rende possibile trovare $|n\rangle$ a partire da $|n^0\rangle$. Consideriamo ora il caso in cui H^0 abbia un sottospazio degenerare, mentre $H^0 + H^1$ non lo ha (la trattazione che segue è valida per casi più generali). Facciamo il procedimento inverso: partiamo da $|n\rangle$ e diminuiamo dal valore finale, la perturbazione, fino a zero in modo continuo. Alla fine otterremo una base $|\bar{n}^0\rangle$ di H^0 . Se ora riaccendiamo la perturbazione possiamo ritracciare il percorso fino a $|n\rangle$. Questo significa che cominciando con $|\bar{n}^0\rangle$ possiamo usare la teoria perturbativa, ma dal momento che H^0 è degenerare non sappiamo a priori quale sia la base corretta da cui partire, infatti avremmo potuto scegliere la base sbagliata.

La base corretta che stiamo cercando è in realtà quella che diagonalizza H^1 nel sottospazio degenerare, in modo da non far divergere il coefficiente di perturbazione di primo ordine. Osserviamo che per trovare la base che diagonalizza H^1 nel suo sottospazio (generalmente finito) degenerare non nell'intero spazio di Hilbert.

Un esempio concreto è l'effetto Stark a livello $n = 2$ dell'idrogeno. Non possiamo dire che

$$\langle 21m | e\mathcal{E}Z | 21m \rangle = 0$$

perché questi stati non sono i punti di partenza corretti per la teoria perturbativa degenerare. Troviamo quindi la corretta base nel settore $n = 2$ che diagonalizza H^1 . Usando le regole di selezione troviamo

$$H^1 \rightarrow \begin{array}{c|cccc} nlm & 200 & 210 & 211 & 21-1 \\ \hline 200 & 0 & \Delta & 0 & 0 \\ 210 & \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 211 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 21-1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}$$

dove

$$\Delta = \langle 200 | e\mathcal{E}Z | 210 \rangle = -3e\mathcal{E}a_0.$$

Dal momento che H^1 è semplicemente Δ volte la matrice di Pauli nel settore $m = 0$, allora ha autovalori $\pm\Delta$ e autostati $[|200\rangle \pm |210\rangle]/2^{1/2}$; mentre in $|m| = 1$, sono gli stati $|2, 1\pm\rangle$ che diagonalizzano H^1 .

16.3.1 Struttura fine

Il potenziale di Coulomb ($-e^2/r$) non è il solo tipo di interazione presente tra elettrone e protone. Esistono alcune piccole correzioni, dette di struttura fine, che producono shift dell'energia pari a α^2 per l'energia di legame. Dal momento che la velocità semiclassica dell'elettrone è $\beta = v/c \approx O(\alpha)$ queste correzioni saranno scritte in termini di $(v/c)^2$ relativamente all'energia di legame. dividiamo questo effetto in due parti.

La prima parte deriva dal fatto che $(v/c)^4 \neq p^2/2m$, ma

$$T = (c^2 p^2 + m^2 c^4)^{1/2} - mc^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + O(p^6 \text{ or } v^6).$$

Dunque abbiamo un termine extra

$$H_T = -P^4/8m^3 c^2$$

rispetto ai calcoli del capitolo sull'atomo di idrogeno e ne vogliamo calcolare l'effetto trattandolo come perturbazione. Dal momento che H_T è invariante sotto rotazioni, allora è diagonale in base $|nlm\rangle$ e possiamo scordarci delle degenerazioni:

$$E_T^1 = -\frac{1}{8m^3 c^2} \langle nlm | P^4 | nlm \rangle.$$

A questo punto con un paio di calcoli algebrici si arriva a

$$E_T^1 = -\frac{1}{2} (mc^2) \alpha^4 \left[-\frac{3}{4n^4} + \frac{1}{n^3(l+1/2)} \right]$$

L'altro effetto è chiamato interazione spin-orbita. Infatti se l'elettrone si muove, l'interazione di Coulomb non è sufficiente. Andiamo nel sistema di riferimento dell'elettrone, in questo sistema il protone si muove ad una velocità ($-\mathbf{v}$) e produce un campo magnetico

$$\mathbf{B} = -\frac{e}{c} \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3}$$

che interagisce con il momento magnetico dell'elettrone:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{s.o.} &= -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{mc r^3} \boldsymbol{\mu} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{r}) \\ &= -\frac{e}{mc} \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{l}}{r^3}. \end{aligned}$$

Ci aspettiamo dunque una perturbazione

$$H_{s.o.} = \left(-\frac{e}{mc} \right) \left(-\frac{e}{mc} \right) \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{r^3} = \frac{e^2}{m^2 c^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L},$$

ma la risposta corretta è esattamente 1/2 di questa. Quel 1/2 è chiamato fattore di Thomas, ma al momento non abbiamo i mezzi per calcolarlo. Qualitativamente il motivo è che l'elettrone è su un sistema di riferimento non inerziale. Riscriviamo $H_{S.O.}$ come

$$H_{s.o.} = \frac{e^2}{4m^2 c^2 r^3} [J^2 - L^2 - S^2]$$

in modo da rendere ovvio l'uso degli stati del momento angolare per la diagonalizzazione di $H_{S.O.}$:

$$\begin{aligned} &\langle j', m'; l', 1/2 | H_{s.o.} | j, m; l, 1/2 \rangle \\ &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{ll'} \frac{e^2}{4m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) - 3/4]. \end{aligned}$$

Dal momento che due stati con stesso totale j ma diverso l sono ortogonali (per l'ortogonalità delle armoniche), poniamo $j = l \pm 1/2$ per ottenere

$$E_{s.o.}^1 = \frac{\hbar^2 e^2}{4m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} \begin{bmatrix} l \\ -(l+1) \end{bmatrix}$$

che possiamo riscrivere come

$$E_{s.o.}^1 = \frac{1}{4} mc^2 \alpha^4 \frac{\begin{Bmatrix} l \\ -(l+1) \end{Bmatrix}}{n^3(l)(l+1/2)(l+1)}.$$

Questa formula è stata trovata per $l \neq 0$, ma in realtà vale anche per $l = 0$.

A questo punto dobbiamo combinare i due effetti:

$$E_{f,s}^1 = E_T^1 + E_{s,o}^1 = -\frac{mc^2\alpha^2}{2n^2} \cdot \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right)$$

per $j = l \pm 1/2$.

La formula di struttura fine può essere estesa ad altri atomi con il cambio

$$\left\langle \frac{e^2}{r^3} \right\rangle \rightarrow \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle,$$

dove V è l'energia potenziale dell'elettrone in quetsione.

Capitolo 17

Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo

17.1 Il problema

Ad esclusione del problema della risonanza magnetica non abbiamo mai visto sistemi governati da una hamiltoniana dipendente dal tempo. In questi casi un approccio frontale all'equazione di Shrodinger completamente dipendente dal tempo è inevitabile.

In questo capitolo vedremo la soluzione perturbativa a fenomeni descritti da

$$H(t) = H^0 + H^1(t),$$

dove H^0 è indipendente dal tempo e H^1 è molto più piccola e dipendente dal tempo.

La tipica domanda che ci poniamo in questi casi è: dato un sistema con autostato $|i^0\rangle$ di H^0 a $T = 0$, quale è la probabilità di trovare uno stato $|f^0\rangle$ ($f \neq i$) dopo un tempo t ? Il nostro obiettivo sarà trovare uno schema risolutivo che ci permetta di trovare il risultato in termini di serie perturbativa. Ovviamente l'ordine 0 corrisponde al caso senza perturbazione, dunque non ci sono possibilità che lo stato cambi (infatti gli autovalori sono detti modi normali o stazionari).

17.2 Teoria delle perturbazione del primo ordine

Vogliamo risolvere (16.1) al primo ordine in H^1 . Dato che gli autovettori $|n^0\rangle$ formano una base completa, possiamo espandere

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n^0\rangle.$$

Trovare $c_n(t)$, dato $c_n(0)$ è equivalente a trovare $|\psi(t)\rangle$ dato $|\psi(0)\rangle$.

Se non ci fosse stata una perturbazione avremmo avuto

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-iE_n^0 t/\hbar}$$

quindi è conveniente riscrivere (16.2) come

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n d_n(t) e^{-iE_n^0 t/\hbar} |n^0\rangle.$$

Dato che il cambiamento di d_n dipende unicamente da H^1 , allora ci aspettiamo di poterlo scrivere come serie di potenze di H^1 . Per trovare \dot{d}_f usiamo l'operatore $(i\hbar\partial/\partial t - H^0 - H^1)$ e poi dottiamo con $\langle f^0 | \exp(iE_f^0 t/\hbar)$:

$$i\hbar\dot{d}_f = \sum_n \langle f^0 | H^1(t) | n^0 \rangle e^{i\omega_{fn}t} d_n(t),$$

dove

$$\omega_{fn} = \frac{E_f^0 - E_n^0}{\hbar}.$$

Osserviamo che H^0 è stato eliminato e (16.3)=(16.1). Consideriamo ora

$$d_n(0) = \delta_{ni},$$

dove il sistema è nello stato $d_n(0) = \delta_{ni}$ e ci chiediamo quale sia $d_f(t)$. Da (16.3) l'ordine 0 è chiaramente

$$\dot{d}_f = 0$$

come ci aspettavamo. Per il primo ordine usiamo l'ordine zero di d_n nel secondo membro di (16.3) perché H^1 è di primo ordine:

$$\dot{d}_f(t) = \frac{-i}{\hbar} \langle f^0 | H^1(t) | i^0 \rangle e^{i\omega_{fi}t} \rightarrow d_f(t) = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f^0 | H^1(t') | i^0 \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt'.$$

Per trovare il secondo ordine ripetiamo e inseriamo d al primo ordine in (16.3), ma ci fermiamo qua.

Come per il caso indipendente dal tempo, esiste una condizione per poter usare la teoria perturbativa, questa è

$$|d_f(t)| \ll 1 (f \neq i).$$

Usiamo questi risultati su un problema semplice. Consideriamo un oscillatore armonico monodimensionale nello stato fondamentale $|0\rangle$ di un'hamiltoniana imperturbata al tempo $t = -\infty$. Applichiamo la perturbazione

$$H^1(t) = -e\mathcal{E}X e^{-t^2/\tau^2}$$

tra $t = -\infty$ e $t = \infty$. Qual è la probabilità che lo stato finale dell'oscillatore sia $|n\rangle$ a $t = \infty$? Pariamo da

$$d_n(\infty) = \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} (-e\mathcal{E}) \langle n | X | 0 \rangle e^{-t^2/\tau^2} e^{in\omega t} dt,$$

per l'oscillatore armonico vale $X = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} (a + a^\dagger)$, allora solo $d_1(\infty) \neq 0$. Usando $a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$ troviamo

$$\begin{aligned} d_1(\infty) &= \frac{ie\mathcal{E}}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2/\tau^2} e^{i\omega t} dt \\ &= \frac{ie\mathcal{E}}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \cdot (\pi\tau^2)^{1/2} e^{-\omega^2\tau^2/4}, \end{aligned}$$

segue che la probabilità di transizione $0 \rightarrow 1$ è

$$P_{0 \rightarrow 1} = |d_1|^2 = \frac{e^2 \mathcal{E}^2 \pi \tau^2}{2m\omega\hbar} e^{-\omega^2\tau^2/2}.$$

17.2.1 Perturbazione improvvisa

Considera un sistema la cui Hamiltoniana cambi improvvisamente per un breve periodo di tempo ϵ . Se $\epsilon \rightarrow 0$, non c'è bisogno di usare la teoria perturbativa, infatti supponendo che il cambio sia avvenuto a $t = 0$ abbiamo

$$\begin{aligned} |\psi(\epsilon/2)\rangle - |\psi(-\epsilon/2)\rangle &= |\psi_{\text{dopo}}\rangle - |\psi_{\text{prima}}\rangle \\ &= \frac{-i}{\hbar} \int_{-\epsilon/2}^{\epsilon/2} H(t) |\psi(t)\rangle dt \end{aligned}$$

il che per $\epsilon \rightarrow 0$ implica $|\psi_{\text{dopo}}\rangle = |\psi_{\text{prima}}\rangle$. Osserviamo che un brusco cambio dell'hamiltoniana non produce bruschi cambi di $|\psi\rangle$, tuttavia il limite $\epsilon \rightarrow 0$ non ha significato in fisica. Questa trattazione serve però a mettere in luce il comportamento perturbativo nei suoi limiti. Infatti sia τ la larghezza dell'impulso gaussiano, il cambiamento del vettore di stato deve essere tendere a zero quando $\tau \rightarrow 0$. Questo risultato essendo esatto deve valere per tutti gli ordini della teoria perturbativa.

17.2.2 Perturbazione adiabatica

Ora vediamo l'altro caso limite, un hamiltoniana che cambia molto lentamente da $H(0)$ a $H(\tau)$ in un tempo τ . Il teorema adiabatico asserisce che se il sistema iniziale è in uno stato $|n(0)\rangle$ di $H(0)$ e il cambiamento è sufficientemente lento, allora il sistema finirà nello stesso autovettore $|n(\tau)\rangle$ di $H(\tau)$ (anche in questo caso abbiamo un risultato esatto, dunque dovrà essere vero per tutti gli ordini perturbativi).

