
Meccanica Quantistica

M. Agozzino, A. Biondo, D. Di Prima, E. Di Stefano

Indice

Prefazione	1
------------	---

CAPITOLO 0 Introduzione	3
-------------------------	---

PARTE I Matematica della Meccanica Quantistica

CAPITOLO 1 Spazi a dimensione finita	9
--------------------------------------	---

1.1 Notazione bra-ket di Dirac	9
1.2 Prodotto scalare euclideo	10
1.3 Componenti di un bra e di un ket	10
1.4 Funzionali e operatori lineari	11
1.5 Operatori hermitiani ed antihermitiani	12
1.6 Operatori unitari	14
1.7 Commutatore di operatori	14
1.8 Operatore esponenziale	15
1.9 Forma esponenziale degli operatori unitari	18

CAPITOLO 2 Il gruppo delle rotazioni	21
--------------------------------------	----

2.1 Gruppi e rappresentazioni	21
2.2 Gruppi continui	24
2.3 Algebra dei generatori	25
2.4 Gruppo $SO(2)$	27
2.5 Gruppo $SO(3)$	28
2.6 Gruppo $SU(2)$	30
2.7 Corrispondenza tra $SU(2)$ e $SO(3)$	31

CAPITOLO 3 Spazi di Hilbert	35
-----------------------------	----

3.1 Spazi di Hilbert separabili	35
3.2 Distribuzione delta di Dirac	39
3.2.1 Rappresentazioni della delta	40
3.2.2 Proprietà della delta	41
3.3 Trasformata di Fourier	42
3.4 Proprietà della trasformate	43
3.5 Calcoli di trasformate	45
3.6 Pacchetti di onde monocromatiche	47
3.7 Analisi di Fourier di un pacchetto d'onda	50
3.8 Trasformata di Fourier di una funzione di Green	55

PARTE II Meccanica Classica e Relatività

CAPITOLO 4 Richiami di meccanica classica	61
4.1 Formulazione lagrangiana della meccanica classica	61
4.2 Dallo spazio delle configurazioni allo spazio delle fasi	63
4.3 Parentesi di Poisson ed equazioni di Hamilton	67
4.4 Trasformazioni canoniche	69
4.5 Trasformazioni canoniche infinitesime	74
4.6 Trasformazioni attive e passive	76
4.7 Composizione di trasformazioni	78
4.8 Gruppi di trasformazioni di simmetria	80
4.9 Da Hamilton-Jacobi all'equazione di Schrödinger	80
 CAPITOLO 5 Formalismo della relatività ristretta	 83
5.1 Introduzione discorsiva	83
5.2 Intervallo invariante	84
5.3 Trasformazioni di Lorentz	85
5.4 Componenti dei quadritensori	89
 CAPITOLO 6 Meccanica relativistica	 93
6.1 Azione di una particella libera	93
6.2 Quadrimpulso	95
6.3 Dualismo onda-particella	96
 CAPITOLO 7 Formulazione covariante dell'elettromagnetismo	 99
7.1 Tensore del campo elettromagnetico	100
7.2 Invarianti del campo	103
7.3 Prima coppia delle equazioni di Maxwell	104
7.4 Invarianza di Gauge	104
7.5 Quadricorrente	105
7.6 L'azione del campo elettromagnetico	106
7.7 Equazioni di Lagrange di un campo	107
7.8 Seconda coppia delle equazioni di Maxwell	108
7.9 Osservazioni sulle onde elettromagnetiche	109

PARTE III Fondamenti della Meccanica Quantistica

CAPITOLO 8 I postulati della meccanica quantistica	113
8.1 Discussione dei postulati	113
8.1.1 Primo postulato	113
8.1.2 Secondo postulato	114
8.1.3 Terzo postulato	114
8.2 L'operatore posizione	118
8.3 Il principio di corrispondenza	120
8.4 L'operatore impulso	122
8.5 Traslazione degli impulsi	127
8.6 Relazioni di indeterminazione	130
8.7 Meccanica classica o meccanica quantistica	134
 CAPITOLO 9 Evoluzione temporale degli stati	 139
9.1 L'equazione di Schrödinger	139
9.2 Operatore evoluzione temporale	142

9.3 Operatore hamiltoniano	143
9.4 Dal propagatore alla formulazione <i>path-integral</i>	146
9.5 Propagatore della particella libera	149
9.5.1 Propagatore della particella libera con formalismo <i>path-integral</i> .	152

CAPITOLO 10 Limite classico 155

10.1 Dinamica dei valori medi	155
10.2 Rappresentazioni di Schrödinger e di Heisenberg	156
10.3 Teorema di Ehrenfest	158

CAPITOLO 11 Simmetrie e loro conseguenze 163

11.1 Trasformazioni di fase	163
11.2 Simmetrie e leggi di conservazione	164
11.3 Operatore parità	166

PARTE IV Applicazioni della Meccanica Quantistica

CAPITOLO 12 Problemi unidimensionali 171

12.1 Problemi fisici nel caso unidimensionale	171
12.2 Buca di potenziale a pareti infinite	173
12.3 L'equazione di continuità per la probabilità	174
12.4 Scattering unidimensionale	177
12.5 Alcuni teoremi	178
12.6 Gradino di potenziale	181
12.7 Buca di potenziale	183
12.8 Barriera di potenziale (effetto tunnel)	185

CAPITOLO 13 Oscillatore armonico 1D 187

13.1 Operatori distruzione e creazione	187
13.2 Autostati dell'oscillatore armonico	190
13.3 Oscillatore armonico nella rappresentazione di Heisenberg	193
13.4 Stati coerenti	194
13.4.1 Stati coerenti o stati quasi-classici	198

CAPITOLO 14 Momento angolare 199

14.1 Rotazioni in due dimensioni	199
14.2 Momento angolare e rotazioni in 3 dimensioni	203
14.2.1 Momento angolare totale e momento angolare orbitale	205
14.3 Problema agli autovalori	206
14.3.1 Forma di \vec{J} nella base degli autostati simultanei. Introduzione al momento angolare di spin	209
14.4 Autofunzioni del momento angolare orbitale	212
14.4.1 Proprietà sulla normalizzazione	216
14.4.2 Alcune armoniche sferiche: Stati S e P	217

CAPITOLO 15 Problemi a invarianza rotazionale 219

15.1 Particella con momento angolare in un campo magnetico uniforme . .	219
15.2 Rotatore rigido 3D	221
15.3 Problemi a simmetria centrale	222
15.4 Precessione del momento angolare	225
15.5 Oscillatore armonico 2D	227
15.5.1 Primo metodo	228

15.5.2	Secondo metodo	228
15.5.3	Terzo metodo: trattazione algebrica	230
15.6	Oscillatore armonico 3D	232
15.7	Buca di potenziale infinita 3D	232
15.8	Buca di potenziale finita 3D	233
CAPITOLO 16 Atomo idrogenoide		235
16.1	Introduzione al problema	235
16.2	Le autofunzioni	235
16.2.1	Normalizzazione della parte radiale	239
16.3	Densità di probabilità e densità di probabilità radiale	239
16.4	Valori medi dell'energia potenziale e cinetica negli autostati dell'atomo idrogenoide	241
16.4.1	Teorema del viriale	243
CAPITOLO 17 Spin		245
17.1	Evidenze sperimentali dello spin	246
17.1.1	Struttura fine delle linee spettrali	246
17.1.2	Effetto Zeeman	246
17.1.3	Esperimento di Stern e Gerlach	247
17.2	Teoria di Pauli dello spin	247
17.3	Proprietà dello spin	249
17.4	Descrizione non relativistica di una particella di spin $1/2$	250
17.4.1	Osservabili e vettori di stato	250
17.4.2	Calcolo della probabilità per una misura fisica	254
CAPITOLO 18 Composizione di momenti angolari		257
18.1	Momento angolare totale in meccanica classica	257
18.2	L'importanza del momento angolare totale in meccanica quantistica	257
18.3	Composizione di due particelle di spin $1/2$	260
18.3.1	Il problema	260
18.3.2	Gli autovalori di S_z	261
18.3.3	Diagonalizzazione di \vec{S}^2	262
18.4	Somma momenti angolari	263
18.4.1	Somma di momenti angolari totali $j_1 = 1$ e $j_2 = 3/2$	263
18.4.2	Composizione dei momenti angolari orbitale e di spin per uno stato con $l = 1$ e $s = 1/2$	264
CAPITOLO 19 Sistemi di particelle identiche		267
19.1	Il problema	267
19.1.1	Particelle identiche in meccanica classica	268
19.1.2	Particelle identiche in meccanica quantistica	269
19.2	Operatori di permutazione	271
19.2.1	Sistemi di due particelle	271
19.2.2	Sistemi di N particelle	275
19.3	Il postulato di simmetrizzazione	277
19.3.1	Costruzione dei ket fisici	278
19.3.2	Applicazione degli altri postulati	279
19.4	Discussione	280
CAPITOLO 20 Trasformazioni di gauge		281
20.1	Gauge invarianza del campo elettromagnetico	281

20.2	Gauge invarianza in meccanica classica	282
20.3	Invarianza di gauge in meccanica quantistica	283
20.4	Effetto Aharonov-Bohm	287
20.5	Osservazioni conclusive	289
20.6	Moto in un campo magnetico omogeneo: livelli di Landau	290

PARTE V Metodi di approssimazione

CAPITOLO 21	Teoria perturbativa indipendente dal tempo	299
21.1	Descrizione del metodo	299
21.2	Perturbazione di un livello non degenerare	302
21.3	Perturbazione di un livello degenerare	304
21.4	Oscillatore armonico 1D perturbato	307
21.4.1	Perturbazione lineare	307
21.4.2	Perturbazione quadratica	309
21.5	Oscillatore armonico 2D accoppiato	310
21.6	Effetto Stark	311
CAPITOLO 22	Il metodo variazionale	315
22.1	Descrizione del metodo	315
22.2	L'atomo di elio	317
CAPITOLO 23	Teoria perturbativa dipendente dal tempo	321
23.1	Descrizione del metodo	321
23.2	Soluzione approssimata dell'equazione di Schrödinger	322
23.3	Perturbazione costante	325
23.4	Relazione di indeterminazione energia-tempo	326
23.5	Perturbazione periodica	328
23.6	L'interazione di un atomo con un'onda elettromagnetica	329
Bibliografia		333

Prefazione

Il presente testo tratta gli argomenti fondamentali della meccanica quantistica che ogni buon fisico, per definirsi tale, dovrebbe conoscere e saper utilizzare. Gli argomenti trattati sono stati selezionati in base all'importanza che essi rivestono nella fisica moderna e alla loro utilità pratica. Il testo consta di cinque parti fondamentali.

La prima parte riguarda i fondamenti matematici della meccanica quantistica. Consigliamo allo studente una lettura abbastanza approfondita di questa parte, con particolare riguardo alla teoria dei gruppi che sarà di fondamentale importanza nella trattazione del momento angolare; tuttavia, qualora il corso di metodi matematici della fisica fosse stato fatto in maniera molto approfondita, lo studente è libero di saltare questa parte e consultarla solo all'occorrenza.

Nella seconda parte vengono richiamati dei concetti di meccanica classica e di relatività; anche in questo caso consigliamo una lettura approfondita dei contenuti, ma qualora tali argomenti fossero già stati trattati in maniera molto approfondita in altri corsi possono essere saltati.

Passiamo, quindi, alle ultime tre parti dove si tratta in dettaglio la meccanica quantistica. La terza parte riguarda i postulati della meccanica quantistica, le differenti rappresentazioni e formulazioni; la quarta parte vede lo studio di alcuni semplici problemi della meccanica quantistica, come l'oscillatore armonico e l'atomo idrogenoide; la quinta parte riguarda i metodi di approssimazione, come la teoria perturbativa e il metodo variazionale.

Argomenti particolarmente più avanzati, interessanti ma che possono essere saltati senza problemi, sono segnalati come approfondimenti dalla seguente notazione:

Approfondimento

Tali approfondimenti sono presenti solo di rado, con eccezione dei primi 3 capitoli in cui sono più frequenti.

Una versione sempre aggiornata del file è presente all'indirizzo

<https://github.com/danielediprima/teoricapdf>

Per eventuali errori e correzioni si prega di contattare gli autori all'indirizzo email

danielediprima17@gmail.com

Introduzione

Una teoria fisica, per essere definita tale, deve essere in accordo con i risultati degli esperimenti. Per descrivere un certo fenomeno, è possibile costruire tante teorie matematiche diverse (in disaccordo tra loro), ma solo una di esse sarà quella in accordo con la realtà.

Quindi, la Fisica è una *scienza sperimentale*. Anche se nel corso di Struttura della Materia verranno affrontati in maniera parallela gli argomenti di questo corso dal punto di vista fenomenologico, non bisogna farsi trarre in inganno, pensando che all'interno della Fisica trovino posto discipline diverse (teoriche e sperimentali). Semplicemente, a causa dell'enorme mole di conoscenza raggiunta in questo campo, gli "addetti ai lavori" devono necessariamente dividersi i compiti, dedicandosi chi agli esperimenti, chi alla formulazione di teorie, ma restando sempre e comunque dei fisici.

Il processo di acquisizione di dati sperimentali e formulazione di teorie è andato avanti nel tempo, portando alla nascita di teorie fisiche sempre più avanzate. Le prime teorie fisiche formulate riguardavano fenomeni che avvenivano a "scale umane" (lunghezze dell'ordine del metro e tempi dell'ordine del secondo). Da questo punto di vista, è addirittura possibile considerare la Geometria Euclidea come una delle prime teorie fisiche. Infatti, essa trae origine da dei postulati provenienti da evidenze sperimentali, e a partire da questi, con ragionamenti logici, si dimostrano proposizioni e teoremi vari. Questi teoremi vanno poi testati sperimentalmente attraverso delle misure; ad esempio posso misurare i due cateti di un triangolo rettangolo e grazie al teorema di Pitagora prevedere la lunghezza dell'ipotenusa, ma è possibile anche misurare l'ipotenusa stessa e confrontarla con la predizione teorica, verificando che essa sia in accordo.

Inoltre, non è raro, nella storia di questa disciplina, che degli oggetti matematici siano stati costruiti specificatamente per far parte dell'apparato matematico di certe teorie fisiche: basti pensare a Newton, il quale piantò i primi semi dell'Analisi Matematica per nutrire la sua teoria della gravitazione, in mirabile accordo con i dati sperimentali dell'epoca (ad esempio le leggi di Keplero).

Tornando alle teorie fisiche della "scala umana", la teoria della Meccanica Classica (di cui la gravitazione di Newton fa parte) è in perfetto accordo con tutti gli esperimenti che si possono eseguire in questi contesti. Quindi, essa risulta una teoria fisica assolutamente consolidata. Allora, perché c'è stata la necessità di formulare altre teorie fisiche?

Con il passare del tempo e l'avanzare della tecnologia, è stato possibile eseguire esperimenti sempre più sofisticati. In particolare, si è notato che a velocità prossime a quelle della luce la Meccanica Classica smette di funzionare. Ciò non significa in alcun modo che la Meccanica Classica

sia “sbagliata”, ma semplicemente che essa non è adeguata a descrivere la realtà in determinati contesti sperimentali.

Allora, è stata formulata la Meccanica Relativistica, poggiante sui postulati della Relatività Ristretta. Va notato come questa non sia assolutamente in disaccordo con la precedente teoria, ma anzi, nel limite di basse velocità essa si riduce esattamente alla Meccanica Classica (non potrebbe essere diversamente visto che la Meccanica Classica è stata ampiamente testata nel suo range di validità).

Allo stesso modo, quando all’inizio del ’900 sono stati esaminati sistemi molto piccoli (scale microscopiche), si è visto che le leggi della Meccanica Classica cessavano di essere valide.

Ricordiamo che, alla fine del 1800, l’Elettromagnetismo era stato già formulato e si conoscevano le equazioni di Maxwell, le quali erano in disaccordo con la Meccanica Classica (basti pensare che la forza di Lorentz dipende dalla velocità della carica e la velocità, e dunque la forza, dipendono dal sistema di riferimento inerziale). Inoltre, secondo le trasformazioni di Galileo, la velocità della luce era dipendente dall’osservatore, fenomeno che non era osservato sperimentalmente (tutte le misure effettuate portavano a pensare che la velocità della luce fosse costante per tutti gli osservatori). Queste incongruenze sono state risolte con la Meccanica Relativistica.

Adesso, consideriamo l’equazione di D’Alembert:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \nabla^2 \psi = 0.$$

Essa è un’equazione lineare e omogenea, e dal punto di vista matematico vale il principio di sovrapposizione (una combinazione lineare di soluzioni è ancora soluzione). Ciò induce a pensare che questa equazione descriva le onde elettromagnetiche nel vuoto o in generale dei processi ondulatori. Infatti, i processi che noi chiamiamo ondulatori hanno proprio la caratteristica di soddisfare il principio di sovrapposizione: delle infinite soluzioni possibili, quella che si realizza fisicamente è stabilita dalle condizioni al contorno del problema. Dunque, possiamo affermare che le soluzioni dell’equazione di D’Alembert, o equazione delle onde, formano uno spazio vettoriale, e ogni elemento di questo spazio rappresenta un possibile stato del sistema che si sta indagando.

All’inizio del ’900, si è scoperto che questa caratteristica non è una prerogativa degli oggetti che noi chiamiamo “onde”, poiché si è visto che qualunque particella (protone, elettrone, ecc.) può essere descritta da un’onda, che soddisfa il principio di sovrapposizione. Ciò va ovviamente contro la nostra intuizione e non è previsto dalla Meccanica Classica. Si noti bene che questo fenomeno si osserva soltanto quando l’oggetto è microscopico, cioè quando le grandezze in gioco sono piccole rispetto a una certa costante della natura (costante di Planck). Quando le grandezze in gioco sono grandi rispetto alla medesima costante, questo effetto di sovrapposizione non si osserva più. Proprio per questo motivo, il principio di sovrapposizione non fa parte del nostro senso comune e dei fenomeni che avvengono alle “scale umane”.

Questo fenomeno è stato osservato grazie a delle esperienze di diffrazione e interferenza. In particolare, se supponiamo di mandare dei raggi X, che sono onde elettromagnetiche, su un reticolo cristallino, è possibile osservare certe figure di diffrazione, dovute alla validità del principio di sovrapposizione. Si è notato che, utilizzando dei fasci di elettroni al

posto dei raggi X, vengono ottenute le medesime figure di diffrazione. Quindi, gli elettroni si comportano in questo contesto come delle onde elettromagnetiche e possono essere descritte da delle onde.

D'altra parte, si è visto che le onde elettromagnetiche possono essere descritte per mezzo di particelle, che chiamiamo fotoni, che si muovono in linea retta. Quindi, le onde elettromagnetiche sono delle onde o delle particelle? Gli effetti di diffrazione e interferenza ci fanno propendere per la prima opzione. Eppure, quando le onde elettromagnetiche vengono assorbite o emesse, è messa in evidenza la loro natura corpuscolare (effetto fotoelettrico).

In sostanza, si è visto che le onde elettromagnetiche sono fatte da fotoni e gli elettroni sono descrivibili da onde. Si noti che l'equazione a cui obbedisce l'onda associata è un elettrone non è l'equazione di D'Alembert, pur restando comunque un'equazione lineare e omogenea e continuando a valere il principio di sovrapposizione. Allora, esisterà uno spazio vettoriale degli stati fisici anche per gli elettroni, i protoni, ecc.

Nasce così la Meccanica Quantistica.

Ribadiamo che gli effetti ondulatori sono osservabili soltanto alla scala microscopica. Tornando alla scala macroscopica, un calcolo eseguito con la Meccanica Quantistica deve dare lo stesso risultato della Meccanica Classica, e non può essere altrimenti.

Quindi, una teoria fisica più avanzata non rimpiazza mai una teoria fisica precedente che è stata riconosciuta valida, ma ne estende semplicemente la validità a nuovi ambiti. In un certo senso, la teoria fisica è "unica", e viene poi declinata nei vari contesti di applicazione (non è ammissibile che ci siano due teorie fisiche discordanti tra loro).

La Meccanica Quantistica è una teoria ampiamente validata, dato che dall'inizio del '900 non c'è stato mai neanche un esperimento in contraddizione con essa. Quindi, anche se può andare contro la nostra intuizione, bisogna accettare il fatto che la realtà sembra essere fatta così. Ciò significa che se un elettrone è descrivibile da un'onda, non è possibile definirne la posizione, visto che va immaginato come un oggetto diffuso nello spazio. Così come non possiamo definire la posizione di un'onda del mare, così non possiamo pretendere di definire quella di un elettrone: la Meccanica Quantistica non è deterministica.

Ovviamente, la natura ondulatoria dell'elettrone si manifesta principalmente in contesti microscopici. Infatti, in Fig.1 è possibile osservare un possibile grafico dell'onda associata ad un elettrone (osservato ad esempio al microscopio) nello spazio, ad un istante fissato. Invece, se supponiamo di considerare la medesima onda, osservandola però da maggiore distanza, vedremo come l'oggetto sarà sempre più ragionevolmente descrivibile come una particella, in quanto localizzato in una zona molto ristretta dello spazio, come in Fig.2. In conclusione, possiamo affermare che il fisico teorico si occupa di estendere la validità della teoria agli ambiti di applicazione nei quali le osservazioni sperimentali non sono adeguatamente in accordo con la teoria attuale. Nel momento in cui non ci sono nuovi input da parte della fenomenologia, il lavoro del fisico teorico diventa quello di costruire teorie matematiche, che diventeranno teorie fisiche solo nel momento in cui verranno validate dagli esperimenti. Inoltre, va precisato il fatto che il fisico teorico non si preoccupa eccessivamente del rigore matematico, derogando questo compito al fisico matematico, il quale si occupa di costruire delle solide basi formali su cui far poggiare

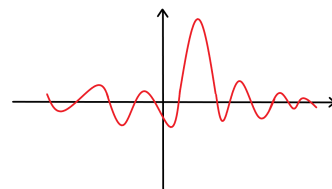


Figura 1: Funzione d'onda di un elettrone

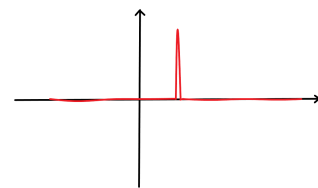


Figura 2: Funzione d'onda di un elettrone, ma da molto lontano

le teorie fisiche.

PARTE I
Matematica della Meccanica
Quantistica

Spazi a dimensione finita

CAPITOLO

1

Introduzione al capitolo

Riprendiamo in questo capitolo alcuni elementi di algebra lineare che saranno utili nel resto del corso, in particolar modo per parlare di spazi di Hilbert, in cui estenderemo i concetti qui discussi. Sebbene il capitolo possa sembrare un'inutile ripetizione del corso di algebra lineare o di metodi matematici della fisica, esso è utile per iniziare a familiarizzare con la notazione di Dirac dei *ket* e *bra* che sarà usata nell'intero corso. Inoltre, al termine del capitolo vengono introdotti nuovi concetti quali il commutatore (§1.7) e le funzioni di operatore (§1.8 e §1.9).

1.1	Notazione bra-ket di Dirac . . .	9
1.2	Prodotto scalare euclideo . . .	10
1.3	Componenti di un bra e di un ket	10
1.4	Funzionali e operatori lineari .	11
1.5	Operatori hermitiani ed antihermitiani	12
1.6	Operatori unitari	14
1.7	Commutatore di operatori . .	14
1.8	Operatore esponenziale	15
1.9	Forma esponenziale degli operatori unitari	18

1.1 Notazione bra-ket di Dirac

Sia V un \mathbb{C} -spazio vettoriale di dimensione finita N . In questo corso adotteremo la notazione di Dirac, in cui un vettore di V è denotato con

$$|v\rangle \in V$$

ed è denominato *ket*, mentre il vettore dello spazio duale V^* ⁽¹⁾ corrispondente a $|v\rangle$ è denotato con

$$\langle v| \in V^*$$

e prende il nome di *bra*. Non c'è ambiguità nell'utilizzo di questa notazione quando ad ogni vettore in V corrisponde un unico covettore in V^* e viceversa, cioè quando i due spazi sono canonicamente isomorfi. Questo isomorfismo è garantito dalla presenza di un prodotto scalare (non degenerare) in V .

E' una convenzione comune, fra testi di fisica in cui si adotta la notazione di Dirac, riferirsi all'elemento n -esimo di una base di V direttamente come $|n\rangle$. Quindi, invece di scrivere

$$|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_N\rangle \quad |v\rangle = \sum_{n=1}^N v_n |e_n\rangle$$

spesso anche noi scriveremo

$$|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle \quad |v\rangle = \sum_{n=1}^N v_n |n\rangle$$

Di solito, ma non necessariamente, per distinguere due ket della stessa base useremo due indici diversi, come $|n\rangle$ e $|k\rangle$, mentre per distinguere due ket di basi diverse mettiamo un apice, come $|n\rangle$ e $|n'\rangle$.

Una trattazione più completa della notazione di Dirac può essere consultata nel primo capitolo del Sakurai [SNF14].

⁽¹⁾ Ricordiamo che V^* è l'insieme dei funzionali lineari da V in \mathbb{C} , e anch'esso forma uno spazio vettoriale della stessa dimensione di V .

Si badi al fatto che alcuni autori come il Sakurai [SNF14] utilizzano invece la convenzione inversa.

1.2 Prodotto scalare euclideo

Definizione 1.1. Definiamo un prodotto scalare euclideo (o hermitiano) in V come un'applicazione

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C} \\ (|v\rangle, |w\rangle) \mapsto \langle v|w\rangle \in \mathbb{C}$$

che goda delle seguenti proprietà (denotando con z^* il complesso coniugato di z) $\forall v, w, z \in V$ e $\forall a, b \in \mathbb{C}$:

Linearità a destra	<i>PS 1</i>	$\langle v aw + bz\rangle = a \langle v w\rangle + b \langle v z\rangle$
Antilinearità a sinistra	<i>PS 2</i>	$\langle av + bw z\rangle = a^* \langle v z\rangle + b^* \langle w z\rangle$
Hermitianità	<i>PS 3</i>	$\langle v w\rangle = \langle w v\rangle^*$
Definito positivo	<i>PS 4</i>	$\langle v v\rangle \geq 0 \quad \text{e} \quad \langle v v\rangle = 0 \iff v\rangle = 0_V$

Il simbolo $\langle v|w\rangle$ prende il nome di *braket*.

Osservazione. La *PS 2* può dedursi da *PS 1* e *PS 3*, mentre grazie a *PS 3* e *PS 4* siffatto prodotto scalare può indurre una norma in quanto è un numero reale non negativo il prodotto $\langle v|v\rangle \in [0, +\infty[$. La proprietà $\langle v|v\rangle = 0$ se e solo se $|v\rangle$ è il vettore nullo è detta *non degenerazione* del prodotto scalare, e garantisce l'isomorfismo canonico tra V e V^* .

Dato che, quando viene fissata una base, V è isomorfo a \mathbb{C}^N , d'ora in avanti assumeremo sempre $V = \mathbb{C}^N$ e utilizzeremo il prodotto scalare euclideo

$$\langle v|w\rangle = \sum_{n=1}^N (v_n^*) w_n \quad (1.1)$$

e da qui si deduce la comodità della notazione di Dirac. In \mathbb{C}^N i ket sono vettori colonna, mentre i bra sono vettori riga coniugati:

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix} \quad \langle v| = (v_1^* \quad \dots \quad v_N^*)$$

quindi la Eq.(1.1) è un prodotto bra-ket riga per colonna; indicando con il simbolo *daga* o *dagger* \dagger la trasposta coniugata di una matrice, allora

$$\langle v|w\rangle = |v\rangle^\dagger |w\rangle = (v_1^* \quad \dots \quad v_N^*) \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_N \end{pmatrix} = \sum_{n=1}^N (v_n^*) w_n \quad (1.2)$$

1.3 Componenti di un bra e di un ket

Sia $\{|n\rangle\} \subset \mathbb{C}^N$ una base ortonormale. Allora scrivendo

$$|z\rangle = \sum_n z_n |n\rangle \quad \langle z| = \sum_n z_n^* \langle n| \quad (1.3)$$

se moltiplichiamo scalarmente la prima equazione per $\langle n' |$ troviamo, per ortonormalità:

$$\langle n' | z \rangle = \sum_n z_n \langle n' | n \rangle = z_{n'}$$

e analogamente, moltiplicando per $|n'\rangle$ la seconda della Eq.(1.3) si ha:

$$z_{n'}^* = \langle z | n' \rangle$$

ossia le componenti di $|z\rangle$ e $\langle z|$ rispetto alla base scelta sono dei prodotti scalari. Possiamo riscrivere le Eq.(1.3) quindi come

$$|z\rangle = \sum_n \langle n | z \rangle |n\rangle \quad \langle z| = \sum_n \langle z | n \rangle \langle n|$$

Da entrambe queste ultime equazioni, è chiaro che è un'identità l'operatore

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$$

Operatore identità

denominato *operatore identità* in quanto lascia invariati i ket e i bra. Quest'ultima uguaglianza è nota come relazione di completezza nel contesto degli spazi di Hilbert. Ogni operatore

$$|n\rangle \langle n|$$

è invece detto *operatore proiezione*. Esplicitamente

$$|1\rangle \langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle \langle 2| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

Con la scrittura $|a\rangle \langle b| = |a\rangle \langle b|^\dagger$ stiamo indicando quello che in algebra lineare si chiama prodotto diadico o prodotto esterno $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})_{ij} = a_i b_j$.

e così via, $|n\rangle \langle n|$ è una matrice $N \times N$ con un solo 1 sull'elemento n -esimo della diagonale e zeri altrove. La somma di tutti i proiettori è quindi la matrice identità.

1.4 Funzionali e operatori lineari

Un funzionale lineare su \mathbb{C}^N è un'applicazione lineare $F : \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}$. Fissata una base di ket $\{|n\rangle\}$, un funzionale lineare F è completamente determinato dalle sue componenti F_n rispetto alla base scelta: infatti, scrivendo $|z\rangle = \sum_n z_n |n\rangle$, per linearità si ha

$$F(|z\rangle) = \sum_n \underbrace{F(|n\rangle)}_{F_n} z_n = \sum_n F_n z_n$$

Componenti di un funzionale lineare

dove abbiamo posto per definizione $F_n := F(|n\rangle)$. Notiamo che l'ultimo membro è il prodotto scalare tra $|F^*\rangle = (F_1^*, \dots, F_N^*)$ e $|z\rangle$:

$$F(|z\rangle) = \langle F^* | z \rangle$$

può così costruirsi un isomorfismo canonico tra \mathbb{C}^N e il suo duale $(\mathbb{C}^N)^*$; ogni bra $\langle w|$ può intendersi come un funzionale lineare $\langle w| : \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}$ di legge

$$\langle w| (|z\rangle) = \langle w | z \rangle = \sum_n w_n^* z_n$$

Significato funzionale dei bra

Anche qui notiamo la comodità della notazione di Dirac.

Consideriamo adesso un operatore lineare A , definito come un'applicazione

$$A : \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}^N$$

Preso un vettore $|z\rangle \in \mathbb{C}^N$ l'operatore A agisce su di esso come

$$A|z\rangle = |w\rangle \in \mathbb{C}^N$$

Similmente a quanto accade per un funzionale lineare, fissata una base di ket $\{|n\rangle\}$ l'operatore A è completamente determinato dalle sue componenti A_{nk} (che formano una matrice) rispetto alla base scelta: infatti per linearità

Componenti di un operatore lineare

$$\langle w|A|z\rangle = \sum_n w_n^* \langle n|A|z\rangle = \sum_n \sum_k w_n^* \underbrace{\langle n|A|k\rangle}_{A_{nk}} z_k = \sum_n \sum_k w_n^* A_{nk} z_k$$

dove nell'ultima uguaglianza abbiamo definito $A_{nk} := \langle n|A|k\rangle$.

In sintesi, quando fissiamo una base possiamo rappresentare un funzionale lineare tramite una vettore riga, mentre un operatore lineare è rappresentabile tramite una matrice.

Problema agli autovalori

Sia A un operatore lineare; diremo problema agli autovalori il problema della ricerca di quei particolari $\lambda \in \mathbb{C}$ per cui esiste un vettore $|v\rangle \in \mathbb{C}^N$ non nullo tale che

$$A|v\rangle = \lambda|v\rangle$$

Questo sistema ammette una soluzione non banale se e solo se

$$\det(A - \lambda \mathbf{1}) = 0$$

che è un'equazione algebrica, detta equazione caratteristica, a coefficienti complessi di grado N in λ , dove N è l'ordine della matrice A e $\mathbf{1}$ è la matrice identità. Per il teorema fondamentale dell'algebra, esiste almeno una soluzione complessa λ_1 di questa equazione, dunque A ammette sempre almeno un autovalore ed un autoket. Nel caso di una seconda radice coincidente $\lambda_2 = \lambda_1$, allora potrebbero esserci due autovettori non linearmente indipendenti e non potrebbe essere possibile costruire una base di autovettori di A .