Per capire meglio facciamo un esempio. Prendiamo una scatola di lunghezza $L(0)$, che si estenda molto lentamente a $L(\tau)$, il teorema adiabatico ci dà la soluzione, ma quanto lenta deve essere l'estensione? Ci sono due modi per qualificare la lentezza dell'estensione:

Metodo 1. Il momento della particella è dell'ordine di $p \simeq \frac{\hbar}{L}$, dunque il tempo necessario affinché la particella compia un'oscillazione è

$$T \simeq \frac{L}{v} = \frac{mL}{p} \simeq \frac{mL^2}{\hbar}.$$

Possiamo dire che la scatola si estende lentamente se e

$$\frac{|\Delta L|_{\text{percycle}}}{L} \simeq \frac{|dL/dt| mL^2/\hbar}{L} = \frac{mL}{\hbar} \left| \frac{dL}{dt} \right| \ll 1.$$

Metodo 2. Il secondo approccio è più potente ma meno intuitivo. Sia

$$T \sim \frac{1}{\omega_{\min}}$$

dove ω_{\min} è la più piccola delle frequenze di transizione tra uno stato iniziale i e finale accessibile f , ovvero

$$\omega_{fi} = \frac{E_f^0 - E_i^0}{\hbar}.$$

Nel nostro esempio $E_n^0 = (n^2 \hbar^2 \pi^2 / 2mL^2)$, le differenze di energia sono dell'ordine di \hbar^2/mL^2 w

$$T \simeq \frac{1}{E_i^0/\hbar} \sim \frac{1}{\omega_i} = \frac{1}{\omega_{\min}} \simeq \frac{mL^2}{\hbar}.$$

Osserviamo che i due metodi coincidono, la maggiore potenza del secondo metodo sta nel fatto che se i livelli sono degeneri o quasi i due metodi non coincideranno e il primo sarà sbagliato.

Vediamo ora un altro esempio, un oscillatore soggetto alla perturbazione

$$H^1(t) = -e\mathcal{E}X e^{-t^2/\tau^2}$$

tra $-\infty \leq t \leq \infty$. Ci aspettiamo che quando τ tenda ad infinito il cambiamento dell'hamiltoniana sia adiabatico. La nostra formula del primo ordine conferma tutte queste supposizioni e ci dice inoltre cosa significa τ grande:

$$\tau \gg 1/\omega.$$

Il teorema adiabatico ci suggerisce un modo per ritrovare la teoria indipendente dal tempo da quella dipendente. Considera l'hamiltoniana $H(t)$ che cambia continuamente fino a $t = 0$

$$H(t) = H^0 + e^{t/\tau} H^1, \quad -\infty \leq t \leq 0.$$

Il teorema adiabatico ci assicura che se lo stato iniziale è $|n^0\rangle$, quello finale sarà $|n\rangle$. Quindi se calcoliamo lo stato a $t = 0$ ad un dato ordine nella teoria dipendente dal tempo, otterremo la formula per lo stato $|n\rangle$ indipendente dal tempo:

$$d_m(0) = \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle e^{t/\tau} e^{i\omega_{mn}t} dt = \frac{(-i/\hbar) \langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle}{1/\tau + i\omega_{mn}},$$

dove ponendo $\tau \rightarrow \infty$ otteniamo il risultato voluto

$$\langle m^0 | n \rangle = \frac{\langle m^0 | H^1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}.$$

Nella pratica dobbiamo usare un τ finito. La condizione per τ finito grande è

$$\tau \gg 1/\omega_{\min}.$$

17.2.3 Perturbazione periodica

Consideriamo ora il caso di una perturbazione periodica, come ad esempio un atomo piazzato tra le pareti di un condensatore connesso ad una corrente alternata. Per semplicità supponiamo che questo segnale sia monocromatico, consideriamo il caso

$$H^1(t) = H^1 e^{-i\omega t}.$$

Diciamo che la perturbazione comincia a $t = 0$, l'ampiezza di transizione da $|i^0\rangle$ a $|f^0\rangle$ nel tempo t è

$$d_f(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_0^t \langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle e^{i(\omega_{fi}-\omega)t'} dt' = \frac{-i}{\hbar} \langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{fi}-\omega)}$$

e la probabilità di transizione è

$$P_{i \rightarrow f} = |d_f|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle \right|^2 \left\{ \frac{\sin\left[(\omega_{fi}-\omega)t/2\right]}{(\omega_{fi}-\omega)\frac{1}{2}t} \right\}^2 t^2$$

questo significa che il sistema tenderà ad andare verso stati f per cui

$$\left| (\omega_{fi}-\omega)t/2 \right| \lesssim \pi \quad \text{oppure} \quad E_f^0 t = (E_i^0 t + \hbar\omega t) \pm 2\hbar\pi \quad \text{oppure} \quad E_f^0 - E_i^0 = \hbar\omega \pm \frac{2\hbar\pi}{t} = \hbar\omega \left(1 \pm \frac{2\pi}{\omega t} \right).$$

Per t piccolo il sistema non ha preferenze per i livelli $E_f^0 = E_i^0 + \hbar\omega$, mentre per $\omega t \gg 2\pi$ allora comincia a favorirli. Il motivo per cui ciò accade è che il sistema, a differenza nostra, non sa a priori che sta avendo a che fare con una perturbazione periodica, ma ci mettere qualche periodo a capirlo. Cosa succede al sistema prima che capisca di essere di fronte ad un segnale periodico? In questi attimi il sistema fa una trasformata di Fourier della perturbazione che percepisce.

Per vedere cosa succede dopo molto tempo supponiamo che il periodo della perturbazione sia infinito, allora

$$\begin{aligned} d_f &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{-i}{\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} H_{fi}^1 e^{i(\omega_{fi}-\omega)t'} dt' \\ &= \frac{-2\pi i}{\hbar} H_{fi}^1 \delta(\omega_{fi}-\omega) \end{aligned}$$

e

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \cdot \left| H_{fi}^1 \right|^2 \delta(\omega_{fi}-\omega) \delta(\omega_{fi}-\omega).$$

Ci troviamo di fronte un prodotto di funzioni delta, possiamo calcolarlo come

$$\delta\delta = \lim_{T \rightarrow \infty} \delta(\omega_{fi}-\omega) \frac{1}{2\pi} \int_{-T/2}^{T/2} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} dt$$

e ponendo $\omega_{fi} = \omega$ otteniamo

$$\delta\delta = \delta(\omega_{fi}-\omega) \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{T}{2\pi}.$$

A questo punto possiamo dividere la probabilità di transizione per T per ottenere il rateo di transizione medio

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{P_{i \rightarrow f}}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle \right|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega).$$

Questa è anche detta regola d'oro di Fermi.

17.3 Ordini più alti nella teoria delle perturbazioni

Abbiamo già visto un modo per studiare ordini più alti del primo, tuttavia quel metodo diventa molto laborioso per ordini alti. Studiamo quindi un metodo alternativo, ma per farlo abbiamo bisogno di vedere la meccanica quantistica da un punto diverso rispetto a quello con cui l'abbiamo vista fin'ora (interpretazione di Shrodinger).

Nella interpretazione di Shrodinger lo stato della particella è descritto dal vettore $|\psi_s(t)\rangle$, il cui prodotto con una quantità ci dà la probabilità che questa sia effettivamente misurata

$$P(\omega, t) = \left| \langle \omega_s | \psi_s(t) \rangle \right|^2$$

L'evoluzione temporale è data dall'equazione di Shrodinger e i valori di aspettazione da

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Omega_S \rangle = \langle [\Omega_S, H_S] \rangle$$

Definiamo il propagatore $U_S(t, t_0)$ come

$$|\psi_S(t)\rangle = U_S(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle$$

da cui segue

$$i\hbar \frac{dU_S}{dt} = H_S U_S$$

Alcune formule utili (e vere per tutti i propagatori) sono le seguenti:

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= I \\ U(t_3, t_2) U(t_2, t_1) &= U(t_3, t_1) \\ U(t_1, t_1) &= I \\ U^\dagger(t_1, t_2) &= U(t_2, t_1). \end{aligned}$$

17.3.1 Interpretazione di interazione

Dal momento che $U_S(t, t_0)$ è un operatore unitario possiamo vedere l'evoluzione temporale dei vettori di stato come una rotazione nello spazio di Hilbert. Immaginiamo in un primo momento che H_S^1 sia assente, allora la rotazione, generata da U_S^0 , obbedirà a

$$i\hbar \frac{dU_S^0}{dt} = H_S^0 U_S^0,$$

la cui soluzione formale è $U_S^0(t, t_0) = e^{-iH_S^0(t-t_0)/\hbar}$. Supponiamo di rimanere con questa rotazione ma reinseriamo anche H_S^1 : se $H_S^1 = 0$ in pratica abbiamo bloccato il tempo, infatti i vettori di stato ruotano insieme alla nostra base; se $H_S^1 \neq 0$ allora avremo una rotazione diversa dei vettori di stato rispetto alla nostra base. Questa interpretazione è chiamata interpretazione di interazione e è relazionata alla interpretazione di Shrodinger da

$$|\psi_I(t)\rangle = [U_S^0(t, t_0)]^\dagger |\psi_S(t)\rangle.$$

L'evoluzione temporale è quindi la seguente:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle &= i\hbar \frac{dU_S^{0\dagger}}{dt} |\psi_S\rangle + U_S^{0\dagger} i\hbar \frac{d|\psi_S\rangle}{dt} \\ &= -U_S^{0\dagger} H_S^0 |\psi_S\rangle + U_S^{0\dagger} (H_S^0 + H_S^1) |\psi_S\rangle = U_S^{0\dagger} H_S^1 |\psi_S\rangle = U_S^{0\dagger} H_S^1 U_S^0 U_S^{0\dagger} |\psi_S\rangle = U_S^{0\dagger} H_S^1 U_S^0 |\psi_I(t)\rangle. \end{aligned}$$

L'hamiltoniana in questa nuova interpretazione è

$$(U_S^0)^\dagger H_S^1(t) U_S^0 = H_I^1(t),$$

quindi deve valere

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = H_I^1(t) |\psi_I(t)\rangle.$$

Dato che la fisica deve essere la stessa deve valere

$$\langle \omega_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \omega_I(t) | \psi_I(t) \rangle,$$

quindi anche gli operatori devono essere dipendenti dal tempo (ruotare) e non possono essere statici come nella interpretazione di Shrodinger

$$\Omega_I(t) = U_S^{0\dagger} \Omega_S U_S^0;$$

possiamo calcolare la dipendenza temporale di Ω_I come segue:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\Omega_I}{dt} &= i\hbar \frac{dU_S^{0\dagger}}{dt} \Omega_S U_S^0 + U_S^{0\dagger} \Omega_S i\hbar \frac{dU_S^0}{dt} \\ &= U_S^{0\dagger} [\Omega_S, H_S^0] U_S^0 = [\Omega_I, H_I^0]. \end{aligned}$$

Ora che abbiamo visto come funziona questa interpretazione possiamo tornare al problema principale scrivere la serie di perturbazioni: Definiamo $U_I(t, t_0)$ come

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle,$$

potremo sempre tornare indietro usando

$$U_S(t, t_0) = U_S^0(t, t_0) U_I(t, t_0),$$

e obbedisce a

$$i\hbar \frac{dU_I}{dt} = H_I^1 U_I.$$

La soluzione di questa equazione è

$$U_I(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I(t') U_I(t', t_0) dt'$$

che è un'equazione integrale e ci permette di scrivere la serie di perturbazione in modo molto semplice: L'ordine zero è

$$U_I(t, t_0) = I + O(H_I^1);$$

Il primo ordine è

$$U_I(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I^1(t') dt' + O(H_I^2).$$

Ripetendo i passaggi (ovvero sostituire il precedente ordine a H_I^1) possiamo facilmente scrivere tutti gli ordini:

$$\begin{aligned} U_I(t, t_0) = & I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I^1(t') dt' + (-i/\hbar)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} H_I^1(t') H_I^1(t'') dt' dt'' \\ & + (-i/\hbar)^3 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} \int_{t_0}^{t''} H_I^1(t') H_I^1(t'') H_I^1(t''') dt' dt'' dt''' + \dots \end{aligned}$$

che nella interpretazione di Shrodinger diventa

$$\begin{aligned} U_S(t, t_0) = & U_S^0(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U_S^0(t, t') H_S^1 U_S^0(t', t_0) dt' \\ & + (-i/\hbar)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} U_S^0(t, t') H_S^1 U_S^0(t', t'') H_S^1 U_S^0(t'', t_0) dt' dt'' + \dots \end{aligned}$$

17.3.2 Interpretazione di Heisenberg

Esistono un numero infinito di interpretazioni (possiamo andare in un sistema che ruota ad una qualsiasi velocità), una particolare è quella di Heisenberg. In questa interpretazione ci muoviamo alla stessa velocità del vettore dipendente dal tempo e vale

$$|\psi_H(t)\rangle = U_S^\dagger(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle.$$

Gli operatori si occupano da soli della dipendenza dal tempo, infatti per

$$\Omega_H(t) = U_S^\dagger \Omega_S U_S$$

vale

$$i\hbar \frac{d\Omega_H}{dt} = [\Omega_H, H_H]$$

che osserviamo essere molto simile all'equazione classica

$$\frac{d\omega}{dt} = \{\omega, \mathcal{H}\}.$$

Infatti la peculiarità di questa interpretazione è che ha molte similitudini con la meccanica classica, ad esempio

$$\dot{X}_H = -\frac{i}{\hbar} [X_H, H_H] = \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \frac{i\hbar P_H}{m} = \frac{P_H}{m}$$

che è chiamata relazione di commutazione di tempo uguale. L'interpretazione di Heisenberg non è la più utilizzata nella meccanica quantistica non relativistica, ma è nettamente la favorita nella teoria relativistica.

17.4 Discussione generale sul elettromagnetismo

In questa sezione partiamo con un breve ripasso generale sul campo elettromagnetico classico e poi vedremo come esprimerlo nella teoria quantistica.