Considereremo adesso tre tipi importanti di operatori, quelli *hermitiani*, quelli *antihermitiani* e quelli *unitari*, che ammettono sempre una base ortonormale di autovettori rispetto alla quale gli operatori assumono forma diagonale⁽²⁾.

1.5 Operatori hermitiani ed antihermitiani

Dato un operatore A , in generale il duale del ket $A|v\rangle$ non è il bra $\langle v|A$. Definiamo l'operatore aggiunto di A come l'unico operatore A^\dagger tale che $\langle v|A^\dagger = (A|v\rangle)^\dagger$ sia il duale di $A|v\rangle$. Per ogni coppia di vettori $|v\rangle, |w\rangle$ deve quindi aversi

$$(\langle w|A|v\rangle)^\dagger = \langle v|A^\dagger|w\rangle$$

Operatore aggiunto

(2) Questi tre tipi di operatori fanno parte della più generale classe degli operatori normali, ossia operatori che commutano con il loro aggiunto. Una delle forme più generali del teorema spettrale vale per ogni operatore normale.

Un operatore A si dice *hermitiano* se è uguale al suo aggiunto, ossia se

$$A^\dagger = A$$

Operatore hermitiano

Per tale operatore vale un'analogia proprietà delle matrici simmetriche:

$$(\langle w|A|z\rangle)^\dagger = \langle z|A|w\rangle \quad (1.4)$$

Diciamo invece che A è *anti-hermitiano* se $A^\dagger = -A$. Possiamo scomporre ciascun operatore nella sua parte hermitiana e nella sua parte anti-hermitiana, cioè

$$A = \frac{A + A^\dagger}{2} + \frac{A - A^\dagger}{2}$$

Proposizione 1.2 (Autovalori di un operatore hermitiano). Gli autovalori di un operatore hermitiano sono reali.

Dimostrazione. Sia $|w\rangle$ un autoket per A , dunque deve essere $A|w\rangle = \lambda|w\rangle$ con $\lambda \in \mathbb{C}$. Moltiplicando scalarmente per $|w\rangle$ si ottiene:

$$\langle w|A|w\rangle = \lambda \langle w|w\rangle$$

Prendendo l'aggiunto di ambo i membri, dato che $A^\dagger = A$ abbiamo:

$$\lambda^* \langle w|w\rangle = \langle w|A|w\rangle^\dagger \stackrel{(1.4)}{=} \langle w|A|w\rangle = \lambda \langle w|w\rangle$$

Dunque si ha:

$$\lambda^* \langle w|w\rangle = \lambda \langle w|w\rangle \iff \lambda^* = \lambda \iff \lambda \in \mathbb{R}$$

□

Alla stessa maniera si conclude che se A è antihermitiano, allora i suoi autovalori sono numeri immaginari puri in quanto devono soddisfare $\lambda^* = -\lambda$.

Teorema 1.3 (Teorema spettrale per gli operatori (anti) hermitiani). Per ogni operatore hermitiano ed antihermitiano esiste una base ortonormale di autoket. *Pertanto*, in tale base l'operatore è diagonale e ha tutti gli autovalori sulla diagonale.

Mostriamo in che senso se un operatore A ammette una base ortonormale di autoket, allora ha forma diagonale in tale base: ricordando che se la base $\{|n\rangle\}$ è ortonormale allora vale $\mathbf{1} = \sum_n |n\rangle \langle n|$, e quindi possiamo scrivere

$$A = \sum_n A |n\rangle \langle n| = \sum_n \lambda_n |n\rangle \langle n| = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_N \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

Rappresentazione spettrale di un operatore hermitiano

Chiameremo la Eq.(1.5) *rappresentazione spettrale* di A . Se A è hermitiano, allora ogni λ_n è un numero reale, mentre se A è antihermitiano allora ogni λ_n è un numero immaginario puro.

1.6 Operatori unitari

Un operatore U è detto *unitario* se il suo aggiunto è uguale al suo inverso, cioè

Operatore unitario

$$U^\dagger = U^{-1}$$

Tali operatori sono ben studiati in quanto inducono le più generali trasformazioni tra due basi ortonormali: infatti, supponendo di passare dalla base $\{n\}$ a $\{n'\}$ tramite un operatore qualunque U , cioè

$$|n'\rangle = U |n\rangle$$

allora supponendo $\{n'\}$ ortonormale si ha

$$\delta_{nk} = \langle n' | k' \rangle = \langle n | U^\dagger U | k \rangle$$

e affinché valga anche $\delta_{nk} = \langle n | k \rangle$ dev'essere $U^\dagger U = \mathbb{1}$, cioè U è unitario. Vale ovviamente anche il viceversa, cioè se U è unitario allora trasforma una base ortonormale in un'altra base ancora ortonormale. Ciò è una conseguenza del fatto che U conserva il prodotto scalare:

$$\langle w' | z' \rangle = \langle w | U^\dagger U | z \rangle = \langle w | z \rangle$$

e quindi conserva anche la norma $\|z'\|^2 = \langle z | z \rangle = \|z\|^2$.

Proposizione 1.4 (Autovalori di un operatore unitario). Gli autovalori di un operatore unitario sono numeri complessi di modulo 1.

Dimostrazione. Sia $|z\rangle$ un autoket di U :

$$U |z\rangle = \lambda |z\rangle$$

Moltiplicando scalarmente per $|z\rangle$ si ottiene

$$\langle z | z \rangle = \langle z | U^\dagger U | z \rangle = \lambda^* \lambda \langle z | z \rangle$$

da cui segue che $\lambda^* \lambda = |\lambda|^2 = 1$ □

Ciò significa che possiamo rappresentare ogni autovalore dell'operatore unitario U in forma esponenziale come

$$\lambda_n = e^{i\theta_n} \quad \theta_n \in [0, 2\pi]$$

Teorema 1.5 (Teorema spettrale per gli operatori unitari). Per ogni operatore unitario esiste una base ortonormale di autoket. *Pertanto*, in tale base l'operatore è diagonale e ha tutti gli autovalori sulla diagonale.

In base a quest'ultimo teorema, anche ogni operatore unitario U ammette una rappresentazione spettrale ed in particolare ha la forma

$$U = \begin{pmatrix} e^{i\theta_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{i\theta_2} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & e^{i\theta_n} \end{pmatrix}$$

Rappresentazione spettrale di
un operatore unitario

1.7 Commutatore di operatori

Definizione 1.6. Di fondamentale importanza sarà il concetto di commutatore di due operatori lineari A e B , definito come

$$[A, B] = AB - BA \quad (1.6)$$

Il commutatore di operatori possiede delle caratteristiche formali che ricordano quelle delle parentesi di Poisson, come possiamo vedere nella seguente proposizione

Proposizione 1.7 (Proprietà del commutatore). Siano A, B, C operatori lineari. Allora valgono le seguenti proprietà:

1. $[A, B] = -[B, A]$
2. $[A, aB] = a[A, B] = [aA, B] \quad a \in \mathbb{C}$
3. $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$ e idem a sinistra
4. $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$
5. $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$

Antisimmetria

Omogeneità a destra e a sinistra

Additività a destra e a sinistra

Regola di Leibniz

Identità di Jacobi

In meccanica quantistica saranno particolarmente utili i seguenti fatti.

Teorema 1.8 (Teorema di commutazione). Siano A e B due operatori hermitiani. Allora $[A, B] = 0$ se e solo se esiste una base ortonormale di autoket comuni ad A e B .

Dimostrazione. Dimostrazione Shankar da tradurre □

Proposizione 1.9 (Commutatore di operatori hermitiani). Il commutatore di due operatori A, B hermitiani è antihermitiano, quindi possiamo sempre scrivere $[A, B] = iC$ con C hermitiano.

Dimostrazione. Siano A, B hermitiani ($A^\dagger = A$ e $B^\dagger = B$) e calcoliamo l'aggiunto del loro commutatore:

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = BA - AB = -[A, B]$$

quindi il commutatore è antihermitiano. Ogni operatore antihermitiano può scriversi nella forma iC con C hermitiano, quindi possiamo porre $[A, B] = iC$, infatti $[A, B]^\dagger = -iC^\dagger = -iC = -[A, B]$. □

1.8 Operatore esponenziale

Sia $f(z)$ una funzione analitica in un certo cerchio di raggio r e di centro $z_0 = 0$. Allora $f(z)$ è espandibile in serie di Taylor in tale cerchio

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k!} f^{(k)}(0) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$$

Funzioni di operatori

M. Agozzino, A. Biondo,
D. Di Prima, E. Di Stefano

Se A è un operatore lineare su uno spazio di Banach (come \mathbb{C}^n o uno spazio di Hilbert) con $\|A\| < r$ allora converge la serie di operatori

$$f(A) := \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k$$

che è ancora un operatore, non necessariamente dello stesso tipo di A . Diciamo così che $f(A)$ è una *funzione di operatori*.

L'ultima serie, in linea di principio, è sufficiente per calcolare $f(A)$. In pratica, se A ammette una rappresentazione spettrale, allora è più comodo calcolare $f(A)$ in tale rappresentazione. Vale la seguente proposizione.

Proposizione 1.10. Sia A un operatore e supponiamo ammetta una base ortonormale di autoket $\{|n\rangle\}$, e sia $f(A)$ una funzione di questo operatore. Indicando con λ_n l'autovalore associato a $|n\rangle$, allora $f(A)$ si può scrivere come somma di proiettori su tali autoket:

$$f(A) = \sum_n |n\rangle f(\lambda_n) \langle n|$$

quindi in tale rappresentazione $f(A)$ è diagonale.

Dimostrazione. Per ipotesi, A può scriversi come

$$A = A \underbrace{\sum_n |n\rangle \langle n|}_{\mathbb{1}} = \sum_n A |n\rangle \langle n| = \sum_n \lambda_n |n\rangle \langle n| = \sum_n |n\rangle \lambda_n \langle n|$$

In tale rappresentazione è immediato calcolare A^2

$$A^2 = \sum_{n,k} |n\rangle \lambda_n \underbrace{\langle n|k\rangle}_{\delta_{nk}} \lambda_k \langle k| = \sum_n |n\rangle \lambda_n^2 \langle n|$$

e in generale si avrà

$$A^k = \sum_n |n\rangle \lambda_n^k \langle n|$$

Possiamo così riscrivere lo sviluppo in serie di $f(A)$:

$$\begin{aligned} f(A) &= \sum_{k=0}^{\infty} c_k A^k = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \sum_n |n\rangle \lambda_n^k \langle n| \\ &= \sum_n |n\rangle \underbrace{\sum_{k=0}^{\infty} c_k \lambda_n^k}_{f(\lambda_n)} \langle n| = \sum_n |n\rangle f(\lambda_n) \langle n| \end{aligned}$$

□

Concludiamo quindi che se

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

allora

$$f(A) = \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & & & \\ & f(\lambda_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & f(\lambda_n) \end{pmatrix}$$

Consideriamo la funzione esponenziale e^z , analitica in \mathbb{C} . Chiamiamo *operatore esponenziale* e^A la funzione di operatori

$$e^A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} = \mathbb{1} + A + \frac{1}{2}A^2 + \dots$$

Operatore esponenziale

Se A ammette una rappresentazione spettrale, allora

$$e^A = \sum_n |n\rangle e^{\lambda_n} \langle n|$$

o in forma matriciale

$$e^A = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1} & & & \\ & e^{\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{\lambda_n} \end{pmatrix}$$

Una proprietà importante dell'esponenziale di un operatore è che $e^B e^A \neq e^A e^B \neq e^{A+B}$, perché in generale gli operatori non commutano a differenza di quanto accade per i numeri complessi. Tuttavia, se A e B commutano, allora $e^B e^A = e^A e^B = e^{A+B}$, come vedremo con la seguente importante formula.

Teorema 1.11 (Formula di BCH (Baker-Campbell-Hausdorff)). Siano A, B due operatori. Allora

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}([A,[A,B]]-[B,[A,B]])+\dots}$$

Formula di BCH

dove i puntini indicano termini che si annullano quando $[A, B] = 0$ (e in tal caso $e^A e^B = e^{A+B}$).

Dimostrazione. Dimostriamo la formula fino al termine $\frac{1}{2}[A, B]$. Lo sviluppo di $e^A e^B$ è il prodotto dei loro sviluppi:

$$\begin{aligned} e^A e^B &= \left(\mathbb{1} + A + \frac{1}{2}A^2 + \dots \right) \left(\mathbb{1} + B + \frac{1}{2}B^2 + \dots \right) \\ &= \mathbb{1} + A + B + AB + \frac{1}{2}(A^2 + B^2) + \dots \end{aligned}$$

mentre lo sviluppo di e^{A+B} è, ricordando che in generale $AB \neq BA$

$$\begin{aligned} e^{A+B} &= \mathbb{1} + (A+B) + \frac{1}{2}(A+B)^2 + \dots \\ &= \mathbb{1} + A + B + \frac{1}{2}(A^2 + AB + BA + B^2) + \dots \\ &= \mathbb{1} + A + B + \frac{1}{2}(AB + BA) + \frac{1}{2}(A^2 + B^2) + \dots \end{aligned}$$

vediamo così che i due sviluppi sono differenti in quanto $AB \neq \frac{1}{2}(AB + BA)$, a meno che A e B commutino: scomponendo AB

come

$$AB = \frac{1}{2}(AB + BA) + \frac{1}{2}(AB - BA) = \frac{1}{2}(AB + BA) + \frac{1}{2}[A, B]$$

e sostituendo nello sviluppo di $e^A e^B$, si vede che è uguale a quello di e^{A+B} a meno del termine $\frac{1}{2}[A, B]$:

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\dots}$$

si dimostra che tutti gli altri termini di ordine superiore contengono commutatori di commutatori, e si annullano anch'essi quando $[A, B] = 0$. \square

Proposizione 1.12 (Proprietà dell'operatore esponenziale). Valgono le seguenti proprietà:

1. $e^0 = \mathbb{1}$
2. $(e^A)^\dagger = e^{(A^\dagger)}$
3. $e^{A+B} = e^A e^B = e^B e^A = e^{B+A} \iff AB = BA$
4. $\exists (e^A)^{-1} = e^{-A} \quad \forall A$
5. $e^{(\alpha+\beta)A} = e^{\alpha A} e^{\beta A} \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$
6. $e^{PAP^{-1}} = P e^A P^{-1} \quad \forall P \text{ invertibile}$
7. $\det e^A = e^{\text{tr } A} \quad \forall A$

Proprietà dell'operatore
esponenziale

Dimostrazione. Le proprietà 1., 2. seguono immediatamente dalla definizione dell'esponenziale come serie di potenze. Le 4., 5. sono corollari della 3., vera per la formula di BCH. La 6. è vera in quanto

$$(PAP^{-1})^2 = PAP^{-1}PAP^{-1} = PA^2P^{-1}$$

e quindi più in generale $(PAP^{-1})^n = PA^nP^{-1}$.

La 7. è facile da dimostrare nel caso in cui A sia diagonalizzabile, cioè $A = P^{-1}DP$ con $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ diagonale ed ha come elementi gli autovalori $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ di A ; essendo anche e^D diagonale, con elementi $e^{\lambda_1}, \dots, e^{\lambda_n}$, è facile calcolarne il determinante:

$$\begin{aligned} \det e^A &\stackrel{6.}{=} \det P^{-1} \det e^D \det P = \det e^D = \det \text{diag}(e^{\lambda_1}, \dots, e^{\lambda_n}) \\ &= e^{\lambda_1} \cdot \dots \cdot e^{\lambda_n} = e^{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} = e^{\text{tr } A} \end{aligned}$$

\square

1.9 Forma esponenziale degli operatori unitari

Proposizione 1.13. Un operatore U è unitario se e solo se esiste un unico operatore A hermitiano tale che $U = e^{iA}$.

Dimostrazione. Consideriamo una matrice hermitiana A . Nella base in cui è diagonale, anche e^A è diagonale, con elementi

$e^{\lambda_1}, \dots, e^{\lambda_n}$: scrivendo A nella sua rappresentazione spettrale

$$A = \sum_n |n\rangle \lambda_n \langle n| = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$

si ha, come abbiamo già calcolato nel §1.8

$$A^k = \text{diag}(\lambda_1^k, \dots, \lambda_n^k)$$

da cui

$$e^A = \text{diag}(e^{\lambda_1}, \dots, e^{\lambda_n})$$

e il teorema Teo.1.5 abbiamo visto anche che la rappresentazione spettrale di un operatore unitario è nella forma $\text{diag}(e^{i\theta_1}, \dots, e^{i\theta_n})$. Segue che allora che se A è hermitiana, allora è unitaria la matrice $U = e^{iA}$; verifichiamolo:

$$U^\dagger U = (e^{iA})^\dagger e^{iA} = e^{-iA^\dagger} e^{iA} \stackrel{BCH}{=} e^{i(-A^\dagger + A)} = \mathbb{1}$$

dove abbiamo utilizzato la formula di BCH e il fatto che $[A, A^\dagger] = 0$. Vale anche il viceversa, cioè dato un operatore unitario U , esiste un unico operatore hermitiano A tale che $U = e^{iA}$. \square

Osservazione. Dato che iA è antihermitiana, abbiamo allora scoperto che *l'esponenziale di una matrice antihermitiana è una matrice unitaria*. Tuttavia ci teniamo a lavorare esplicitamente con operatori hermitiani in quanto essi rappresentano le osservabili fisiche, come vedremo quando parleremo di meccanica quantistica.

Il gruppo delle rotazioni

CAPITOLO

2

AVVERTENZA

I paragrafi §2.1 e §2.2 sono stati *notevolmente* approfonditi in quanto l'autore di questo capitolo ha ritenuto opportuno presentare una trattazione più istruttiva di questi argomenti.

Si tenga presente che molto di quanto scritto è frutto dello studio individuale svolto dall'autore, quindi non si garantisce la completa correttezza degli argomenti esposti.

Lo studente lettore è libero di saltare il §2.1 passando direttamente al §2.2.

Introduzione al capitolo

In questo capitolo forniremo le poche definizioni sufficienti per distinguere un gruppo da una sua rappresentazione nel §2.1, e distinguerlo anche dalla sua algebra di generatori nel §2.3. Studieremo poi il gruppo delle rotazioni $SO(3)$, uno dei più importanti per la fisica in quanto descrive l'isotropia dello spazio, e il gruppo $SU(2)$ che descrive invece le simmetrie rispettate dallo spin; vedremo infine che questi due gruppi sono strettamente legati tra loro.

2.1 Gruppi e rappresentazioni . . .	21
2.2 Gruppi continui	24
2.3 Algebra dei generatori	25
2.4 Gruppo $SO(2)$	27
2.5 Gruppo $SO(3)$	28
2.6 Gruppo $SU(2)$	30
2.7 Corrispondenza tra $SU(2)$ e $SO(3)$	31

I contenuti di questo capitolo sono già più che sufficienti per questo corso, ma in futuro vorrei scrivere meglio gli approfondimenti perché sono ancora superficiali.

2.1 Gruppi e rappresentazioni

Definizione 2.1. Un *gruppo* (astratto) è un insieme G dotato di un'operazione binaria interna

$$G \times G \ni (g_1, g_2) \mapsto g_1 \circ g_2$$

che soddisfa le seguenti proprietà:

1. $g_1, g_2 \in G \implies g_1 \circ g_2 \in G$
2. $(g_1 \circ g_2) \circ g_3 = g_1 \circ (g_2 \circ g_3) \quad \forall g \in G$
3. $\exists e \in G$ tale che $g \circ e = e \circ g = g \quad \forall g \in G$
4. $\forall g \in G \quad \exists g^{-1} \in G$ tale che $g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e$

Chiusura

Associatività

Esistenza dell'elemento neutro

Esistenza dell'inverso

Il gruppo così definito, fin qui, è solo una struttura algebrica astratta poco utile perché ogni g è definito solo in relazione agli altri elementi dell'insieme, mentre noi verremmo in qualche modo interpretare g come una trasformazione che agisce su un altro oggetto. Per esempio, il gruppo

delle rotazioni può agire su un cerchio, su un quadrato, su un vettore, su una funzione ecc. Poiché lo stato di un sistema fisico è descritto da un vettore, finito o infinito dimensionale, a noi interessa studiare le azioni di un gruppo su un generico spazio vettoriale. Dato un gruppo astratto, come quello delle rotazioni, diciamo allora che una sua *rappresentazione* è una corrispondenza, non necessariamente biunivoca ma che preserva la struttura di gruppo, tra il gruppo stesso e il gruppo degli endomorfismi che agiscono sullo spazio vettoriale che ci interessa; tali endomorfismi sono nei fatti delle matrici quadrate se lo spazio ha dimensione finita. Diamo la seguente definizione.

Definizione 2.2. Sia V uno spazio vettoriale; indichiamo con $GL(V)$ il gruppo degli endomorfismi su V . Dato un gruppo G , allora una rappresentazione (lineare) di G sullo spazio V è un omomorfismo ρ tra G e $GL(V)$, ossia un'applicazione

$$\rho : G \longrightarrow GL(V)$$

che preserva la struttura di gruppo⁽¹⁾:

$$\rho(g_1 \circ g_2) = \rho(g_1)\rho(g_2) \quad \forall g_1, g_2 \in G$$

dove la giustapposizione $\rho(g_1)\rho(g_2)$ denota la composizione tra operatori, come il prodotto tra matrici.

V è detto *spazio di rappresentazione* o *spazio base*, e la sua dimensione è detta *dimensione della rappresentazione*; è consuetudine utilizzare il nome *rappresentazione* per riferirsi allo spazio V stesso.

Dati un elemento $g \in G$ ed un vettore $v \in V$, allora la sua rappresentazione $\rho(g)$ agisce su v come

$$v \longmapsto \rho(g)v$$

Se il \mathbb{K} -spazio V ha dimensione finita, possiamo fissarvi una base e $GL(V) = GL_n(\mathbb{K})$ è l'insieme delle matrici quadrate $n \times n$ invertibili sul campo \mathbb{K} , con n dimensione di V ; l'ultima azione si scrive allora come un prodotto tra matrici⁽²⁾

$$v_i \longmapsto \sum_j \rho(g)_{ij} v_j$$

Riusciamo così, grazie ad una rappresentazione, a interpretare g come una trasformazione lineare, mentre prima era solo l'elemento astratto di un insieme.

Esempio 2.3. Facciamo un esempio per chiarire le idee e consideriamo il gruppo discreto $G = C_3$ delle rotazioni che lasciano invariato un triangolo equilatero: è formato da tre elementi $\{e, g_+, g_-\}$ dove e è l'identità e g_+, g_- sono rotazioni di 120° in senso antiorario e orario rispettivamente. Il gruppo soddisfa alcune proprietà come l'essere ciclico (esiste un elemento generatore di cui ogni altro elemento è una potenza) con $e = g_+^3$ e $g_- = g_+^2$, potremmo quindi scrivere $C_3 = \{e, g_+, g_+^2\}$.

Una rappresentazione bidimensionale di C_3 è data da $\rho : C_3 \rightarrow$

Rappresentazione di un
gruppo

(1) Si noti come questa condizione implichi che $\rho(e) = \mathbb{1}$ e $\rho(g^{-1}) = \rho(g)^{-1}$

(2) Se V ha dimensione infinita, $\rho(g)$ può ad esempio essere un operatore di traslazione che agisce su uno spazio di funzioni.

$GL(\mathbb{R}^2)$ con

$$\rho(e) = \mathbf{1} \quad \rho(g_+) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \quad \rho(g_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$$

e si verifica che si conservano le proprietà cicliche del gruppo, ossia $\rho(g_+)^3 = \rho(e)$ e $\rho(g_+)^2 = \rho(g_-)$.

Un'altra possibile rappresentazione è quella unidimensionale $s : C_3 \rightarrow GL(\mathbb{C})$ con

$$s(e) = 1 \quad s(g_+) = e^{i2\pi/3} \quad s(g_-) = e^{-i2\pi/3}$$

o ancora una bidimensionale $t : C_3 \rightarrow GL(\mathbb{C}^2)$ con

$$t(e) = \mathbf{1} \quad t(g_+) = \begin{pmatrix} e^{i2\pi/3} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad t(g_-) = \begin{pmatrix} e^{-i2\pi/3} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

in cui è evidente anche qui che continuano ad essere rispettate le proprietà del gruppo. Si vede subito che la terza rappresentazione è “riducibile” alla seconda, che invece è irriducibile; la prima è irriducibile se ci limitiamo a considerare spazi reali, mentre è riducibile se ammettiamo spazi complessi.

Uno degli scopi della teoria delle rappresentazioni è classificare tutte le possibili rappresentazioni irriducibili di un gruppo.

Esistono vari tipi di rappresentazioni, anche infinito dimensionali, e non tutte preservano necessariamente le proprietà del gruppo. Ogni gruppo ammette ad esempio la rappresentazione irriducibile banale che manda tutto il gruppo nell'elemento $1_{\mathbb{K}}$ del campo \mathbb{K} ; sebbene questa rappresentazione possa sembrare poco interessante, ha in realtà un importante significato: pensando al campo \mathbb{K} come uno spazio unidimensionale, il vettore $1_{\mathbb{K}}$ è la base di questo spazio per ogni altro numero ϕ lasciato invariato sotto l'azione del gruppo. Ogni numero ϕ invariante sotto l'azione di un gruppo è detto *scalare* o *invariante* rispetto al gruppo. Ad esempio, i moduli dei vettori sono invarianti rispetto a rotazioni spaziali, mentre le componenti dei vettori non lo sono; o ancora, i determinanti e le tracce delle matrici sono invarianti rispetto a ogni trasformazione di similitudine di matrici. Possiamo quindi definire gli invarianti di un gruppo come gli elementi della sua rappresentazione banale.

Spesso, piuttosto che provare a definire un gruppo intrinsecamente, si preferisce scegliere una sua rappresentazione (non necessariamente lineare). Quando consideriamo come gruppo astratto $G \leq GL_n(\mathbb{K})$ un gruppo di matrici $n \times n$ sul campo \mathbb{K} , allora si dice che ammetta la rappresentazione definente o canonica $\pi : G \rightarrow GL(\mathbb{K}^n)$ come operatore sullo spazio \mathbb{K}^n , e in tal caso diciamo per esempio che $SO(2)$ ammette la rappresentazione canonica bidimensionale e scriviamo semplicemente $SO(2) = \{R \in \mathbb{R}^{2 \times 2} \mid RR^T = \mathbf{1}, \det R = 1\}$, mentre una sua rappresentazione non canonica unidimensionale è $\rho : SO(2) \rightarrow GL(\mathbb{C})$, $\rho(R(\theta)) = e^{i\theta}$ dove θ è l'angolo di rotazione.

2.2 Gruppi continui

Nel paragrafo precedente abbiamo mostrato l'esempio del gruppo discreto C_3 , che contiene informazioni sulle simmetrie rotazionali di un triangolo equilatero, che sono discrete. Tuttavia in natura esistono anche simmetrie continue, come quelle rotazionali di una circonferenza, che sono descritte da importanti gruppi detti *continui* o *di Lie*⁽³⁾.

(3) Gruppi continui (anche detti topologici) e gruppi di Lie sono in realtà differenti, in quanto i primi sono spazi topologici mentre i secondi sono anche varietà differenziabili; molti dei primi però, sotto certe condizioni, risultano essere anche gruppi di Lie (quinto problema di Hilbert) quindi possiamo considerare i due termini come sinonimi.

Definizione 2.4. Per quello che interessa a noi, allo stesso modo con cui in un gruppo numerabile possiamo identificare ogni elemento con un numero naturale, un gruppo G è *continuo* o *di Lie* se possiamo costruirvi un sistema di coordinate in modo che ogni elemento $g \in G$ sia in corrispondenza biunivoca con n parametri reali $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{R}$:

$$g = g(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$$

dove i parametri variano con continuità in un aperto di \mathbb{R}^n .

Ad esempio, una generica matrice di rotazione nel piano dipende dall'angolo di rotazione θ , quindi da un parametro; una generica matrice di rotazione nello spazio dipende da una terna di parametri, che possono essere ad esempio i 3 angoli di Eulero. Quindi queste matrici formano un gruppo continuo. In realtà è continuo anche il più generale gruppo di matrici invertibili $n \times n$ nel campo $\mathbb{K} = \mathbb{R}, \mathbb{C}$ indicato con $GL_n(\mathbb{K})$; ogni altro gruppo continuo di matrici è un sottogruppo di $GL_n(\mathbb{K})$.

Esempio 2.5. Vediamo brevemente come possiamo definire alcuni importanti gruppi di matrici.

Il primo è $O(n)$, definibile come l'insieme delle trasformazioni lineari che lascia invariata la norma euclidea⁽⁴⁾

$$x_1^2 + \dots + x_n^2$$

ed è facile vedere che $O(n)$ ammette una rappresentazione canonica come gruppo di matrici ortogonali $n \times n$ a valori in \mathbb{R} . L'insieme di tali matrici con determinante $+1$ è denotato con $SO(n)$ ed è un sottogruppo di $O(n)$; quelle con determinante -1 non formano un gruppo in quanto il loro prodotto ha determinante $+1$. Il gruppo delle rotazioni spaziali è $SO(3)$, che studieremo in dettaglio più avanti.

Verifichiamo che l'insieme $O(n)$ formi un gruppo: il prodotto di matrici ortogonali è ancora ortogonale

$$(R_1 R_2)^T R_1 R_2 = R_2^T R_1^T R_1 R_2 = R_2^T R_2 = 1$$

quindi l'insieme è chiuso rispetto al prodotto; l'associatività vale per qualunque prodotto tra matrici; l'insieme contiene l'identità in quanto la matrice identità è ortogonale, e per ogni elemento esiste l'inverso ed è $R^{-1} = R^T$. Quindi $O(n)$ è un gruppo.

Molte teorie recenti, come quelle relativistiche, sono formulate in spazi con segnatura mista il cui gruppo delle isometrie è il gruppo ortogonale indefinito $O(p, q)$, che lascia invariata la forma quadratica reale

$$x_1^2 + \dots + x_p^2 - y_1^2 - \dots - y_q^2$$

Gruppo $O(n)$

(4) Stiamo quindi scegliendo di definire il gruppo a partire dalla sua rappresentazione banale.

Analogamente abbiamo poi il gruppo $U(n)$, formato dalle trasformazioni che lasciano invariata la forma quadratica su \mathbb{C}^n

$$|z_1|^2 + \dots + |z_n|^2$$

e la rappresentazione canonica di $U(n)$ è data dall'insieme delle matrici unitarie $n \times n$ a valori in \mathbb{C} .

Gruppo $U(n)$

2.3 Algebra dei generatori

Consideriamo una matrice unitaria $U \in U(n)$. In base a quello che abbiamo detto nel paragrafo precedente, U può dipendere da un certo numero di parametri. Per vedere come, ricordiamo la Prop.1.13 secondo cui esiste un'unica matrice hermitiana A tale che

$$U = e^{iA}$$

Poiché la combinazione lineare di matrici hermitiane è ancora hermitiana, queste formano uno spazio vettoriale di matrici, detto *algebra dei generatori* o *algebra di Lie*⁽⁵⁾. Sia allora

$$A = \sum_{k=1}^p \alpha_k J_k \quad \alpha_k \in \mathbb{R}$$

una combinazione lineare di una base di p matrici hermitiane J_1, \dots, J_p , dette *generatori* del gruppo $U(n)$; i coefficienti α_k devono necessariamente essere reali affinché A sia hermitiana.