17.4.1 Elettrodinamica classica

Partiamo dalla forza di Lorentz

$$\mathbf{F} = q \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right)$$

e dalle equazioni di Maxwell

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j},$$

dove abbiamo cambiato le costanti di moltiplicazione in modo da avere $|E| = |B|$. Vengono poi espresse: l'equazione di continuità, il vettore potenziale magnetico \mathbf{A} , il potenziale elettrico ϕ , l'equazione di Poisson e la sua controparte magnetica. Vengono poi introdotte le trasformazioni di Gauge e il Gauge di Coulomb:

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0;$$

$$\phi = 0.$$

Usando il Gauge di Coulomb troviamo facilmente l'equazione delle onde e che queste viaggiano a c . Una forma di soluzione importante di questa equazione è

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t).$$

Procedendo troviamo che $\omega = kc$, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0 = 0$ e dunque le onde si propagano in direzione di \mathbf{A} e sono trasverse. L'energia di queste onde attraverso un unità di superficie per secondo è

$$|\mathbf{S}| = \frac{c}{4\pi} |(\mathbf{E} \times \mathbf{B})| = \frac{\omega^2}{4\pi c} |\mathbf{A}_0|^2 \sin^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t),$$

mentre l'energia per unità di volume è

$$u = (1/8\pi) \cdot [|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{B}|^2].$$

17.4.2 Potenziali nella teoria quantistica

Ci chiediamo se anche in meccanica quantistica le invarianze di Gauge siano valide, per farlo usiamo l'approccio dei path integral.

Ricordiamo che

$$U(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = N \sum_{\text{cammini}} \exp[iS/\hbar],$$

dove N è il fattore di normalizzazione e S , l'azione che in questo caso è

$$S = \int_{t'}^t \mathcal{L} dt'' = \int_{t'}^t \left(\frac{1}{2} m |\dot{\mathbf{r}}|^2 + \frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} - q\phi \right) dt''.$$

Supponiamo di effettuare una trasformazione Gauge dei potenziali:

$$S \rightarrow S_\Lambda = S - \int_{t'}^t \frac{q}{c} \left(\mathbf{v} \cdot \nabla \Lambda + \frac{\partial \Lambda}{\partial t''} \right) dt''$$

ma

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \Lambda + \frac{\partial \Lambda}{\partial t''} = \frac{d\Lambda}{dt''}$$

è la derivata totale rispetto alla traiettoria. Segue

$$S_\Lambda = S + \frac{q}{c} [\Lambda(\mathbf{r}', t') - \Lambda(\mathbf{r}, t)].$$

È chiaro che S e S_Λ si equivalgono in meccanica classica, per vedere se i due si equivalgono anche in quantistica trasformiamo il propagatore

$$U \rightarrow U_\Lambda = U \cdot \exp \left\{ \frac{iq}{\hbar c} [\Lambda(\mathbf{r}', t') - \Lambda(\mathbf{r}, t)] \right\}$$

e dal momento che $U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \langle \mathbf{r} | U(t, t') | \mathbf{r}' \rangle$, è chiaro che l'effetto della trasformazione è equivalente ad un cambio di coordinate (il che non cambia la fisica):

$$|\mathbf{r}\rangle \rightarrow |\mathbf{r}_\Lambda\rangle = e^{(iq\Lambda/\hbar c)} |\mathbf{r}\rangle.$$

La funzione d'onda sotto trasformazione di Gauge è

$$\psi = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \rightarrow \psi_\Lambda = \langle \mathbf{r}_\Lambda | \psi \rangle = e^{-iq\Lambda(\mathbf{r}, t)/\hbar c} \psi.$$

Vediamo però che diversamente dalla meccanica classica la meccanica quantistica dà più importanza ai potenziali rispetto a quella classica. Questo è particolarmente evidente nell'esperimento di Aharonov-Bohm, dove vediamo che le due meccaniche danno importanza uguali ai potenziali solo se $\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$ è un multiplo del flusso quantico

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{q}.$$

17.5 Interazione di atomi con la radiazione elettromagnetica

Questa sezione è in realtà un assaggio di un argomento enorme, non potendo coprirlo interamente faremo solo un paio di esempi: l'effetto fotoelettrico nell'idrogeno e il decadimento spontaneo dell'idrogeno da uno stato eccitato a quello fondamentale.

17.5.1 Effetto fotoelettrico nell'idrogeno

Consideriamo un atomo di idrogeno nel suo stato fondamentale $|100\rangle$, centrato nell'origine, interagente con un'onda incidente

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t).$$

Per energie sufficientemente grandi l'elettrone dell'atomo potrà essere liberato. Vogliamo calcolare il rateo di successo di questo processo usando la regola d'oro di Fermi:

$$R_{i \rightarrow f} = \text{rateo di transizione } i \rightarrow f = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f^0 | H^1 | i^0 \rangle \right|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega).$$

Facciamo prima però due punti:

- Dobbiamo usare un autostato dell'hamiltoniana di Coulomb $H^0 = P^2/2m - e^2/r$ che porti energia positiva e dobbiamo poter ignorare l'attrazione del protone una volta liberato l'elettrone. Questo significa poter scrivere la serie di perturbazioni come $|f^0\rangle = |\mathbf{p}_f\rangle + \text{ordini più alti}$ e ignorare senza troppo errore gli ordini più alti. Si dà il caso che per un atomo di idrogeno in s questo sia il vero;
- In questo caso la perturbazione è

$$H^1(t) = \frac{-(-e)}{2mc} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}) = \frac{e}{2mc} \left[e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right] \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P},$$

dei due pezzi esponenziali solo il primo ha la corretta dipendenza dal tempo da indurre una transizione $i \rightarrow f$ con $E_f > E_i$, il secondo verrà ammazzato dalla funzione delta della conservazione dell'energia, dunque lo possiamo ignorare:

$$\begin{aligned} H^1(t) &= \frac{e}{2mc} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P} e^{-i\omega t} \\ &= H^1 e^{-i\omega t}. \end{aligned}$$

Ora cerchiamo gli elementi della matrice di transizione

$$H_{fi}^1 = \frac{e}{2mc} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \int e^{-i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{A}_0 \cdot (-i\hbar \nabla) e^{-r/a_0} d^3\mathbf{r},$$

ricordiamo che la moltiplicazione per una funzione d'onda $e^{i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar}$ aggiunge allo stato un momento \mathbf{p}_0 , dunque moltiplicando per le funzioni d'onda stiamo dando un momento all'atomo in forma di radiazione. Questo momento è però trascurabile rispetto al momento dell'elettrone per una transizione tra i livelli atomici (l'energia trasferita è dell'ordine del Rydberg). Anche l'interazione con lo spin è trascurabile per gli stessi motivi.

Il dominio in cui stiamo lavorando è spesso chiamato

$$ka_0 \ll 1,$$

il che significa che la lunghezza d'onda è molto maggiore del raggio atomico, dunque il campo elettromagnetico percepito dall'atomo è un campo costante $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \simeq 1$. Questa si chiama approssimazione del dipolo elettrico, poiché il campo elettrico costante percepito dall'atomo è

$$\mathbf{E} = \frac{-1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \frac{-1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathbf{A}_0}{2} e^{-i\omega t} \right) = \frac{i\omega}{2c} \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t}$$

e ci si accoppia attraverso il momento del dipolo elettrico $\boldsymbol{\mu} = -e\mathbf{R}$:

$$H^1(t) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E} = \frac{i\omega e}{2c} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{R} e^{-i\omega t}.$$

Possiamo dimostrare che questa hamiltoniana perturbativa coincide con quest'altra

$$H^1(t) = \frac{e}{2mc} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{P} e^{-i\omega t}.$$

A questo punto riprendiamo l'elemento di matrice H_{fi}^1 , ma nell'approssimazione di dipolo

$$H_{fi}^1 = N \int e^{-i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar} \mathbf{A}_0 \cdot (-i\hbar \nabla) e^{-r/a_0} d^3\mathbf{r},$$

dove N è una costante data da $N = \left(\frac{e}{2mc} \right) \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2}$. Se adesso integriamo ∇ per parti e scegliamo \mathbf{p}_f andare lungo l'asse z otteniamo

$$H_{fi}^1 = \frac{8\pi/a_0}{\left[(1/a_0)^2 + (p_f/\hbar)^2 \right]^2},$$

che ci dà il seguente rateo di transizione

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \left(\frac{e}{2mc} \right)^2 \frac{1}{8\pi^3 \hbar^3} \frac{1}{\pi a_0^3} \frac{|\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{p}_f|^2 64\pi^2 a_0^6}{\left[1 + (p_f a_0/\hbar)^2 \right]^4} \times \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega).$$

Adesso occupiamoci della funzione δ , questa funzione ci dà una distribuzione di probabilità di trovare un elettrone nello stato finale ad un momento matematicamente preciso \mathbf{p}_f . Questa probabilità è di poco interesse nella pratica, dove posizioniamo un detector con una certa apertura angolare $d\Omega$ e ci chiediamo quanti elettroni captati avranno un certo momento $(\mathbf{p}_f, \mathbf{p}_f + d\mathbf{p}_f)$. La funzione δ ci dice che il momento degli elettroni è piccato a

$$\frac{p_f^2}{2m} = E_i^0 + \hbar\omega.$$

Il contributo dato da questa regione è calcolabile come

$$\delta \left(\frac{p_f^2}{2m} - E_i^0 - \hbar\omega \right) = \frac{m}{p_f} \delta \left\{ p_f - \left[2m(E_i^0 + \hbar\omega) \right]^{1/2} \right\}.$$

Otteniamo così

$$\begin{aligned} R_{i \rightarrow d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| H_{fi}^1 \right|^2 m p_f d\Omega \\ &= \frac{4a_0^3 e^2 p_f |\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{p}_f|^2}{m\pi \hbar^4 c^2 \left[1 + (p_f a_0/\hbar)^2 \right]^4} d\Omega. \end{aligned}$$

Osserviamo che il rateo dipende unicamente dall'ampiezza di A_0 , l'angolo tra \mathbf{A}_0 e il momento uscente e l'ampiezza di p_f (o equivalentemente ω , la frequenza di radiazione). Osserviamo che all'elettrone piace andare in direzione parallela ad \mathbf{A}_0 , mentre non è presente la direzione dell'onda incidente dal momento che abbiamo assunto che questa fosse un campo costante. Per ottenere il rateo totale di ionizzazione dobbiamo integrare su tutti gli angoli e dopo aver mezzo \mathbf{A}_0 lungo z otteniamo

$$R_{i \rightarrow \text{all}} = \frac{4a_0^3 e^2 p_f^3 |\mathbf{A}_0|^2}{m\pi\hbar^4 c^2 \left[1 + (p_f a_0/\hbar)^2\right]^4} \iint \cos^2 \theta d(\cos \theta) d\phi$$

$$= \frac{16a_0^3 e^2 p_f^3 |\mathbf{A}_0|^2}{3m\hbar^4 c^2 \left[1 + (p_f a_0/\hbar)^2\right]^4}.$$

Dal momento che ogni per ogni ionizzazione è necessario che il raggio trasmetta $\hbar\omega$ all'atomo, il rateo di assorbimento dell'energia è

$$\frac{dE_{\text{abs}}}{dt} = \hbar\omega \cdot R_{i \rightarrow \text{all}}.$$

Supponiamo ora di avere un disco perfettamente assorbente di area σ , dal momento che l'energia del raggio per unità di area è $\omega^2 |\mathbf{A}_0|^2 / 8\pi c$, allora l'energia assorbita dal disco sarà

$$\frac{dE_{\text{abs}}}{dt} = \frac{\sigma \cdot |\mathbf{A}_0|^2 \omega^2}{8\pi c},$$

comparando questa equazione alla precedente vediamo che possiamo associare all'atomo una sezione trasversale fotoelettrica:

$$\sigma = \frac{8\pi c}{|\mathbf{A}_0|^2 \omega^2} \cdot \hbar\omega \cdot R_{i \rightarrow \text{all}} = \frac{32a_0^3 e^2 p_f^3 \cos^2 \theta}{mc\omega\hbar^3 \left[1 + p_f^2 a_0^2 / \hbar^2\right]^4}.$$

17.5.2 Quantizzazione dei campi

Il formalismo illustrato nel precedente esempio (<trattamento semiclassico perde di significato quando andiamo a trattare campi molto piccoli. Prendiamo ad esempio un atomo di idrogeno nello spazio vuoto in assenza di campi classici, dal precedente formalismo $\mathbf{A} = \dot{\mathbf{A}} = 0$ e quindi il rateo di decadimento è 0. Sperimentalmente tuttavia si osserva che questo non è vero e abbiamo $R \approx 10^9 \text{ s}^{-1}$. Questo perché solo classicamente lo spazio vuoto significa $\mathbf{A} = \dot{\mathbf{A}} = 0$, quantisticamente abbiamo $\langle \mathbf{A} \rangle = \langle \dot{\mathbf{A}} \rangle = 0$ (dove \mathbf{A} sono degli operatori) con delle fluttuazioni $(\Delta A)^2$, $(\Delta \dot{A})^2$. Sono queste fluttuazioni a portare gli atomi a decadere.

Vediamo quindi come trattare il campo magnetico quantisticamente. Dobbiamo trovare un set completo di coordinate canoniche (e relativi momenti) che obbediscano alle relazioni di commutazione, successivamente dovremo creare l'hamiltoniana \mathcal{H} e sostituendo le variabili con i relativi operatori, trovare H . Come coordinate scegliamo i potenziali, tuttavia ricordando che questi non hanno veramente un significato fisico concreto, leviamo la libertà di Gauge usando il Gauge di Coulomb. Per trovare il momento coniugato di queste coordinate scriviamo la lagrangiana

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi} \int [|\mathbf{E}|^2 - |\mathbf{B}|^2] d^3\mathbf{r} = \frac{1}{8\pi} \int \left[\left| -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \right|^2 - |\nabla \times \mathbf{A}|^2 \right] d^3\mathbf{r} \quad \text{ancora senza Gauge di Coulomb.}$$

A questo punto usiamo il Gauge di Coulomb ($\phi = 0$) e definiamo il momento relativo ad \mathbf{A}

$$\Pi_i(\mathbf{r}_0) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_i(\mathbf{r}_0)} \rightarrow \Pi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{\mathbf{A}} = -\frac{\mathbf{E}}{4\pi c}$$

Osserviamo che Π è essenzialmente il campo elettrico.