Vediamo così che U dipende dai p parametri $\alpha_1, \dots, \alpha_p$ reali

$$U(\alpha_k) = e^{i \sum_k \alpha_k J_k}$$

Quest'ultima relazione porta con sé un importantissimo significato geometrico: *l'algebra dei generatori è lo spazio tangente al gruppo nell'identità*. Infatti, sviluppando in serie

$$U(\alpha_k) = \mathbb{1} + i \sum_k \alpha_k J_k + o(\alpha_k^2)$$

da cui si vede che

$$J_k = \frac{1}{i} \frac{\partial U}{\partial \alpha_k}$$

L'algebra dei generatori è vincolata a soddisfare delle certe regole di commutazione affinché nel gruppo generato valga la chiusura. In particolare, se $U_1 = e^{iA}$ e $U_2 = e^{iB}$, allora deve esistere una matrice hermitiana C tale che

$$U_1 U_2 = U_3 \implies e^{iA} e^{iB} = e^{iC}$$

E per la formula di BCH

$$C = A + B - \frac{1}{2i} [A, B] + \dots$$

Se A, B, C sono espresse come combinazioni lineari della stessa base di generatori J_1, \dots, J_p , dato che il primo membro appartiene all'algebra, anche il secondo membro dev'esserlo, quindi i commutatori devono a loro

(5) A rigore, si definiscono generatori gli operatori antihermitiani iJ_k e sono questi che formano l'algebra di Lie; in questa trattazione stiamo tuttavia scrivendo ogni operatore antihermitiano iJ_k in funzione esplicita del suo associato hermitiano J_k per ragioni fisiche che saranno ovvie quando parleremo di meccanica quantistica.

volta essere combinazioni lineari della base di generatori: devono esistere dei coefficienti c_k^{ij} tali che

Costanti di struttura

$$[J_i, J_j] = i \sum_k c_k^{ij} J_k$$

Si noti che tali coefficienti sono necessariamente reali perché il commutatore di due matrici hermitiane è antihermitiano⁽⁶⁾, e iJ_k è già antihermitiano.

(6) Abbiamo visto questa proprietà con la proposizione Prop.1.9

E' facile verificare che i coefficienti c_k^{ij} , denominati *costanti di struttura del gruppo*, non dipendono dalla scelta della base di generatori, e per questo si dice che le costanti di struttura caratterizzano completamente l'algebra.

Osservazione. Due algebre di Lie con le stesse costanti di struttura sono isomorfe, e si dimostra anche che ad ogni algebra di Lie corrisponde un unico gruppo di Lie semplicemente connesso⁽⁷⁾.

Si può anche dimostrare che queste costanti sono tutte nulle se e solo se il gruppo è abeliano, e che ogni gruppo di Lie è abeliano se e solo se è un gruppo ad un solo parametro.

(7) Quest'ultimo risultato è noto con il nome di terzo teorema di Lie.

Rappresentazioni di algebre di Lie

Approfondimento

Dato che le algebre di Lie sono spazi vettoriali, sono più facili da studiare rispetto ai gruppi. Nell'ambito nella teoria delle rappresentazioni dei gruppi di Lie vale l'importante risultato che *ad ogni rappresentazione di un gruppo di Lie corrisponde un'unica rappresentazione delle rispettive algebre di Lie*, cioè una mappa tra algebre di Lie che conserva le proprietà del commutatore; *viceversa, se il gruppo è semplicemente connesso, allora ad ogni rappresentazione della sua algebra di Lie corrisponde un'unica rappresentazione del gruppo stesso*.

Quando si vogliono studiare le rappresentazioni di un gruppo di Lie G non semplicemente connesso, si cerca un altro gruppo \tilde{G} detto *rivestimento universale di G* , che sia semplicemente connesso e contemporaneamente abbia un'algebra di Lie isomorfa a quella di G ; i due gruppi devono essere isomorfi in un intorno dell'identità affinché abbiano algebre di Lie isomorfe.

La ragione intuitiva per cui è richiesta la semplice connessione nel passaggio dall'algebra al gruppo è che le algebre di Lie, in quanto spazi tangenti ai rispettivi gruppi, conservano solamente le proprietà locali del gruppo presenti in un intorno dell'identità, perdendo le proprietà globali. Quando il gruppo è semplicemente connesso, ogni elemento può essere collegato all'identità da un cammino continuo, e quindi si può "ricostruire" tutto il gruppo a partire da un intorno dell'identità grazie alla mappa esponenziale; quando il gruppo non è semplicemente connesso, questa procedura non è possibile.

Per esempio $SO(3)$ e $SU(2)$ hanno algebre di Lie isomorfe in quanto, come vedremo, hanno le stesse costanti di struttura, ma mentre $SO(3)$ non è semplicemente connesso, $SU(2)$ lo è ed ogni rappresentazione di $SO(3)$ è una rappresentazione anche di $SU(2)$; que-

sto avviene con le rappresentazioni bosoniche di $SO(3)$. La cosa interessante è che esistono rappresentazioni irriducibili di $SU(2)$ su spazi di spinori, dette rappresentazioni fermioniche, che non sono rappresentazioni di $SO(3)$.

Come abbiamo visto, la semplice connessione gioca un ruolo importante nello studio delle rappresentazioni di un gruppo; un'altra proprietà topologica importante è la compattezza: si dimostra che tutte le rappresentazioni irriducibili di un gruppo compatto sono finito dimensionali. Questo è il caso di $SO(3)$ e $SU(2)$, che sono gruppi compatti in quanto omeomorfi, rispettivamente, allo spazio proiettivo $\mathbb{R}P^3$ e alla 3-sfera S^3 immersa in \mathbb{R}^4 .

Un esempio di gruppo non compatto è il gruppo di Lorentz $SO(1, 3)$, che è omeomorfo ad un iperboloide. Ciò fa sì che le sue rappresentazioni unitarie irriducibili abbiano dimensione infinita.

2.4 Gruppo $SO(2)$

Possiamo definire $SO(2)$ come l'insieme

$$SO(2) = \{R \in \mathbb{R}^{2 \times 2} \mid RR^T = \mathbb{1}, \det R = 1\}$$

ed è il gruppo delle rotazioni nel piano. E' possibile dedurre che ogni $R \in SO(2)$ deve avere la forma⁽⁸⁾

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

quindi ci troviamo di fronte ad un gruppo ad un parametro. Dato che le matrici ortogonali sono una forma reale delle matrici unitarie, anche per esse vale la relazione $R = e^{i\theta J}$. Ci chiediamo adesso quale sia il generatore J del gruppo. Per trovarlo, sviluppiamo $R(\theta)$ in serie nella forma $R = \mathbb{1} + i\theta J + o(\theta^2)$:

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & \theta \\ -\theta & 1 \end{pmatrix} + o(\theta^2) = \mathbb{1} + i\theta \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + o(\theta^2)$$

troviamo quindi che il generatore delle rotazioni nel piano è

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Banalmente $[J_i, J_j] = [J, J] = 0$, in accordo con il fatto che le rotazioni nel piano commutano.

Esercizio 2.6. Come esercizio, proviamo viceversa che noto il generatore

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

allora si ha $e^{iJ} = R(\theta)$.

Dobbiamo calcolare $R(\theta)$ nella base di autovettori. Per farlo, procediamo come segue:

1. Calcoliamo autovalori λ_n e autovettori $|n\rangle$ di J

(8) L'idea è che, poiché R è unitario, l'equazione caratteristica di R è equivalente alla condizione $\text{tr } R = e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2\cos\theta$. Dopo aver uguagliato entrambi gli elementi della diagonale a $\cos\theta$, il vincolo sul determinante $\det R = 1$ fissa poi il prodotto degli altri due elementi.

2. Calcoliamo i proiettori $|n\rangle\langle n|$

3. Determiniamo la matrice di rotazione $R = \sum_n |n\rangle e^{i\theta\lambda_n} \langle n|$

Risolviamo il problema agli autovalori:

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & i \\ -i & -\lambda \end{pmatrix} = 0 \iff \lambda^2 - 1 = 0 \iff \lambda = \pm 1$$

Determino gli autovalori normalizzati:

$$\begin{pmatrix} \mp 1 & -i \\ i & \mp 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \iff \begin{cases} \mp x - iy = 0 \\ ix \mp y = 0 \end{cases}$$

da cui, normalizzando

$$y = \pm ix \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$$

Indicheremo i due autovettori con i simboli:

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

Determiniamo i proiettori:

$$\begin{aligned} |+\rangle\langle +| &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad -i) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix} \\ |-\rangle\langle -| &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad i) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Facendo una verifica di buon senso si ottiene $|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = \mathbf{1}$ e $|+\rangle\lambda_+ \langle +| + |-\rangle\lambda_- \langle -| = J$. Calcoliamo, quindi, R :

$$\begin{aligned} R &= |+\rangle e^{i\theta(1)} \langle +| + |-\rangle e^{i\theta(-1)} \langle -| = \frac{e^{i\theta}}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} + \frac{e^{-i\theta}}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

La matrice di rotazione non ha autovettori in campo reale in quanto non lascia invariato nessun vettore. In campo complesso, però, essa ammette due autovalori distinti; possiamo dunque determinare una base ortonormale di autovettori e in tale base si ha:

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{pmatrix}$$

Notiamo che sussiste una stretta relazione tra $SO(2)$ e $U(1)$, essendo $U(1)$ il gruppo delle matrici unitarie di ordine 1, il cui elemento generico è $e^{i\theta}$.

2.5 Gruppo $SO(3)$

Si definisce

$$SO(3) = \{R \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid RR^T = \mathbf{1}, \det R = 1\}$$

Questo è il gruppo delle rotazioni nello spazio; i parametri sono 3, uno per ogni piano in cui avviene la rotazione, ossia i piani xy , yz e zx . Ogni rotazione attorno un asse coordinato è descritta da una matrice poco diversa da quella di rotazione nel piano; per esempio, attorno z abbiamo

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = e^{i\theta J_3} \quad \text{con} \quad J_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Cerchiamo adesso il generatore del generico elemento di $SO(3)$. Sia $\vec{\theta}$ il vettore avente come direzione quella dell'asse di rotazione e come modulo l'angolo di rotazione. Fissato un punto P individuato dal vettore posizione \vec{r} , a seguito di una rotazione esso sarà individuato da un vettore \vec{r}' . Si può provare che per rotazioni piccole

$$\Delta \vec{r} = \vec{r} \times \vec{\theta}$$

Tale vettore ha modulo $|\Delta \vec{r}| = r\theta \sin \phi$, essendo ϕ l'angolo compreso tra il vettore \vec{r} e il vettore $\vec{\theta}$. Se θ è un angolo infinitesimo si ha

$$\vec{r}' = \vec{r} + \Delta \vec{r} = \vec{r} + \vec{r} \times \vec{\theta}$$

e passando in componenti si ottiene

$$x'_i = x_i + \varepsilon_{ijk} x_j \theta_k = (\delta_{ij} + \varepsilon_{ijk} \theta_k) x_j$$

dunque la matrice di rotazione si può scrivere come

$$R_{ij} = \delta_{ij} + \varepsilon_{ijk} \theta_k$$

Notiamo immediatamente che la matrice di rotazione dipende da tre parametri (le componenti di $\vec{\theta}$). Dalla precedente relazione segue che

$$R_{ij} = \delta_{ij} + \varepsilon_{ijk} \theta_k = \delta_{ij} + i\theta_k \underbrace{(-i\varepsilon_{ijk})}_{J_{ij}^{(k)}} = \delta_{ij} + i\theta_k J_{ij}^{(k)}$$

I generatori di questo gruppo sono quindi:

$$\begin{aligned} J^{(1)} &= -i\varepsilon_{ij1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \\ J^{(2)} &= -i\varepsilon_{ij2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ J^{(3)} &= -i\varepsilon_{ij3} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Andiamo a verificare che l'insieme delle matrici delle rotazioni forma un gruppo. Poiché si dimostra facilmente che

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k$$

allora l'algebra è chiusa. Osserviamo che l'insieme delle rotazioni attorno l'asse x e attorno l'asse y non forma un gruppo in quanto $[J^{(1)}, J^{(2)}] =$

Questi operatori ammettono una rappresentazione a dimensione infinita data dagli operatori differenziali $\hat{J}^{(k)} = -i\varepsilon_{kij} x_i \partial_j$, e si verifica che questi soddisfano le stesse regole di commutazione dell'algebra di $SO(3)$. In meccanica quantistica vedremo che l'operatore momento angolare è legato a tale operatore differenziale tramite $\hat{L}^{(k)} = \hbar \hat{J}^{(k)}$. Possiamo quindi dire che ogni operatore momento angolare è la rappresentazione a dimensione infinita di un generatore delle rotazioni.

$iJ^{(3)}$ che non è un generatore di rotazioni attorno ai due assi scelti; serve quindi aggiungere il generatore J^3 per rendere chiuso l'insieme e quindi avere un gruppo.

Gruppo $SO(3)$ e trasformazioni canoniche

Con il linguaggio delle trasformazioni canoniche i generatori delle rotazioni erano le componenti del momento angolare, che formano un'algebra (di Lie) chiusa rispetto alle parentesi di Poisson:

$$\{L_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk} L_k$$

Con l'esempio precedente abbiamo visto che le rotazioni possono anche essere descritte mediante un set di generatori hermitiani. Vi è quindi una corrispondenza tra le due descrizioni dovuta al fatto che le due algebre di generatori hanno le stesse costanti di struttura ε_{ijk} , quindi sono isomorfe.

L'analogia tra le due relazioni è evidente, infatti per le trasformazioni infinitesime, a livello generale, avevamo già provato che i generatori sono tali che $\{G_i, G_j\} = \sum_k c_k^{ij} G_k$. Le costanti di struttura nel nostro caso sono le ε_{ijk} : possiamo quindi dire che $SO(3)$ e le trasformazioni infinitesime di rotazione sono entrambe rappresentazioni del gruppo delle rotazioni.

2.6 Gruppo $SU(2)$

Il gruppo $SU(2)$ gioca un ruolo fondamentale in meccanica quantistica.

Definiamo

$$SU(2) = \{U \in \mathbb{C}^{2 \times 2} | UU^\dagger = \mathbb{1}, \quad \det U = 1\}$$

ed è facile verificare che formi un gruppo. Agisce su bra e ket di \mathbb{C}^2 come

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\mapsto |\psi'\rangle = U |\psi\rangle \\ \langle\chi| &\mapsto \langle\chi'| = (|\chi'\rangle)^\dagger = (U |\chi\rangle)^\dagger = \langle\chi| U^\dagger \end{aligned}$$

quindi dato un operatore M di $\mathbb{C}^{2 \times 2}$ abbiamo

$$\langle\chi'| M' |\psi'\rangle = \langle\chi| \underbrace{U^\dagger M' U}_M |\psi\rangle$$

da cui si vede che U trasforma gli operatori come

$$M \mapsto M' = U M U^\dagger$$

Cerchiamo i generatori del gruppo tramite l'identità

$$U = e^{iA}$$

dove A è hermitiana; la condizione $\det U = e^{i \operatorname{tr} A} = 1$ (che abbiamo dimostrato nella Prop.1.12) vincola A a soddisfare $\operatorname{tr} A = 0$, quindi ad avere la forma

$$A = \begin{pmatrix} a & b^* \\ b & -a \end{pmatrix} \quad a \in \mathbb{R}, \quad b \in \mathbb{C}$$

pertanto i parametri reali del gruppo sono 3:

$$A = \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix} = x\sigma_1 + y\sigma_2 + z\sigma_3 \quad x, y, z \in \mathbb{R}$$

dove abbiamo introdotto le *matrici di Pauli*

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{Matrici di Pauli}$$

che formano quindi una base di generatori per $SU(2)$.

Introducendo il vettore delle coordinate $\vec{r} = (x, y, z)$ e *il vettore di Pauli* $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ possiamo scrivere

Vettore di Pauli

$$A = \vec{r} \cdot \vec{\sigma} \quad U = e^{i\vec{r} \cdot \vec{\sigma}}$$

Osservazione. Se avessimo considerato il gruppo più ampio $U(2)$, avremmo rilassato le condizioni imposte sul generatore A che prende la forma più generica

$$A = \begin{pmatrix} t + z & x - iy \\ x + iy & t - z \end{pmatrix} = t\mathbb{1} + x\sigma_1 + y\sigma_2 + z\sigma_3$$

con $t, x, y, z \in \mathbb{R}$, quindi $U(2)$ è un gruppo a 4 parametri reali, e vi è l'identità $\mathbb{1}$ come ulteriore generatore.

Le matrici di Pauli appena introdotte sono un set di matrici hermitiane 2×2 che formano una base per lo spazio dei generatori di $SU(2)$. Soddisfano le seguenti proprietà:

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_j &= \delta_{ij} \mathbb{1} + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k \\ [\sigma_i, \sigma_j] &= 2i\varepsilon_{ijk} \sigma_k \\ \sigma_i^2 &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

Alcune proprietà delle matrici di Pauli

Dividendo per 4 la seconda di queste equazioni scopriamo che le $\sigma_i/2$ rispettano le stesse relazioni di commutazione dei generatori J_i di $SO(3)$:

$$\left[\frac{\sigma_i}{2}, \frac{\sigma_j}{2} \right] = i\varepsilon_{ijk} \frac{\sigma_k}{2} \quad (2.1)$$

Quindi *l'algebra di Lie di $SO(3)$ è isomorfa all'algebra di Lie di $SU(2)$* ; ciò non implica però che i due gruppi siano isomorfi (anche perché hanno proprietà topologiche diverse), perché come vedremo la corrispondenza non è biunivoca ma due a uno.

2.7 Corrispondenza tra $SU(2)$ e $SO(3)$

In base alla Eq.(2.1), le algebre dei generatori di $SO(3)$ e di $SU(2)$ sono isomorfe, e quindi se $R \in SO(3)$ con

$$R(\vec{\theta}) = e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{J}}$$

allora alla stessa terna di parametri $\vec{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ corrisponderà (almeno) un elemento $U \in SU(2)$ quando a \vec{J} sostituiamo $\vec{\sigma}/2$:

$$U(\vec{\theta}) = e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{\sigma}/2}$$

che può scriversi in forma matriciale sviluppando in serie: se consideriamo per semplicità una rotazione attorno l'asse y , quindi $\vec{\theta} = (0, \theta, 0)$,

abbiamo

$$\begin{aligned}
 U &= \mathbb{1} + i\frac{\theta}{2}\sigma_2 + \frac{1}{2}\left(i\frac{\theta}{2}\sigma_2\right)^2 + \frac{1}{3!}\left(i\frac{\theta}{2}\sigma_2\right)^3 + \dots \\
 &= \mathbb{1}\left(1 - \frac{1}{2}(\theta/2)^2 + \dots\right) + i\sigma_2\left(\frac{\theta}{2} - \frac{1}{3!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^3 + \dots\right) \\
 &= \mathbb{1}\cos\frac{\theta}{2} + i\sigma_2\sin\frac{\theta}{2} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} \\ -\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.2)
 \end{aligned}$$

che corrisponde alla matrice di $SO(3)$

$$R = e^{i\theta J_2} = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Per una rotazione generica $\vec{\theta} = \theta\hat{n}$, con \hat{n} versore della direzione dell'asse di rotazione, l'elemento generico di $SU(2)$ è nella forma

$$U(\theta\hat{n}) = e^{i\theta\hat{n}\cdot\vec{\sigma}/2} = \mathbb{1}\cos\frac{\theta}{2} + i\hat{n}\cdot\vec{\sigma}\sin\frac{\theta}{2}$$

Questa formula è nota come *formula di Eulero per i quaternioni*, e gioca lo stesso ruolo per $SO(3)$ che gioca la formula $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ per $SO(2)$.

Notiamo che $U(0) = U(4\pi) = \mathbb{1}$ e $U(2\pi) = -\mathbb{1}$; quindi a $R(0) = R(2\pi) = \mathbb{1}$ corrispondono due matrici diverse $U(0)$ e $U(2\pi)$. Vedremo che più in generale a $R(\vec{\theta})$ corrispondono due matrici unitarie $U(\vec{\theta})$ e $-U(\vec{\theta})$.

Qual è la corrispondenza esplicita che c'è tra una matrice ortogonale $R(\vec{\theta}) \in SO(3)$ ed una unitaria $U(\vec{\theta}) \in SU(2)$?

Notiamo che dato un generatore di $SU(2)$

$$A = \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix} = \vec{r} \cdot \vec{\sigma}$$

allora $\det A = -x^2 - y^2 - z^2 = -\|\vec{r}\|^2$, quindi il determinante di A è invariante rispetto all'azione

$$\vec{r} \mapsto R\vec{r}$$

di $SO(3)$ sul vettore \vec{r} ; d'altra parte, il determinante di ogni matrice è invariante per trasformazioni di similitudine, e in particolare per trasformazioni unitarie⁽⁹⁾:

$$\det(UAU^\dagger) = \det A$$

Quindi la scrittura $A = \vec{r} \cdot \vec{\sigma}$ evidenzia una duplice azione di $SU(2)$ e di $SO(3)$ su A : sembra che la relazione di corrispondenza sia

$$U(\vec{r} \cdot \vec{\sigma})U^\dagger = (R\vec{r}) \cdot \vec{\sigma} \quad \forall \vec{r} \in \mathbb{R}^3$$

Possiamo scrivere il primo membro come⁽¹⁰⁾

$$U(\vec{r} \cdot \vec{\sigma})U^\dagger = \vec{r} \cdot (U\vec{\sigma}U^\dagger)$$

e il secondo come⁽¹¹⁾

$$(R\vec{r}) \cdot \vec{\sigma} = (R_{ik}r_k)\sigma_i = r_k(R_{ki}^T\sigma_i) = \vec{r} \cdot (R^T\vec{\sigma})$$

⁽⁹⁾ Richiediamo che i generatori seguano trasformazioni di tipo unitario affinché si preservi l'hermitianità.

⁽¹⁰⁾ Con $(U\vec{\sigma}U^\dagger)$ intendiamo il vettore di matrici $\begin{pmatrix} U\sigma_1U^\dagger \\ U\sigma_2U^\dagger \\ U\sigma_3U^\dagger \end{pmatrix}$

⁽¹¹⁾ Con la giustapposizione $R^T\vec{\sigma}$ denotiamo l'azione della matrice R^T sul vettore di matrici di Pauli $\vec{\sigma}$ (come se al posto delle matrici di Pauli ci fossero le componenti numeriche di un vettore.)

e i due membri sono uguali per ogni \vec{r} se e solo se

$$U\vec{\sigma}U^\dagger = R^T\vec{\sigma}$$

da intendere in termini delle matrici di Pauli come

$$U\sigma_iU^\dagger = (R^T\vec{\sigma})_i$$

Si noti che ogni membro di questa equazione è una matrice 2×2 . Enunciamo e dimostriamo quindi il seguente risultato.

Questa relazione è più nota in letteratura nella forma $R_{ij} = \frac{1}{2} \text{tr}(\sigma_i U \sigma_j U^\dagger)$

Proposizione 2.7 (Corrispondenza $SU(2) \rightarrow SO(3)$). Esiste una corrispondenza $SU(2) \rightarrow SO(3)$ due a uno data dalla relazione

$$U(\vec{\theta})\sigma_iU^\dagger(\vec{\theta}) = \left[R^T(\vec{\theta})\vec{\sigma} \right]_i \quad \forall \vec{\theta} \in \mathbb{R}^3$$

con $U(\vec{\theta}) \in SU(2)$ e $R(\vec{\theta}) \in SO(3)$.

Dimostrazione. Si vede che sia $U(\vec{\theta})$ che $-U(\vec{\theta})$ danno luogo alla stessa matrice $R(\vec{\theta})$, quindi la corrispondenza fornita dalla relazione è due a uno; dimostriamola nel caso più semplice di una rotazione attorno l'asse y in cui $\vec{\theta} = (0, \theta, 0)$ e quindi, come abbiamo già visto con la (2.2)

$$R^T(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}$$

$$U(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

Abbiamo

$$R^T\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \sigma_1 + \sin \theta \sigma_3 \\ \sigma_2 \\ -\sin \theta \sigma_1 + \cos \theta \sigma_3 \end{pmatrix}$$

Utilizzando la relazione $U = \mathbb{1} \cos \frac{\theta}{2} + i\sigma_2 \sin \frac{\theta}{2}$ (Eq.(2.2)) e ricordando che $\sigma_2^2 = \mathbb{1}$ si verifica facilmente che

$$U\sigma_2U^\dagger = \sigma_2 = (R^T\vec{\sigma})_2$$

Mentre per quanto riguarda la prima componente di $R^T\vec{\sigma}$

$$(R^T\vec{\sigma})_1 = \cos \theta \sigma_1 + \sin \theta \sigma_3 = \begin{pmatrix} \sin \theta & \cos \theta \\ \cos \theta & -\sin \theta \end{pmatrix}$$

e si ha che

$$\begin{aligned} U\sigma_1U^\dagger &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} & \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} & -2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sin \theta & \cos \theta \\ \cos \theta & -\sin \theta \end{pmatrix} = (R^T\vec{\sigma})_1 \end{aligned}$$

Analogamente si dimostra l'uguaglianza per la terza componente.

□

Spazi di Hilbert

CAPITOLO

3

Introduzione al capitolo

Lo scopo di questo capitolo è presentare alcune delle conoscenze più basilari necessarie per trattare la meccanica quantistica utilizzando il formalismo degli spazi di Hilbert. Non aggiungeremo nulla di profondamente nuovo rispetto a quanto fatto nel capitolo 1, perché l'approccio seguito sarà quello di generalizzare alcune nozioni di algebra lineare al caso di spazi a dimensione infinita, senza pretesa di rigore.

Nel §3.1 proveremo a motivare la definizione di spazio di Hilbert, e presenteremo due tipi di spazi L^2 come esempi. Nel §3.2 definiremo la distribuzione delta di Dirac, che utilizzeremo per introdurre e maneggiare agevolmente la trasformata di Fourier nel §3.3; con tali strumenti, in fisica riusciamo a trattare spazi di Hilbert con "basi non numerabili". Nei paragrafi successivi utilizzeremo la trasformata di Fourier per studiare un pacchetto d'onda e per risolvere l'equazione di Poisson tramite il metodo della funzione di Green.

3.1 Spazi di Hilbert separabili . . .	35
3.2 Distribuzione delta di Dirac . .	39
3.3 Trasformata di Fourier	42
3.4 Proprietà della trasformate . .	43
3.5 Calcoli di trasformate	45
3.6 Pacchetti di onde monocromatiche	47
3.7 Analisi di Fourier di un pacchetto d'onda	50
3.8 Trasformata di Fourier di una funzione di Green	55

Sarebbe carino completare questo capitolo con qualche cenno alla teoria spettrale degli operatori, per colmare le lacune lasciate dal corso di metodi.

3.1 Spazi di Hilbert separabili

Consideriamo un \mathbb{C} -spazio V a dimensione finita e sia $\{|n\rangle\}$ un insieme di p ket linearmente indipendenti di V . Una proprietà fondamentale degli spazi vettoriali è la *sovrapposizione*: una combinazione lineare di ket di V è ancora un ket di V , ossia

$$\sum_{n=1}^p z_n |n\rangle \in V \quad z_n \in \mathbb{C}$$

Vogliamo generalizzare questa proprietà al caso in cui la dimensione di V sia infinita e quindi l'insieme di ket $\{|n\rangle\}$ può essere infinito. La proprietà di indipendenza lineare si può estendere introducendo una nozione di ortogonalità, e quindi occorre dotare V di un prodotto scalare. Se $\{|n\rangle\}$ è numerabile⁽¹⁾, allora la sommatoria appena scritta può generalizzarsi come una serie, quindi dobbiamo innanzitutto dotare V di una norma per definire una nozione di limite della successione delle somme parziali.

A questo punto ci chiediamo se la serie

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

converga effettivamente ad un ket di V .

(1) Affronteremo più avanti il caso in cui l'insieme sia non numerabile dopo aver introdotto la delta di Dirac e la trasformata di Fourier.

Se la successione numerica $\{z_n\}$ è quadrato sommabile, allora la successione delle somme parziali della serie è di Cauchy: richiediamo che V sia uno spazio di Banach cosicché la serie converga ad un elemento $|z\rangle \in V$.

Vogliamo infine che ogni z_n si ottenga come $z_n = \langle n|z\rangle$, cioè che esista un prodotto scalare in V .

Diamo quindi la seguente definizione.

Spazio di Hilbert

Definizione 3.1. Sia \mathcal{H} un \mathbb{C} -spazio vettoriale di *dimensione qualunque*, finita o infinita. Diciamo che \mathcal{H} è uno *spazio di Hilbert* se:

- \mathcal{H} è euclideo (o pre-hilbertiano), ossia in esso è definito un prodotto scalare euclideo⁽²⁾

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$$

- \mathcal{H} è uno spazio normato completo rispetto alla norma indotta dal prodotto scalare euclideo

$$\|\psi\|_2 := \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \quad \forall \psi \in \mathcal{H}$$

Ogni insieme di ket $\{|n\rangle\}$ di \mathcal{H} è detto *sistema in \mathcal{H}* .

Esempio 3.2. Sono spazi di Hilbert l'insieme ℓ^2 delle successioni di numeri complessi $\{z_n\}$ quadrato sommabili, ossia tali che

$$\sum_{n=1}^{\infty} |z_n|^2 < \infty$$

con il prodotto scalare

$$\langle z | w \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} z_n^* w_n$$

e lo spazio $L^2(I)$ delle funzioni $f : I \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ a quadrato sommabile, ossia tali che

$$\int_I |f(x)|^2 dx < \infty$$

con il prodotto scalare

$$\langle f | g \rangle = \int_I f(x)^* g(x) dx$$

Il teorema di Riesz-Fischer ci dice che se $\{|n\rangle\}$ è un sistema ortonormale in \mathcal{H} e $\{\psi_n\} \in \ell^2$ è una successione quadrato sommabile, allora esiste ed è unico il ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ tale che:

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

⁽²⁾ Che abbiamo definito nel §1.2

Definizione 3.3. Viceversa, supponiamo che $\{|n\rangle\} \subset \mathcal{H}$ e che per ogni $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ esista una successione $\{\psi_n\}$ tale che converga la serie

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

allora in tal caso $\{|n\rangle\}$ è detto *sistema completo* di \mathcal{H} , i numeri ψ_n sono detti *coefficienti di Fourier di ψ rispetto al sistema $\{|n\rangle\}$* e la serie $\sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |n\rangle$ è chiamata *sviluppo in serie di Fourier di $|\psi\rangle$ rispetto al sistema $\{|n\rangle\}$* .

Se uno spazio di Hilbert ammette un sistema completo⁽³⁾ allora è detto *separabile*, e in tal caso per il teorema di Riesz-Fischer è isomorfo a ℓ^2 .

Spazio di Hilbert separabile

(3) Tale sistema completo potrà poi eventualmente ortonormalizzarsi secondo la procedura di Grand-Schmidt.

Un sistema ortonormale completo altro non è che l'estensione di una base ortonormale dal caso finito al caso infinito con cardinalità del numerabile.

Nel caso in cui \mathcal{H} ammetta un sistema ortonormale completo vale l'identità

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

che è equivalente alla *relazione di completezza*

$$\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$$

Relazione di completezza

dove $\mathbb{1}$ è l'operatore identità su \mathcal{H} .

Osservazione. Grazie a questa relazione possiamo agevolmente scrivere lo sviluppo in serie di Fourier come

$$|\psi\rangle = \mathbb{1} |\psi\rangle = \left(\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n| \right) |\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle n|\psi\rangle |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |n\rangle$$

e possiamo anche scrivere il prodotto scalare esplicitamente come un prodotto scalare in ℓ^2 :

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

Nei seguenti esempi vedremo che tutti i tipi di spazi L^2 sono separabili.

Esempio 3.4. In $L^2[-\pi, \pi]$ consideriamo il prodotto scalare

Spazio $L^2[-\pi, \pi]$

$$\langle f|g\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} f(x)^* g(x) dx$$

Tale spazio ammette il sistema ortogonale (non normalizzato) formato dalle funzioni

$$|n\rangle = e^{inx}$$

con $n \in \mathbb{Z}$ e $x \in [-\pi, \pi]$: infatti

$$\langle m|n\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} e^{-imx} e^{inx} dx = \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(n-m)x} dx = 2\pi \delta_{mn}$$

Tale sistema è detto *sistema trigonometrico in forma complessa o base di Fourier*.

La forma reale della serie si ottiene ponendo $f_n = (a_n - ib_n)/2$ e $f_{-n} = (a_n + ib_n)/2$, da cui

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{inx} \\ &= f_0 + \sum_{n=1}^{\infty} f_n e^{inx} + f_{-n} e^{-inx} \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx + b_n \sin nx \end{aligned}$$

In analisi funzionale si dimostra che ogni funzione $f \in L^2[-\pi, \pi]$ può essere sviluppata come una serie trigonometrica di Fourier e quindi il sistema trigonometrico è completo:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{inx}$$

dove ogni coefficiente di Fourier f_n è dato dal prodotto scalare

$$\langle n|f \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} f_m \langle n|m \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} f_m 2\pi \delta_{mn} = f_n 2\pi$$

da cui la proiezione ortogonale

$$f_n = \frac{1}{2\pi} \langle n|f \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-inx} f(x) dx$$

Vedremo che quest'ultimo integrale è concettualmente simile ad una trasformata di Fourier.

Per ottenere il sistema trigonometrico in qualsiasi altro spazio $L^2[-l, l]$ è sufficiente effettuare un cambio di variabile $x \mapsto \pi x/l$, sostituendo quindi le funzioni e^{inx} con $e^{in\pi x/l}$.

Lo spazio $L^2[-1, 1]$ ammette anche un sistema completo non ortogonale formato dai polinomi elementari $\{|n\rangle = x^n\}^{(4)}$, che quando viene ortogonalizzato dà luogo ai polinomi di Legendre.

(4) Questo è un risultato del teorema di approssimazione polinomiale di Weierstrass.

Spazio $L^2(\mathbb{R})$

Esempio 3.5. Polinomi e funzioni trigonometriche non si annullano all'infinito, quindi non sono quadrato sommabili in \mathbb{R} e non possono formare un sistema completo di $L^2(\mathbb{R})$; se però si regolarizza il polinomio elementare x^n moltiplicandolo per una gaussiana, otteniamo delle funzioni che si annullano all'infinito

$$|n\rangle = x^n e^{-x^2/2}$$

Ortonormalizzando tale sistema si ottengono le funzioni

$$|\tilde{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) e^{-x^2/2}$$

dove gli $H_n(x)$ sono polinomi di Hermite.

Per quanto riguarda $L^2[0, \infty[$, è sufficiente regolarizzare il polinomio x^n moltiplicandolo per e^{-x} in modo che si annulli solo nella semiretta reale positiva. Ortogonalizzando $x^n e^{-x}$ si ottengono le funzioni $L_n(x) e^{-x}$ dove gli $L_n(x)$ sono polinomi di Laguerre.

Con l'ultimo esempio abbiamo visto che per generiche funzioni quadrato sommabili definite sulla retta o sulla semiretta reale non siamo in grado di costruire un sistema completo di funzioni trigonometriche, e quindi non possiamo neanche svilupparle in serie di Fourier, ossia come sovrapposizione di oscillazioni armoniche.

Per funzioni periodiche è ancora possibile uno sviluppo in serie di Fourier, ma questo è un caso banale.

Per funzioni non periodiche, il problema viene risolto sostituendo la

serie di Fourier con un integrale di Fourier: vedremo che invece di

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{inx} \quad f_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx e^{-inx} f(x)$$

dovremo scrivere

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

L'analogia è evidente; la funzione viene espressa come una sovrapposizione non più di un numero discreto di oscillatori armonici, ma di onde piane con frequenze continue.

Notiamo che il fattore $1/2\pi$ nel secondo caso è presente nella rappresentazione di $f(x)$, mentre nel primo caso è inglobato nelle sue componenti; ciò è dovuto semplicemente a come si conviene che siano definite le componenti/la trasformata.

3.2 Distribuzione delta di Dirac

Fin qui ci siamo occupati di sistemi completi, ossia basi numerabili in cui le sovrapposizioni sono espresse come serie; l'unica cosa che è cambiata passando dal caso finito al caso infinito numerabile è che le sommatorie sono state sostituite con delle serie, ma si tratta sempre di sovrapposizioni discrete.

Adesso vogliamo estendere il concetto di base ortonormale dal caso discreto al caso continuo. Per quello che interessa a noi in fisica, questo passaggio si effettua con la prescrizione di sostituire le sommatorie con degli integrali, la delta di Kronecker con la delta di Dirac e le serie di Fourier con le antitrasformate di Fourier⁽⁵⁾.

Nel caso discreto, la relazione di completezza per un sistema ortonormale completo si scriveva come

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$$

dove la somma è finita o infinita a seconda del caso.

Nel caso continuo identifichiamo i ket di un sistema $\{|x\rangle\}_{x \in \mathbb{R}}$ con un indice continuo $x \in \mathbb{R}$, e scriviamo la corrispondente relazione di completezza come

$$\int dx |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}$$

dove l'integrale è esteso su un intervallo opportuno.

Vediamo adesso cosa dovrebbe succedere se volessimo scrivere un ket $|\psi\rangle$ come sovrapposizione continua di ket $|x\rangle$, ossia

$$|\psi\rangle = \mathbb{1} |\psi\rangle = \left(\int dx |x\rangle\langle x| \right) |\psi\rangle = \int dx \langle x|\psi\rangle |x\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle$$

dove abbiamo definito la funzione delle componenti $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, analoga alle $\psi_n = \langle n|\psi\rangle$ del caso discreto. Moltiplicando primo e ultimo membro di queste uguaglianze per $\langle x'|$ otteniamo

$$\psi(x') = \int dx \psi(x) \langle x'|x\rangle$$

Definendo allora la "funzione" delta di Dirac $\delta(x - x')$ con la relazione

$$\int dx \delta(x - x') \psi(x) = \psi(x') \quad (3.1) \quad \text{Delta di Dirac}$$

(5) Molti dei risultati validi per gli spazi vettoriali a dimensione finita si estendono in modo diretto al caso di spazi a dimensione infinita e base continua utilizzando questa prescrizione, salvo alcuni casi in cui serve più cautela. L'approccio più rigoroso a questo argomento si affronta in analisi funzionale e nella teoria delle distribuzioni.

Relazione di completezza in forma integrale

possiamo scrivere la relazione di ortogonalità del sistema come

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

in analogia con il caso discreto $\langle m | n \rangle = \delta_{mn}$.

In realtà non esiste alcuna funzione che soddisfa la Eq.(3.1), ma il problema viene aggirato definendo la delta di Dirac come una *distribuzione*, ossia un funzionale lineare limitato di legge

$$\delta_{x'}(\varphi) := \varphi(x') \in \mathbb{C} \quad \forall \varphi \in K$$

(6) In genere uno spazio di Schwartz o uno spazio di funzioni C^∞ a supporto compatto.

dove K è uno spazio di funzioni test⁽⁶⁾. Con il simbolo $\delta(x - x')$ si intende una funzione generalizzata che acquisisce significato solo dentro un integrale con una funzione di prova, come nella Eq.(3.1).

3.2.1 Rappresentazioni della delta

Rappresentazione di Heaviside Si suole definire la delta di Dirac in modo informale come una funzione che vale zero ovunque tranne in un punto, in cui vale infinito. Ciò è suggerito da quella che si chiama *rappresentazione di Heaviside della delta di Dirac*, ossia la successione di funzioni

$$\delta_n(x - x_0) = \begin{cases} n/2 & \text{se } |x - x_0| < 1/n \\ 0 & \text{se } |x - x_0| > 1/n \end{cases}$$

Il limite di questa successione vale 0 per $x \neq x_0$, e $+\infty$ per $x = x_0$, da cui l'interpretazione della delta come funzione che vale infinito in un punto e zero altrove.

Notiamo che

$$\langle \delta_n | \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \delta_n(x - x_0) \varphi(x) = \frac{n}{2} \int_{x_0 - 1/n}^{x_0 + 1/n} \varphi(x) dx$$

Se φ è continua, vale il teorema della media integrale:

$$\int_{x_0 - 1/n}^{x_0 + 1/n} \varphi(x) dx = \frac{2}{n} \varphi(\xi_n)$$

per qualche $\xi_n \in [x_0 - 1/n, x_0 + 1/n]$. Quindi

$$\langle \delta_n | \varphi \rangle = \varphi(\xi_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \varphi(x_0) = \delta_{x_0}(\varphi)$$

(7) Cfr. Bernardini, Ragnisco, Santini - "Metodi matematici della fisica" pp.335-336

Cioè la successione numerica $\langle \delta_n | \varphi \rangle$ converge a $\delta_{x_0}(\varphi)$ per ogni φ continua: in tal caso si dice che la convergenza sia *debole* o *in senso delle distribuzioni*, perché è una convergenza in valore assoluto (in \mathbb{C}) ottenuta quando viene fissata una funzione di prova. La scrittura $\langle \delta_n | \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \delta_{x_0}$ è invece un abuso di notazione, perché i funzionali $\langle \delta_n |$ non convergono a δ_{x_0} sotto la norma di operatori.

Rappresentazione di Fourier Un'importante successione di funzionali che converge debolmente alla delta di Dirac è la seguente⁽⁷⁾:

$$\int_{\mathbb{R}} dx \delta_n(x - x_0) \varphi(x) = \int_{\mathbb{R}} dx \frac{\sin(n(x - x_0))}{\pi(x - x_0)} \varphi(x) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \varphi(x_0) = \delta_{x_0}(\varphi)$$

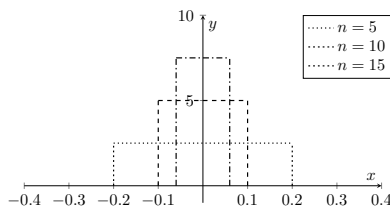


Figura 3.1: Funzioni $\delta_n(x)$

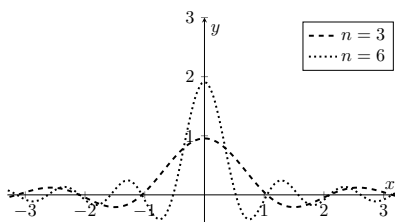


Figura 3.2: Funzioni $\sin(nx)/\pi x$

dove φ deve annullarsi all'infinito più velocemente di ogni potenza e deve soddisfare la condizione del Dini⁽⁸⁾. Possiamo riscrivere

$$\delta_n(x-x_0) = \frac{\sin(n(x-x_0))}{\pi(x-x_0)} = \frac{1}{2\pi} \frac{e^{in(x-x_0)} - e^{-in(x-x_0)}}{i(x-x_0)} = \int_{-n}^n \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x_0)}$$

(8) La condizione del Dini richiede che il rapporto incrementale di ψ in x_0 sia assolutamente integrabile in ogni intorno di x_0 , condizione certamente soddisfatta da funzioni di classe C^1 .

quindi al limite per $n \rightarrow \infty$ si ha

$$\int_{\mathbb{R}} dx \varphi(x) \int_{-n}^n \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x_0)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \varphi(x_0) = \delta_{x_0}(\varphi)$$

Con un abuso di notazione, possiamo scrivere l'uguaglianza

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x_0)} = \delta(x-x_0) \quad (3.2) \quad \text{Rappresentazione di Fourier della delta di Dirac}$$

da intendere in senso debole e in parte principale; chiameremo la Eq.(3.2) *rappresentazione di Fourier della delta di Dirac*.

3.2.2 Proprietà della delta

Vediamo adesso alcune proprietà della distribuzione delta.

Proposizione 3.6. Intendendo la funzione generalizzata $\delta(x)$ sotto integrale con una funzione di prova, valgono le seguenti proprietà:

1. $\delta(-x) = \delta(x)$
2. $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad \forall a \neq 0$
3. $\delta(g(x)) = \sum_{n=1}^p \frac{\delta(x-x_n)}{|g'(x_n)|}$ dove i p punti x_n sono gli zeri semplici di $g(x)$ in \mathbb{R} , ossia con $g(x_n) = 0, g'(x_n) \neq 0$; può eventualmente essere $p = \infty$.
4. $x\delta(x) = 0$
5. $g(x)\delta(x-x_0) = g(x_0)\delta(x-x_0)$

Alcune proprietà della delta

Dimostrazione. Proviamo la 1.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(-x) \varphi(x) = - \int_{+\infty}^{-\infty} dy \delta(y) \varphi(-y) = \varphi(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) \varphi(x)$$

per ogni funzione di prova φ , quindi confrontando primo e ultimo membro si ha $\delta(x) = \delta(-x)$.

Proviamo la 2.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(ax) \varphi(x) &= \begin{cases} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{a} \delta(y) \varphi\left(\frac{y}{a}\right) & a > 0 \\ \int_{+\infty}^{-\infty} \frac{dy}{a} \delta(y) \varphi\left(\frac{y}{a}\right) & a < 0 \end{cases} \\ &= \frac{1}{|a|} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \delta(y) \varphi\left(\frac{y}{a}\right) \\ &= \frac{\varphi(0)}{|a|} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\delta(x)}{|a|} \varphi(x)\end{aligned}$$

per ogni φ , da cui $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$.

La dimostrazione della 3. non è complicata ma la omettiamo⁽⁹⁾.

Per quanto riguarda la 4.

$$\int_{\mathbb{R}} dx [x\delta(x)]\varphi(x) = \int_{\mathbb{R}} dx \delta(x)[x\varphi(x)] = 0\varphi(0) = 0$$

Infine la 5.

$$\int_{\mathbb{R}} \delta(x - x_0)[g(x)\varphi(x)] = g(x_0)\varphi(x_0) = \int_{\mathbb{R}} [\delta(x - x_0)g(x_0)]\varphi(x)$$

□

Definiamo la delta di Dirac in 3 dimensioni come un prodotto di 3 delta:

Delta in 3 dimensioni

$$\begin{aligned}\delta^3(\vec{x}) &= \delta(x)\delta(y)\delta(z) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk_x}{2\pi} e^{ik_x x} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk_y}{2\pi} e^{ik_y y} \int_{\mathbb{R}} \frac{dk_z}{2\pi} e^{ik_z z} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\end{aligned}\quad (3.3)$$

in modo che

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

3.3 Trasformata di Fourier

In base alla rappresentazione di Fourier della delta Eq.(3.2) possiamo scrivere

⁽¹⁰⁾ Usiamo $\delta(x_0 - x) = \delta(x - x_0)$

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} dx_0 \delta(x_0 - x) \psi(x_0) \stackrel{(10)}{=} \int_{\mathbb{R}} dx_0 \left(\int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x_0)} \right) \psi(x_0)$$

Se $\psi(x)$ è assolutamente integrabile in \mathbb{R} , possiamo scambiare l'ordine di integrazione e ottenere

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} dx_0 e^{-ikx_0} \psi(x_0)}_{\tilde{\psi}(k)} = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \tilde{\psi}(k)$$

In matematica è più comune definire trasformata ed antitrasformata entrambe con un fattore $1/\sqrt{2\pi}$, per rendere unitaria la trasformata.

Abbiamo introdotto la funzione *trasformata di Fourier* di $\psi(x)$

$$\tilde{\psi}(k) = \int_{\mathbb{R}} dx e^{-ikx} \psi(x) \quad (3.4)$$

mentre chiamiamo *antitrasformata di Fourier* l'espressione

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \tilde{\psi}(k) \quad (3.5)$$

Per l'esistenza della trasformata $\tilde{\psi}$ è sufficiente che ψ sia assolutamente integrabile⁽¹¹⁾, mentre per la validità dell'antitrasformata serve anche che ψ si annulli all'infinito più velocemente di ogni potenza e che soddisfi la condizione di Dini.

Osservazione. Definendo gli "autoket impulso" $|k\rangle$ in modo che nella base ortonormale "posizione" $\{|x\rangle\}$ risulti⁽¹²⁾

$$\langle x|k\rangle = e^{ikx}$$

allora questi soddisfano la relazione di completezza scritta come

$$\int \frac{dk}{2\pi} |k\rangle\langle k| = \mathbb{1} \quad (3.6)$$

Infatti, se $\langle x|x_0\rangle = \delta(x - x_0)$, moltiplicando ambo i membri della Eq.(3.6) per $\langle x|$ e per $|x_0\rangle$ otteniamo

$$\int \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x_0)} = \delta(x - x_0)$$

che è proprio la rappresentazione di Fourier della delta (Eq.(3.1)). Analogamente possiamo scrivere l'antitrasformata di Fourier come avevamo già fatto nel caso discreto per scrivere lo sviluppo in serie di Fourier:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1} |\psi\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \langle k|\psi\rangle |k\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) |k\rangle$$

e passando alla base posizione moltiplicando per $\langle x|$ otteniamo proprio l'antitrasformata Eq.(3.5).

Per scrivere la trasformata, sfruttiamo invece la relazione di completezza per la base posizione

$$\int dx |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}$$

da cui

$$|\psi\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle$$

e moltiplicando per $\langle k|$ otteniamo la trasformata di Fourier Eq.(3.4).

(11) Infatti

$$\left| \int_{\mathbb{R}} dx e^{-ikx} \psi(x) \right| \leq \int_{\mathbb{R}} dx |\psi(x)|$$

(12) A rigore, tali autofunzioni non sono assolutamente integrabili, quindi non appartengono allo stesso spazio di Hilbert di ψ e $\tilde{\psi}$; ciò rappresenta un'inconsistenza nello studio dello spettro di alcuni operatori come quello dell'impulso. Si usa quindi estendere lo spazio per includere queste funzioni, introducendo gli spazi di Hilbert "allargati".

3.4 Proprietà della trasformate

Proposizione 3.7 (Trasformata della derivata). Indichiamo con $\mathcal{F}[\psi](k) := \tilde{\psi}(k)$ la funzione trasformata di Fourier di $\psi(x)$. Allora la trasformata della derivata $\psi'(x)$ vale

$$\mathcal{F}[\psi'](k) = ik\mathcal{F}[\psi](k)$$

Dimostrazione.

$$\mathcal{F}[\psi'](k) = \int_{\mathbb{R}} dx e^{-ikx} \psi'(x) = \left[e^{-ikx} \psi(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} + ik \int_{\mathbb{R}} dx e^{-ikx} \psi(x)$$

Se $\psi(x)$ è assolutamente integrabile, allora il termine al contorno si annulla e otteniamo la tesi. \square

E' banale concludere che più in generale $\mathcal{F}[\psi^{(n)}](k) = (ik)^n \mathcal{F}[\psi](k)$. La trasformata di Fourier converte quindi le derivazioni in moltiplicazioni; grazie a tale interessante proprietà, le applicazioni della trasformata sono innumerevoli.

Ricordiamo che per la disuguaglianza di Hölder ogni funzione quadrato sommabile è anche assolutamente integrabile (ma non viceversa) e quindi ammette trasformata.

Proposizione 3.8 (Unitarietà della trasformata). Sia $\tilde{\psi}$ la trasformata di Fourier di ψ . Allora vale l'uguaglianza

$$\int dx |\psi(x)|^2 = \int \frac{dk}{2\pi} |\tilde{\psi}(k)|^2$$

da cui si deduce che

$$\tilde{\psi} \in L^2 \iff \psi \in L^2$$

Dimostrazione. Calcoliamo esplicitamente $\langle \psi | \psi \rangle$ usando le due diverse relazioni di completezza per $|x\rangle$ e per $|k\rangle$:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{1} | \psi \rangle = \begin{cases} \int dx \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle = \int dx |\psi(x)|^2 \\ \int \frac{dk}{2\pi} \langle \psi | k \rangle \langle k | \psi \rangle = \int \frac{dk}{2\pi} |\tilde{\psi}(k)|^2 \end{cases}$$

otteniamo così

$$\int dx |\psi(x)|^2 = \int \frac{dk}{2\pi} |\tilde{\psi}(k)|^2$$

da cui $\psi(x)$ è quadrato sommabile se e solo se $\tilde{\psi}(k)$ è quadrato sommabile. \square

Osservazione. Potevamo dimostrare la proposizione senza usare le relazioni di completezza come segue:

(13) Scambio ordine di integrazione

$$\begin{aligned} \int dk |\tilde{\psi}(k)|^2 &= \int dk \left(\int dx e^{ikx} \psi^*(x) \right) \tilde{\psi}(k) \stackrel{(13)}{=} \\ &= \int dx \psi^*(x) \left(\int dk e^{ikx} \tilde{\psi}(k) \right) = 2\pi \int dx |\psi(x)|^2 \end{aligned}$$

o anche come:

$$\begin{aligned} \int dx \psi^*(x) \psi(x) &= \int dx \left(\int \frac{dk}{2\pi} e^{-ikx} \tilde{\psi}^*(k) \right) \left(\int \frac{dk'}{2\pi} e^{-ik'x} \tilde{\psi}(k') \right) \\ &= \int \frac{dk dk'}{(2\pi)^2} \tilde{\psi}^*(k) \tilde{\psi}(k') \underbrace{\int dx e^{i(k'-k)x}}_{=2\pi\delta(k'-k)} \\ &= \int \frac{dk}{2\pi} |\tilde{\psi}(k)|^2 \end{aligned}$$

Segue quindi che se $\psi(x)$ è normalizzabile, anche la trasformata

$\tilde{\psi}(k)$ lo è, ponendo però attenzione al fatto che mentre la condizione di normalizzazione per $\psi(x)$ è

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

quella per $\tilde{\psi}(k)$ invece è

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} |\tilde{\psi}(k)|^2 = 1$$

Trasformata in più dimensioni

Finora abbiamo considerato solo la trasformata in una dimensione, e il motivo è che in più dimensioni si può semplicemente scrivere come un prodotto di trasformate unidimensionali: se $\psi(\vec{x})$ è una funzione su \mathbb{R}^3 , allora usando la Eq.(3.3) si ha

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

mentre la trasformata vale

$$\tilde{\psi}(\vec{x}) = \int d^3\vec{x} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x})$$

Trasformata in 3 dimensioni

3.5 Calcoli di trasformate

Esponenziale unitario e delta di Dirac Consideriamo dei casi semplici di funzioni di cui calcolare la trasformata. Sia $\psi(x) = e^{iqx}$, allora

$$\tilde{\psi}(k) = \int dx e^{-ikx} e^{iqx} = \int dx e^{i(q-k)x} = 2\pi\delta(q-k)$$

Il risultato ha un'interpretazione fisica chiara: la funzione e^{iqx} descrive un'onda piana monocromatica che ha come unica lunghezza d'onda $\lambda = 2\pi/q$; la trasformata di Fourier corrispondente è quindi una sovrapposizione pesata di onde con lunghezze d'onda diverse, dove tutti i pesi sono nulli eccetto per $k = q$.

Osservazione. Prima avevamo detto che la trasformata di Fourier esiste solo per funzioni assolutamente integrabili, ma e^{iqx} non lo è, ed infatti la trasformata è risultata essere una delta di Dirac, che non è una funzione vera e propria. Questo è un esempio di come la trasformata di Fourier possa essere estesa a funzioni non assolutamente integrabili, ma solo in senso delle distribuzioni.

Il fatto che la funzione d'onda ψ debba essere in particolare quadrato sommabile significa che la sua energia, proporzionale al modulo quadro di ψ , dev'essere finita. Un'onda piana monocromatica come e^{iqx} è estesa in tutto lo spazio e possiede energia infinita: nella realtà nessun'onda è perfettamente monocromatica.

Possiamo anche calcolare la trasformata della delta stessa:

$$\tilde{\delta}(k) = \int dx e^{-ikx} \delta(x) = e^{-ik0} = 1$$

Notiamo quindi che la rappresentazione di Fourier della delta è un'anti-trasformata:

$$\delta(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \underbrace{\tilde{\delta}(k)}_{=1}$$

Lorentziana Calcoliamo la trasformata di Fourier della funzione lorentziana

$$\psi(x) = \frac{1}{x^2 + \lambda^2}$$

Gaussiana Sia data la funzione Gaussiana

$$\psi(x) = Ne^{-\frac{\lambda x^2}{2}}$$

con N costante di normalizzazione. Ne calcoliamo il valore imponendo la normalizzazione a 1:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda x^2} dx = N^2 \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

da cui

$$N = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Calcoliamo ora la trasformata di Fourier:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(k) &= \int_{-\infty}^{+\infty} Ne^{-\frac{\lambda x^2}{2}} e^{-ikx} dx = N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\lambda}{2}(x^2 + \frac{2ikx}{\lambda})} dx = \\ &= N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\lambda}{2}(x^2 + \frac{2ikx}{\lambda} + (\frac{ik}{\lambda})^2)} e^{\frac{\lambda}{2}(\frac{ik}{\lambda})^2} dx = \\ &= Ne^{\frac{\lambda}{2}(\frac{ik}{\lambda})^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\lambda}{2}(x + \frac{ik}{\lambda})^2} dx \end{aligned}$$

Poniamo $z = x + \frac{ik}{\lambda}$, ottenendo

$$\tilde{\psi}(k) = Ne^{\frac{ik^2}{2\lambda}} \int_{\gamma} e^{-\frac{\lambda}{2}z^2} dz$$

dove γ è il cammino di integrazione nel piano complesso che percorre la retta parallela all'asse reale e distante $\frac{k}{\lambda}$ da esso. Consideriamo l'integrale della stessa funzione complessa lungo la curva chiusa γ' indicata in Fig.3.3. Osserviamo che l'integranda è analitica lungo e dentro la curva, dunque per il teorema integrale di Cauchy $\forall L > 0$ si ha che

$$\int_{\gamma'} e^{-\frac{\lambda}{2}z^2} dz = 0$$

Al limite per $L \rightarrow \infty$ la curva γ' gli integrali lungo i cammini verticali si annullano, dunque

$$\int_{\gamma} e^{-\frac{\lambda}{2}z^2} dz = \int_{\text{Re}z} e^{-\frac{\lambda}{2}z^2} dz = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\lambda}{2}x^2} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}}$$

quindi, in definitiva, la trasformata di Fourier è

$$\tilde{\psi}(k) = Ne^{\frac{\lambda}{2}(\frac{ik}{\lambda})^2} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}} = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{k^2}{2\lambda}} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}} = \sqrt{2} \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{k^2}{2\lambda}}$$

Abbiamo così dimostrato che la trasformata di Fourier di una Gaussiana è ancora una Gaussiana. Chiaramente il coefficiente che moltiplica l'esponentiale sarà diverso, e questo aspetto, come adesso vedremo, è legato alla normalizzazione, mentre la costante presente all'esponente è

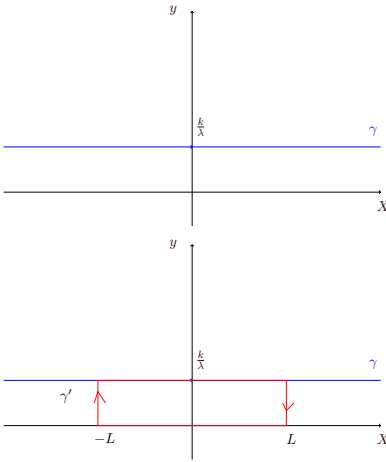


Figura 3.3: Cammino finito su cui effettuare l'integrazione

legata allo scarto quadratico medio.

Nella definizione della funzione gaussiana in questione è evidente che si è supposto $\langle x \rangle = 0$, dunque $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle$. Calcolando quest'ultima quantità abbiamo:

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} N^2 e^{-\lambda x^2} x^2 dx = N^2 \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda x^2} dx \right) = \\ &= -N^2 \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \right) = \frac{N^2}{2} \sqrt{\pi} \lambda^{-\frac{3}{2}} = \frac{1}{2\lambda} = \sigma_x^2\end{aligned}$$

Poichè $\psi(x)$ è normalizzata a 1 con l'ipotesi $N^2 = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}$, allora, essendo $\tilde{\psi}(k)$ la sua trasformata di Fourier, per quanto detto sulle funzioni a quadrato sommabili e per le loro trasformate, si ha

$$\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle = 2\pi \langle \psi | \psi \rangle = 2\pi$$

Cioè

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(k)|^2 dk = 2\pi$$

Equivalentemente, utilizzando la seguente notazione, la trasformata di Fourier di una gaussiana normalizzata a 1 sarà anch'essa normalizzata a 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(k)|^2 \frac{dk}{2\pi} = 1$$

Inoltre, essendo anche $\tilde{\psi}(k)$ una gaussiana centrata nell'origine, $\langle k \rangle = 0$. Quindi calcolando la media delle posizioni quadrate avremo lo scarto quadratico medio della distribuzione $\tilde{\psi}(k)$. Per facilità poniamo $\mu = 1/\lambda$ in modo da ottenere un calcolo formalmente analogo al precedente:

$$\langle k^2 \rangle = \sigma_k^2 = \frac{\lambda}{2}$$

Il risultato ottenuto è coerente con la proprietà di cui godono gli scarti quadratici medi di una distribuzione e della sua trasformata di Fourier, infatti

$$\sigma_x \cdot \sigma_k = \frac{1}{2}$$

Si può addirittura provare che la relazione vale come uguaglianza soltanto per le distribuzioni gaussiane.

3.6 Pacchetti di onde monocromatiche

Sia data una funzione d'onda $\psi(x)$, con $\psi(x) \in L^2$, che descrive un pacchetto di onde. Osserviamo che per semplicità stiamo trascurando la dipendenza dal tempo "scattando una foto" al pacchetto a un certo istante t . Se infatti avessi $\psi(x, t)$ e adoperassi l'antitrasformata di Fourier

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k, t) e^{ikx}$$

si noterebbe chiaramente che t è un solamente un parametro in questo discorso.

Poichè $\psi(x)$ rappresenta un pacchetto, dunque una sovrapposizione di onde di una certa lunghezza d'onda $\lambda_i = 2\pi/k_i$, possiamo scrivere:

$$\psi(x) = \sum_i \tilde{\psi}(k_i) e^{ik_i x}$$

Ogni termine della somma è chiaramente una funzione oscillante che non si smorza mai singolarmente, bensì solo nella sovrapposizione con le altre funzioni. Fisicamente ciò equivale al fenomeno di interferenza tra onde monocromatiche di lunghezza d'onda diversa. Chiariamoci un'idea con il seguente esempio, considerando la sovrapposizione di 2 onde:

per $x' = 0$ le due onde sono in fase;

per $x' = \Delta x$ si ha un'opposizione di fase, dunque un'interferenza distruttiva.

Sono proprio le posizioni in cui si ha interferenza distruttiva che smorzano il pacchetto rendendolo matematicamente a quadrato sommabile.

Nel punto Δx le fasi delle onde sono $k_1 x$ e $k_2 x$, mentre la differenza di fase risulta essere $(k_1 - k_2)x = \Delta x \Delta k = \pi$, poichè la sovrapposizione si deve annullare in tale punto. Dunque otteniamo che $\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k}$. Questo risultato, come vedremo in meccanica quantistica, è strettamente connesso al principio di indeterminazione di Heisenberg.

Alla luce di quanto affermato, il fatto che il pacchetto $\psi(x)$ vada a zero in determinate regioni di spazio è legato alla presenza nella trasformata di Fourier di molte lunghezze d'onda diverse tra loro, che sovrapponendosi provocano importanti interferenze distruttive. Se la distribuzione dei numeri d'onda k è ristretta a un intervallo molto piccolo, la distanza da raggiungere per avere interferenza negativa sarà molto grande, dunque il pacchetto si smorzerà molto lentamente; viceversa, la funzione d'onda andrà a zero più rapidamente.

Chiaramente quella appena esposta è una trattazione qualitativa. Andiamo ad affrontare il discorso in maniera più rigorosa, definendo alcune quantità matematiche per le distribuzioni.

Definizione 3.9. Definiamo il **valore medio della posizione** data la distribuzione di ampiezza di probabilità $\psi(x)$ come

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 x dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx} \quad (3.7)$$

Valore medio della posizione

Possiamo eventualmente imporre una condizione di normalizzazione a 1, oppure definire

$$\varphi(x) = \frac{\psi(x)}{\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx}}$$

ottenendo

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 x dx$$

per snellire la notazione. Analogamente si definisce la quantità

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 x^2 dx$$

Risulta dunque evidente che il modulo quadro $|\psi(x)|^2$ agisce da densità di probabilità.

Definizione 3.10. Definiamo lo **scarto quadratico medio** della posizione come

$$\sigma_x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (3.8)$$

Scarto quadratico medio della posizione

Tale quantità ci dà informazioni circa la larghezza della distribuzione $\psi(x)$.

Passando alla trasformata di Fourier, possiamo definire le stesse quantità per la distribuzione $\tilde{\psi}(k)$. Osserviamo anche che, essendo $\psi(x)$ a quadrato sommabile, vale la relazione

$$\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle = 2\pi \langle \psi | \psi \rangle$$

dunque se imponiamo la condizione di normalizzazione a 1

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

avremo che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(k)|^2 \frac{dk}{2\pi} = 1$$

Si può infine dimostrare che vale la seguente proprietà

Proposizione 3.11. Data una distribuzione $\psi(x) \in L^2$, e data la sua trasformata di Fourier di coefficiente $\tilde{\psi}(k)$ vale che

$$\sigma_x \cdot \sigma_k \geq \frac{1}{2} \quad (3.9)$$

Indeterminazione nell'analisi di Fourier

Una volta definiti questi concetti, possiamo tornare a parlare dei pacchetti di onde.

Supponiamo di voler rappresentare con la funzione $\psi(x)$ un pacchetto di onde, ad esempio un'onda elettromagnetica. Chiaramente essa deve essere localizzata in certe regioni dello spazio, in quanto in natura si dispone di energia finita. Allora imporre che una funzione d'onda sia a quadrato sommabile, ovvero

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

equivale alla necessità fisica di avere energia finita. Dunque possiamo parlare di "distribuzione di energia nello spazio" e applicare i concetti di valor medio e scarto quadratico medio, i quali indicano rispettivamente dove è principalmente localizzata l'energia e l'estensione della distribuzione. Osserviamo inoltre che, nel caso dell'onda elettromagnetica, i fotoni a essa associati sono distribuiti in proporzione all'energia, dunque la distribuzione di energia è anche una distribuzione di probabilità per la posizione dei fotoni.