Capitolo 18

INTRODUZIONE ALLO SCATTERING QUANTISTICO

In questo capitolo vogliamo introdurre la teoria dello scattering elastico quantistico, mostrando come descrivere un processo d'urto. È proprio lo studio di questi fenomeni che, a partire dal secolo scorso, ha permesso ai fisici di indagare la natura delle interazioni fondamentali. Nel presente corso rimarremo in ambito non relativistico: useremo l'energia cinetica nella sua versione classica $p^2/2m$, utilizzeremo potenziali statici e, soprattutto, faremo riferimento all'equazione di Schrödinger, mentre è bene premettere da subito che una visione dello scattering più generale e profonda richiede di gettare le proprie basi su una teoria relativistica.

18.1 Ampiezza di scattering e comportamento asintotico

Abbiamo ormai appreso, ed è forse inutile ripeterlo, che la Meccanica Classica, in cui vediamo le particelle come "palline da biliardo", cioè corpuscoli che seguono una traiettoria ben determinata, non riesce a spiegare una lunga lista di fenomeni, alcuni davvero eclatanti. Non sorprende, quindi, che immaginare un processo di urto, anche detto di diffusione o di scattering, nel modo riportato in Fig. 14.1 corrisponda ad avere una visione molto miope di quanto sta in realtà avendo luogo laggiù in fondo.

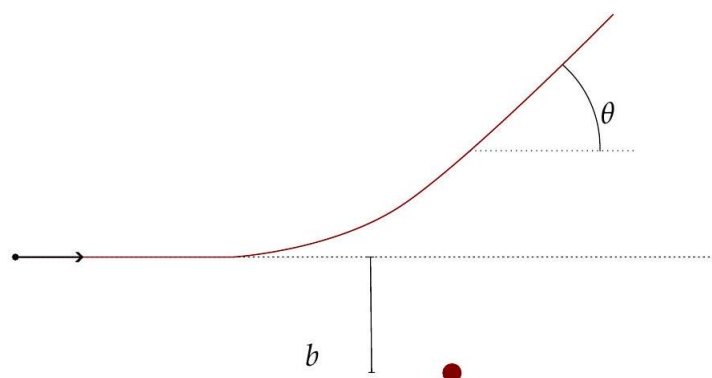


Figura 14.1: Visione classica dello scattering elastico. Una volta fissata la natura della particella incidente e del centro diffusore, a ciascuna coppia energia-parametro d'urto (E, b) corrisponde un preciso angolo di scattering $\theta(E, b)$. Il processo è immaginato accadere in modo deterministico, ed è risolto trovando la traiettoria della particella incidente. La figura purtroppo è bidimensionale, ma basta poca immaginazione per capire che il processo è caratterizzato in realtà da due angoli: oltre al già citato angolo polare θ , dobbiamo aggiungere l'angolo azimutale ϕ , che tuttavia vedremo essere, in molti casi, poco rilevante.

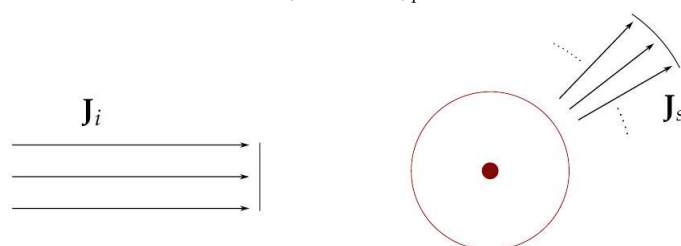


Figura 14.2: Illustrazione relativa allo scattering elastico quantistico. Classicamente, avremmo comunque studiato il fenomeno d'urto in termini probabilistici, immaginando che questa necessità fosse da imputare all'incapacità tecnica di indirizzare il proiettile con una coppia ben specifica di

valori (E, b) , e dunque all'invio, da parte dello sperimentatore, di un flusso di particelle-proiettile. Adesso, invece, la descrizione probabilistica è intrinseca alla teoria quantistica stessa.

Ora, invece, stiamo studiando la Meccanica Quantistica, e agli oggetti che trattiamo non piace più seguire una traiettoria; siamo costretti a dare una descrizione del loro stato in termini di funzione d'onda.

Immaginiamo, come illustrato in Fig. 14.2, che il centro diffusore sia investito da un flusso entrante di particelle, e che queste, dopo aver interagito, se ne allontanino, costituendo un flusso uscente. Possiamo associare a questi flussi delle funzioni d'onda, rispettivamente $\psi^{(i)}$ e $\psi^{(s)}$, ed associare a ciascuna la corrispondente corrente di probabilità, che abbiamo definito nel capitolo 4.2:

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} [\psi^*(\mathbf{x}) \nabla \psi(\mathbf{x})]$$

In entrambi i casi, cerchiamo una descrizione asintotica, ovvero a grande distanza dalla zona di interazione, in modo tale che non possa percepire l'effetto del potenziale del centro diffusore, e corrisponda in questo modo a una soluzione di particella libera. Con $\psi^{(i)}$ vogliamo rappresentare un flusso di particelle con velocità, e quindi impulso, ben definiti. Da questo segue che $\psi^{(i)}(\mathbf{x})$ è un'onda piana incidente

$$\psi^{(i)}(\mathbf{x}) = A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$$

relativa all'impulso \mathbf{k} e alla corrente di probabilità $\mathbf{J}^{(i)}$

$$\mathbf{J}^{(i)} = |A|^2 \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}$$

Chiaramente, con una semplice ridefinizione degli assi possiamo scrivere

$$\psi^{(i)}(\mathbf{x}) = A e^{ikz}$$

Per verificare questo punto, basta utilizzare l'equazione (14.1). Un flusso entrante di questo tipo porta con sé un problema: le onde piane, per rispettare il Principio di indeterminazione, devono essere definite nell'intero spazio, e questo non può essere realizzabile praticamente. Per nascondere questo sotto al tappeto, dobbiamo ammettere di ambientare lo scattering in una regione di interazione molto lontana dalla sorgente dell'onda piana, e porre che la scala di lunghezza su cui è definita tale onda incidente sia approssimabile come infinita. Anche il flusso di particelle uscente, diretto verso un l'angolo solido $d\Omega$ e di nuovo analizzato a grandi distanze dal centro diffusore, dobbiamo associare una funzione d'onda ed una corrente di probabilità. In tal caso, le funzioni avranno la forma di onde sferiche uscenti, poiché quella è la soluzione dell'equazione alle autofunzioni in coordinate sferiche, considerando un potenziale nullo. Per $U = 0$, infatti, vale l'equazione alle autofunzioni

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^{(s)}(\mathbf{x}) = E' \psi^{(s)}(\mathbf{x}) \stackrel{!}{=} E \psi^{(s)}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi^{(s)}(\mathbf{x})$$

L'uguaglianza indicata con $\stackrel{!}{=}$ corrisponde ad imporre lo studio del solo scattering elastico: se definiamo come $k = |\mathbf{k}|$ e $k' = |\mathbf{k}'|$ i moduli dei vettori impulso incidente e diffuso rispettivamente, abbiamo scattering elastico nel caso

$$k = k' \quad \text{ovvero} \quad E = E'$$

Per chiarezza, riscriviamo l'equazione alle autofunzioni (14.2) come

$$\nabla^2 \psi^{(s)} + k^2 \psi^{(s)} = 0$$

Questa equazione alle derivate parziali è chiamata Equazione di Helmholtz. Ovviamente, in questo caso ($U = 0$) c' è invarianza per rotazioni, quindi si conserva il momento angolare e possiamo cercare per la funzione d'onda una soluzione a variabili separate:

$$\psi_{klm}^{(s)} = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

dove la parte angolare è costituita dalle armoniche sferiche, autofunzioni del momento angolare. Come abbiamo visto in sezione 6.3.4, l'equazione sopra riportata diventa, limitatamente alla parte radiale,

$$R_{kl}'' + \frac{2}{r} R_{kl}' + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{kl} = 0$$

dove il segno apicale' indica la derivata parziale ∂_r . Asintoticamente, cioè a grande r , tra le parentesi domina il termine k^2 . Quindi, asintoticamente la soluzione all'equazione radiale perde la dipendenza da l ; in particolare tutte le soluzioni tendono alla soluzione per $l = 0$ (detta di onda s). Per questo motivo, avendo perso la diretta dipendenza da l , la soluzione all'equazione differenziale sarà accoppiata a una certa funzione angolare dipendente dal problema, che chiameremo ampiezza di scattering, e non a una specifica armonica sferica. Per il momento continuiamo a indicare il numero quantico l , e risolviamo:

$$R_{kl}'' + \frac{2}{r}R_{kl}' + k^2 R_{kl} = 0$$

La soluzione (asintotica) per l'autofunzione radiale è

$$R_{kl}(r) = \frac{e^{ikr}}{r}$$

La soluzione completa è allora

$$\psi^{(s)} = A \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \phi)$$

La funzione $f(\theta, \phi)$, chiamata ampiezza di scattering, determina una modulazione angolare e racchiude l'intera informazione dinamica del processo d'urto. Abbiamo così terminato di scrivere il comportamento asintotico della soluzione:

$$\psi_{r \rightarrow \infty} = \psi^{(i)} + \psi^{(s)} = A e^{ikz} + A \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \phi)$$

Per particelle che incidono su centri diffusori a simmetria radiale, come nel caso dei potenziali centrali $U(r)$, gli unici che vedremo, la dinamica deve avere una simmetria cilindrica rispetto all'asse di incidenza: l'ampiezza di scattering non può dipendere da ϕ , motivo per cui l'effettiva soluzione è data da

$$\psi_{r \rightarrow \infty} = \psi^{(i)} + \psi^{(s)} = A e^{ikz} + A \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta)$$

18.1.1 Onde sferiche e onde piane

Nel seguito di questo capitolo considereremo l'onda diffusa sfericamente come stato "di arrivo" del processo: in altri termini, schematizzeremo il processo come

$$e^{ikz} \xrightarrow{\text{dinamica}} f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Conviene precisare sin da qui che le onde sferiche diffuse sono asintoticamente "circa delle onde piane". Questa affermazione, che può sembrare autoevidente per intuizione geometrica, può essere mostrata come segue: 1° operatore impulso $\hat{\mathbf{P}}$ è dotato di un set completo di autostati $|\mathbf{p}\rangle$, indipendenti e ortogonali. In particolare, vale l'ovvia condizione

$$\hat{\mathbf{P}}|\psi\rangle = \mathbf{p}|\psi\rangle \implies |\psi\rangle = |\mathbf{p}\rangle$$

Consideriamo ora un'onda sferica radiale $\psi(\mathbf{x}) = e^{ikr}/r$. In rappresentazione delle coordinate, vale

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}\psi(\mathbf{x}) &= -i\hbar \nabla \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= -i\hbar \left(ik \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r^2} \right) \\ &\simeq \hbar k \psi(\mathbf{x}) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) \end{aligned}$$

quindi possiamo dire che un'onda sferica è, nel limite asintotico, approssimativamente un autostato dell'operatore Impulso, per cui è lecito considerare lo stato "di arrivo" simultaneamente un'onda sferica e un'onda piana.

18.1.2 La sezione d'urto differenziale

Vogliamo ora definire una grandezza di importanza fondamentale per lo studio di questo processo. Il numero di particelle diffuse per unità di tempo nell'angolo solido $d\Omega$, centrato nella direzione i cui angoli, rispetto al flusso incidente, sono θ e ϕ , è proporzionale al modulo della corrente incidente e a $d\Omega$. Il fattore di proporzionalità $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi)$ è definito sezione d'urto differenziale

$$\frac{dN}{dt} = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) \cdot |\mathbf{J}^{(i)}| d\Omega$$

ed è chiaramente funzione degli angoli polare e azimutale. Possiamo aggiungere che, integrando la corrente uscente sulla superficie di una sfera dal raggio r molto esteso, i.e. sufficientemente lungo da raggiungere le distanze a cui abbiamo definito $\mathbf{J}^{(s)}$, dobbiamo trovare lo stesso valore:

$$\frac{dN}{dt} = \int_{\Omega} |\mathbf{J}^{(s)}| r^2 d\Omega \implies \frac{dN}{dt d\Omega} = |\mathbf{J}^{(s)}| r^2$$

Dall'unione delle equazioni (14.5) e (14.6) deriva il risultato

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\mathbf{J}^{(s)}|}{|\mathbf{J}^{(i)}|} r^2$$

Osserviamo dunque che la sezione d'urto differenziale è definita anche grazie al rapporto tra la corrente uscente e la corrente entrante. La corrente di probabilità relativa al flusso uscente asintoticamente, limitatamente alla sua coordinata radiale, è

$$\begin{aligned} J_r^{(s)} &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[\left(\psi^{(s)} \right)^* \frac{\partial}{\partial r} \psi^{(s)} \right] \\ &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[\left(A \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \phi) \right)^* A \frac{ikr e^{ikr} - e^{ikr}}{r^2} f(\theta, \phi) \right] \\ &= |A|^2 \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[\frac{ik}{r^2} - \frac{1}{r^3} \right] |f(\theta, \phi)|^2 = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta, \phi)|^2}{r^2} \end{aligned}$$

Asintoticamente la corrente uscente sarà puramente radiale: possiamo usare questo risultato dentro l'equazione (14.7), ricordando quanto trovato per $\mathbf{J}^{(i)}$, per giungere a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2$$

e trovare il legame tra sezione d'urto differenziale e ampiezza di scattering.