Passiamo adesso alla trasformata di Fourier e consideriamo l'onda in questione come sovrapposizione di onde monocromatiche di lunghezze d'onda $2\pi/k_i$:

$$\psi(x) = \sum_j \tilde{\psi}(k_j) e^{ik_j x}$$

dove il coefficiente $\tilde{\psi}(k_j)$ fornisce il peso di ogni lunghezza d'onda diversa del pacchetto. Poichè i concetti statistici introdotti si possono estendere anche alla trasformata di Fourier della distribuzione, allora il termine $|\tilde{\psi}(k)|^2$ indica la densità di probabilità per la distribuzione dei numeri d'onda del pacchetto, $\langle k \rangle$ indica il valor medio dei numeri d'onda e σ_k il loro scarto quadratico medio.

Osserviamo che mentre nell'esempio qualitativo sull'interferenza tra due onde monocromatiche avevamo trovato che $\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k}$, dove Δx e Δk sono rispettivamente la distanza per avere un'interferenza negativa e la differenza di fase, adesso si è visto come per gli scarti quadratici valga che $\sigma_x \sim \frac{1}{\sigma_k}$. Dunque se si richiede un pacchetto ben localizzato (σ_x piccolo) allora bisogna fornire nella sovrapposizione una grande varietà di lunghezze d'onda (σ_k grande), e viceversa.

3.7 Analisi di Fourier di un pacchetto d'onda

Proprietà di un pacchetto di onde con dipendenza dal tempo

Sia data un'onda piana monocromatica $\psi(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$. Introduciamo una notazione quadrivettoriale per snellire i calcoli, definendo:

$$k^\mu = \left(\frac{\omega}{c}, \vec{k} \right)$$

da cui la funzione d'onda diventa $\psi = e^{-ik_\mu x^\mu}$.

Imponendo, com'è naturale che sia, la validità dell'equazione di D'Alembert $\partial_\mu \partial^\mu \psi = 0$ otteniamo quella che viene chiamata "relazione di dispersione":

$$\begin{aligned} \partial_\mu e^{-ik_\mu x^\mu} &= -ik_\mu e^{-ik_\mu x^\mu} \\ \partial_\mu \partial^\mu e^{-ik_\mu x^\mu} &= -k_\mu k^\mu e^{-ik_\mu x^\mu} = 0 \iff k_\mu k^\mu = 0 \end{aligned}$$

da cui, essendo $k_\mu k^\mu = \omega^2/c^2 - |\vec{k}|^2$:

$$\omega = c |\vec{k}| \quad (3.10)$$

Osserviamo che la relazione di dispersione non è in generale lineare, per cui scriveremo $\omega = \omega(\vec{k})$. Un altro esempio di relazione di dispersione lineare è quello delle onde elastiche a grandi lunghezze d'onda, ovvero a piccoli k , che si propagano in un mezzo dispersivo con velocità \vec{v} . In questo caso $\omega = v |\vec{k}|$.

Consideriamo adesso il caso in cui $\psi(\vec{r}, t)$ rappresenti un pacchetto di onde monocromatiche. In questo caso la relazione di dispersione non è più in generale lineare. Applicando la trasformata di Fourier, scriveremo:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}(\vec{k}, t) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k})t)}$$

Osserviamo che si tratta dello stesso tipo di trasformate finora utilizzate, infatti ricombinando i termini avremo:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \left[\tilde{\psi}(\vec{k}, t) e^{-i\omega(\vec{k})t} \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Osserviamo che scrivere $\omega = \omega(\vec{k})$ implica che ogni funzione del tipo $e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$ è una soluzione dell'equazione di D'Alembert. Il pacchetto è

infatti una sovrapposizione di funzioni che soddisfano l'equazione d'onda, quindi matematicamente anch'esso ne è soluzione per il principio di sovrapposizione, e dunque per il teorema di Fourier. In generale l'espressione di $\omega(\vec{k})$ può dipendere da vari fattori, tra cui mezzo di propagazione o posizione nei mezzi non omogenei. Per adesso considereremo mezzi omogenei.

Se definiamo *velocità di fase* la velocità con cui si propaga la fase di un'onda del pacchetto, allora nel caso di una relazione di dispersione lineare, essa non sarà altro che il coefficiente di proporzionalità

$$v = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{\lambda}{T}$$

Se invece vogliamo studiare la velocità con cui si sposta il pacchetto, allora bisogna fare delle considerazioni d'insieme sul pacchetto stesso. Il rapporto tra la pulsazione e il numero d'onda infatti, in generale, è una quantità che dipende da k :

$$\frac{\omega(k)}{k} = v(k)$$

Per chiarirci le idee, facciamo un ragionamento di tipo qualitativo considerando due onde del pacchetto, e per comodità restringendoci al caso unidimensionale. Supponiamo di avere nell'origine dell'asse x e all'istante $t = 0$ il punto di massimo del pacchetto, dove necessariamente molte onde si trovano in fase tra loro, in quanto deve prevalere l'interferenza costruttiva. In una certa posizione x e a un certo istante t , scegliendo due onde del pacchetto, avremo

$$\varphi = kx - \omega t$$

$$\varphi' = k'x - \omega' t$$

Calcoliamo la differenza di fase nella posizione x all'istante t :

$$\varphi - \varphi' = (k' - k)x - (\omega' - \omega)t$$

Allora in particolare possiamo considerare delle variazioni per numero d'onda e pulsazione nel pacchetto in modo tale che

$$k' = k + \delta k$$

$$\omega' = \omega + \delta \omega$$

da cui

$$\delta \varphi = \delta k x - \delta \omega t$$

Se imponiamo che la variazione di fase sia zero, ovvero che lo sfasamento sia minimo(???), si ha

$$\delta \varphi = 0 \iff \delta k x = \delta \omega t \iff \frac{x}{t} = \frac{\delta \omega}{\delta k}$$

Siccome x/t rappresenta la velocità con cui si sposta la zona di interferenza costruttiva, allora possiamo definire la quantità *velocità di gruppo* per un pacchetto che si propaga in un mezzo omogeneo come

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

Chiaramente essa dipende dal numero d'onda, dunque rispetto ad esso considereremo un valor medio di v_g , per poter parlare di velocità con cui si sposta il pacchetto. Se in particolare la relazione di dispersione è lineare, è banale verificare che $v_g = v$, ovvero la velocità di gruppo coincide con la velocità di fase.

Esercizio: calcolare il valor medio di posizione nel tempo e studiarne la velocità Dato il pacchetto $\psi(x, t)$, calcoliamo il valor medio

$$\langle x \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 x dx$$

al variare del tempo e calcoliamone la velocità di spostamento.

Applicando la trasformata di Fourier a $\psi(x, t)$ otteniamo

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_t &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 x dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x dx \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \tilde{\psi}(k_1)^* e^{-i(k_1 x - \omega_1 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_2}{2\pi} \tilde{\psi}(k_2) e^{i(k_2 x - \omega_2 t)} \end{aligned}$$

dove $\omega_1 = \omega(k_1)$ e $\omega_2 = \omega(k_2)$. Scriviamo adesso

$$x e^{ik_2 x} = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial k_2} \left(e^{ik_2 x} \right)$$

e invertiamo l'ordine d'integrazione utilizzando la distribuzione delta:

$$\langle x \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_2}{2\pi} \tilde{\psi}(k_1)^* e^{i\omega_1 t} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_1 x} \tilde{\psi}(k_2) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial k_2} \left(e^{ik_2 x} \right) e^{-i\omega_2 t} dx$$

A questo punto integriamo per parti e osserviamo che la derivata totale rispetto a k_2 si annulla poichè le funzioni vanno a zero a $-\infty$ e $+\infty$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_t &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_2}{2\pi} \tilde{\psi}(k_1)^* \left[i \frac{\partial}{\partial k_2} \tilde{\psi}(k_2) \right] e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k_2 - k_1)x} dx + \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_2}{2\pi} t \left(\frac{\partial}{\partial k_2} \omega_2 \right) \tilde{\psi}(k_1)^* \tilde{\psi}(k_2) e^{i\omega_1 t} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k_2 - k_1)x} dx \end{aligned}$$

Utilizzando a questo punto la delta di Dirac otteniamo

$$\langle x \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \tilde{\psi}(k_1)^* \left[i \frac{\partial}{\partial k_1} \tilde{\psi}(k_1) \right] + t \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_1}{2\pi} \left(\frac{\partial}{\partial k_1} \omega_1 \right) \tilde{\psi}(k_1)^* \tilde{\psi}(k_1)$$

Osserviamo che abbiamo utilizzato il fatto che

$$\frac{\partial}{\partial k_2} e^{-i\omega_2 t} = -i t e^{-i\omega_2 t} \frac{\partial}{\partial k_2} \omega_2$$

Vista l'assenza di ambiguità, adesso possiamo identificare $k = k_1$ e $\omega = \omega_1$.

Dalla definizione di valor medio, è evidente che il coefficiente moltiplicativo di t nell'espressione di $\langle x \rangle_t$ rappresenta il valor medio della velocità di gruppo, ovvero $\left\langle \frac{\partial \omega}{\partial k} \right\rangle$.

L'espressione del valor medio della posizione risulta essere dunque lineare nel tempo, e scriveremo:

$$\langle x \rangle_t = \langle x_0 \rangle + t \left\langle \frac{\partial \omega}{\partial k} \right\rangle$$

dove $\langle x_0 \rangle$ è il termine noto di questa espressione.

Calcolando la velocità è banale che

$$\frac{d\langle x \rangle_t}{dt} = \left\langle \frac{\partial \omega}{\partial k} \right\rangle$$

cioè la media della velocità di gruppo rappresenta la velocità con cui si sposta nel tempo il valor medio del pacchetto.

Esempio 3.12. Sia dato un elettrone che si trovi nello stato $|\psi\rangle$ descritto dalla funzione d'onda

$$\psi(r) = N \exp\left\{-\frac{r}{a}\right\}$$

con N costante di normalizzazione. Dopo aver normalizzato la funzione d'onda, si calcoli il valore medio dell'energia potenziale, l'indeterminazione sulla posizione e l'indeterminazione sull'impulso.

Normalizziamo la funzione $\psi(r)$:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \int |\psi(r)|^2 d^3\vec{r} = 1 \implies \\ \implies \langle \psi | \psi \rangle &= N^2 \int \exp\left\{-2\frac{r}{a}\right\} d^3\vec{r} = \\ &= N^2 4\pi \int_0^{+\infty} r^2 \exp\left\{-2\frac{r}{a}\right\} dr = 1 \end{aligned}$$

Sfruttando la relazione

$$\int_0^{+\infty} x^n \exp\{-\lambda x\} dx = \frac{n!}{\lambda^{n+1}} \quad (3.11)$$

che si prova in maniera immediata mediante la formula di integrazione per parti e procedendo in maniera ricorsiva, otteniamo che

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= N^2 4\pi \int_0^{+\infty} r^2 \exp\left\{-2\frac{r}{a}\right\} dr = \\ &= N^2 4\pi \frac{2!}{\left(\frac{2}{a}\right)^3} = \pi N^2 a^3 = 1 \implies \\ &\implies N = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \end{aligned}$$

La funzione d'onda normalizzata è quindi

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp\left\{-\frac{r}{a}\right\}$$

Calcoliamo adesso il valore medio dell'energia potenziale:

$$\begin{aligned} \langle V(r) \rangle &= \left\langle -\frac{e^2}{r} \right\rangle = \\ &= \int |\psi(r)|^2 \left(-\frac{e^2}{r}\right) d^3\vec{r} = \\ &= \int_0^{+\infty} \frac{1}{\pi a^3} \exp\left\{-\frac{2r}{a}\right\} \left(-\frac{e^2}{r}\right) 4\pi r^2 dr = \\ &= -\frac{4e^2}{a^3} \int_0^{+\infty} r \exp\left\{-\frac{2r}{a}\right\} dr = \\ &= -\frac{4e^2}{a^3} \frac{a^2}{4} = -\frac{e^2}{a} \end{aligned}$$

Determiniamo adesso l'indeterminazione sull'ascissa; per fare questo dobbiamo calcolare $\langle x^2 \rangle$ ed $\langle x \rangle$. Vista la parità della funzione rispetto a x , y , e z si ha che

$$\langle x \rangle = 0$$

Calcoliamo, dunque, $\langle r^2 \rangle$

$$\begin{aligned}\langle r^2 \rangle &= \int_0^{+\infty} \frac{1}{\pi a^3} \exp\left\{-\frac{2r}{a}\right\} r^2 4\pi r^2 dr = \\ &= \frac{4}{a^3} \int_0^{+\infty} r^4 \exp\left\{-\frac{2r}{a}\right\} dr = \\ &= \frac{4}{a^3} \left(\frac{a}{2}\right)^5 4! = 3a^2\end{aligned}$$

Poiché il problema è a simmetria sferica si ha che

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle$$

e quindi si ha

$$\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = \sqrt{\frac{1}{3} \langle r^2 \rangle} = a$$

Passiamo adesso al calcolo dell'indeterminazione sull'impulso. Per fare questo dobbiamo calcolare $\langle \vec{P}^2 \rangle$ ed $\langle \vec{P} \rangle$. Per calcolare $\langle p^2 \rangle$ possiamo procedere in vari modi:

- sfruttare la definizione dell'operatore impulso nella rappresentazione delle coordinate;
- determinare la trasformata di Fourier della funzione d'onda e calcolare

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

La seconda strada risulta essere più comoda solo quando si conosce già la trasformata di Fourier della funzione d'onda. Proseguiamo quindi applicando il primo metodo

$$\langle \vec{P}^2 \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) (-\hbar^2 \nabla^2) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

Calcoliamo il laplaciano della funzione d'onda

$$\begin{aligned}\nabla \psi(r) &= -\frac{1}{a} \frac{\vec{r}}{r} \exp\left\{-\frac{r}{a}\right\} \Rightarrow \\ \Rightarrow \nabla^2 \psi(r) &= \left(-\frac{3}{ar} + \frac{1}{ar^2} \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r} + \frac{1}{a^2} \frac{\vec{r}^2}{r^2}\right) \exp\left\{-\frac{r}{a}\right\} = \\ &= \left(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ar}\right) \exp\left\{-\frac{r}{a}\right\}\end{aligned}$$

e quindi

$$\begin{aligned}\langle \vec{P}^2 \rangle &= -\frac{\hbar^2}{\pi a^3} \int \exp\left\{-\frac{r}{a}\right\} \nabla^2 \exp\left\{-\frac{r}{a}\right\} d^3\vec{r} = \\ &= -\frac{\hbar^2}{\pi a^3} \int_0^{+\infty} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ar}\right) \exp\left\{-\frac{2r}{a}\right\} 4\pi r^2 dr = \\ &= -\frac{4\hbar^2}{\pi a^2} \int_0^{+\infty} \left(\frac{r^2}{a^2} - 2\frac{r}{a}\right) \exp\left\{-\frac{2r}{a}\right\} \frac{dr}{a} = \\ &= -\frac{4\hbar^2}{a^2} \int_0^{+\infty} (x^2 - 2x) \exp\{-2x\} dx = \frac{\hbar^2}{a^2}\end{aligned}$$

In maniera analoga a quanto visto per le posizioni anche in questo caso

$$\begin{aligned}\langle P_x \rangle &= \langle P_y \rangle = \langle P_z \rangle = 0 \\ \langle P_x^2 \rangle &= \langle P_y^2 \rangle = \langle P_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle \vec{P}^2 \rangle\end{aligned}$$

e quindi

$$\sigma_{p_x} = \sigma_{p_y} = \sigma_{p_z} = \frac{\hbar}{\sqrt{3}a}$$

Osserviamo che è valida la relazione di indeterminazione di Heisenberg con la disuguaglianza stretta

$$\sigma_x \sigma_{p_x} = \frac{\hbar}{\sqrt{3}} > \frac{\hbar}{2}$$

Determiniamo adesso la trasformata di Fourier di $\psi(r)$

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(\vec{k}) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \int d^3\vec{r} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \exp\{-i\vec{k} \cdot \vec{r}\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \int_0^{+\infty} r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \exp(-ikr \cos \theta) = \\ &= \frac{2\pi}{\sqrt{\pi a^3}} \int_0^{+\infty} r^2 \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \left[\frac{\exp(-ikr) - \exp(ikr)}{-ikr} \right] dr = \\ &= \frac{2\pi i}{\sqrt{\pi a^3} k} \int_0^{+\infty} r \exp\left(-\frac{r}{a}\right) [\exp(-ikr) - \exp(ikr)] dr = \\ &= \frac{2\pi i}{\sqrt{\pi a^3} k} \left\{ \int_0^{+\infty} r \exp\left[r\left(\frac{1}{a} + ik\right)\right] dr - \int_0^{+\infty} r \exp\left[-r\left(\frac{1}{a} - ik\right)\right] dr \right\} = \\ &= \frac{2\pi i}{\sqrt{\pi a^3} k} \left[\frac{1}{\left(\frac{1}{a} + ik\right)^2} - \frac{1}{\left(\frac{1}{a} - ik\right)^2} \right] = \\ &= \frac{2\pi i}{\sqrt{\pi a^3} k} \frac{-i\frac{4k}{a}}{\left(\frac{1}{a^2} + k^2\right)^2} = \\ &= \frac{8\pi}{\sqrt{\pi a^3} a} \frac{1}{\left(\frac{1}{a^2} + k^2\right)^2} = \\ &= \frac{8\pi a^3}{\sqrt{\pi a^3}} \frac{1}{(1 + a^2 k^2)^2} = \\ &= \frac{8\sqrt{\pi a^3}}{(1 + a^2 k^2)^2}\end{aligned}$$

3.8 Trasformata di Fourier di una funzione di Green

Un metodo generale per risolvere le equazioni differenziali lineari disomogenee consiste nel cercare la *funzione di Green*: sia data un'equazione nella forma

$$Lu(\vec{x}) = f(\vec{x})$$

dove L è un operatore lineare, $u(\vec{x})$ è la funzione incognita e $f(\vec{x})$ è una funzione nota.

Supponendo che esista l'operatore inverso L^{-1} possiamo scrivere la soluzione come

$$u(\vec{x}) = L^{-1}f(\vec{x})$$

Si definisce allora la funzione di Green $G(\vec{x}, \vec{x}')$ associata a L come il nucleo dell'operatore integrale L^{-1} , ovvero tale che

$$L^{-1}f(\vec{x}) = \int d^3\vec{x}' G(\vec{x}, \vec{x}')f(\vec{x}')$$

Quindi il problema si sposta dalla risoluzione dell'equazione alla ricerca di tale funzione G . Moltiplicando ambo i membri dell'ultima uguaglianza per L , che agisce sulla variabile \vec{x} ma non \vec{x}' otteniamo,

$$f(\vec{x}) = \int d^3\vec{x}' [LG(\vec{x}, \vec{x}')]f(\vec{x}')$$

Segue allora che l'operatore L applicato alla sua funzione di Green dev'essere una delta di Dirac:

$$LG(\vec{x} - \vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (3.12)$$

Risulta più facile trovare dapprima la trasformata di Fourier di G : scriviamo

$$G(\vec{x} - \vec{x}') = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{G}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \quad \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}$$

Senza perdita di generalità possiamo porre l'origine in \vec{x}' in modo che $\vec{x}' = 0$ per semplificare la scrittura. La Eq.(3.12) diventa allora

$$\int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{G}(\vec{k}) L(e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

da cui la trasformata

$$\tilde{G}(\vec{k}) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}}{L(e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}})}$$

In conclusione, la funzione di Green di L vale

$$G(\vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{2i\vec{k} \cdot \vec{x}}}{L(e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}})} \quad (3.13)$$

Quindi adesso la difficoltà sta nel calcolare l'integrale Eq.(3.13) per trovare la funzione di Green; fatto ciò, la soluzione potrà scriversi in forma chiusa come

$$u(\vec{x}) = L^{-1}f(\vec{x}) = \int d^3\vec{x}' G(\vec{x} - \vec{x}')f(\vec{x}')$$

Esempio 3.13. Vogliamo risolvere l'equazione di Poisson

$$\nabla^2 \varphi(\vec{x}) = -4\pi \rho(\vec{x})$$

Utilizziamo la Eq.(3.13) per calcolare la funzione di Green del laplaciano ∇^2 : abbiamo

$$\tilde{G}(\vec{k}) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}}{\nabla^2(e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}})} = -\frac{1}{k^2}$$

Calcoliamo quindi l'antitrasformata

$$G(\vec{x}) = - \int_{\mathbb{R}} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}}{k^2}$$

Passiamo in coordinate sferiche: $d^3 \vec{k} = k^2 dk d\cos\theta d\varphi$ e sfruttiamo il fatto che l'integranda sia invariante per rotazioni per ruotare gli assi k_x, k_y, k_z in modo che \vec{x} punti lungo k_z , e quindi $\vec{k} \cdot \vec{x} = k_z r = kr \cos\theta$ (avendo posto $r = \|\vec{x}\|$). Si ha quindi

$$\begin{aligned} G(\vec{x}) &= - \int_0^{+\infty} \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \int_{-1}^1 d\cos\theta \frac{e^{ikr \cos\theta}}{k^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= \frac{-2\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{+\infty} dk \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr} \\ &= \frac{-1}{(2\pi)^2} \frac{2}{r} \underbrace{\int_0^{+\infty} \frac{\sin kr}{k} dk}_{=\frac{\pi}{2}} = -\frac{1}{4\pi r} \end{aligned}$$

Ricordando che $r = \|\vec{x}\|$ e traslando l'origine spaziale nel vettore \vec{x}' , concludiamo che la funzione di Green del laplaciano è $G(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{-1}{4\pi \|\vec{x} - \vec{x}'\|}$, e la soluzione dell'equazione di Poisson è

$$\varphi(\vec{x}) = \int d^3 \vec{x}' \frac{\rho(\vec{x}')}{\|\vec{x} - \vec{x}'\|}$$

PARTE II
Meccanica Classica e
Relatività

Richiami di meccanica classica

CAPITOLO

4

4.1 Formulazione lagrangiana della meccanica classica

Una descrizione molto elegante della Meccanica Classica è quella basata sul *principio di minima azione*. Supponiamo che ad un sistema meccanico sia associata una funzione scalare L delle *coordinate lagrangiane* $\{q^\alpha\}$, delle *velocità generalizzate* $\{\dot{q}^\alpha\}$ e del tempo t , chiamata *Lagrangiana* del sistema. Inoltre, supponiamo di considerare delle curve $q^\alpha(t)$ nello *spazio delle configurazioni*, dove t varia tra t_1 e t_2 .

Allora, possiamo definire il funzionale *azione* S lungo la curva $q^\alpha(t)$ di estremi $q^\alpha(t_1)$ e $q^\alpha(t_2)$ come

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q^\alpha(t), \dot{q}^\alpha(t), t) dt$$

Si noti come il valore di S sia determinato una volta fissata la traiettoria $q^\alpha(t)$ nello spazio delle configurazioni. Adesso, supponiamo di *variare* la traiettoria $q^\alpha(t)$, considerando una traiettoria deformata $q^\alpha(t) + \delta q^\alpha(t)$, dove le funzioni $\delta q^\alpha(t)$ sono tali da essere sufficientemente regolari e da annullarsi in t_1 e t_2 (chiamiamo una variazione con queste caratteristiche *sincrona* e *ad estremi fissi*). Il principio di minima azione afferma che la variazione prima dell'azione, per variazioni sincrone e ad estremi fissi, è nulla calcolata sulla traiettoria fisica, cioè sulla traiettoria che effettivamente si realizza e soddisfa le equazioni del moto.

Si noti che, in una tale formulazione della Meccanica Classica, il *vulnus* è rappresentato dalla ricerca della Lagrangiana del sistema, in quanto essa va ricercata in modo tale che, tramite il principio di minima azione, fornisca le equazioni del moto corrette, le quali vengono ricavate dall'esperimento.

Adesso, eseguiamo il calcolo esplicito della variazione dell'azione per variazione sincrone e ad estremi fissi, osservando che $\delta \dot{q}^\alpha = \frac{d\delta q^\alpha}{dt}$:

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q^\alpha} \delta q^\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \delta \dot{q}^\alpha \right) dt =^{(1)} \\ &= \int_{t_2}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q^\alpha} \delta q^\alpha + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \delta q^\alpha \right) - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \delta q^\alpha \right] dt = \\ &= \int_{t_2}^{t_2} \delta q^\alpha \left(\frac{\partial L}{\partial q^\alpha} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \right) dt + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \delta q^\alpha \right]_{t_1}^{t_2} =^{(2)} \\ &= \int_{t_2}^{t_2} \delta q^\alpha \left(\frac{\partial L}{\partial q^\alpha} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} \right) dt \end{aligned}$$

4.1	Formulazione lagrangiana della meccanica classica	61
4.2	Dallo spazio delle configurazioni allo spazio delle fasi	63
4.3	Parentesi di Poisson ed equazioni di Hamilton	67
4.4	Trasformazioni canoniche	69
4.5	Trasformazioni canoniche infinitesime	74
4.6	Trasformazioni attive e passive	76
4.7	Composizione di trasformazioni	78
4.8	Gruppi di trasformazioni di simmetria	80
4.9	Da Hamilton-Jacobi all'equazione di Schrödinger	80

Funzionale d'azione

(1) Integro per parti il secondo addendo

(2) Il termine di bordo è nullo per estremi fissi
M. Agozzino, A. Biondo,
D. Di Prima, E. Di Stefano

Allora, abbiamo che $\delta S = 0 \forall \delta q^\alpha$ se e solo se

Equazioni di Eulero-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} = 0 \quad \forall \alpha \quad (4.1)$$

Le Eq.(4.1) si chiamano *equazioni di Eulero-Lagrange*, e non rappresentano altro che le equazioni del moto.

Ribadiamo che l'ostacolo di questa formulazione è rappresentato dalla ricerca della Lagrangiana, poiché bisogna trovarne una tale che inserita nelle Eq.(4.1) fornisca le equazioni del moto corrette.

Ad ogni modo, risulta possibile effettuare dei ragionamenti per trovare la forma funzionale della Lagrangiana, anche nel momento in cui si voglia estendere la teoria ad ambiti nei quali non si ha ancora conoscenza sperimentale diretta.

Lagrangiana di particella libera

Esempio 4.1. Supponiamo di avere una particella libera. Dall'esperienza sappiamo già che essa si muove di moto rettilineo uniforme, dunque conosciamo le equazioni del moto. Ciò nonostante, supponiamo di voler ignorare questa informazione e costruire la Lagrangiana con dei ragionamenti teorici.

Data l'omogeneità dello spazio (dovuta all'assenza di campi), L non potrà dipendere dalle coordinate $\{x^\alpha\}$ della particella. Inoltre, per l'isotropia dello spazio (dovuta alla medesima ragione), L non potrà dipendere dalla direzione della velocità della particella, ma unicamente dal suo modulo.

Allora, avremo che

$$L = L(v^2)$$

A questo punto, per un criterio di semplicità, possiamo immaginare che L sia uguale all'energia cinetica della particella:

$$L = \frac{1}{2}mv^2$$

Si verifica facilmente che una tale Lagrangiana fornisce le equazioni del moto corrette.

Lagrangiana di particella soggetta a potenziale

Esempio 4.2. Supponiamo di avere una particella avente una certa energia potenziale $U(q^\alpha)$. Inoltre, supponiamo che l'energia cinetica della particella sia una forma quadratica delle velocità generalizzate. Allora, risulta noto che la Lagrangiana ha la forma

$$L = T - U = \frac{1}{2}m\dot{q}^\beta\dot{q}^\beta - U(q^\alpha)$$

A questo punto, utilizzando le Eq.(4.1), otteniamo le seguenti equazioni del moto:

$$m\ddot{q}^\alpha = -\frac{\partial U}{\partial q^\alpha}$$

Inoltre, se definiamo l'*energia generalizzata* come $E = \dot{q}^\alpha \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} - L$, dopo qualche semplice passaggio otteniamo

$$E = 2T - T + U = T + U$$

Proposizione 4.3 (Non univocità della Lagrangiana). Data una Lagrangiana L , esistono infinite Lagrangiane fisicamente equivalenti

ad essa (danno origine alle stesse equazioni del moto). Ognuna di queste Lagrangiane L' differisce da L per la derivata temporale di una funzione arbitraria delle coordinate lagrangiane e del tempo:

$$L' = L + \frac{d}{dt}f(q^\alpha, t)$$

Dimostrazione. Siano

$$S' = \int_{t_1}^{t_2} L' dt = \int_{t_1}^{t_2} (L + \frac{df}{dt}) dt$$

e

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt$$

Procediamo a calcolare la variazione prima di S' per variazioni sincrone e ad estremi fissi:

$$\begin{aligned} \delta S' &= \delta \int_{t_1}^{t_2} (L + \frac{df}{dt}) dt = \delta S + \delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{df}{dt} dt = \delta S + [\delta f]_{t_1}^{t_2} = \\ &= \delta S + \left[\frac{\partial f}{\partial q^\alpha} \delta q^\alpha + \frac{\partial f}{\partial t} \delta t \right]_{t_1}^{t_2} = \delta S \end{aligned}$$

Allora, abbiamo ottenuto che $\delta S = 0$ se e solo se $\delta S' = 0$, cioè le due Lagrangiane sono equivalenti. \square

Proposizione 4.4 (Variabili cicliche). Sia data una Lagrangiana $L = L(q^\beta, \dot{q}^\beta, t)$. Se L non dipende dalla coordinata q^α , diremo che L è ciclica rispetto alla coordinata q^α .

Se L è ciclica rispetto a q^α , allora, lungo la traiettoria del moto, si conserva la quantità $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha}$. Chiamiamo tale quantità *impulso coniugato* alla variabile q^α .

Dimostrazione. Se L è ciclica rispetto a q^α , allora si ha che $\frac{\partial L}{\partial q^\alpha} = 0$. Utilizzando le Eq.(4.1), otteniamo che

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} = \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} = 0$$

e dunque

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} = \text{costante}$$

\square

4.2 Dallo spazio delle configurazioni allo spazio delle fasi

Data una Lagrangiana $L = L(q^\beta, \dot{q}^\beta, t)$, nella sezione precedente abbiamo definito l'impulso coniugato alla variabile q^α come $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha}$. Di seguito, indicheremo tale quantità con p_α .

A partire dagli impulsi coniugati, risulta possibile descrivere il sistema in una maniera differente rispetto a quella adoperata finora, la quale usa le coordinate lagrangiane e le velocità generalizzate. In particolare

possiamo passare dallo spazio delle configurazioni al cosiddetto *spazio delle fasi*, descrivendo il sistema attraverso le coordinate lagrangiane e gli impulsi coniugati:

$$(q^\alpha, \dot{q}^\alpha) \rightarrow (q^\alpha, p_\alpha)$$

Ovviamente, tale passaggio è lecito se è possibile invertire la relazione

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha}$$

in modo da ottenere l'espressione

$$\dot{q}^\alpha = \dot{q}^\alpha(q^\beta, p_\beta)$$

adoperando la quale è possibile ottenere una descrizione in termini di $\{q^\beta\}$ e $\{p_\beta\}$.

Una volta fatto ciò, all'interno di questo nuovo spazio, potremmo pensare per semplicità di descrivere il sistema attraverso una nuova Lagrangiana, funzione delle coordinate lagrangiane e degli impulsi:

$$L(q^\alpha, \dot{q}^\alpha, t) \rightarrow L(q^\alpha, \dot{q}^\alpha(q^\beta, p_\beta), t)$$

Vediamo perché questa cosa non è lecita ed è invece necessario l'uso della *trasformata di Legendre*.

Trasformata di Legendre

Supponiamo di avere una funzione $f(x)$ e definiamo la quantità $u = \frac{df}{dx}$ (cioè stiamo trattando la derivata di f come una variabile). Supponiamo di poter invertire quest'ultima relazione, ottenendo la x in funzione di u :

$$x = x(u)$$

A questo punto, possiamo sostituire la relazione appena ottenuta nell'espressione di $f(x)$, ottenendo $f(u)$, cioè la funzione di partenza espressa in funzione di una nuova variabile (il discorso è analogo per la Lagrangiana con la velocità generalizzata e l'impulso coniugato).

Fatto questo, è possibile ritornare indietro, cioè ricostruire la $f(x)$ a partire dalla $f(u)$?