NOTA Noi considereremo solamente potenziali sferici, che godono di simmetria assiale e quindi sono indipendenti da rotazioni attorno all'asse di impatto, che nel nostro caso è \bar{z} . Pertanto, la sezione d'urto differenziale non dipenderà dalla coordinata sferica ϕ , su cui integriamo, guadagnando un fattore 2π . Essendo $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$, troveremo allora

$$\frac{1}{2\pi \sin\theta} \frac{d\sigma}{d\theta} = |f(\theta)|^2$$

Due importanti precisazioni

Fermiamoci un attimo per sottolineare due punti:

1. Stiamo lavorando con una funzione d'onda della forma

$$\psi(\mathbf{x}) = A \left[e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

D'altra parte, la sezione d'urto differenziale contiene sia $\mathbf{J}^{(s)}$, relativa all'onda sferica, sia $\mathbf{J}^{(i)}$, relativa all'onda piana. La corrente di probabilità va però calcolata considerando tutta la funzione d'onda, quindi a priori le due correnti non sono ben definite. Dato lo stato sovrapposto

$$|\psi\rangle = |\psi^{(i)}\rangle + |\psi^{(s)}\rangle$$

non è vero che il flusso della sovrapposizione è la sovrapposizione dei flussi, perché ci sono effetti di interferenza. Diamo solamente una soluzione informale al problema, specificando che misuriamo il flusso in uscita a grandi distanze, i.e. a distanze molto maggiori sia del raggio d'azione del potenziale d'interazione sia dell'estensione trasversalmente coerente del fronte d'onda piano incidente, che in situazioni reali è ovviamente finito. In questo modo, lavorando nel limite asintotico, otteniamo la seguente condizione: nella regione di rivelazione la funzione d'onda piana in ingresso è (circa) nulla, così come è (circa) nulla quella sferica alla posizione della sorgente da cui l'onda piana è inviata verso il centro diffusore. Solamente in questa condizione è lecito trascurare gli effetti d'interferenza e quindi distinguere le correnti di probabilità, calcolandole separatamente.

2. Nonostante il riferimento esplicito alla situazione fisica in cui una particella proiettile investe un centro diffusore fisso, la stessa trattazione è utilizzabile nel caso di urto tra due particelle, anche quando queste sono lanciate una contro l'altra: possiamo mappare questo secondo problema in quello, più comodo, di una singola particella immersa in un campo centrale, eseguendo l'opportuna trasformazione canonica.

18.2 Approssimazione di Born

Consideriamo l'Hamiltoniana

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(r)$$

valida nella regione di interazione, e cerchiamo di risolvere l'equazione alle autofunzioni

$$H\psi = E\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$$

ove $k = |\mathbf{k}|$, con la condizione che le soluzioni abbiano asintoticamente la forma di equazione (14.4):

$$\psi_{r \rightarrow \infty} = \psi^{(i)} + \psi^{(s)} = Ae^{ikz} + A \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \phi)$$

Ciò a cui siamo interessati è trovare $f(\theta)$, e da quella $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta)$.

A questo scopo, dopo aver riscritto l'equazione alle autofunzioni nella versione

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = \frac{2m}{\hbar^2} U \psi$$

utilizziamo l'approssimazione di Born. Mentre nella teoria delle perturbazioni si è soliti trattare perturbativamente la conseguenza di una interazione rispetto all'effetto di una interazione differente, comparativamente molto più rilevante della prima, adesso invece supponiamo che il potenziale abbia un effetto piccolo rispetto alla soluzione di particella libera. Come sempre, alla fine dovremo spiegare in modo quantitativo quando sia possibile considerare tale perturbazione come piccola.

Per chiarificare l'approccio perturbativo, assegniamo temporaneamente un parametro adimensionale λ al potenziale U :

$$U \rightarrow \lambda U$$

Questo non aggiunge nulla alla trattazione: si tratta solamente di una riscrittura graficamente più chiara che parametrizza la "grandezza" del potenziale di interazione. Come al solito useremo λ come parametro di espansione analitica. Espandiamo in serie la funzione d'onda

$$\psi = \psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

per cui l'equazione differenziale, in questi termini, si riscrive come

$$[\nabla^2 + k^2](\psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2)) = \frac{2m}{\hbar^2} \lambda U (\psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2))$$

Il lato di destra è $\mathcal{O}(\lambda)$, all'ordine più basso. Ne segue che $\psi^{(0)}$ corrisponde alla soluzione di particella libera e risolve l'equazione differenziale omogenea d'ordine zero

$$\nabla^2 \psi^{(0)} + k^2 \psi^{(0)} = 0$$

ovvero la succitata Equazione di Helmholtz.

La degenerazione è ∞ , poiché c'è una soluzione corrispondente ad ogni direzione possibile; noi però scegliamo saggiamente

$$\psi^{(0)} = e^{ikz}$$

in quanto ci troviamo alla ricerca di una soluzione che risulti aderente alla forma asintotica richiesta: all'ordine zero, in assenza di cioè di potenziale di interazione, la soluzione completa del problema è proprio l'onda piana incidente, mentre non c'è nessuna diffusione, dunque nessuna onda sferica. Utilizzando lo schema perturbativo, troviamo $\psi^{(1)}$ come soluzione dell'equazione di primo ordine in λ , considerando la soluzione di particella libera come termine di sorgente:

$$\nabla^2 \psi^{(1)} + k^2 \psi^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2} U \psi^{(0)}$$

Naturalmente potremmo procedere con quest'approccio ricorsivo a ogni ordine, ma per le nostre applicazioni questo non sarà necessario. Dimentichiamoci adesso del parametro λ , riassorbendolo dentro U , e continuiamo i calcoli.

Il calcolo prosegue in modo analogo a quello dei potenziali ritardati nella teoria dell'Elettromagnetismo. In particolare, considerando l'operatore differenziale lineare

$$\mathcal{L} \equiv \nabla^2 + k^2$$

e la funzione della posizione

$$F(\mathbf{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{x}) \psi^{(0)}(\mathbf{x})$$

l'equazione si scrive nella forma

$$\mathcal{L}[\psi^{(1)}] = F$$

Ci serve conoscere la Funzione di Green del problema: essa costituisce la risposta del sistema lineare per termini di sorgente "a delta", i.e.

$$\mathcal{L}[\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

e si dimostra essere uguale a

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|}$$

Se avessimo $k = 0$, otterremo come funzione di Green la stessa soluzione senza il termine di fase, e in tal caso l'equazione risolta sarebbe quella di Laplace; è possibile dimostrare che per un operatore del tipo $\nabla^2 + k^2$ la soluzione corretta è effettivamente quella riportata, dove il termine di fase $e^{ik|\mathbf{x}|}$ è originato dalla presenza di un termine k^2 nella definizione dell'operatore. L'equazione qui risolta prende il nome di Equazione di Lippman-Schwinger.

Nota la Funzione di Green, la soluzione generale al problema è data dalla sua convoluzione con il termine di sorgente F :

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{x}' U(\mathbf{x}') \psi^{(0)}(\mathbf{x}') \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

Questa è l'equazione cercata, che determina il termine perturbativo di primo ordine nella funzione d'onda del sistema.

18.2.1 Regimi di applicabilità

Vogliamo controllare che la soluzione appena trovata soddisfi l'ipotesi di lavoro

$$|\psi^{(1)}| \ll |\psi^{(0)}|$$

Consideriamo, tra tutti i potenziali di interazione possibili, quelli sferici e a range di interazione finito. Questi costituiscono una classe di potenziali sferici che, per r superiore ad un certo raggio a , sono soppressi e tendono a zero in modo rapido:

$$U(r) \simeq 0 \quad \forall r > a$$

Possiamo considerare almeno tutti i potenziali del tipo

$$U_k(r) = \alpha \frac{e^{-r/a}}{r^k} \quad \forall k \in \mathbb{N}$$

tra i quali rientra ad esempio $U_2(r) = (\alpha e^{-r/a})/r^2$, mentre un'assenza degna di nota è quella del potenziale di Coulomb, che infatti non siamo capaci di trattare in questo modo. Essendo $|\psi^{(0)}| = 1$, allora segue che $\psi^{(0)} = \mathcal{O}(1)$. Trattiamo due casi:

1. Nel caso di scattering di particelle lente, cioè nel limite $ka \ll 1$, si ha

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \underbrace{d^3\mathbf{x}'}_{a^3} \underbrace{U(\mathbf{x}')}_{\sim U} \underbrace{\psi^{(0)}(\mathbf{x}')}_{\mathcal{O}(1)} \underbrace{\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}_{1/a}$$

dove abbiamo indicato che l'integrazione nello spazio porta un contributo di volume a^3 , il denominatore porta un $1/a$, poiché $U(r)$ è significativamente diverso da zero soltanto nella sfera di raggio a , dove assume il valore tipico U . In questa regione, per l'ipotesi $ka \ll 1$, approssimiamo il termine di fase semplicemente come $\mathcal{O}(1)$. Possiamo concludere che l'ordine di grandezza della correzione di primo ordine sia

$$|\psi^{(1)}| \sim \frac{m}{\hbar^2} |U| a^2$$

Affinché la perturbazione sia piccola rispetto al modulo della soluzione imperturbata, e quindi l'approssimazione di Born risulti valida, è necessario che sia soddisfatta la disuguaglianza

$$|\psi^{(1)}| \ll |\psi^{(0)}| \implies \frac{m}{\hbar^2} |U| a^2 \ll 1 \implies |U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

2. Nel caso di scattering di particelle veloci, i.e. $ka \gg 1$, il vincolo è meno stringente. Infatti in tal caso il termine di fase $e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$ che compare nell'integrale, poiché nella regione di integrazione è di ordine e^{ika} , è fortemente oscillante. Dalla Teoria delle distribuzioni, grazie al Teorema di Riemann-Lebesgue, sappiamo che vale il limite

$$\lim_{\omega \rightarrow \pm\infty} e^{i\omega x} \stackrel{d}{=} 0$$

dove $\stackrel{d}{=}$ è un'uguaglianza da intendersi nel senso delle distribuzioni, cioè: data una generica funzione test $f(x)$, vale il limite (stavolta da intendersi proprio in senso analitico)

$$\lim_{\omega \rightarrow \pm\infty} \int_{\mathbb{R}} dx f(x) e^{i\omega x} = 0$$

In altri termini, le trasformate di Fourier delle funzioni tendono a 0 per frequenze infinite. Ne segue che all'interno del volume finito $\sim a^3$, dove il potenziale è significativamente non nullo, la forte oscillazione dell'integrale renderà significativi solo alcuni contributi in regioni limitate.

Rimandiamo a [3] per la trattazione completa: l'idea, sostanzialmente, è che in questo caso si possa considerare solamente la diffusione in avanti (angoli di scattering piccoli) e che ciò permetta di scrivere

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) \simeq g(\mathbf{x}) e^{ikz}$$

con g una funzione lentamente variabile. Inserendo quest'informazione nell'equazione differenziale per $\psi^{(1)}$, si deriva un'equazione differenziale per g che conduce all'approssimazione

$$g|_{|\mathbf{x}| \simeq a} \simeq \frac{im|U|a}{k\hbar^2} \implies |\psi^{(1)}| \sim \frac{m|U|a}{k\hbar^2}$$

La condizione di applicabilità della Teoria delle perturbazioni, come sopra, è che i termini successivi dello sviluppo siano molto più piccoli del termine dominante: questo porta a

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} ka$$

In effetti, troviamo una condizione molto meno stringente sul potenziale, che in questo limite di alte velocità può anche assumere valori maggiori rispetto al caso di basse velocità. Chiaramente in questo caso dobbiamo sempre ricordarci che la trattazione è qui non relativistica: un altro (ovvio) limite da imporre è

$$p \ll mc \implies 1 \ll ka \ll \frac{amc}{\hbar}$$

Dedichiamo le prossime sezioni a studiare nel dettaglio la forma della $\psi^{(1)}$, sia con una soluzione approssimata che con un calcolo perturbativo.

18.3 Una prima soluzione approssimata

Cominciamo con un calcolo che è facile ritrovare in altri contesti di scattering di onde su sistemi, ad esempio nell'analisi dei fattori di forma elettromagnetici; questo non è un caso, perché il ragionamento è applicabile universalmente in ambito ondulatorio.

Con riferimento alla Fig. 14.3, eseguiamo una prima approssimazione: sia

$$|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'|$$

il che implica

$$R = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \simeq |\mathbf{x}| - \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}'}{|\mathbf{x}|} = |\mathbf{x}| - \bar{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}'$$

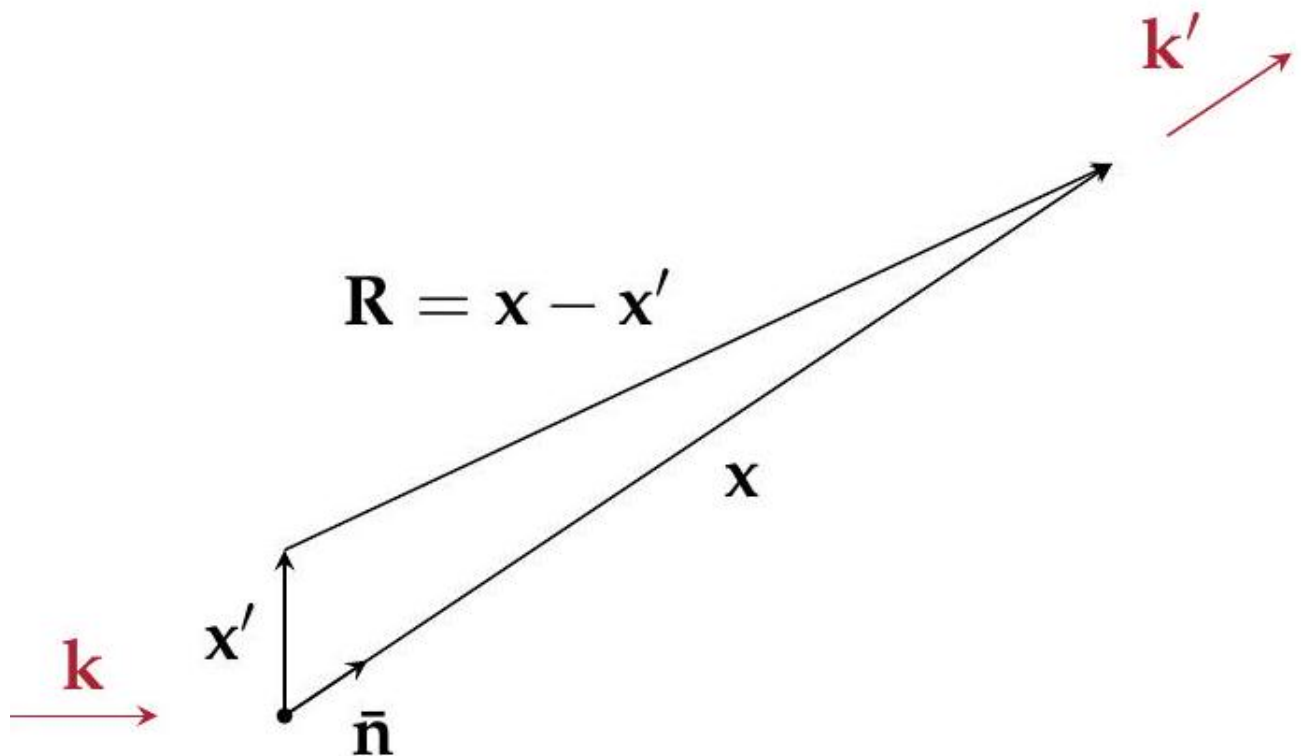


Figura 14.3: Notazione utilizzata per il calcolo approssimato dell'ampiezza di scattering.

dove $\bar{\mathbf{n}} = \mathbf{x}/|\mathbf{x}|$ è il versore indicato in figura. Con questa approssimazione, l'Eq. (14.II) - che ricordiamo, funziona per $r \rightarrow +\infty$ - si riduce a

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(\mathbf{x}) &\simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{x}' e^{ikz'} U(\mathbf{x}') \frac{e^{ik(|\mathbf{x}| - \bar{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}')}}{|\mathbf{x}|} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \underbrace{\int d^3\mathbf{x}' U(\mathbf{x}') e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}'}}_{=(2\pi)^{3/2} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} \end{aligned}$$

dove $\mathbf{k} = k\bar{\mathbf{z}}$ e $\mathbf{k}' = k\bar{\mathbf{n}}$, mentre $|\mathbf{x}| = r$. Al denominatore effettuiamo l'approssimazione violenta $R \simeq |\mathbf{x}| = r$, mentre portiamo più rispetto al fattore di fase. Compone una Trasformata di Fourier del potenziale

$$\psi^{(1)}(\mathbf{x}) \simeq -\frac{\sqrt{2\pi}m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

Definendo il vettore impulso trasferito $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ possiamo scrivere

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{x}' U(\mathbf{x}') e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x}'|\cos\theta'}$$

dove θ è per definizione l'angolo tra \mathbf{k} e \mathbf{k}' , e chiamiamo θ' l'angolo compreso tra \mathbf{q} e \mathbf{x}' . Troviamo quindi l'ampiezza di scattering:

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \psi^{(1)}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{q}) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{con} \quad f(\mathbf{q}) = -\frac{\sqrt{2\pi}m}{\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{q})$$

Avevamo promesso di trovare un'ampiezza di scattering dipendente da θ : lo scattering è elastico, ovvero $k = k'$, allora

$$\begin{aligned} |\mathbf{q}| &= |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \\ &= \sqrt{k^2 + k'^2 - 2|\mathbf{k}||\mathbf{k}'|\cos\theta} \\ &= k\sqrt{2(1 - \cos\theta)} \\ &= k\sqrt{4\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} = 2k\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned}$$

Segue che la dipendenza da θ è nascosta in \mathbf{q} , quindi possiamo scrivere direttamente

$$f(\mathbf{q}(\theta)) \rightarrow f(\theta)$$

Questo ci fornisce proprio l'ampiezza di scattering cercata, con la giusta dipendenza¹. Nel caso di potenziali centrali, dipendenti dalla sola coordinata radiale, l'integrale appena trovato può essere reso esplicito scrivendo

$$\begin{aligned} \tilde{U}(q) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^{+\infty} r'^2 dr' \int_0^\pi \sin\theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' U(r') e^{iqr'\cos\theta'} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} dr' r'^2 U(r') \int_{-1}^{+1} d\cos\theta' e^{iqr'\cos\theta'} \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} dr' r'^2 U(r') \frac{e^{-iqr'} - e^{iqr'}}{iqr'} \\ &= \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{+\infty} dr' r' U(r') \frac{\sin(qr')}{q} \end{aligned}$$

da cui giungiamo all'espressione per l'ampiezza di scattering

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} dr' r' U(r') \frac{\sin(qr')}{q}$$

Questa è un'espressione valida in generale nell'Approssimazione di Born (da lì abbiamo potuto scrivere il primo integrale) e nell'ipotesi di potenziale centrale.

18.3.1 Esempio: potenziale uniforme a raggio d'azione finito

Supponiamo di avere un potenziale centrale della forma

$$U(r) = \begin{cases} -U_1 & \text{se } r \leq a \\ 0 & \text{se } r > a \end{cases} \quad \text{con} \quad U_1 \ll U_0 \equiv \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

La condizione imposta su U_1 è già sufficiente a far valere l'Approssimazione di Born per lo scattering di particelle lente, e quindi anche nel caso di particelle veloci.

La sezione d'urto differenziale integrata su ϕ si calcola a partire dall'Eq. (14.12) utilizzando la relazione (14.9):

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi \sin \theta} \frac{d\sigma}{d\theta} &= |f(\theta)|^2 \\
&= \left(\frac{2mU_1}{q^2 \hbar^2} \right)^2 \left| \int_0^a dr' q r' \sin(qr') \right|^2 \\
&= \left(\frac{2mU_1}{q^3 \hbar^2} \right)^2 \left| \int_0^{aq} ds \sin s \right|^2 \\
&= \left(\frac{2mU_1}{q^3 \hbar^2} \right)^2 \left| -aq \cos(aq) + \int_0^{aq} ds \cos s \right|^2 \\
&= 4a^2 \left(\frac{U_1}{U_0} \right)^2 \left(\frac{\sin(aq) - aq \cos(aq)}{(aq)^3} \right)^2
\end{aligned}$$

dove abbiamo eseguito il cambio di variabile $a = qr'$. Possiamo dunque calcolare la sezione d'urto totale:

$$\begin{aligned}
\sigma &= \int_0^{4\pi} d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_0^\pi \sin \theta |f(\theta)|^2 d\theta \\
&= 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta 4a^2 \left(\frac{U_1}{U_0} \right)^2 \left(\frac{\sin(aq) - aq \cos(aq)}{(aq)^3} \right)^2
\end{aligned}$$

Questo integrale non è particolarmente divertente da risolvere, per cui ci affidiamo a [2] e ne riportiamo direttamente il risultato, che si ottiene sostituendo $q = 2k \sin(\theta/2)$:

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{U_1}{U_0} \right)^2 \left(1 - \frac{1}{(2ka)^2} + \frac{\sin(4ka)}{(2ka)^3} - \frac{\sin^2(2ka)}{(2ka)^4} \right)$$

18.3.2 Esempio: potenziale di Yukawa

Consideriamo adesso un potenziale centrale del tipo:

$$U(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-r/a} \quad \text{con} \quad U_1 = \frac{\alpha}{a} \quad \text{e} \quad U_0 = \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

Questo potenziale, usato per descrivere le forze nucleari, fu introdotto nel 1935 da H. Yukawa. Stavolta l'approssimazione di Born per particelle lente è soddisfatta se vale

$$\alpha \ll \frac{\hbar^2}{ma}$$

Di nuovo, siamo interessati alla sezione d'urto differenziale. Con la stessa notazione dell'esempio precedente:

$$\begin{aligned}
|f(\theta)|^2 &= \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \left| \int_0^{+\infty} dr' \alpha e^{-r'/a} \frac{\sin(qr')}{q} \right|^2 \\
&= \frac{4}{q^4} \left(\frac{\alpha}{a^2 U_0} \right)^2 \left| \int_0^{+\infty} ds e^{-s/aa} \sin s \right|^2 \\
&= \frac{4}{a^2 q^4} \left(\frac{U_1}{U_0} \right)^2 \left(\frac{(aq)^2}{1 + (aq)^2} \right)^2 = 4a^2 \left(\frac{U_1}{U_0} \frac{1}{1 + (aq)^2} \right)^2
\end{aligned}$$

Non riportiamo il calcolo dell'integrale. Dall'ampiezza di scattering risaliamo alla sezione d'urto:

$$\begin{aligned}
\sigma &= \int d\Omega |f(\theta)|^2 \\
&= 8\pi a^2 \left(\frac{U_1}{U_0} \right)^2 \int_{-1}^{+1} d\cos \theta \left(\frac{1}{1 + (aq)^2} \right)^2
\end{aligned}$$

Usiamo la relazione tra θ e q :

$$q = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = 2k \sqrt{\frac{1 - \cos \theta}{2}} \implies q^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$$

da cui segue la relazione differenziale

$$\cos \theta = 1 - \frac{q^2}{2k^2} \implies d \cos \theta = -\frac{dq^2}{2k^2}$$

Allora l'integrale si risolve come segue

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{+1} d \cos \theta \left(\frac{1}{1 + (aq)^2} \right)^2 &= - \int_{4k^2}^0 \frac{dq^2}{k^2} \left(\frac{1}{1 + (aq)^2} \right)^2 \\ &= \frac{1}{2(ak)^2} \int_0^{4k^2} d(aq)^2 \left(\frac{1}{1 + (aq)^2} \right)^2 \\ &= \frac{1}{2(ak)^2} \int_0^{(2ak)^2} \frac{ds}{(1+s)^2} \\ &= - \frac{1}{2(ak)^2} \frac{1}{1+s} \Big|_0^{(2ak)^2} \\ &= \frac{1}{2(ak)^2} \left(1 - \frac{1}{1 + (2ak)^2} \right) = \frac{2}{1 + (2ak)^2} \end{aligned}$$

per cui, in conclusione, la sezione d'urto totale risulta uguale a

$$\sigma = 16\pi a^2 \left(\frac{U_1}{U_0} \right)^2 \frac{1}{1 + (2ak)^2} = 16\pi \left(\frac{m\alpha a^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{1 + (2ak)^2}$$

Studiamone i limiti:

- per $a \rightarrow 0$, come ci aspetteremmo da un potenziale confinato in una regione infinitesima di spazio, la sezione d'urto totale tende ad annullarsi;
- per $a \rightarrow +\infty$ troviamo un'inattesa divergenza, ma ciò non costituisce un problema: in questo limite il potenziale si riduce a quello coulombiano, che con queste tecniche non può essere trattato, come abbiamo anticipato poco sopra in questo capitolo.

18.4 Seconda soluzione: trattazione perturbativa time-dependent

Torniamo a studiare la forma della $\psi^{(1)}$ con un approccio perturbativo. In particolare useremo la Teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo, formalismo introdotto nel Cap. II, Parte I.

Esponiamo innanzitutto l'idea che sta alla base di tutta questa derivazione. Siccome siamo interessati ai limiti asintotici e i potenziali indipendenti dal tempo che consideriamo sono significativamente non nulli entro un raggio d'azione finito, possiamo affermare che il proiettile incidente interagirà con il potenziale solamente in una regione finita di spazio; questo significa che se sommiamo all'hamiltoniana imperturbata \hat{H}_0 un termine perturbativo U solo durante il passaggio ravvicinato del proiettile al centro diffusore, commettiamo un errore trascurabile sulla dinamica. Ovviamente, tutto questo andrebbe quantificato: la condizione fondamentale che richiediamo è che i potenziali siano asintoticamente nulli, e vedremo che questo basterà a determinare un risultato.

Sia quindi data l'hamiltoniana perturbata

$$\hat{H}(t) = \begin{cases} \hat{H}_0 & \text{per } t < 0, t > T \\ \hat{H}_0 + \hat{U}(\mathbf{x}) & \text{per } 0 \leq t \leq T \end{cases}$$

dove T è un tempo arbitrario che impostiamo noi, sufficientemente lungo, in linea ideale, da coprire tutta la parte importante dell'evoluzione d'interazione. Non è importante specificare quanto lungo: lo manderemo presto a infinito, immaginando di misurare i flussi in uscita a distanze asintotiche.

In Sez. 11.4 abbiamo visto che, su spettri discreti non degeneri, l'evoluzione di un sistema inizialmente in un autostato dell'hamiltoniana imperturbata $|i\rangle$ è dato da ($\hbar = 1$)

$$|\psi(t=0)\rangle = |i\rangle \rightarrow \left| (\psi(t>T)) = \sum_n a_n(T) e^{-i\epsilon_n t} \right| n \rangle$$

dove adottiamo la stessa notazione usata in quel contesto. La probabilità di misurare l'energia ϵ_f si scrive come

$$\mathcal{P}_{\epsilon_f}(t > T) = |a_f(T)|^2 \quad \text{con} \quad a_f(T) = -i \int_0^T dt \langle f | \hat{H}_{\text{pert}}(t) | i \rangle e^{i(\epsilon_f - \epsilon_i)t}$$

dove \hat{H}_{pert} indica una generica hamiltoniana di perturbazione.

Lavoriamo in uno spettro continuo fortemente degenere: una volta fissato $|\mathbf{k}|$, l'energia è la stessa in ogni direzione. L'autostato di partenza è $|\psi(0)\rangle = |i\rangle$, ma in uscita abbiamo un'onda sferica, non piana. In ogni caso potremmo pensare di sviluppare lo stato in termini di autostati dell'impulso:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |\psi(t)\rangle \stackrel{?}{\simeq} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{k}' \underbrace{a(\mathbf{k}', T) e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}'}t}}_{\tilde{\psi}(\mathbf{k}', t) = \langle \mathbf{k}' | \psi(t) \rangle} |\mathbf{k}'\rangle$$

Dobbiamo tuttavia prestare attenzione al fatto che questa è un'estensione al continuo sbagliata (o quantomeno ambigua) della formula discreta. Vedremo nella prossima sezione dove risiede il problema, e come correggere il tiro.

18.4.1 La relazione di completezza su stati del continuo

Apriamo una parentesi importante: nei precedenti capitoli non è generalmente sorta la necessità di svolgere questa precisazione, che però si rivelerà funzionale nel seguito.