Partendo dalla relazione $f = f(u)$, supponiamo di poterla invertire per ricavare $u = u(f)$. Ma per definizione si ha

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

Allora, possiamo scrivere che

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

Integrando, otteniamo che

$$x + c = \int \frac{df}{u(f)} = F(f)$$

dove c è una costante di integrazione e $F(f)$ è una primitiva di $\frac{1}{u(f)}$, che supponiamo di poter trovare. Allora, abbiamo ottenuto la relazione $F(f) = x + c$. Supponendo di poterla invertire, ricaviamo che

$$f = f(x + c)$$

cioè siamo riusciti a ricostruire la $f(x)$ a meno di una costante sulla variabile x , che non riusciamo a determinare.

Dunque, partendo dalla $f(u)$, troviamo infinite funzioni traslate di una costante sull'asse x rispetto alla funzione di partenza $f(x)$, cioè abbiamo perso dell'informazione.

Infatti, fissato x_0 , non riusciamo a stabilire quale sia $f_0 = f(x_0)$ (si veda figura a lato). Osserviamo però che, fissato x_0 , $p_0 = \frac{df}{dx}(x_0)$ risulta definita in modo univoco, cioè le infinite funzioni hanno la stessa derivata

Dopo questa digressione sulla perdita di informazione nel passaggio allo spazio delle fasi, procediamo adoperando una trasformata di Legendre sulla Lagrangiana, in modo da non perdere informazione.

Definiamo l'*Hamiltoniana* \mathcal{H} come

$$\mathcal{H}(q^\alpha, p_\alpha, t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\beta} \dot{q}^\beta - L \quad (4.2)$$

posto che sia possibile ottenere la relazione $\dot{q}^\alpha = \dot{q}^\alpha(q^\beta, p_\beta)$, in modo da poterla inserire all'interno della Eq.(4.2). La funzione appena definita coincide con l'*energia del sistema*.

Differenziando la Eq.(4.2), otteniamo

$$d\mathcal{H} = \dot{q}^\beta dp_\beta + p_\gamma d\dot{q}^\gamma - \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} dq^\alpha - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\delta} d\dot{q}^\delta - \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

Ricordando la definizione dell'impulso, possiamo scrivere

$$d\mathcal{H} = \dot{q}^\beta dp_\beta - \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} dq^\alpha - \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

In base alle equazioni di Lagrange⁽³⁾ (Eq.(4.1)), possiamo scrivere che ⁽³⁾ Ossia

$$d\mathcal{H} = \dot{q}^\beta dp_\beta - p_\alpha dq^\alpha - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (4.3) \quad \frac{\partial L}{\partial q^\alpha} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\alpha} = \dot{p}_\alpha$$

da cui seguono le seguenti relazioni:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\alpha} = \dot{q}^\alpha \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\alpha} = -\dot{p}_\alpha \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \end{cases}$$

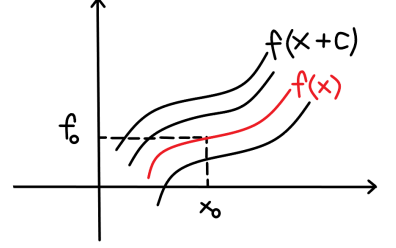
Le equazioni

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\alpha} = \dot{q}^\alpha \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\alpha} = -\dot{p}_\alpha \end{cases} \quad (4.4)$$

sono dette *equazioni di Hamilton*.

Osserviamo come le equazioni appena ottenute siano altamente simmetriche nelle $\{q^\alpha\}$ e $\{p_\alpha\}$. Inoltre, osserviamo che la Lagrangiana è ciclica rispetto alla coordinata q^γ se e solo se l'Hamiltoniana è ciclica rispetto alla medesima variabile.

Adesso, vediamo quando l'Hamiltoniana si conserva nel tempo, cioè quando l'energia si conserva.



Proposizione 4.5 (Dipendenza dal tempo di \mathcal{H}). Data l'Hamiltoniana $\mathcal{H} = \mathcal{H}(q^\beta, p_\beta, t)$, essa si conserva nel tempo sulla traiettoria del moto se e solo se essa non dipende esplicitamente dal tempo, e ciò accade se e solo se la Lagrangiana non dipende esplicitamente dal tempo.

Dimostrazione.

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\alpha} \dot{q}^\alpha + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\beta} \dot{p}_\beta + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = p_\alpha \dot{q}^\alpha - \dot{q}^\beta \dot{p}_\beta + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

□

Hamiltoniana di un rotatore rigido con un grado di libertà

Esempio 4.6. Per un tale sistema, l'energia cinetica si potrà scrivere come

$$T = \frac{1}{2} I \dot{\phi}^2$$

dove I è il momento di inerzia del sistema rispetto all'asse di rotazione e ϕ è la posizione angolare. Inoltre, il sistema potrà avere una certa energia potenziale $U(\phi)$. Allora, si avrà:

$$L = \frac{1}{2} I \dot{\phi}^2 - U(\phi)$$

da cui

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = I \dot{\phi}$$

e possiamo invertire la relazione appena ottenuta:

$$\dot{\phi} = \frac{p_\phi}{I}$$

Osserviamo che se $U(\phi) = 0$, la Lagrangiana è ciclica nella ϕ e si conserva la quantità p_ϕ .

Adesso, costruiamo l'Hamiltoniana del sistema:

$$\mathcal{H} = p_\phi \dot{\phi} - L = \frac{p_\phi^2}{I} - \frac{1}{2} I \frac{p_\phi^2}{I^2} + U(\phi) = \frac{p_\phi^2}{2I} + U(\phi).$$

Le equazioni di Hamilton che ne derivano sono le seguenti:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\phi} = \frac{p_\phi}{I} = \dot{\phi} \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} = \frac{\partial U}{\partial \phi} = -\dot{p}_\phi \end{cases}$$

Hamiltoniana di una particella in 2 dimensioni in coordinate polari

Esempio 4.7. La Lagrangiana di un tale sistema è

$$L = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - U(x, y)$$

dove m è la massa della particella e $U(x, y)$ la sua energia potenziale.

Ricordando che le relazioni che permettono il passaggio alle coordinate polari sono le seguenti:

$$\begin{cases} x = r \cos \phi \\ y = r \sin \phi \end{cases}$$

possiamo scrivere che

$$\begin{cases} \dot{x} = \dot{r} \cos \phi - r \dot{\phi} \sin \phi \\ \dot{y} = \dot{r} \sin \phi + r \dot{\phi} \cos \phi \end{cases}$$

Dopo semplici passaggi algebrici, otteniamo che

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - U(r, \phi)$$

Osserviamo che l'energia cinetica totale è stata scritta come somma di un contributo radiale ($\propto \dot{r}^2$) e di un contributo angolare ($\propto \dot{\phi}^2$).

A questo punto, troviamo gli impulsi coniugati:

$$\begin{cases} p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \\ p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mr^2\dot{\phi} \end{cases}$$

Possiamo invertire le relazioni appena trovate e ottenere

$$\begin{cases} \dot{r} = \frac{p_r}{m} \\ \dot{\phi} = \frac{p_\phi}{mr^2} \end{cases}$$

A questo punto, possiamo trovare l'Hamiltoniana del sistema:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= p_\phi \dot{\phi} + p_r \dot{r} - \frac{1}{2}m\dot{r}^2 - \frac{1}{2}mr^2\dot{\phi}^2 + U(r, \phi) = \\ &= \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\phi^2}{2mr^2} + U(r, \phi) \end{aligned}$$

Scriviamo le equazioni di Hamilton:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m} = \dot{r} \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial r} = -\frac{p_\phi^2}{mr^3} + \frac{\partial U}{\partial r} = -\dot{p}_r \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\phi} = \frac{p_\phi}{mr^2} = \dot{\phi} \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} = \frac{\partial U}{\partial \phi} = -\dot{p}_\phi \end{cases}$$

Osserviamo che nel caso in cui il campo sia centrale, cioè $\frac{\partial U}{\partial \phi} = 0$, si ha la conservazione di p_ϕ .

4.3 Parentesi di Poisson ed equazioni di Hamilton

Sia $A = A(q^\alpha, p_\alpha, t)$ una qualunque variabile dinamica nello spazio delle fasi e calcoliamone la derivata totale rispetto al tempo su una traiettoria $\{q^\alpha(t), p_\alpha(t)\}$:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial q^\alpha} \dot{q}^\alpha + \frac{\partial A}{\partial p_\alpha} \dot{p}_\alpha + \frac{\partial A}{\partial t}.$$

Se la traiettoria su cui calcoliamo $\frac{dA}{dt}$ è quella del moto, possiamo sfruttare le equazioni di Hamilton (Eq.(4.4)):

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial q^\alpha} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial A}{\partial p_\alpha} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\alpha} + \frac{\partial A}{\partial t}.$$

A questo punto, date due funzioni scalari f e g definite nello spazio delle fasi, definiamo la loro *parentesi di Poisson* come

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial q^\alpha} \frac{\partial g}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} \frac{\partial g}{\partial q^\alpha}. \quad (4.5)$$

Allora, possiamo scrivere che

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, \mathcal{H}\}.$$

In particolare, se A non dipende esplicitamente dal tempo, si ha che

$$\frac{dA}{dt} = \{A, \mathcal{H}\} \quad (4.6)$$

Dunque, dalla Eq.(4.6), possiamo dedurre che una variabile dinamica non dipendente esplicitamente dal tempo è un integrale primo del moto se e solo se la sua parentesi di Poisson con l'Hamiltoniana è nulla.

Proposizione 4.8 (Proprietà delle parentesi di Poisson). Ricordiamo le proprietà più importanti delle parentesi di Poisson, tutte ricavabili a partire dalla Eq.(4.5):

Antisimmetria
Proprietà analoga a quella vista per i commutatori
Linearità
Conseguenza diretta dell'antisimmetria
Identità di Jacobi

1. $\{A, B\} = -\{B, A\},$
2. $\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\},$
3. $\{\alpha A + \beta B, C\} = \alpha\{A, C\} + \beta\{B, C\}, \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{R})$
4. $\{A, A\} = 0,$
5. $\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0,$
6. $\{q^\beta, A\} = \frac{\partial A}{\partial p_\beta},$
7. $\{p_\beta, A\} = -\frac{\partial A}{\partial q^\beta}.$

Avendo introdotto le parentesi di Poisson, possiamo trovare una nuova forma per le equazioni di Hamilton, sfruttando le ultime due proprietà delle parentesi di Poisson:

$$\begin{aligned} \dot{q}^\alpha &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\alpha} = \{q^\alpha, \mathcal{H}\}, \\ \dot{p}_\alpha &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^\alpha} = \{p_\alpha, \mathcal{H}\}. \end{aligned}$$

Dunque, come si sarebbe anche potuto ottenere da Eq.(4.6), abbiamo che q^α e p_α sono degli integrali primi del moto se e solo se la loro parentesi di Poisson con l'Hamiltoniana è nulla. A scanso di equivoci, puntualizziamo che q^α e p_α non dipendono esplicitamente dal tempo, in quanto, sulla traiettoria del moto, esse sono delle variabili dinamiche $A(q^\beta(t), p_\beta(t), t) = q^\alpha(t)$ e $A'(q^\beta(t), p_\beta(t), t) = p_\alpha(t)$ (la dipendenza dal tempo non è esplicita, ma è per il tramite di q^α e p_α).

4.4 Trasformazioni canoniche

Supponiamo che il nostro sistema sia individuato nello spazio delle fasi dal punto (q^α, p_α) . Osserviamo che la scelta delle coordinate lagrangiane, e quindi anche dei momenti coniugati, non è unica. Dunque, possiamo cercare un nuovo set di variabili (q'^α, p'_α) che mantenga invariata la forma delle equazioni del moto e che non cambi il contenuto fisico del sistema. In particolare, la Lagrangiana nelle vecchie variabili deve essere fisicamente equivalente alla Lagrangiana nelle nuove variabili, e dunque esse devono differire al più per la derivata totale rispetto al tempo di una funzione arbitraria $F = F(q^\alpha, q'^\alpha, t)$:

$$L - L' = \frac{dF}{dt}. \quad (4.7)$$

Attraverso l'Eq.(4.2)⁽⁴⁾, possiamo riscrivere l'Eq.(4.7) come: (4)

$$p_\alpha \dot{q}^\alpha - \mathcal{H} = p'_\alpha \dot{q}'^\alpha - \mathcal{H}' + \frac{dF}{dt}, \quad (4.8) \quad \mathcal{H}(q^\alpha, p_\alpha, t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^\beta} \dot{q}^\beta - L \quad (4.2)$$

e dunque, in generale sarà

$$\mathcal{H}' \neq \mathcal{H}.$$

Cioè, per passare al nuovo sistema di coordinate, non possiamo semplicemente sostituire q^α con q'^α e p_α con p'_α nell'Hamiltoniana.

Calcolando dF a partire dalla Eq.(4.8), troviamo

$$dF = p_\alpha dq^\alpha - p'_\alpha dq'^\alpha + (\mathcal{H}' - \mathcal{H}) dt. \quad (4.9)$$

Osserviamo che delle $4n$ variabili $\{q^\alpha, p_\alpha, q'^\alpha, p'_\alpha\}$ non tutte sono indipendenti, ma deve necessariamente esistere una trasformazione intermedia che, ad esempio, note q^α e q'^α ci permetta di calcolare p_α e p'_α . La funzione F dunque non dipenderà da $4n$ variabili, ma solamente da $2n$ indipendenti (nel nostro caso da q^α e q'^α).⁽⁵⁾

Possiamo quindi pensare l'Eq.(4.9) come il differenziale totale della funzione F e ottenere quindi che:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial q^\alpha} = p_\alpha, \\ \frac{\partial F}{\partial q'^\alpha} = -p'_\alpha, \\ \frac{\partial F}{\partial t} = \mathcal{H}' - \mathcal{H}. \end{cases} \quad (4.10)$$

Osserviamo che se F dipende esplicitamente dal tempo, le due Hamiltoniane sono numericamente differenti, mentre in caso contrario le due Hamiltoniane sono numericamente uguali, pur avendo una forma funzionale differente (quando $\mathcal{H} = \mathcal{H}'$ si dice che la trasformazione è *completamente canonica*).

In generale, una trasformazione di coordinate e impulsi che lascia inalterata la fisica del sistema e la forma delle equazioni del moto è detta *trasformazione canonica*, e la funzione F prende il nome di *funzione generatrice*.

Nel caso più generale possibile⁽⁶⁾, la funzione generatrice dipende da n vecchie variabili e da n nuove variabili. Dunque, possiamo considerare una funzione del tipo

$$F_2 = F + p'_\alpha q'^\alpha,$$

(5) Qui vi è un'incongruenza: nella Eq.(4.7) abbiamo detto che $F = F(q, t)$ mentre adesso stiamo affermando che $F = F(q, q', t)$. Probabilmente ciò dipende dal fatto che per passare da Eq.(4.7) a Eq.(4.8) mediante la trasformata di Legendre non abbiamo tenuto in considerazione come varia il termine dF/dt . Per una trattazione più esauriente si rimanda al corso di meccanica

(6) Si rimanda al corso di Meccanica Analitica per una trattazione più esauriente.

il cui differenziale è

$$dF_2 = dF + p'_\alpha dq'^\alpha + q'^\alpha dp'_\alpha.$$

Utilizzando il risultato di Eq.(4.9) otteniamo

$$dF_2 = p_\alpha dq^\alpha + q'^\alpha dp'_\alpha + (\mathcal{H}' - \mathcal{H}) dt,$$

cioè si ha che $F_2 = F_2(q^\beta, p'_\beta, t)$ e le relazioni che ci permettono di trovare le variabili mancanti sono le seguenti:

$$\begin{cases} \frac{\partial F_2}{\partial q^\alpha} = p_\alpha, \\ \frac{\partial F_2}{\partial p'_\alpha} = q'^\alpha, \\ \frac{\partial F_2}{\partial t} = \mathcal{H}' - \mathcal{H}. \end{cases} \quad (4.11)$$

Nonostante F_2 sembri essere la trasformata di Legendre di F , in realtà non lo è esattamente; infatti affinché ciò sia vero è necessario che la relazione $\frac{\partial F}{\partial q'^\alpha} = -p'_\alpha$ sia invertibile rispetto a q'^α . Generalmente ciò non accade e dunque F ed F_2 costituiscono due classi indipendenti di trasformazioni.

Trasformazione identica

Esempio 4.9. Consideriamo la funzione generatrice $F_2 = q^\alpha p'_\alpha$. Applicando le Eq.(4.11) otteniamo

$$\begin{cases} q'^\alpha = q^\alpha, \\ p_\alpha = p'_\alpha, \end{cases} \quad (4.12)$$

cioè la *trasformazione identica*. Essa è importante perché possiamo costruire tutta una serie di trasformazioni in un suo intorno, cioè le trasformazioni infinitesime. Si noti che questa trasformazione non può essere ottenuta con una funzione generatrice di tipo F_1 (q^α e q'^α non possono essere considerate indipendenti nella trasformazione identica), e dunque la classe di trasformazioni generata da F_1 non contiene l'identità.

Trasformazione di scambio

Esempio 4.10. Consideriamo la funzione generatrice $F_1 = q^\alpha q'^\alpha$. Applicando le Eq.(4.10) otteniamo

$$\begin{cases} p_\alpha = q'^\alpha, \\ -p'_\alpha = q^\alpha. \end{cases} \quad (4.13)$$

Questa trasformazione trasforma le vecchie coordinate nei nuovi impulsi (a meno del segno) e i vecchi impulsi nelle nuove coordinate, ed è detta *trasformazione di scambio*. Si noti come essa non può essere ottenuta con una funzione generatrice di tipo F_2 (la classe di trasformazioni generata da F_2 non contiene la trasformazione di scambio). Essa mette in evidenza l'elevata simmetria presente nel formalismo hamiltoniano. Infatti, dalle equazioni di Hamilton (Eq.(4.4)), si può vedere che se l'Hamiltoniana non dipende da una coordinata si conserva l'impulso coniugato, e se invece non dipende da un impulso, si conserva la corrispondente coordinata. Allora, appare evidente che una trasformazione di scambio non altera la fisica del sistema e l'eventuale presenza di quantità conservate, proprio grazie alla simmetria delle equazioni di Hamilton.

Esempio 4.11. Consideriamo la funzione generatrice $F_2 = (q^\alpha + \lambda \delta_\beta^\alpha) p'_\alpha$ essendo $\lambda \in \mathbb{R}$. Applicando le Eq.(4.11) otteniamo

$$\begin{cases} q'^\alpha = q^\alpha + \lambda \delta_\beta^\alpha, \\ p_\alpha = p'_\alpha. \end{cases} \quad (4.14)$$

Essa è una *trasformazione di traslazione*, e in particolare abbiamo traslato di λ la coordinata q^β , lasciando inalterate le restanti coordinate e tutti gli impulsi.

Trasformazione di traslazione

Esempio 4.12. Consideriamo la funzione generatrice $F_2 = Q^\alpha(q^\beta) p'_\alpha$. Questo tipo di trasformazione trasforma le coordinate mediante una funzione che non dipende dagli impulsi, infatti applicando le Eq.(4.11) otteniamo

$$\begin{cases} q'^\alpha = Q^\alpha(q^\beta) \\ p_\alpha = \frac{\partial Q^\beta}{\partial q^\alpha} p'_\beta \end{cases} \quad (4.15)$$

Notiamo che

$$\frac{\partial Q^\beta}{\partial q^\alpha} = \frac{\partial q'^\beta}{\partial q^\alpha} \quad (4.16)$$

dunque si ha

$$p_\alpha = \frac{\partial q'^\beta}{\partial q^\alpha} p'_\beta \quad (4.17)$$

Notiamo che i volumi nello spazio delle fasi si trasformano come

$$\int d^N q d^N p = \int \left| \frac{\partial(q, p)}{\partial(q', p')} \right| d^N q' d^N p' \quad (4.18)$$

e quindi per una trasformazione puntuale si ha che lo jacobiano risulta essere unitario, dunque

$$\int d^N q d^N p = \int d^N q' d^N p' \quad (4.19)$$

questo costituisce un caso particolare di quello che è noto come teorema di Liouville, ed è valido per qualunque tipo di trasformazione canonica.

Trasformazione puntuale

Approfondimento

Il teorema di Liouville afferma che ogni trasformazione canonica preserva i volumi nello spazio delle fasi; in simboli

$$\int d^N q d^N p = \int d^N q' d^N p'$$

Ne proponiamo in seguito una breve dimostrazione compiuta dal Landau nel suo primo volume.

Senza alcuna perdita di generalità assumiamo $N = 1$ per semplificare la notazione. Consideriamo la trasformazione canonica

$(q, p) \rightarrow (q', p')$ e denotiamo con

$$\frac{\partial(q', p')}{\partial(q, p)}$$

il determinante jacobiano di tale trasformazione. Come è ben noto dall'analisi, i volumi si trasformano come

$$\int dq' dp' = \int \frac{\partial(q', p')}{\partial(q, p)} dq dp$$

si tratta dunque di provare che lo jacobiano sia pari a 1. Gli jacobiani soddisfano le seguenti utili proprietà

$$\begin{aligned} \frac{\partial(q', p')}{\partial(q, p)} &= \frac{\partial(q', p')}{\partial(x, y)} \bigg/ \frac{\partial(q, p)}{\partial(x, y)} \\ \frac{\partial(q, p, x)}{\partial(q', p', x)} &= \frac{\partial(q, p)}{\partial(q', p')} \bigg|_{x=const} \end{aligned}$$

Possiamo quindi riscrivere lo jacobiano della nostra trasformazione come un rapporto di altri due determinanti

$$\frac{\partial(q', p')}{\partial(q, p)} = \frac{\partial(q', p')}{\partial(q, p')} \bigg/ \frac{\partial(q, p)}{\partial(q, p')} = \frac{\partial q'}{\partial q} \bigg|_{p'=const} \bigg/ \frac{\partial p}{\partial p'} \bigg|_{q=const}$$

e per le relazioni di compatibilità ottenute dal differenziale $dF_2(q, p', t)$ della funzione generatrice del secondo tipo - che è una forma differenziale chiusa in quanto esatta per canonicità della trasformazione - si ha che numeratore e denominatore dell'ultimo membro sono uguali, quindi

$$\frac{\partial(q', p')}{\partial(q, p)} = 1$$

come volevasi dimostrare.

Tale teorema riveste un ruolo importante in meccanica statistica, dato che permette di studiare le evoluzioni dei sistemi a molte particelle come se fossero *flussi hamiltoniani* di fluidi incompressibili nello spazio delle fasi.

Proposizione 4.13 (Invarianza per trasformazioni canoniche delle parentesi di Poisson). Le parentesi di Poisson sono invarianti per trasformazioni canoniche. Cioè, date due funzioni $A = A(q^\beta, p_\beta)$ e $B = B(q^\beta, p_\beta)$, a seguito di una trasformazione canonica, esse muteranno la loro forma funzionale, ma

$$\left\{ A(q^\beta, p_\beta), B(q^\beta, p_\beta) \right\}_{q, p} = \left\{ A(q'^\beta, p'_\beta), B(q'^\beta, p'_\beta) \right\}_{q', p'}. \quad (4.20)$$

Dimostrazione. Effettuiamo la dimostrazione nel caso in cui la funzione generatrice della trasformazione canonica non dipenda esplicitamente dal tempo. Allora, la dimostrazione risulta assai

semplice; infatti presa una qualunque funzione $A = A(q^\beta, p_\beta)$, la sua derivata temporale è data, secondo l'Eq.(4.6)⁽⁷⁾, da

$$\frac{dA(q^\beta, p_\beta)}{dt} = \left\{ A(q', p_\beta), \mathcal{H}(q^\beta, p_\beta, t) \right\}_{q, p}.$$

Effettuando una trasformazione completamente canonica $(q^\beta, p_\beta) \rightarrow (q'^\beta, p'_\beta)$, nelle nuove variabili abbiamo

$$\frac{dA(q'^\beta, p'_\beta)}{dt} = \left\{ A(q'^\beta, p'_\beta), \mathcal{H}(q'^\beta, p'_\beta, t) \right\}_{q', p'}.$$

Tuttavia, poiché la derivata di una funzione rispetto al tempo non può dipendere dal sistema di coordinate scelto, allora deve essere

$$\left\{ A(q', p_\beta), \mathcal{H}(q^\beta, p_\beta, t) \right\}_{q, p} = \left\{ A(q'^\beta, p'_\beta), \mathcal{H}(q'^\beta, p'_\beta, t) \right\}_{q', p'}.$$

Sembrerebbe che abbiamo dimostrato Eq.(4.20) nel solo particolare caso in cui $B = \mathcal{H}$. Tuttavia possiamo fare questa semplice osservazione: in nessun passaggio della nostra dimostrazione abbiamo detto come \mathcal{H} deve dipendere da q^β e p_β . Infatti, da un punto di vista squisitamente matematico, la dinamica hamiltoniana non impone nessuna restrizione su \mathcal{H} : ciò che ci porta a scrivere $\mathcal{H} = T + V$ è l'imporre il requisito che tale funzione descriva l'evoluzione temporale del nostro sistema fisico. Quindi, nei passaggi precedenti, \mathcal{H} sarebbe potuta essere una funzione qualunque di q^β e p_β , ottenendo il risultato desiderato.⁽⁸⁾

In conclusione, possiamo affermare che condizione necessaria e sufficiente affinché una trasformazione sia canonica è che valga l'Eq.(4.20). \square

Esempio 4.14. Sia R la matrice che descrive una data rotazione. Supposto di descrivere il sistema con le coordinate cartesiane $\{x_i\}$, in seguito ad una rotazione, queste mutano con la legge

$$x'_i = R_{ij}x_j. \quad (4.21)$$

Questa è una trasformazione puntuale e la funzione generatrice a essa associata deve essere necessariamente una funzione di tipo F_2 , avente la seguente forma:

$$F_2(x_i, p'_i) = R_{ij}x_jp'_i. \quad (4.22)$$

Applicando le Eq.(4.11)⁽⁹⁾ otteniamo

$$\begin{cases} x'_i = R_{ij}x_j, \\ p_i = R_{ij}p'_j. \end{cases} \quad (4.23)$$

Consideriamo la seconda equazione; essa può essere riscritta come

$$p_i = (R^T)_{ji}p'_j.$$

Poiché la matrice di trasformazione è ortogonale, cioè $R^T = R^{-1}$, si ha

$$p_i = (R^{-1})_{ji}p'_j.$$

$$\frac{dA}{dt} = \{A, \mathcal{H}\} \quad (4.6)$$

(8) Si può dimostrare l'Eq.(4.20) in maniera più esplicita utilizzando la definizione di parentesi di Poisson, la definizione di trasformazione canonica e la regola di derivazione di funzioni composte.

(9)
$$\begin{cases} \frac{\partial F_2}{\partial q^\alpha} = p_\alpha, \\ \frac{\partial F_2}{\partial p'_\alpha} = q'^\alpha, \\ \frac{\partial F_2}{\partial t} = \mathcal{H}' - \mathcal{H}. \end{cases} \quad (4.11)$$

Invertendo la precedente relazione, si ottiene

$$p'_i = R_{ij}p_j, \quad (4.24)$$

cioè i momenti ruotano con la stessa matrice con cui ruotano le coordinate.

4.5 Trasformazioni canoniche infinitesime

Una trasformazione canonica può essere costruita nell'intorno dell'identità come

$$F_2(q^\beta, p'_\beta) = q^\alpha p'_\alpha + \varepsilon G(q^\beta, p'_\beta), \quad (4.25)$$

dove ε è un parametro reale. Se esso è un parametro infinitesimo, la trasformazione indotta da tale funzione generatrice è detta *trasformazione canonica infinitesima*. Applicando le Eq.(4.11), otteniamo

$$\begin{cases} p_\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial q^\alpha} = p'_\alpha + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q^\alpha}, \\ q'^\alpha = \frac{\partial F_2}{\partial p'_\alpha} = q^\alpha + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p'_\alpha}. \end{cases} \quad (4.26)$$

Introdotti $\delta p_\alpha = p'_\alpha - p_\alpha$ e $\delta q^\alpha = q'^\alpha - q^\alpha$, abbiamo che

$$\begin{cases} \delta p_\alpha = -\varepsilon \frac{\partial G(q^\beta, p'_\beta)}{\partial q^\alpha}, \\ \delta q^\alpha = \varepsilon \frac{\partial G(q^\beta, p'_\beta)}{\partial p'_\alpha}. \end{cases} \quad (4.27)$$

Supponendo ε infinitesimo e trascurando termini di ordine superiore al primo (cioè i termini $\mathcal{O}(\varepsilon^2)^{(10)}$), possiamo assumere che $G(q^\beta, p'_\beta) = G(q^\beta, p_\beta)$ e sostituire la derivata rispetto a p'_α con quella rispetto a p_α , ottenendo:

$$\begin{cases} \delta p_\alpha = -\varepsilon \frac{\partial G(q^\beta, p_\beta)}{\partial q^\alpha}, \\ \delta q^\alpha = \varepsilon \frac{\partial G(q^\beta, p_\beta)}{\partial p_\alpha}. \end{cases} \quad (4.28)$$

⁽¹⁰⁾ Qui e in seguito, con la scrittura $\mathcal{O}(\varepsilon^n)$, indicheremo i termini tali che $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{O}(\varepsilon^n)}{\varepsilon^n} \in \mathbb{R}$, cioè i termini che sono dell'ordine di ε^n o di ordine superiore.

Approfondimento

Infatti, possiamo scrivere che

$$G(q^\beta, p'_\beta) = G(q^\beta, p_\beta) + \delta p_\alpha \frac{\partial G}{\partial p'_\alpha} + \dots = G(q^\beta, p_\beta) + \mathcal{O}(\varepsilon).$$

Allora, abbiamo che

$$\begin{aligned} \delta q^\alpha &= \varepsilon \frac{\partial G(q^\beta, p'_\beta)}{\partial p'_\alpha} = \varepsilon \left[\frac{\partial G(q^\beta, p_\beta)}{\partial p_\gamma} \frac{\partial p_\gamma}{\partial p'_\alpha} + \frac{\partial G(q^\beta, p_\beta)}{\partial q^\gamma} \frac{\partial q^\gamma}{\partial p'_\alpha} + \mathcal{O}(\varepsilon) \right] = \\ &= \varepsilon \left\{ \frac{\partial G(q^\beta, p_\beta)}{\partial p_\gamma} [\delta_{\alpha\gamma} + \mathcal{O}(\varepsilon)] + \frac{\partial G(q^\beta, p_\beta)}{\partial q^\gamma} \mathcal{O}(\varepsilon) + \mathcal{O}(\varepsilon) \right\} = \\ &= \varepsilon \frac{\partial G(q^\beta, p_\beta)}{\partial p_\alpha} + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

In conclusione, a meno di infinitesimi di ordine superiore al primo, resta provato che valgono le Eq.(4.28).

La seguente dimostrazione è frutto dell'autore del capitolo; non la presentiamo per mera pedanteria, ma perché si tratta di un passaggio chiave: dal poter scambiare p'_β con p_β otteniamo come importantissimo risultato che sia le coordinate q^α che i loro impulsi coniugati p_α possono considerarsi dei generatori di trasformazioni infinitesime, fatto che useremo in meccanica quantistica quando imporremo che gli operatori hermitiani associati a posizione e impulso si riducano, nel limite classico, ai generatori q^α e p_α .

La funzione G prende il nome di *generatore della trasformazione infinitesima*.

Esempio 4.15. Assumiamo che sia $G = q^\beta$; dalle Eq.(4.28) abbiamo che

$$\begin{cases} \delta p_\beta = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q^\beta} = -\varepsilon, \\ \delta p_\alpha = 0 \quad \forall \alpha \neq \beta, \\ \delta q^\gamma = 0 \quad \forall \gamma. \end{cases} \quad (4.29)$$

Traslazione dell'impulso

La trasformazione canonica indotta da questo generatore è la traslazione infinitesima di p_β , impulso coniugato alla coordinata q^β .

Esempio 4.16. Sia $G = p_\beta$; dalle Eq.(4.28) si ottiene:

$$\begin{cases} \delta q^\beta = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_\beta} = \varepsilon, \\ \delta q^\alpha = 0 \quad \forall \alpha \neq \beta, \\ \delta p_\gamma = 0 \quad \forall \gamma. \end{cases} \quad (4.30)$$

Traslazione delle coordinate

La trasformazione canonica indotta da questo generatore è la traslazione della coordinata coniugata all'impulso p_β . Si noti come, simmetricamente, l'impulso sia il generatore di una traslazione infinitesima della coordinata coniugata e la coordinata sia il generatore di una traslazione infinitesima dell'impulso coniugato.

Esempio 4.17. Siano le coordinate cartesiane $\{x, y, z\}$ le nostre coordinate lagrangiane. Sia $G = L_z = xp_y - yp_x$; proviamo che tale funzione è il generatore di una rotazione infinitesima attorno

all'asse z . Dalle Eq.(4.28) si ha:

Rotazione attorno all'asse z

$$\begin{cases} \delta x = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_x} = -\varepsilon y, \\ \delta y = -\varepsilon \frac{\partial G}{\partial p_y} = \varepsilon x, \\ \delta p_x = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial x} = -\varepsilon p_y, \\ \delta p_y = \varepsilon \frac{\partial G}{\partial y} = \varepsilon p_x; \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x' = x - \varepsilon y, \\ y' = y + \varepsilon x, \\ p'_x = p_x - \varepsilon p_y, \\ p'_y = p_y + \varepsilon p_x. \end{cases} \quad (4.31)$$

Passando alla rappresentazione matriciale otteniamo

$$\begin{pmatrix} p'_x \\ p'_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon \\ \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon \\ \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

Ricordiamo che la matrice che rappresenta una rotazione di un angolo θ attorno all'asse z è

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (4.34)$$

In particolare, se $\theta \rightarrow 0$, possiamo scrivere $\cos \theta \simeq 1$ e $\sin \theta \simeq \theta$, e la matrice di rotazione può essere approssimata come

$$\begin{pmatrix} 1 & -\theta \\ \theta & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

La trasformazione indotta da G è quindi una rotazione infinitesima attorno all'asse z .

4.6 Trasformazioni attive e passive

Consideriamo una trasformazione canonica $(q^\alpha, p_\alpha) \rightarrow (q'^\alpha, p'_\alpha)$ in cui si abbia

$$\begin{cases} q'^\alpha = q'^\alpha(q^\beta, p_\beta) \\ p'_\alpha = p'_\alpha(q^\beta, p_\beta) \end{cases} \quad (4.36)$$

In generale il dominio in cui variano (q^α, p_α) è diverso da quello in cui variano (q'^α, p'_α) . Diremo *trasformazione canonica regolare* quella particolare trasformazione canonica nella quale il dominio in cui variano le nuove variabili coincide con quello in cui variano le vecchie.

Una trasformazione regolare permette di considerare la trasformazione canonica *in senso attivo*: invece di pensare (q'^α, p'_α) come lo stesso punto nello spazio delle fasi in un nuovo sistema di riferimento, possiamo vederlo come un nuovo punto nello stesso spazio delle fasi. Ciò corrisponde a una trasformazione attiva in cui abbiamo cambiato lo stato del sistema (abbiamo dato al sistema un nuovo atto di moto).

Sia A una qualunque variabile dinamica che descriva il sistema; in generale $A(q^\beta, p_\beta) \neq A(q'^\beta, p'_\beta)$, nonostante la dipendenza funzionale resti uguale. Se in tale trasformazione $\mathcal{H}(q^\beta, p_\beta) = \mathcal{H}(q'^\beta, p'_\beta)$, allora diremo che essa è una *trasformazione di simmetria*. Se l'Hamiltoniana rimane

invariata per rototraslazioni, allora la rototraslazione è una trasformazione di simmetria.

Consideriamo una variabile dinamica $A = A(q^\beta, p_\beta)$ e determiniamone la variazione a seguito di una trasformazione canonica in senso attivo.

$$\delta A = \frac{\partial A}{\partial q} \delta q + \frac{\partial A}{\partial p} \delta p \quad (4.37)$$

Sostituendo le Eq.(4.28) otteniamo

$$\delta A = \frac{\partial A}{\partial q} \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p} + \frac{\partial A}{\partial p} \left(-\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q} \right) = \varepsilon \{A, G\} \quad (4.38)$$

Tutte le trasformazioni di simmetria che lasciano invariata una variabile dinamica sono quelle i cui generatori hanno parentesi di Poisson nulla con la variabile dinamica stessa, cioè:

$$\delta A = 0 \iff \{A, G\} = 0 \quad (4.39)$$

Poiché per definizione una trasformazione di simmetria lascia invariata l'hamiltoniana deve essere

$$\{\mathcal{H}, G\} = 0 \quad (4.40)$$

Dunque le trasformazioni di simmetria sono quelle i cui generatori hanno parentesi di Poisson nulla con l'hamiltoniana. Tuttavia l'hamiltoniana stessa può essere considerata come generatore di una funzione di simmetria; infatti posto $G = \mathcal{H}$ dalle Eq.(4.28) si ricava

$$\begin{cases} \delta p = -\varepsilon \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \\ \delta q = \varepsilon \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \end{cases} \quad (4.41)$$

e dunque posto $\varepsilon = \delta t$, dividendo le precedenti relazioni per ε si ottengono proprio le equazioni di Hamilton. La trasformazione canonica generata da \mathcal{H} è l'evoluzione temporale del nostro sistema. Essa può essere vista come una trasformazione di tipo attivo: partendo da un punto nello spazio delle fasi, a seguito di tale trasformazione canonica sono ricondotto a un altro punto dello stesso spazio delle fasi.

Preso un generatore G possiamo interpretare la scrittura $\{\mathcal{H}, G\}$ in due modi differenti:

- G è il generatore di una trasformazione di simmetria che lascia invariata l'hamiltoniana, cioè $\delta \mathcal{H} = 0$
- \mathcal{H} è il generatore della trasformazione canonica, dunque poiché tale trasformazione coincide con l'evoluzione temporale del sistema, si può affermare che G è un integrale primo del moto.

Concludiamo quindi affermando che tutte e sole le grandezze conservate sono i generatori di trasformazioni di simmetria che lasciano invariata l'hamiltoniana. Quanto affermato altro non è che una nuova forma per il teorema di Noether.

Esempio 4.18. Consideriamo una rotazione attorno all'asse z ; come abbiamo già visto il generatore di tale trasformazione canonica è L_z ,

cioè la componente z del momento angolare. Se vogliamo calcolare la parentesi di Poisson tra L_z e la funzione $x^2 + y^2$ abbiamo

$$\{L_z, x^2 + y^2\} = 0$$

in quanto la funzione $x^2 + y^2$ è invariante per rotazioni attorno all'asse z .

Andiamo a calcolare $\{L_x, L_y\}$. Banalmente essa sarà non nulla perché se vediamo L_x come il generatore di una rotazione attorno all'asse x , tale rotazione non lascia invariata L_y e viceversa.

$$\begin{aligned}\{L_x, L_y\} &= \{yp_z - zp_y, L_y\} = \{yp_z, L_y\} - \{zp_y, L_y\} = \\ &= y\{p_z, L_y\} + \{y, L_y\}p_y - z\{p_y, L_y\} - \{z, L_y\}p_y\end{aligned}$$

I termini $\{y, L_y\}$ e $\{p_y, L_y\}$ sono banalmente nulli perché la rotazione attorno all'asse y generata da L_y lascia invariati y e p_y , dunque la precedente relazione si riduce a

$$\begin{aligned}\{L_x, L_y\} &= y\{p_z, L_y\} - \{z, L_y\}p_y = \\ &= y\left[-\frac{\partial}{\partial z}(zp_x - xp_z)\right] - \frac{\partial}{\partial p_z}(zp_x - xp_z)p_y = \\ &= xp_y - yp_x = L_z\end{aligned}$$

Si prova in modo generale che $\{L_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk}L_k$.

Proviamo adesso che $\{L_z, L^2\} = 0$.

$$\begin{aligned}\{L_z, L^2\} &= \{L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2\} = \\ &= \{L_z, L_x^2\} + \{L_z, L_y^2\} + \{L_z, L_z^2\} = \\ &= L_x\{L_z, L_x\} + \{L_z, L_x\}L_x + L_y\{L_z, L_y\} + \{L_z, L_y\}L_y = \\ &= 2L_xL_y - 2L_yL_x = 0\end{aligned}$$

Avremmo potuto dimostrare la precedente affermazione senza fare neanche un calcolo osservando che

- $\{L_z, L_z^2\} = 0$ in quanto la componente z del momento angolare è invariante per rotazioni attorno all'asse z ;
- $\{L_z, L_x^2 + L_y^2\} = 0$ in quanto la proiezione del momento angolare sul piano xy è invariante per rotazioni attorno all'asse z .

4.7 Composizione di trasformazioni

Sia A una variabile dinamica tale che $A = A(q, p)$; per una trasformazione infinitesima si ha che $\delta A = \varepsilon\{A, G\}$, dove G è il generatore della trasformazione. Consideriamo due trasformazioni distinte per cui si ottiene rispettivamente $\delta A_1 = \varepsilon_1\{A, G_1\}$ e $\delta A_2 = \varepsilon_2\{A, G_2\}$ e indaghiamo circa cosa accade applicandole in successione in ordine diverso.

- Applichiamo prima la trasformazione G_1 e poi la trasformazione G_2 . Le variazioni di A durante i due step sono in ordine:

$$\begin{cases} \delta A_1 = \varepsilon_1\{A, G_1\} \\ \delta A_2 = \varepsilon_2\{A + \delta A_1, G_2\} \end{cases}$$

Andando a quantificare δA_2 ; in questo specifico caso si ottiene:

$$\begin{aligned}\delta A_2 &= \varepsilon_2\{A + \delta A_1, G_2\} = \varepsilon_2\{A + \varepsilon_1\{A, G_1\}, G_2\} = \\ &= \varepsilon_2\{A, G_2\} + \varepsilon_1\varepsilon_2\{\{A, G_1\}, G_2\}\end{aligned}$$

La variazione totale della grandezza A dovuta alla trasformazione complessiva sarà dunque:

$$\delta A_{12} = \delta A_1 + \delta A_2 = \varepsilon_1\{A, G_1\} + \varepsilon_2\{A, G_2\} + \varepsilon_1\varepsilon_2\{\{A, G_1\}, G_2\}$$

- Applichiamo, al contrario, prima la trasformazione G_2 e poi la trasformazione G_1 . Rinominando le variazioni rispetto al caso precedente, si ottiene:

$$\begin{cases} \delta A_2 = \varepsilon_2\{A, G_2\} \\ \delta A_1 = \varepsilon_1\{A + \delta A_2, G_1\} \end{cases} \quad (4.42)$$

Quindi se valutiamo stavolta δA_1 , si ha:

$$\begin{aligned}\delta A_1 &= \varepsilon_1\{A + \delta A_2, G_1\} = \varepsilon_1\{A + \varepsilon_2\{A, G_2\}, G_1\} = \\ &= \varepsilon_1\{A, G_1\} + \varepsilon_2\varepsilon_1\{\{A, G_2\}, G_1\}\end{aligned}$$

Mentre la variazione totale di A risulta essere:

$$\delta A_{21} = \delta A_2 + \delta A_1 = \varepsilon_2\{A, G_2\} + \varepsilon_1\{A, G_1\} + \varepsilon_2\varepsilon_1\{\{A, G_2\}, G_1\} \quad (4.43)$$

I risultati finali delle due trasformazioni sono rispettivamente $A + \delta_{12}A$ e $A + \delta_{21}A$. Dunque, per quantificare quanto sono diversi i due risultati, calcoliamo la differenza tra le due variazioni:

$$\begin{aligned}\delta A_{12} - \delta A_{21} &= \varepsilon_1\varepsilon_2[\{\{A, G_1\}, G_2\} - \{\{A, G_2\}, G_1\}] = \\ &= \varepsilon_1\varepsilon_2[\{\{A, G_1\}, G_2\} + \{\{G_2, A\}, G_1\}]\end{aligned}$$

Se aggiungiamo ad ambo i membri il termine $\varepsilon_1\varepsilon_2\{\{G_1, G_2\}, A\}$ si ottiene al secondo membro l'identità di Jacobi per le parentesi di Poisson, per cui possiamo scrivere:

$$\delta A_{12} - \delta A_{21} = -\varepsilon_1\varepsilon_2\{\{G_1, G_2\}, A\} = \varepsilon_1\varepsilon_2\{A, \{G_1, G_2\}\}$$

Il risultato appena ricavato può essere sintetizzato nella seguente proposizione:

Proposizione 4.19. La differenza tra le variazioni di A ottenute componendo due trasformazioni di generatori G_1, G_2 e parametri infinitesimi $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ prima in un ordine e poi nell'altro può essere intesa come la variazione dovuta a una trasformazione infinitesima avente come generatore G' la parentesi di Poisson dei generatori delle singole trasformazioni $G' = \{G_1, G_2\}$ e come parametro infinitesimo ε' il prodotto dei singoli parametri $\varepsilon' = \varepsilon_1\varepsilon_2$. La variazione della variabile dinamica considerata sarà dunque $\delta A = \varepsilon'\{A, G'\}$.

Quanto appena dimostrato comporta che, se i generatori di due trasformazioni *commutano*, cioè $\{G_1, G_2\} = 0$, allora l'ordine di applicazione delle due trasformazioni non influisce sul risultato finale.

Esempio 4.20. Nelle proprietà del momento angolare abbiamo visto che $\{L_x, L_y\} = L_z$. Dunque se consideriamo una rotazione infinitesima attorno all'asse x e una rotazione infinitesima attorno all'asse y , l'ordine di applicazione delle due rotazioni influisce sul risultato finale, e la differenza tra le variazioni è dovuta a una rotazione attorno all'asse z , infatti $G_1 = L_x$, $G_2 = L_y$ e $G' = L_z$.

4.8 Gruppi di trasformazioni di simmetria

Mostriamo adesso che le trasformazioni di simmetria presentano una struttura di gruppo, rispetto all'operazione di composizione. Per fare un esempio, è evidente che le rotazioni nello spazio siano un gruppo, anche per quanto visto sulle relazioni tra i loro generatori, ovvero le componenti del momento angolare.

Un altro esempio è dato dalle traslazioni nello spazio, che sono un gruppo abeliano, infatti $\{P_i, P_j\} = 0$. Il gruppo più ampio è costituito dall'insieme delle rototraslazioni $(L_x, L_y, L_z, P_x, P_y, P_z)$ le quali costituiscono un gruppo non abeliano, infatti se considero le parentesi di Poisson di due generatori qualsiasi posso trovare che essi non commutano, ma l'operazione di composizione è chiusa:

$$\{P_x, L_y\} = \{P_x, zP_x - xP_z\} = -\partial_x(zP_x - xP_z) = P_z$$

Risulta evidente che le rotazioni e le traslazioni costituiscono un sottoinsieme delle rototraslazioni; è importante notare che in generale se un insieme ha la struttura di gruppo rispetto a una legge di composizione non è garantito che ogni suo sottoinsieme sia anche un sottogruppo, in quanto devono continuare a valere le proprietà anche per tale sottoinsieme. Per portare un esempio, consideriamo l'insieme delle rotazioni generate da L_x ed L_y ; tale insieme non è un sottogruppo delle rotazioni, in quanto $\{L_x, L_y\} = L_z$, e dunque non è chiuso rispetto alla legge di composizione. Vale in generale la seguente proposizione:

Proposizione 4.21. Sia dato un set di generatori di trasformazioni di simmetria $\{G_i\}$, allora l'insieme delle trasformazioni generate da tale set di generatori ha la struttura di gruppo se vale che:

$$\{G_i, G_j\} = \sum_k c_k^{ij} G_k, \quad (4.44)$$

dove c_k^{ij} sono dei coefficienti reali.

4.9 Da Hamilton-Jacobi all'equazione di Schrödinger

(11) Passiamo da $2n$ equazioni differenziali del primo ordine a un'equazione differenziale alle derivate parziali del primo ordine.

Ricaviamo adesso l'equazione di Hamilton-Jacobi⁽¹¹⁾. Ciò che si vuole fare è determinare una relazione che trasforma un problema meccanico in un'equazione differenziale del 1° ordine per la funzione $S(q, t)$, detta *funzione azione*. Consideriamo come traiettoria la traiettoria fisica del sistema con estremo iniziale fissato ed estremo superiore variabile nel tempo. Con questa scelta, la funzione azione si può scrivere come

$$S(q, t) = \int_{t_0}^t L(q, \dot{q}, t') dt'.$$

Così facendo, S risulta essere una funzione unicamente della variabile t , in quanto la traiettoria risulta essere fissata (cioè sono fissate le variabili q). Calcolandone la derivata rispetto al tempo, si ottiene

$$\frac{dS}{dt} = L = p\dot{q} - H,$$

da cui passando ai differenziali, otteniamo

$$dS = p dq - H dt.$$

Possiamo quindi ricavare le relazioni

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial q} &= p; \\ \frac{\partial S}{\partial t} &= -H.\end{aligned}$$

Ricordando che $H = H(q, p, t)$, possiamo scrivere

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = 0, \quad (4.45)$$

che è proprio l'equazione di Hamilton-Jacobi.

Lavorando nell'ambito dell'ottica geometrica, possiamo trascurare la natura ondulatoria della radiazione e considerare la luce come un fascio di raggi e studiarla mediante l'applicazione delle leggi della meccanica classica, tra cui l'equazione di Hamilton-Jacobi Eq.(4.45).

In piccole regioni dello spazio è sempre possibile approssimare la radiazione a un'onda piana di equazione $\exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))$, dove \vec{k} è il vettore d'onda e ω la frequenza⁽¹²⁾. Nel caso di ottica geometrica, però, gli effetti ondulatori sono trascurabili e possiamo considerare l'onda come un sistema costituito da particelle in moto rettilineo lungo la direzione individuata da \vec{k} . L'approssimazione di ottica geometrica vale, però, solo quando la lunghezza d'onda λ è molto minore delle dimensioni caratteristiche del sistema L . Vediamo come questa condizione si traduce in termini della fase dell'onda, definita come $\varphi = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t$:

$$\frac{L}{\lambda} \gg 1 \implies \frac{2\pi L}{\lambda} \gg 2\pi > 1 \implies kL \gg 1.$$

Visto che $|\vec{r}| \approx L$, si ha che

$$\varphi \gg 1.$$

Consideriamo l'azione S delle particelle nella maniera classica; poiché il moto è rettilineo uniforme, l'impulso e l'energia sono costanti, dunque

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial \vec{r}} &= \vec{p} = \text{cost} \\ \frac{\partial S}{\partial t} &= -H = \text{cost}\end{aligned}$$

Dunque

$$S = \vec{p} \cdot \vec{r} - Et + \text{cost}.$$

Osservando la forma della funzione S notiamo come essa ci ricordi l'espressione della fase ϕ dell'onda elettromagnetica. Andiamo allora a definire la "funzione d'onda" del fascio di particelle:

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{i\frac{S}{\hbar}} \quad (4.46)$$

⁽¹²⁾ In generale l'onda si può sempre scrivere come sovrapposizione di termini del suddetto tipo

dove \hbar è una costante delle dimensioni di S che viene inizialmente inserita per rendere adimensionale l'esponente. Osserviamo che aver affermato che $\phi \gg 1$ significa, tradotto in termini di funzione d'onda del fascio, che $S/\hbar \gg 1$ (è questa l'espressione che ci consente di operare in un caso limite in cui è valida la meccanica classica). Una volta fatta questa assunzione, si può lavorare sulla funzione d'onda trattando il sistema come classico:

$$\psi = e^{i\frac{S}{\hbar}} = e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}-Et}{\hbar}} = e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = e^{i(\frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot\vec{r}-\frac{E}{\hbar}t)} = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

Dunque otteniamo le seguenti relazioni che legano le caratteristiche del fascio di particelle a quelle dell'onda elettromagnetica:

$$\begin{cases} \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \\ \omega = \frac{E}{\hbar} \end{cases}$$

In particolare dalla prima otteniamo la *relazione di De Broglie*:

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p}$$

dove $h = 2\pi\hbar$ è una costante che viene fuori dalla fenomenologia, e si trova che $h \sim 10^{-34} Js$.

In generale, se la funzione d'onda è del tipo Eq.(4.46), il fatto che S è soluzione di Eq.(4.45) vale solo nel caso di limite classico. Sotto tale ipotesi, considero S soluzione dell'equazione di Hamilton-Jacobi Eq.(4.45) e la inserisco nell'espressione della funzione d'onda. Iniziamo derivando la funzione d'onda:

$$\begin{aligned} \nabla\psi &= \frac{i}{\hbar} \nabla S \psi \\ \left(\frac{\hbar}{i} \nabla\psi\right) &= (\nabla S) \psi \end{aligned}$$

Derivando due volte ψ otteniamo:

$$\begin{aligned} \nabla^2\psi &= \frac{i}{\hbar} (\nabla^2 S) \psi + \left(\frac{i}{\hbar} \nabla S\right)^2 \psi \\ \left(\frac{\hbar}{i} \nabla^2\psi\right) &= (\nabla S)^2 \psi + \frac{\hbar}{i} (\nabla^2 S) \psi \end{aligned}$$

Al limite classico abbiamo che $S/\hbar \gg 1$, per cui vale la seguente espressione:

$$\left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right)^n = (\nabla S)^n \psi$$

Se invece deriviamo ψ rispetto al tempo

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} \frac{\hbar}{i} = \left(\frac{\partial S}{\partial t}\right) \psi$$

Poiché stiamo supponendo che valga l'equazione di Hamilton-Jacobi, Da

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H(\vec{r}, \nabla S, t)$$

otteniamo l'equazione:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial\psi}{\partial t} = -H\left(\vec{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla, t\right) \psi \quad (4.47)$$

che viene definita *equazione di Schroedinger* nel caso limite.

Formalismo della relatività ristretta

CAPITOLO

5

Introduzione al capitolo

Introduciamo adesso la relatività ristretta e il formalismo che naturalmente ne deriva. Dopo aver visto il perché risulta essere necessaria una teoria della relatività ristretta (§5.1), introduciamo l'intervallo invariante (§5.2) e le trasformazioni di Lorentz (§5.3). Infine, introduciamo i quadrivettori e i quadritensori (§5.4).

5.1	Introduzione discorsiva	83
5.2	Intervallo invariante	84
5.3	Trasformazioni di Lorentz	85
5.4	Componenti dei quadritensori	89

5.1 Introduzione discorsiva

Tutti i fenomeni della natura avvengono nello spazio e nel tempo; ogni elemento di fenomeno che si realizza in un volume sufficientemente piccolo e in un intervallo sufficientemente breve è detto *evento* e può essere rappresentato numericamente tramite coordinate spaziali e temporali quando viene fissato un sistema di riferimento. La descrizione di un fenomeno fisico può così essere ricondotta alla descrizione di una successione di eventi.

E' un dato di fatto — a meno di scuole di pensiero differenti — che ogni evento si realizzi indipendentemente dalla presenza di un osservatore; quindi non può esistere un riferimento privilegiato rispetto al quale rappresentare un evento. Si rende così necessario stabilire in che modo la descrizione di uno stesso fenomeno differisca tra i diversi riferimenti, tramite *leggi di trasformazione delle coordinate di un evento*. Queste sono importanti soprattutto perché spesso per un dato fenomeno potrebbe esistere un riferimento che, sebbene non privilegiato, ne renda più semplice la descrizione; riferimenti di questo tipo sono ad esempio quelli inerziali e quelli baricentrali. Anche la geometria analitica si pone il problema di studiare come cambia un luogo di punti a seguito di trasformazioni di vario tipo, ma in tale disciplina è assente l'interesse di considerare riferimenti in moto relativo fra di essi, inevitabilmente presenti in fisica per via dell'utilizzo del tempo come ulteriore coordinata.

Quando vogliamo considerare riferimenti in moto relativo, sorgono due domande:

1. In che modo il moto di un riferimento influenza l'osservazione di un fenomeno, e quindi come cambiano le *leggi fisiche* passando da un riferimento all'altro?
2. Qual è la correlazione tra le *misure quantitative* di uno stesso fenomeno osservato da riferimenti diversi?

Questa introduzione è una sintesi di quanto scritto dall'Ugarov nel primo capitolo del suo testo *Teoria della relatività ristretta*.

La prima domanda conduce alla formulazione del principio di relatività: *le leggi fisiche sono identiche in tutti i sistemi di riferimento inerziali.*

La risposta alla seconda è data dalle trasformazioni di Galileo nella fisica classica, e di Lorentz nella fisica relativistica.

Velocità di propagazione delle interazioni

Oggi sappiamo che molti fenomeni naturali sono descrivibili, almeno in linea di principio e per quanto ne riguarda l'aspetto più fondamentale, in termini di interazioni tra particelle. In meccanica classica, le interazioni sono descritte tramite funzioni, che possono essere le forze o i loro potenziali, che dipendono dalle posizioni reciproche occupate dalle particelle interagenti. Ciò presuppone che le interazioni si propaghino istantaneamente, in quanto uno spostamento di una particella provocherebbe immediatamente una variazione della forza che agisce sull'altra. Tuttavia, non solo in tutti i fenomeni fisici osservati ad oggi scorre sempre un intervallo di tempo finito tra l'avvenire di una *causa* in un punto *A* dello spazio e di un *effetto* in un altro punto *B* distante dal primo, ma l'esperienza mostra come esista una velocità massima con cui tutte le interazioni si propagano. Per il principio di relatività, questa velocità deve essere la stessa in tutti i sistemi di riferimento inerziali, quindi si tratta di una costante universale. Dallo studio delle onde elettromagnetiche si deduce che tale costante deve coincidere con la velocità della luce nel vuoto, che vale

$$c = 2.988 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

Principio di corrispondenza

La meccanica classica richiede pertanto di essere corretta con un'unica ma fondamentale modifica nei suoi assiomi: mentre nel principio galileiano si postula velocità d'interazione infinita (come conseguenza dell'invarianza dei tempi), in quello di Einstein si postula velocità d'interazione finita. Le conseguenze di questa modifica sono molteplici e profonde, e il motivo per cui le previsioni della meccanica non relativistica risultano comunque molto precise nella descrizione dei fenomeni della vita di tutti i giorni è che in confronto la velocità c è talmente alta che *le leggi relativistiche si riducono a quelle classiche nel limite di piccole velocità*; questo è l'enunciato del *principio di corrispondenza*, che risulta fondamentale per formulare correttamente le teorie relativistiche.

5.2 Intervallo invariante

Vogliamo determinare le leggi di trasformazione delle coordinate di un evento coinvolte nel passaggio da un riferimento inerziale all'altro, tali per cui la velocità c sia invariante.

Il primo passo che possiamo compiere è stabilire se queste trasformazioni ammettano una funzione invariante delle coordinate, ossia che sotto l'azione di tali trasformazioni è lasciata identica. Questa funzione può essere dedotta direttamente dai postulati della relatività ristretta: consideriamo una sorgente puntiforme di luce che si propaga in tutte le direzioni con velocità c . Rispetto ad un riferimento inerziale K , l'equazione cartesiana del fronte d'onda di luce è

$$\Delta r^2 = c^2 \Delta t^2 \quad (5.1)$$

dove $\Delta r^2 = \Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \Delta x_3^2$. Per il principio di relatività di Einstein, a seguito della trasformazione $(x_1, x_2, x_3, t) \mapsto (x'_1, x'_2, x'_3, t')$ da K a K' inerziale, deve continuare a valere

$$(\Delta r')^2 = c^2 (\Delta t')^2 \quad (5.2)$$

ciò implica che, definendo l'intervallo $\Delta s^2 = c^2 \Delta t^2 - \Delta r^2$, questo dev'essere invariante, cioè

$$\Delta s^2 = \Delta s'^2 \quad (5.3)$$

Osservazione

In realtà, affinché le Eq.(5.1) e Eq.(5.2) siano equivalenti devono annullarsi contemporaneamente i due intervalli, e in generale ciò avviene se

$$\Delta s^2 = \alpha \Delta s'^2$$

dove α è una costante che dipende dai riferimenti K e K' . Per omogeneità dello spazio e del tempo, α non può dipendere dalle coordinate degli eventi, quindi $\alpha = \alpha(\mathbf{v})$ con \mathbf{v} velocità di K' rispetto a K ; per isotropia dello spazio deve in particolare essere $\alpha = \alpha(v)$ con v modulo di \mathbf{v} . Consideriamo tre riferimenti inerziali K, K_1 e K_2 e chiamiamo \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 le velocità di K_1 e K_2 rispetto a K . Allora

$$\Delta s^2 = \alpha(v_1) \Delta s_1^2 = \alpha(v_2) \Delta s_2^2$$

e chiamata \mathbf{v}_{12} la velocità di K_2 rispetto a K_1 , deve anche valere

$$\Delta s_1^2 = \alpha(v_{12}) \Delta s_2^2$$

Confrontando le ultime due relazioni si ottiene

$$\frac{\alpha(v_2)}{\alpha(v_1)} = \alpha(v_{12})$$

e notiamo che mentre v_{12} dipende, oltre che dai moduli di \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 , dall'angolo θ formato da \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 , il primo membro non dipende da θ . Quindi l'ultima relazione può valere soltanto se α non dipende nemmeno dalla velocità v_{12} e quindi è una funzione costante. Dovendo essere anche $\alpha(v_1) = \alpha(v_2) = \text{cost}$, segue che $\alpha(v) = 1$.

Questa osservazione è rintracciabile nel [LL10].

Notiamo come Δs^2 sia invariante per rototraslazioni spaziali combinate con una traslazione temporale, in quanto lasciano invariati singolarmente Δr^2 e Δt^2 come già poteva succedere in relatività galileiana. La novità adesso è che sono anche ammesse trasformazioni che modificano sia lo spazio Δr^2 che il tempo Δt^2 affinché si conservi Δs^2 .

A seconda del segno di Δs^2 si distinguono tre tipi di intervalli diversi:

- $\Delta s^2 > 0 \iff$ intervallo di tipo tempo
- $\Delta s^2 = 0 \iff$ intervallo di tipo luce
- $\Delta s^2 < 0 \iff$ intervallo di tipo spazio

Classificazione degli intervalli

Si ponga attenzione al fatto che questa classificazione dipende dalla segnatura scelta convenzionalmente nella metrica, che nel nostro corso è $(+, -, -, -)$. Altri autori adottano la segnatura $(+, +, +, -)$ per avere una metrica euclidea nel sottospazio \mathbb{R}^3 , e in quel caso risulta $\Delta s^2 < 0$ se questo è di tipo tempo.

5.3 Trasformazioni di Lorentz

Si può dimostrare che le più generali trasformazioni di coordinate di un evento tra due riferimenti inerziali debbono essere lineari affini⁽¹⁾, cioè la

(1) Sulla giustificazione di questa affermazione si consultì l'approfondimento posto alla fine di questo paragrafo.

composizione di una trasformazione lineare e di una traslazione. Quindi a meno di traslazioni cerchiamo le più generali trasformazioni lineari che conservino la quantità $c^2t^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$. Dato che le rotazioni in n dimensioni sono le più generali trasformazioni che lasciano invariata ogni forma quadratica del tipo

$$x_1^2 + \dots + x_n^2$$

Gruppo $SO(4)$

ponendo $x_4 = ict$ possiamo scrivere l'intervallo in questa forma, in modo che risulti

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = \text{invariante}$$

e questa quantità è invariante sotto l'azione del gruppo delle matrici ortogonali speciali⁽²⁾ 4×4 , denotato con $SO(4)$. Questo è un gruppo a 6 parametri, in quanto abbiamo un parametro per ogni piano in cui può avvenire la rotazione, che è uno dei seguenti

$$\underbrace{x_1x_2 \quad x_1x_3 \quad x_2x_3}_{\text{spazio-spazio}} \quad \underbrace{x_1x_4 \quad x_2x_4 \quad x_3x_4}_{\text{spazio-tempo}}$$

Le rotazioni che coinvolgono i piani x_1x_2 , x_1x_3 , x_2x_3 sono le rotazioni spaziali che conosciamo già. In più abbiamo le rotazioni spazio-temporali nei piani x_1x_4 , x_2x_4 , x_3x_4 ; poiché possiamo annullare le componenti x_2 e x_3 tramite rotazioni spaziali, è sufficiente studiare la rotazione nel piano x_1x_4 , che è regolata da una matrice di $SO(2)$, per cui ponendo $x = x_1$ abbiamo la trasformazione lineare

$$\begin{pmatrix} x' \\ x'_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ x_4 \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

da cui si verifica facilmente che $x^2 + x_4^2$ è invariante come volevamo. Poiché $x_4 = ict$, l'ultima trasformazione è in realtà una cosiddetta rotazione iperbolica, in quanto geometricamente è una trasformazione di simmetria per le iperboli di equazione $-c^2t^2 + x^2 = k$ piuttosto che per le circonferenze: dato che valgono le relazioni

$$i \sin \theta = \sinh i\theta \quad \cos \theta = \cosh i\theta$$

e ridistribuendo l'unità immaginaria nella Eq.(5.4) quest'ultima diventa la trasformazione di un gruppo denotato con $SO(1, 1)$

$$\begin{pmatrix} x' \\ ct' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh i\theta & -\sinh i\theta \\ -\sinh i\theta & \cosh i\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ ct \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

Questa trasformazione è nota come *boost di Lorentz lungo la direzione x* .