Sia $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ la base completa degli autostati dell'operatore Posizione, normalizzata come una δ : questo significa, e qui eseguiamo un'imposizione arbitraria, che vale

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$$

La relazione di completezza su questa base ci fornisce una scrittura per l'identità in termini degli operatori di stato associati ai $|\mathbf{x}\rangle$

$$\mathbb{I} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|$$

Ora, sappiamo che esiste una base ortogonale completa di autostati dell'operatore impulso: sia $\{|\mathbf{k}\rangle\}$ quella normalizzata come una δ , per cui valgono cioè le stesse considerazioni esposte appena sopra. In particolare - rimandiamo al Cap. 3 per la dimostrazione - questa base è rappresentata nelle coordinate dalle funzioni d'onda

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$$

Sappiamo che per una base siffatta la probabilità (infinitesima) che sullo stato $|\psi\rangle$ si misuri un impulso contenuto entro un volume $\hbar^3 d^3\mathbf{k}$ attorno all'impulso $\hbar\mathbf{k}$ è data da²

$$d\mathcal{P} = d^3\mathbf{k} |\langle \mathbf{k} | \psi \rangle|^2$$

Questa probabilità è correttamente normalizzata: sottintendendo ovunque l'integrazione su \mathbb{R}^3 , abbiamo

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \int d\mathcal{P} \\ &= \int d^3\mathbf{k} \langle \psi | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \psi \rangle \\ &= \int d^3\mathbf{k} d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} \langle \psi | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{y}) \underbrace{\int d^3\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{x})}}_{=(2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x})} = \int d^3\mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2 \end{aligned}$$

e ciò risulta verificato essendo la funzione d'onda correttamente normalizzata. Questo calcolo ci fornisce anche automaticamente la corretta relazione di completezza su questa base:

$$\mathbb{I} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|$$

Se adesso decidiamo di usare una base di funzioni d'onda della forma

$$C(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

i.e. se lavoriamo con degli impulsi arbitrariamente normalizzati

$$|\mathbf{k}^a\rangle = (2\pi)^{3/2} C(\mathbf{k})|\mathbf{k}\rangle$$

ove l'apice a indica proprio l'arbitrarietà, allora la corretta definizione di probabilità è data da

$$d\mathcal{P} = d^3\mathbf{k} |\langle \mathbf{k} | \psi \rangle|^2 = \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2} |\langle \mathbf{k}^a | \psi \rangle|^2$$

e la corretta relazione di completezza da usare è

$$\mathbb{I} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2} |\mathbf{k}^a\rangle \langle \mathbf{k}^a|$$

Da questo risultato discende la sezione seguente: abbiamo ritenuto necessario precisare questi semplici calcoli per esplicitare la generalità di quanto deriveremo.

18.4.2 Lo spazio delle fasi

Torniamo al nostro problema: nota la forma che assume la relazione di completezza sotto normalizzazioni arbitrarie, scriviamo la corretta espressione dell'oggetto con cui stiamo lavorando

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |\psi(t)\rangle \simeq \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2} a(\mathbf{k}, T) e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}} t} |\mathbf{k}^a\rangle$$

Questa è l'estensione che corregge l'ambigua scrittura (14.13). A scanso di equivoci, specifichiamo che stiamo lavorando con autofunzioni arbitrariamente normalizzate

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k}^a \rangle = C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

e sottintendiamo, in questa sezione, l'apice a . Come esposto nella sezione precedente, la probabilità infinitesima corretta è

$$d\mathcal{P} = |a(\mathbf{k}, T)|^2 \underbrace{\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2}}_{\equiv d\Phi}$$

dove $d\Phi$ è usualmente definito Spazio delle fasi; rimandiamo a [3] al riguardo. La definizione di questa quantità permette, una volta che ci siamo accordati su come normalizziamo la base degli impulsi, di effettuare un calcolo probabilistico che pesi correttamente gli oggetti considerati. In ogni caso, nella prossima sezione deriveremo una formula del tutto indipendente dalla scelta della normalizzazione.

18.4.3 Il rate di probabilità

Nella sezione appena precedente abbiamo visto che, scelta la normalizzazione della base degli impulsi

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k}^a \rangle = C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \implies \langle \mathbf{k}_1^a | \mathbf{k}_2^a \rangle = C^*(\mathbf{k}_1) C(\mathbf{k}_2) (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$$

se in questa base abbiamo calcolato i coefficienti $a(\mathbf{k}, T)$ allora possiamo calcolarne il modulo quadro e integrarlo in $d\Phi$ per ottenere una probabilità correttamente definita. Come al solito, indichiamo con $|\mathbf{k}\rangle$ gli autostati con normalizzazione a δ :

$$\langle \mathbf{k}_1 | \mathbf{k}_2 \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$$

Sia $|\mathbf{i}\rangle$ il nostro stato incidente di partenza, con impulso \mathbf{k}_0 : rappresentandolo nelle coordinate, diciamo che

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{i} \rangle = \psi_{\mathbf{i}}(\mathbf{x}) = I(\mathbf{k}_0) e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{x}}$$

con I un'ampiezza arbitraria. Potrebbe sembrare strano lasciare questa libertà, visto che il fascio di particelle incidenti è "fisso": motiveremo più avanti, mostrando come in realtà la derivazione sia

indipendente dalla scelta di questa ampiezza. In termini degli stati correttamente normalizzati $|\mathbf{k}\rangle$, lo stato i) ha la forma

$$|i\rangle = (2\pi)^{3/2} I(\mathbf{k}_0) |\mathbf{k}_0\rangle$$

dove il termine \hbar a dividere nasce dal fatto che $|a|^2$ in unità $\hbar \neq 1$ va rimoltiplicato per \hbar^{-2} , ma in queste unità la δ correttamente definita (dal momento che nell'esponenziale è sottinteso un \hbar^{-1}) è

$$\delta\left(\frac{\epsilon' - \epsilon}{\hbar}\right) = \hbar \delta(\epsilon' - \epsilon)$$

per la stessa proprietà della distribuzione delta utilizzata anche prima. Rendendo esplicite le normalizzazioni, otteniamo

$$\begin{aligned} dR(\mathbf{k}) &= \frac{2\pi}{\hbar} (2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2 |I(\mathbf{k}_0)|^2 |\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0) \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 |C(\mathbf{k})|^2} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |I(\mathbf{k}_0)|^2 |\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0) d^3\mathbf{k} \end{aligned}$$

cioè siamo riusciti a trovare una quantità indipendente dalla scelta della normalizzazione della base degli impulsi. Questo è un risultato da non trascurare: dobbiamo derivare delle quantità fisicamente osservabili, che devono essere indipendenti da come scegliamo di normalizzare una base sul continuo. Non esiste una normalizzazione giusta e una sbagliata, perché a ogni normalizzazione arbitraria corrisponde un riscaldamento connesso dello spazio delle fasi, e questo garantisce che il calcolo si possa svolgere in ogni caso, con un risultato tale da risultare sempre interpretabile come una probabilità.

È invece perfettamente sensata la proporzionalità al termine $|I|^2$: il rate di probabilità, essendo una probabilità di rivelazione per unità di tempo, deve dipendere dal numero di proiettili che inviamo contro il bersaglio, che qui viene rappresentato dall'intensità del fascio incidente.

18.4.4 La regola d'oro: il continuo

A questo punto possiamo sfruttare a piena potenza quanto derivato: se la normalizzazione che scegliamo non varia il risultato, possiamo derivare una forma esplicita per la sezione d'urto differenziale. Partiamo ricordando quanto detto in Eq. 14.6

$$\frac{dR}{d\Omega} = \frac{dN_i}{dt d\Omega} = |\mathbf{J}^{(i)}| \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

dove a sinistra abbiamo riportato il rate per unità di angolo solido, che sappiamo calcolare: ricordando infatti com'è definita la corrente di probabilità

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^{(i)} &= \text{Re} \left\{ \psi_1^*(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{v}} \psi_1(\mathbf{x}) \right\} \\ &= |I(\mathbf{k}_0)|^2 \text{Re} \left\{ e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}} \frac{-i\hbar \nabla}{m} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}} \right\} = |I(\mathbf{k}_0)|^2 \frac{\hbar \mathbf{k}_0}{m} \end{aligned}$$

Dunque nel calcolo di $d\sigma/d\Omega$ si cancella anche il termine $|I|^2$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{|\mathbf{J}^{(i)}|} \frac{dR}{d\Omega} = \frac{1}{d\Omega} \frac{2\pi m}{\hbar^2 k_0} |\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0) d^3\mathbf{k}$$

e questo è sensato: la sezione d'urto differenziale non deve dipendere dal numero di particelle che inviamo contro il bersaglio, perché rappresenta proprio la costante di proporzionalità tra il numero di particelle in entrata e il numero di particelle che nell'unità di tempo attraversano la superficie sottesa da $d\Omega$.

I risultati qui sviluppati in questo modo macchinoso permettono di trarre le seguenti conclusioni: dato un generico stato di partenza $|i\rangle$ di particella incidente, la quantità

$$dR(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k} | \hat{U} | i \rangle|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_0) d\Phi$$

rappresenta il rate di probabilità di misurare un impulso in uscita $\hbar \mathbf{k}$ indipendentemente dalla normalizzazione scelta per gli autostati dell'impulso. Si tratta della Regola d'Oro di Fermi (già incontrata in Sez. 11.4.3) applicata per transizioni dal continuo al continuo. Inoltre la quantità dR rappresenta anche un $d\sigma$ a meno di un riscaldamento dovuto al modulo della corrente di probabilità. Si ha in particolare che per flussi unitari il rate per unità di angolo solido rappresenta esattamente la sezione d'urto differenziale.

18.4.5 Verifica della consistenza: confrontiamo i due approcci

Confrontiamo adesso questo risultato con quello ottenuto tramite l'Approssimazione di Born: vogliamo quindi usare l'Eq. 14.14 per calcolare la sezione d'urto totale. Cominciamo riscrivendo la δ che vi compare come

$$\begin{aligned}\delta(\epsilon - \epsilon_0) &= \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}\right) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \delta(k^2 - k_0^2) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{\delta(k - k_0)}{2k_0} + \frac{\delta(k + k_0)}{2k_0} \right] = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \delta(k - k_0)\end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo usato l'ovvia condizione $k = |\mathbf{k}| > 0$ per assassinare il secondo addendo. Il differenziale di volume $d^3\mathbf{k}$ può essere scritto come

$$d^3\mathbf{k} = k^2 dk d\Omega$$

dove $d\Omega$ è esattamente il differenziale di angolo solido che compare nella sezione d'urto differenziale: ricordiamo che il nostro rate di probabilità è definito sugli stati in uscita che (asintoticamente) sono onde piane il cui vettore d'onda è diretto entro $d\Omega$. In questo modo dalla (14.15) si ottiene, ponendo tutto insieme

$$d\sigma = \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} |\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 \delta(k - k_0) dk$$

che integrato dà

$$\sigma = \int d\sigma = \left| \frac{\sqrt{2\pi} m}{\hbar^2} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \right|_{|\mathbf{k}|=|\mathbf{k}_0|}^2$$

Il risultato è coerente con l'ampiezza di scattering che avevamo trovato nella Sez. 14.4.

18.5 Sviluppo in onde parziali

Accenniamo adesso un terzo approccio che si può seguire per risolvere il problema di scattering elastico formulato nelle scorse sezioni. Non entreremo in tutti i dettagli matematici riguardanti le equazioni differenziali che compaiono nel procedimento, ma ci concentreremo sui risultati. L'obiettivo è sempre risolvere l'equazione alle autofunzioni (14.10), che riscriviamo per comodità come

$$\nabla^2 \psi + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) \right) \psi = 0$$

a cui dovremo imporre l'andamento asintotico

$$\psi_{r \rightarrow \infty} = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \phi)$$

L'idea è di sviluppare la funzione d'onda non come sovrapposizione di autostati dell'impulso, come nella precedente sezione, ma come sovrapposizione di autofunzioni $|E, l, m\rangle$ con $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l, m} a_{lm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

scrittura che è anche nota come espansione in onde parziali ³.

Dimostrazione. Partiamo da alcune proprietà generali della soluzione dell'equazione di Schrödinger in campo centrale. Come abbiamo visto in Sez. 6.3.2, se cerchiamo una soluzione fattorizzata $\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ dell'equazione $H\psi = E'\psi$ (i.e. se cerchiamo una soluzione che oltre ad essere autostato per \hat{H} , lo sia anche per \hat{L}^2 e per \hat{L}_z), allora la parte radiale deve soddisfare la seguente equazione dipendente da l :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E' - U(r)) R(r) = 0$$

Il Teorema di non degenerazione implica che, fissato l , questa equazione è risolta soltanto da un insieme discreto di funzioni $R_{E'l}$. In altri termini esiste un insieme discreto di energie $\{E'\}$ per cui questa equazione ammette soluzioni non identicamente nulle: battezziamo $R_{E'l}$ tale set di soluzioni. Osserviamo che in questo insieme ci sono in generale soluzioni relative a scattering anelastico, in cui le onde uscenti hanno impulso diverso (energia diversa) da quello incidente.

Noi stiamo studiando invece lo scattering elastico, per cui poniamo $E' \stackrel{!}{=} E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ e cerchiamo una soluzione R_{kl} corrispondente a questo specifico autovalore dell'energia ⁴ :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_{kl}(r) \right] - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{kl}(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - U(r) \right] R_{kl}(r) = 0$$

In questo senso k è un numero quantico fissato a priori dall'impulso delle particelle incidenti, e non ci interessa farlo variare. Per ogni l allora avremo una diversa soluzione R_{kl} . In questo modo abbiamo caratterizzato tutte le funzioni d'onda degli stati stazionari con energia $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ e con momento angolare (l, m) definito:

$$\psi_{klm}(r, \theta, \phi) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Tuttavia noi stiamo cercando funzioni ad energia definita, non ad energia e momento angolare definiti. Poiché la base $|l, m\rangle$ del momento angolare è completa nell'autospazio di energia E , una generica funzione con energia $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ potrà essere scritta come combinazione lineare delle funzioni trovate:

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l,m} a_{lm} \psi_{klm} = \sum_{l,m} a_{lm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Tuttavia, il fatto che il potenziale $U = U(r)$ sia centrale permette, data la simmetria assiale del problema, di considerare solo le onde parziali con $m = 0$ in quanto sono le uniche indipendenti dall'angolo azimutale ϕ :

$$\psi(r, \theta) = \sum_l a_l R_{kl}(r) Y_{l0}(\theta)$$

che può essere riscritta in termini dei polinomi di Legendre

$$\psi(r, \theta) = \sum_l a_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta)$$

dove le opportune normalizzazioni sono gestite dal set di costanti a_l .

In particolare l'Eq. (14.17) per la parte radiale R_{kl} , a seguito del cambio di variabile $u_{kl} = r R_{kl}$ diventa

$$\frac{d^2 u_{kl}}{dr^2} + [k^2 - V(r)] u_{kl} = 0$$

dove $V(r)$ è proporzionale al potenziale efficace del problema radiale

$$V(r) = \frac{2m}{\hbar^2} U_{\text{eff}}(r) = \frac{2m}{\hbar^2} U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}$$

A questo punto osserviamo che l'equazione (14.19), per r molto grande (formalmente $r \gg a$), dato che $V(r) \rightarrow 0$, ha la soluzione approssimata

$$\frac{d^2 u_{kl}}{dr^2} + k^2 u_{kl} \simeq 0 \quad \implies \quad u_{kl}(r) \sim A e^{ikr} + B e^{-ikr}$$

In particolare si dimostra che la scelta giusta delle costanti di normalizzazione corrisponde al seguente andamento asintotico

$$u_{kl}(r) \sim 2 \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right)$$

dove le δ_l sono fasi che dipendono dallo specifico potenziale $U(r)$ sotto esame, oltre che dall'indice l della funzione radiale considerata. Le δ_l prendono il nome di fasi di scattering. Pertanto, massaggiando un po' l'espressione,

$$\begin{aligned}
R_{kl}(r) &\sim \frac{2}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \\
&= \frac{1}{ir} \left[e^{i(kr - l\pi/2 + \delta_l)} - e^{-i(kr - l\pi/2 + \delta_l)} \right] \\
&= \frac{(-i)^l}{ir} e^{-i\delta_l} \left[e^{ikr} e^{2i\delta_l} - (-1)^l e^{-ikr} \right] \\
&= \frac{(-i)^l}{ir} e^{-i\delta_l} \left[e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} + (e^{2i\delta_l} - 1) e^{ikr} \right]
\end{aligned}$$

dove abbiamo sommato e sottratto e^{ikr} nell'ultimo passaggio, in modo tale da separare i termini che sarebbero presenti anche con $U = 0$ (cioè quando $\delta_l = 0$) dall'ultimo binomio, dovuto proprio alla presenza del potenziale. Allora inserendo R_{kl} in (14.18) si trova che l'andamento asintotico di ψ deve essere

$$\psi(r, \theta) \sim \sum_l a_l \frac{(-i)^l}{ir} e^{-i\delta_l} \left[e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} + (e^{2i\delta_l} - 1) e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta)$$

Se non ci fosse potenziale, sarebbe $U(r) \equiv 0$ e pertanto la soluzione all'equazione di Schrödinger sarebbe banalmente l'onda incidente imperturbata, $\psi(\mathbf{x}) = e^{ikz}$, che a grandi distanze ha l'andamento asintotico

$$e^{ikz} \sim \sum_l \frac{2l+1}{2ikr} \left[e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} \right] P_l(\cos \theta)$$

La richiesta che per $U = 0$ l'andamento sia proprio questo porta alla seguente condizione sui coefficienti di normalizzazione:

$$a_l \frac{(-i)^l}{ir} e^{-i\delta_l} \stackrel{!}{=} \frac{2l+1}{2ikr}$$

ossia

$$a_l = \frac{1}{2k} (2l+1) i^l e^{i\delta_l}$$

Fermiamoci un secondo e ricordiamo i passaggi importanti. Abbiamo espanso la funzione d'onda in onde parziali, trovando un andamento asintotico per grandi r di ogni funzione radiale R_{kl} . Il potenziale deve avere un effetto tale da ricondurre alla soluzione di particella libera se sostituiamo ovunque $U = 0$ (dunque $\delta_l = 0$). Questo impone che la normalizzazione da usare sia la normalizzazione di particella libera: in questo modo mettendo $U = 0$ troviamo precisamente la funzione d'onda (sviluppata in onde parziali) di un'onda piana propagante lungo z .

Pertanto la funzione d'onda può essere approssimata come

$$\begin{aligned}
\psi(r, \theta) &\sim \sum_l \frac{2l+1}{2ikr} P_l(\cos \theta) \left[e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} + (e^{2i\delta_l} - 1) e^{ikr} \right] \\
&= \sum_l \frac{2l+1}{2ikr} P_l(\cos \theta) \left[e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} \right] \\
&\quad + \sum_l \frac{2l+1}{2ikr} P_l(\cos \theta) \left[(e^{2i\delta_l} - 1) e^{ikr} \right] \\
&\stackrel{!}{=} e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}
\end{aligned}$$

La prima somma è per costruzione il corretto sviluppo asintotico di e^{ikz} , mentre nella seconda possiamo leggere l'ampiezza di scattering:

$$f(\theta) = \sum_l \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l} - 1)$$

In particolare le fasi δ_l prendono il nome di fasi di scattering, e la loro conoscenza permette di risalire alla sezione d'urto.

18.5.1 Scattering da particelle lente

Vogliamo studiare, alla luce della trattazione di questa sezione, il processo di scattering di un flusso incidente di particelle "lente", ossia nel limite

$$ka \ll 1$$

nelle stesse ipotesi usate finora, cioè di un potenziale approssimativamente nullo per $r > a$. Equivalentemente, studiamo il limite

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ll \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

cioè con energia molto più piccola del modulo tipico del potenziale nella regione di interazione.

Si può dimostrare che in questo limite la fase introdotta dal potenziale ha la seguente dipendenza da k

$$\delta_l = (c_l k)^{2l+1}$$

dove c_l è una costante moltiplicativa (opportunamente dimensionata) irrilevante per le considerazioni qualitative seguenti. Questo ci permette di sviluppare l'esponenziale nell'ampiezza di scattering

$$e^{2i\delta_l} - 1 \simeq 2i\delta_l = 2ic_l^{2l+1} k^{2l+1}$$

dunque

$$\begin{aligned} f(\theta) &\simeq \sum_l \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos \theta) 2ic_l^{2l+1} k^{2l+1} \\ &= \sum_l (2l+1) c_l^{2l+1} P_l(\cos \theta) k^{2l} \end{aligned}$$

Pertanto possiamo affermare che, nel limite $ka \ll 1$, cioè per k "piccolo" la somma è dominata dal termine con $l = 0$ (la cosiddetta onda s) mentre i termini successivi sono sempre più soppressi all'aumentare di l . Dal momento che

$$P_0(\cos \theta) = 1$$

consistentemente col fatto che $l = 0$ significa simmetria rotazionale, possiamo concludere che nel limite in cui possiamo trascurare i termini della somma superiori al primo

$$f(\theta) \simeq \text{costante}$$

cioè il processo è isotropo all'ordine dominante, e la sezione d'urto differenziale è la stessa in tutte le direzioni. Oltre a ciò, sempre nello stesso limite di particelle lente la sezione d'urto non dipende dall'energia delle particelle: infatti nell'espressione sopra riportata per $f(\theta)$, nel caso $ka \ll 1$ gli unici termini che sopravvivono in ciascuna somma sono quelli dove compare k^0 , quindi indipendenti dall'energia. Si può scrivere allora

$$\sigma = 4\pi\alpha^2$$

dove α è detta lunghezza di diffusione del processo.

NOTE

1. A dir la verità, $|\mathbf{q}|$ dipende anche da k . Questo è un fatto rilevante nell'analisi spettrale del problema, allo stesso modo in cui questa dipendenza è fondamentale ad esempio nel contesto dell'analisi dello Scattering Rayleigh.
2. Questo è solo un modo involuto di riferirsi, in coordinate cartesiane, a un impulso compreso, nello spazio degli impulsi, entro il "volume"

$$[k_x, k_x + dk_x] \times [k_y, k_y + dk_y] \times [k_z, k_z + dk_z]$$

3. Consideriamo inizialmente la serie di Fourier

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{k', l, m} a_{k' l m} R_{k' l}(r) Y_{l m}(\theta, \phi)$$

per la funzione d'onda $\psi(r, \theta, \phi)$, dove $R_{k' l}(r) Y_{l m}(\theta, \phi)$ sono le autofunzioni di un operatore autoaggiunto per cui sia possibile trovare lo spettro usando la separazione delle variabili. Tali autofunzioni fattorizzate contengono la dipendenza delle coordinate angolari solamente nelle armoniche sferiche $Y_{l m}(\theta, \phi)$. Questo permette di usare il teorema di non degenerazione sulla parte radiale, in modo che i possibili valori di k' siano discreti; in caso avverso, la somma deve essere sostituita con un integrale. I primi operatori che affiorano alla mente con uno spettro di questo tipo sono probabilmente gli hamiltoniani a potenziale centrale, ad esempio quello dell'atomo di idrogeno, dell'oscillatore armonico tridimensionale o di particella libera. In ogni caso

$$\{R_{k' l}(r) Y_{l m}(\theta, \phi)\}_{k' l m}$$

costituisce una base completa dello spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$. Ricordiamo infatti che, in virtù dell'estensione infinito-dimensionale del Teorema Spettrale, il set di autofunzioni di un operatore lineare autoaggiunto costituisce una base completa dello spazio funzionale. Inoltre, possiamo sempre considerare una base che sia anche ortogonale. Vogliamo far notare che la funzione d'onda $\psi(r, \theta, \phi)$ di cui scriviamo l'espansione può essere il frutto, a questo livello, di un processo di scattering contro un potenziale generico, anche privo della simmetria centrale.

Per espandere in serie la $\psi(r, \theta, \phi)$, potremmo dunque usare le autofunzioni dell'hamiltoniano dell'atomo di idrogeno o dell'oscillatore armonico tridimensionale: ovviamente esse costituirebbero una buona base, anche se forse non la più "comoda" per descrivere le autofunzioni dell'hamiltoniano che stiamo considerando adesso. In questo problema stiamo cercando delle funzioni con energia ben definita, poiché studiamo il caso di scattering elastico, dunque l'energia che osserviamo in uscita è l'energia relativa all'impulso del flusso incidente:

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = E' \stackrel{!}{=} E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Questo implica che nella serie di Fourier scritta appena sopra consideriamo un solo k' fissato:

$$a_{k' l m} \propto \delta_{k, k'}$$

quindi per il presente problema la serie si riduce almeno alla forma

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l, m} a_{l m} R_{k l}(r) Y_{l m}(\theta, \phi)$$

4. Ci potremmo chiedere cosa garantisca l'esistenza di una soluzione a questa equazione differenziale con il k dell'onda incidente. Si può giustificare la necessità dell'esistenza dello scattering elastico citando il teorema ottico:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0)$$

pertanto in ogni processo di scattering con sezione d'urto totale non nulla, l'ampiezza di scattering elastico in avanti deve essere non nulla: lo scattering elastico deve esistere. Il teorema ottico è una conseguenza dell'unitarietà del processo, cioè della conservazione della probabilità.

NOTE AGGIUNTIVE

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Quest'ultimo punto detto dal professore in classe è una semplificazione, infatti cercando è vero soltanto per potenziali regolari.

- Se l'operatore hamiltoniano di un sistema unidimensionale ammette uno spettro discreto, allora gli autostati sono non degeneri.
- Dati tre operatori \hat{A}, \hat{B} e \hat{C} legati dalla relazione

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

allora le rispettive varianze (calcolate sullo stato $|\psi\rangle$) sono legate dalla condizione

$$\Delta_A \Delta_B \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle|$$

- Teorema (Non degenerazione). Se l'operatore hamiltoniano di un sistema unidimensionale ammette uno spettro discreto, allora gli autostati sono non degeneri.

D'altra parte un moto limitato implica uno spettro discreto; ogni volta che il moto è limitato, si ha automaticamente la non-degenerazione. Nella dimostrazione del teorema è possibile richiedere che le funzioni d'onda si annullino all'infinito anche solo da un lato: basta che il moto sia limitato da una parte sola per ottenere uno spettro non degenerare.

- Una possibile interpretazione degli stati misti è come miscele statistiche: attribuiamo una probabilità classica w_n al fatto che il sistema occupi ciascuno degli stati $\{|n\rangle\}$ e calcoliamo i valori medi di conseguenza. Tuttavia, fissata ρ , c'è un'arbitrarietà nella scelta dei w_n e dei $\{|n\rangle\}$ per cui tale interpretazione non è univoca.

Per calcolare valori medi delle osservabili agenti solo su \mathcal{H}_1 si introduce l'operatore matrice densità ridotta $\rho^{(1)} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$, definita da

$$\rho^{(1)} = \text{Tr}_2 \rho$$

cioè l'operatore i cui elementi di matrice si ottengono da quelli di ρ sommando sugli elementi diagonali della base di \mathcal{H}_2 . In questo modo se O_1 è un operatore che agisce solo sul sottosistema 1, ossia $O_1 = O_1 \otimes \mathbb{I}_2$, allora

$$\langle O_1 \rangle = \text{Tr} \rho^{(1)} O_1$$

Anche la matrice densità ridotta è autoaggiunta, semidefinita positiva ed ha traccia unitaria.

Se uno stato di $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ è entangled, la matrice densità ridotta per il sottosistema 1 corrisponde ad uno stato misto per il sottosistema. Dunque se due sottosistemi hanno interagito per esempio a tempi $t < 0$, arrivando ad uno stato entangled, per tutti i tempi successivi e dopo aver separato i sottosistemi si conserva l'informazione sulla loro interazione precedente, per esempio sotto forma di correlazioni.