Il significato fisico della Eq.(5.5) è ancora oscuro per la presenza del parametro θ . Per capire meglio cosa questo rappresenti, studiamo il caso in cui l'evento coincida con l'origine di K' , in modo che $x' = ct' = 0$. Allora in tal caso si ha

$$\frac{v}{c} = \frac{x}{ct} = \tanh i\theta \quad (5.6)$$

dove v è la velocità dell'origine di K' rispetto a K , che ricordiamo essere diretta lungo x nelle ipotesi fatte ($x_2 = x_3 = 0$). Vale inoltre l'identità trigonometrica

$$1 - \tanh^2 i\theta = \frac{1}{\cosh^2 i\theta} \quad (5.7)$$

(2) Anche le matrici ortogonali con determinante -1 lasciano invariata questa forma quadratica; si tenga a mente tuttavia, come fa notare il prof. V. Moretti nelle dispense del suo corso di relatività speciale a p.80, che le leggi fisiche che regolano l'interazione debole — a differenza delle altre 3 interazioni — non rispettano la cosiddetta simmetria di parità, ossia l'invarianza per riflessioni. Negli anni '50 si ebbero le prime osservazioni della violazione della simmetria di parità nei fenomeni di decadimento beta. Se quindi vogliamo che valga il principio di relatività esteso a *tutte* le leggi della fisica, dobbiamo considerare solo il sottogruppo delle rotazioni spaziali che ha determinante $+1$.

Notiamo come componendo due boost in direzioni diverse possiamo ottenere una trasformazione complessiva equivalente ad un boost composto ad una rotazione spaziale. Questo è un fenomeno fisico, che non ha un analogo classico, noto come *rotazione di Wigner*. Pertanto l'insieme dei boost, affinché formi un gruppo, deve essere accoppiato con l'insieme delle rotazioni spaziali.

e ponendo $\beta = \tanh i\theta \stackrel{(5.6)}{=} v/c$ e $\gamma = \cosh i\theta$ abbiamo

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (5.8)$$

dove abbiamo assunto $\gamma > 0$ affinché il verso dello scorrimento del tempo si conservi, come si osserva in natura⁽³⁾.

Quindi notando che $\gamma^2 - 1 = \beta^2 \gamma^2$ possiamo riscrivere la Eq.(5.5) come

$$\begin{pmatrix} x' \\ ct' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta \\ -\gamma\beta & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ ct \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

che è la comune forma del boost di Lorentz. Possiamo ottenere una trasformazione lineare più generale componendo un boost con una rotazione spaziale; le trasformazioni di quest'ultimo tipo sono chiamate *trasformazioni di Lorentz*.

Se includiamo anche le altre 2 dimensioni spaziali e conveniamo che da adesso la prima componente sia quella temporale, il boost lungo x ha la forma

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

(3) Altra osservazione del prof. Moretti: come abbiamo già notato con la simmetria di parità, la classe delle trasformazioni che lascia invariato Δs^2 è in realtà troppo vasta per essere in accordo con il principio di relatività esteso a tutte le leggi fisiche: nonostante ammettere le inversioni temporali sia matematicamente corretto, questo farebbe sì che il secondo principio della termodinamica abbia la stessa forma solamente tra riferimenti in cui il tempo scorre nello stesso verso.

Boost di Lorentz

dove le componenti y, z rimangono invariate perché stiamo solamente effettuando una rotazione iperbolica nel piano $x ct$. Si deduce che il linguaggio naturale della relatività ristretta è quello dei quadri-vettori, ossia quadruplette di numeri che si trasformano secondo quest'ultima legge. Denotando con x^μ , $\mu = 0, 1, 2, 3$ le componenti del quadri-vettore (ct, x, y, z) , l'ultima legge di trasformazione può scriversi come (utilizzando la convenzione di Einstein sugli indici ripetuti)

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu \quad (5.11)$$

dove Λ^μ_ν è una matrice appartenente al gruppo ortocrono $SO(1, 3)$; il nome è dovuto al fatto che poiché $\Lambda^0_0 > 0$, il verso temporale è invariato. Tale gruppo ha la proprietà di lasciare invariata la forma quadratica $ct^2 - x^2 - y^2 - z^2 = x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu$, dove abbiamo indicato con

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

la *matrice della metrica di Minkowski*. Affinché $x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu = \mathbf{x}^T g \mathbf{x}$ sia invariante, si deve avere la conservazione del prodotto scalare $(\mathbf{x}')^T g \mathbf{x}' = \mathbf{x}^T g \mathbf{x}$, ossia

$$(\Lambda \mathbf{x})^T g (\Lambda \mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \Lambda^T g \Lambda \mathbf{x} = \mathbf{x}^T g \mathbf{x}$$

cioè Λ deve soddisfare l'identità

$$\Lambda^T g \Lambda = g \quad (5.12)$$

che generalizza la definizione di matrice ortogonale al caso degli spazi muniti di metriche non euclidee.

Proprietà generali delle trasformazioni fra sistemi inerziali

Approfondimento

In questo paragrafo si citano approfondimenti circa la forma delle trasformazioni di Galileo e di Lorentz.

Il punto di partenza di ogni deduzione delle trasformazioni di Galileo o di Lorentz è la constatazione che, in quanto devono preservare la validità del principio d'inerzia, le trasformazioni delle coordinate debbono essere lineari affini, cioè del tipo

Linearità delle trasformazioni

$$\begin{cases} x'_i = a_{ij}x_j + b_i & \forall i = 1, 2, 3 \\ t' = ht + k \end{cases}$$

Molti autori giustificano questa forma delle trasformazioni cercate con una delle seguenti argomentazioni, in ordine di popolarità:

1. Per un riferimento inerziale lo spazio è omogeneo e isotropo e il tempo è omogeneo, dove con omogeneità e isotropia si intende rispettivamente invarianza per traslazioni e invarianza per rotazioni. Le più generali trasformazioni che preservano tali simmetrie sono quelle lineari affini.
2. Un moto rettilineo uniforme avviene su una retta, e le più generali trasformazioni che trasformano rette in altre rette con continuità e senza mandare punti all'infinito sono quelle lineari affini.
3. L'unico tipo di trasformazione la cui inversa ha ancora la stessa forma è quella lineare affine.

I dettagli matematici di queste affermazioni sono però poco discussi. D'altro canto, è molto intuitivo il fatto che le trasformazioni devono essere necessariamente di questa forma.

Se il lettore è interessato ad approfondire questo argomento, può consultare ad esempio l'articolo [Ver22]⁽⁴⁾ in cui è presente una dimostrazione (relativamente) semplice della linearità delle trasformazioni tra due riferimenti inerziali.

Si consiglia inoltre la lettura dell'articolo [PT15]⁽⁵⁾ in cui si mostra in maniera molto semplice ed elegante che le trasformazioni di Galileo e di Lorentz sono le uniche trasformazioni lineari che rispettano il principio di relatività e al contempo formano un gruppo, in particolare che sono chiuse sotto la composizione; questo è un risultato molto interessante perché la richiesta di struttura di gruppo è in realtà molto naturale dato che cerchiamo le trasformazioni più generali possibili tra due riferimenti inerziali, e può del resto essere considerata come una richiesta sottesa già dal principio di relatività dato che in questo si sottintende l'esistenza della trasformazione identica e di quella inversa, e la chiusura e l'associatività della composizione di trasformazioni. Sotto questa struttura, l'esistenza di una velocità massima raggiungibile, che al limite può essere considerata infinita, diventa dunque un'immediata conseguenza del principio di relatività. Citando il Rindler, il ruolo del postulato di Einstein continua ad essere fondamentale in quanto stabilisce se il valore di questa velocità limite sia finito o

(4) <https://biblio.ugent.be/publication/8761064>

(5) <https://doi.org/10.48550/arXiv.1504.02423>

Non esistono altre trasformazioni

infinito, e quindi se bisogna adoperare le trasformazioni di Galileo oppure quelle di Lorentz.

Questi risultati furono discussi già nel 1911 da Von Ignatowsky, ma sono ancora poco o per nulla discussi nei corsi introduttivi alla relatività ristretta.

5.4 Componenti dei quadritensori

Con quadrivettore e quadritensore intenderemo rispettivamente un vettore ed un tensore dello spazio di Minkowski, ossia lo spazio vettoriale \mathbb{R}^4 munito della metrica di Minkowski

$$g = g^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} =: \text{diag}(1, -1, -1, -1) \quad (5.13)$$

e per tali oggetti richiediamo che le componenti cambino secondo trasformazioni lineari che lasciano invariata la metrica di Minkowski, che abbiamo chiamato trasformazioni di Lorentz. In particolare, se le componenti controvarianti di qualunque quadrivettore \mathbf{x} sono x^μ con $\mu = 0, 1, 2, 3$ allora questo deve trasformarsi secondo la legge

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu \quad (5.14)$$

Cerchiamo adesso le leggi di trasformazione di un quadritensore T di ordine 2; immaginando di poterne fattorizzare le componenti come

$$T^{\mu\nu} = A^\mu B^\nu$$

dove A^μ e B^ν sono componenti di quadrivettori, si deduce che le componenti di un quadritensore si trasformano secondo la legge

$$(T')^{\mu\nu} = A'^\mu B'^\nu = \Lambda^\mu_\rho A^\rho \Lambda^\nu_\sigma B^\sigma = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma T^{\rho\sigma} \quad (5.15)$$

Ogni vettore e tensore di dimensione 4 che non segue queste leggi di trasformazione viene detto *pseudovettore* e *pseudotensore*.

Analogamente utilizzeremo il termine *scalare di Lorentz* o più brevemente *scalare* o *invariante* per ogni numero reale che non cambia sotto l'azione di una trasformazione di Lorentz. Ogni numero che invece cambia per trasformazioni di Lorentz è detto *pseudoscalare*.

In ogni spazio vettoriale sono pseudoscalari le componenti di un vettore se prese singolarmente, in quanto banalmente cambiano sotto una qualunque trasformazione. Ciò significa che in relatività il tempo t è uno pseudoscalare in quanto si trova nella prima componente del quadrivettore evento (ct, x, y, z) . Sono pseudoscalari anche le distanze spaziali euclidee, in quanto hanno la forma $x^2 + y^2 + z^2$ che non è invariante per boost. La fenomenologia di questi due casi è nota come *dilatazione dei tempi* e *contrazione delle lunghezze*.

Come si deduce dalla Eq.(5.12)⁽⁶⁾ sono scalari tutti i prodotti scalari tra quadrivettori

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = x^\mu g_{\mu\nu} y^\nu = x^0 y^0 - x^1 y^1 - x^2 y^2 - x^3 y^3$$

Quadrivettori e quadritensori

Scalari di Lorentz

$$\Lambda^T g \Lambda = g \quad (5.12)$$

Innalzamenti e abbassamenti
di indice

e in particolare anche l'intervallo $\Delta s^2 = c^2 \Delta t^2 - \Delta r^2 = \Delta \mathbf{x} \cdot \Delta \mathbf{x}$.

In uno spazio vettoriale, qualunque (matrice della) metrica diversa dall'identità $\mathbb{1}$ che sia diagonale e con elementi a modulo unitario è detta pseudoeuclidea. In spazi muniti di metriche pseudoeuclidee si perdono alcune comode proprietà come l'identificazione tra componenti covarianti e controvarianti di un vettore/tensore, e per le matrici ortogonali non vale l'uguaglianza tra inversa e trasposta.

Analizziamo brevemente questi aspetti nel caso dello spazio di Minkowski. Dato un quadrivettore \mathbf{x} , le sue componenti covarianti sono date dal prodotto scalare con la base

$$x_\nu = \mathbf{x} \cdot e_\nu = x^\mu e_\mu \cdot e_\nu = x^\mu g_{\mu\nu}$$

da cui, moltiplicando per il tensore metrico inverso $g^{\nu\rho}$

$$x^\mu = x_\rho g^{\mu\rho}$$

queste ultime due operazioni sono note rispettivamente come *abbassamento di indice* e *innalzamento di indice*, e sono il risultato di un isomorfismo canonico esistente tra uno spazio vettoriale ed il suo duale quando viene assegnato un prodotto scalare. Sotto la metrica $g = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ queste operazioni sono semplicemente cambi di segno delle componenti spaziali:

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) \implies x_\mu = (x^0, -x^1, -x^2, -x^3)$$

Le stesse operazioni sugli indici si deducono per qualunque tensore di ordine n semplicemente fattorizzandone le componenti: nel caso $n = 2$, fattorizzando $T_{\mu\nu} = A_\mu B_\nu$ avremo per esempio

$$\begin{aligned} T^\mu{}_\nu &= A^\mu B_\nu = g^{\mu\rho} A_\rho B_\nu = g^{\mu\rho} T_{\rho\nu} \\ T^{\mu\nu} &= A^\mu B^\nu = g^{\mu\rho} g^{\nu\sigma} A_\rho B_\sigma = g^{\mu\rho} g^{\nu\sigma} T_{\rho\sigma} \end{aligned}$$

Analogamente a prima, queste operazioni sono solamente cambiamenti di segno delle componenti spaziali nell'indice innalzato/abbassato: se per semplicità consideriamo matrici 2×2 sotto la metrica $g = \text{diag}(1, -1)$ e le componenti covarianti di T sono

$$T_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}$$

allora innalzando il primo indice che è di riga, cambia segno la seconda riga (corrisponde ad una moltiplicazione a sinistra con il tensore metrico)

$$T^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ -T_{21} & -T_{22} \end{pmatrix}$$

e innalzando anche quello di colonna, cambia di segno la seconda colonna (corrisponde ad una moltiplicazione a destra con il tensore metrico)

$$T^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ -T_{21} & -T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & -T_{12} \\ -T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}$$

Facciamo notare che la scrittura $T^\mu{}_\nu$, in cui gli indici misti non sono spazati orizzontalmente, è ambigua in quanto non vi possiamo più convenzionalmente distinguere l'indice di riga a sinistra da quello di colonna a destra: riprendendo l'esempio di prima

$$T^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ -T_{21} & -T_{22} \end{pmatrix} \quad \text{mentre} \quad T_\mu{}^\nu = \begin{pmatrix} T_{11} & -T_{12} \\ T_{21} & -T_{22} \end{pmatrix}$$

che sono chiaramente diversi a meno che T sia diagonale.

Poniamo adesso l'attenzione alle matrici ortogonali $\Lambda \in SO(1,3)$ dello spazio di Minkowski. Mentre se la metrica è euclidea allora la matrice R conserva il prodotto scalare se e solo se soddisfa

$$R^T R = \mathbb{1} \quad (\Longleftarrow R \in SO(n))$$

invece nel caso in cui la metrica sia pseudoeuclidea, Λ conserva il prodotto scalare se e solo se soddisfa, come abbiamo già visto ricavando la Eq.(5.12)

$$\Lambda^T g \Lambda = g \quad (\Longleftarrow R \in SO(n, m))$$

quindi nello spazio di Minkowski $\Lambda^T \neq \Lambda^{-1}$.

L'identità $\Lambda^T g \Lambda = g$ in componenti si scrive

$$\Lambda_\mu^\nu g_{\nu\rho} \Lambda^\rho_\sigma = g_{\mu\sigma}$$

quindi finora abbiamo rappresentato Λ con le componenti di un tensore misto:

$$\Lambda^\mu_\nu = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma \\ -\beta\gamma & \gamma \end{pmatrix}$$

da cui le componenti del tensore totalmente controvariante

$$\Lambda^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\nu g^{\nu\rho} = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma \\ -\beta\gamma & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & \beta\gamma \\ -\beta\gamma & -\gamma \end{pmatrix}$$

che è numericamente diverso da quello misto: in particolare, il tensore misto ha determinante +1 mentre quello totalmente controvariante ha determinante -1. Geometricamente, dato che $\Lambda^{11} < 0$ allora viene indotta un'inversione dell'orientamento spaziale⁽⁷⁾.

Per il principio di relatività deve valere l'identità

$$\Lambda(\beta)\Lambda(-\beta) = \mathbb{1}$$

cioè l'inversa di Λ deve aversi alla sola trasformazione $\beta \mapsto -\beta$. Si ponga attenzione al fatto che quando vogliamo scrivere questa relazione in componenti, per il tensore misto vale

$$\Lambda(\beta)^\mu_\nu \Lambda(-\beta)^\nu_\rho = \delta^\mu_\rho$$

mentre la stessa identità scritta per quello completamente controvariante si ha alzando e abbassando gli indici contratti di questa equazione:

$$\Lambda(\beta)^\mu_\nu \Lambda(-\beta)^\nu_\rho = \Lambda(\beta)^{\mu\sigma} \Lambda(-\beta)_{\lambda\rho} g_{\sigma\nu} g^{\nu\lambda} = \Lambda(\beta)^{\mu\nu} \Lambda(-\beta)_{\nu\rho} = \delta^\mu_\rho$$

quindi l'inversa di $\Lambda(\beta)^{\mu\nu}$ è $\Lambda(-\beta)_{\mu\nu}$.

Le trasformazioni di un quadrivettore indotte dai tensori $\Lambda^{\mu\nu}$ e $\Lambda_{\mu\nu}$ non sono altro che la stessa trasformazione indotta da Λ^μ_ν composta ad un innalzamento/abbassamento di indice:

$$y'^\nu = \Lambda^{\mu\nu} y_\mu \quad y'_\nu = \Lambda_{\mu\nu} y^\mu$$

Di particolare importanza nel prosieguo del corso risulta essere il tensore unità completamente antisimmetrico di rango quattro $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$, cioè il tensore le cui componenti non nulle sono uguali a ± 1 e cambiano di segno scambiando due indici qualsiasi. Dall'antisimmetria del tensore segue

Quadritensori ortogonali

(7) Nei corsi in cui si studia con maggior dettaglio il gruppo ortocrono denotato come $O^+(1,3)$, si distingue un sottogruppo *proprio* $SO(1,3)$ formato dalle matrici ortogonali tali che $\det \Lambda = 1$ che preservano l'orientamento spaziale dal sottoinsieme di quelle tali che $\det \Lambda = -1$, che invece invertono l'orientamento spaziale e non formano un gruppo. Per il presente corso questi dettagli sono irrilevanti, ma li presentiamo comunque per chiarire eventuali dubbi qualora il lettore voglia integrare lo studio con testi in cui sono utilizzate queste distinzioni tra sottogruppi.

Tensore completamente antisimmetrico

che tutte le componenti che hanno almeno due indici uguali sono nulle. Ponendo

$$\varepsilon^{0123} = +1$$

tutte le componenti non nulle di $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ sono uguali a $+1$ o a -1 a seconda che l'indice $\mu\nu\rho\sigma$ sia una permutazione pari o dispari di 0123 . Rispetto alle rotazioni del sistema di coordinate le grandezze $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ si comportano come un tensore; se invece, una delle tre componenti spaziali cambia di segno, le componenti $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$, essendo identiche in tutti i sistemi di coordinate non cambiano, mentre le componenti di un tensore dovrebbero cambiare di segno. Quindi $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ non è un tensore, ma un *pseudotensore*.

Meccanica relativistica

CAPITOLO

6

Introduzione al capitolo

Una conclusione che possiamo trarre dal precedente capitolo è che il linguaggio naturale della relatività ristretta è quello quadridimensionale. Le leggi fisiche devono essere quindi formulate, se possibile, in termini di scalari di Lorentz, quadrivettori e di quadritensori, cosicché rispettino senza dubbio il principio di relatività di Einstein in quanto *covarianti a vista*. In questo capitolo ci occuperemo di costruire una teoria della meccanica che sia coerente con i principi della relatività ristretta adoperando il formalismo lagrangiano, che come vedremo risulta essere covariante semplicemente scegliendo un funzionale d'azione che sia anche uno scalare di Lorentz.

6.1 Azione di una particella libera	93
6.2 Quadrimpulso	95
6.3 Dualismo onda-particella . . .	96

6.1 Azione di una particella libera

Quando si vuole formulare una nuova teoria adoperando il formalismo lagrangiano, la principale difficoltà sta nel trovare quale sia il funzionale tale che la sua variazione si annulli quando valgono le equazioni che descrivono la fisica osservata, in ottemperanza al principio di minima azione. Per esempio, se si sceglie il funzionale come

$$S = \int_{t_0}^{t_1} (T + U) dt$$

allora per mezzo del principio di Hamilton si ottengono equazioni di Lagrange equivalenti all'equazione simbolica della dinamica per sistemi olonomi conservativi della meccanica classica.

Per quanto riguarda la meccanica relativistica, in questo capitolo ci occupiamo innanzitutto del funzionale più semplice, ossia quello di una particella libera. In base al principio d'inerzia, la traiettoria della particella è una geodetica, e quindi devono annullarsi contemporaneamente le variazioni prime del funzionale d'azione⁽¹⁾ S e del funzionale di lunghezza della traiettoria, e ciò succede se questi sono proporzionali:

$$S = -\alpha \int_A^B ds \quad (6.1)$$

dove $\alpha > 0$ è uno scalare di Lorentz, e con A e B denotiamo i due eventi delle posizioni iniziali e finali agli istanti t_0 e t_1 . Nello spazio di Minkowski consideriamo solo linee d'universo tali che in ogni loro punto risulti ds^2 di tipo tempo, cioè $ds^2 = dx^\mu dx_\mu = c^2 dt^2 - dr^2 > 0$.

(1) Chi ha seguito il corso di meccanica analitica del prof. Trovato sa che il principio di minima azione si esprime considerando variazioni asincrone, e per questo motivo risulta applicabile in relatività — al contrario del principio di Hamilton — dato che in questa teoria perde di senso il concetto di sincronismo. Quindi S è un funzionale d'azione piuttosto che un funzionale di Hamilton.

Il motivo per cui stiamo già supponendo S e $\int ds$ aventi segno opposto nella Eq.(6.1) è che, scrivendo $ds = \sqrt{c^2 dt^2 - dr^2} = \sqrt{1 - \beta^2} c dt$, allora

$$\int_A^B ds = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{1 - \beta^2} c dt \leq \int_{t_0}^{t_1} c dt$$

cioè nel riferimento solidale alla particella, la lunghezza della sua linea d'universo è massima⁽²⁾; quindi le geodetiche sono curve di massima lunghezza nello spazio di Minkowski, e affinché l'azione sia minima — per rispettare il principio di minima azione — deve avere segno opposto alla lunghezza.

Possiamo riscrivere S come un integrale rispetto al tempo t :

$$S = \int_{t_0}^{t_1} -\alpha c \sqrt{1 - \beta^2} dt$$

e se definiamo la lagrangiana L come l'integranda dell'azione rispetto al tempo, allora troviamo che in relatività $L = -\alpha c \sqrt{1 - \beta^2}$. Il valore della costante α si trova imponendo che nel limite di basse velocità riotteniamo l'energia cinetica $L = mv^2/2$. Ricordando lo sviluppo in serie

$$(1 + z)^a = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{a}{k} z^k = 1 + az + \mathcal{O}(z^2)$$

convergente per $|z| < 1$, abbiamo

$$L = -\alpha c (1 - \beta^2)^{1/2} \approx -\alpha c \left(1 - \frac{1}{2} \beta^2 \right) = -\alpha c + \frac{\alpha}{2c} v^2$$

da cui si trova che a meno di infinitesimi di ordine $\mathcal{O}(v^4)$ e della costante $-\alpha c$ che non influisce sulle equazioni del moto, la lagrangiana si riduce all'energia cinetica se

$$\alpha = mc$$

Lagrangiana di particella libera

Quindi se in relatività utilizziamo la lagrangiana

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \beta^2} \quad (6.2)$$

otteniamo una descrizione della particella libera che nel limite di basse velocità è in accordo con la meccanica classica.

Notiamo che nonostante siffatta L non sia scalare, l'azione $S = -\alpha \int ds$ è scalare in quanto è il prodotto di $-\alpha = -mc$ e di $\int ds$, e pertanto il formalismo che stiamo costruendo è da ritenersi covariante.

Equazioni di Lagrange

Verifichiamo infine che la condizione di stazionarietà del funzionale

$$S = -mc \int_A^B \sqrt{dx^\mu dx_\mu}$$

sia effettivamente in accordo con il principio d'inerzia, cioè il funzionale è stazionario quando la velocità della particella è costante.

Introduciamo le variazioni δx^μ , allora la variazione del funzionale vale

$$\delta S = -mc \int_A^B \delta \left(\sqrt{dx^\mu dx_\mu} \right) = -mc \int_A^B \frac{dx_\mu \delta(dx^\mu)}{\sqrt{dx^\nu dx_\nu}}$$

(2) Come fa notare il Landau in [LL10] nel § 3, se constatiamo che il tempo proprio di percorrenza di una linea d'universo (cioè il tempo misurato effettivamente da un orologio solidale alla particella) è $\frac{1}{c} \int ds$, possiamo visualizzare geometricamente il paradosso dei gemelli: la linea d'universo del gemello sulla Terra è un segmento di retta passante per A e B , mentre quella del fratello sull'astronave è una curva di estremi A e B . Poiché il gemello a Terra si muove lungo una geodetica, il suo tempo risulta massimo e quindi è invecchiato rispetto al fratello.

Notiamo che il quadrivettore

$$u^\mu = \frac{dx^\mu}{ds} = \frac{dx^\mu}{\sqrt{dx^\nu dx_\nu}} = \left(\frac{cdt}{cdt\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{d\mathbf{r}}{cdt\sqrt{1-\beta^2}} \right) = (\gamma, \gamma\mathbf{v}/c) \quad (6.3)$$

è il (versore) quadrivelocità. Quindi, sfruttando anche che $\delta(dx^\mu) = d(\delta x^\mu)$

$$\delta S = -mc \int_A^B u_\mu d(\delta x^\mu)$$

e integrando per parti troviamo

$$\delta S = -mc \underbrace{\int_A^B d(u_\mu \delta x^\mu)}_{[u_\mu \delta x^\mu]_B^A} + mc \int_A^B \delta x^\mu du_\mu$$

il primo addendo è nullo per variazioni nulle agli estremi, ossia per $\delta x_A^\mu = \delta x_B^\mu = 0$. Riscrivendo $du_\mu = \frac{du_\mu}{ds} ds$, troviamo che δS è nullo per ogni δx^μ se e solo se valgono le equazioni di Lagrange

$$mc \frac{du_\mu}{ds} = m \frac{du_\mu}{d\tau} = 0 \quad (6.4)$$

(dove $d\tau = ds/c$ è il tempo proprio) da cui segue che la quadrivelocità è costante. Pertanto il formalismo è coerente con la dinamica di una particella libera.

6.2 Quadrimpulso

Nella formulazione lagrangiana, la quantità di moto (o impulso) di una particella è definita come $\mathbf{p} = \partial L / \partial \mathbf{v}$. Utilizzando la Eq.(6.2) abbiamo esplicitamente

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \frac{1}{c} \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \gamma m \mathbf{v} \quad (6.5)$$

e quindi gli indici spaziali delle equazioni di Lagrange Eq.(6.4) esprimono la conservazione dell'impulso $\gamma m \mathbf{v}$.

L'energia è invece definita come $E = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L$, quindi

$$E = \frac{mv^2}{\sqrt{1-\beta^2}} + mc^2 \sqrt{1-\beta^2} = m \frac{v^2 + c^2(1-\beta^2)}{\sqrt{1-\beta^2}} = \gamma mc^2 \quad (6.6)$$

e la funzione di Hamilton H può ottenersi da quest'ultima espressione di E scrivendo $v = v(p)$, oppure più elegantemente tramite la *relazione di mass shell* che tra poco vedremo. L'indice temporale delle equazioni di Lagrange Eq.(6.4) esprime quindi la conservazione dell'energia.

In relatività, l'energia e l'impulso formano rispettivamente la parte temporale e spaziale di un quadrivettore, detto *quadrimpulso*

$$P^\mu = (E/c, \mathbf{p}) = (\gamma mc, \gamma m \mathbf{v}) \quad (6.7)$$

La ragione per cui possiamo dire che questa quaterna di numeri formi un effettivamente un quadrivettore, è che può ottenersi a partire dal quadrivettore evento (ct, x, y, z) che certamente è un quadrivettore. Definendo la quadrivelocità secondo la Eq.(6.3), ossia come⁽³⁾

(3) La quadrivelocità definita in questo modo risulta più specificatamente un quadriversore, in quanto il suo modulo è unitario, come ci si aspetta già dallo studio delle ascisse curvilinee. Alcuni testi di relatività definiscono la quadrivelocità come dx^μ/ds , mentre altri equivalentemente come $dx^\mu/d\tau$ dove $d\tau = ds/c$ è il tempo proprio.

$$u^\mu := \frac{dx^\mu}{ds} = (\gamma, \gamma \mathbf{v}/c)$$

che è un quadrivettore perché ds è invariante, allora è evidente che il quadrimpulso sia proporzionale alla quadrivelocità:

$$P^\mu = mc u^\mu$$

con mc scalare, e quindi P^μ è un quadrivettore.

Relazione di mass shell

In base a quest'ultima relazione, il modulo di risulta

$$P^\mu P_\mu = m^2 c^2 u^\mu u_\mu = m^2 c^2$$

(che d'altronde è il modulo di $P^\mu = (\gamma mc, \gamma m \mathbf{v})$ misurato nel riferimento in cui $v = 0$, assodato che P^μ sia quadrivettore e quindi il suo modulo debba essere scalare) ma per la Eq.(6.7) vale anche

$$P^\mu P_\mu = E^2/c^2 - p^2$$

da cui per confronto delle ultime due equazioni ricaviamo la *relazione di mass shell*

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (6.8)$$

che esprime l'energia in funzione dell'impulso, quindi definisce la funzione di Hamilton per una particella libera

$$H = E(p) = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

Notiamo che H non dipende né dalle coordinate spaziali né dal tempo, quindi segue subito che $\mathbf{p} = \text{cost}$ e $E = \text{cost}$ come ci aspettiamo dato che stiamo supponendo libera la particella.

Nel limite di basse velocità, H vale

$$H = mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} \approx mc^2 \left(1 + \frac{p^2}{2m^2 c^2} \right) = mc^2 + \frac{p^2}{2m}$$

Anche in questo caso appare la costante additiva mc^2 . Dato che H rappresenta l'energia di un sistema fisico, adesso possiamo attribuire a mc^2 un significato fisico più chiaro: *un corpo di massa m possiede un'energia mai nulla, pari a mc^2 quando è a riposo*. Questa è una previsione del tutto nuova rispetto alla meccanica classica, ed in sostanza una conseguenza della natura quadridimensionale formata dall'impulso e dall'energia.

6.3 Dualismo onda-particella

Nel formalismo lagrangiano, possiamo definire impulso ed energia a partire dalla lagrangiana tramite le Eq.(6.5), Eq.(6.6), o equivalentemente senza conoscere la lagrangiana a partire dall'azione⁽⁴⁾ come

$$\mathbf{p} = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}} \quad E = -\frac{\partial S}{\partial t}$$

e da queste si evince subito come il quadrimpulso sia allora la derivata covariante dell'azione, cambiata di segno. Per derivata covariante di una funzione scalare di un evento $f(x^\mu)$ intendiamo il quadrivettore

$$\frac{\partial f}{\partial x^\mu}$$

⁽⁴⁾ Riportiamo alla memoria quanto studiato nel corso di meccanica analitica, ossia che S può intendersi, piuttosto che come funzionale su un insieme di curve, come una funzione delle coordinate e del tempo, quando nello spazio delle configurazioni vengono fissate le traiettorie in modo che soddisfino le equazioni di Lagrange con un estremo iniziale fissato.

che per trasformazioni di Lorentz di x^μ , in base alla regola della catena, si trasforma come

$$\frac{\partial f}{\partial x^\mu} = \frac{\partial f}{\partial x'^\nu} \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} = \frac{\partial f}{\partial x'^\nu} \Lambda_\mu^\nu$$

che è la legge di trasformazione delle componenti covarianti di un quadri-vettore. Denotando

$$\partial_\mu f := \frac{\partial f}{\partial x^\mu} \quad \partial^\mu f := \frac{\partial f}{\partial x_\mu}$$

allora l'operatore d'alambertiano $\square f$ può scriversi come

$$\square f = \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial r^2} \right) f = \partial_\mu \partial^\mu f = \partial^\mu \partial_\mu f$$

Seguendo la notazione appena esposta, la derivata covariante di S si scrive, ricordando che in base alle regole di abbassamento di indice le componenti covarianti del quadrimpulso sono $P_\mu = (E/c, -\mathbf{p})$:

$$\partial_\mu S = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial S}{\partial t}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}} \right) = \left(-\frac{E}{c}, \mathbf{p} \right) = -P_\mu$$

e quindi per una particella libera, essendo $P_\mu = cost$ in base alla conservazione dell'energia e dell'impulso, l'azione $S(x^\mu)$ è una funzione lineare

$$S(x^\mu) = -P_\mu x^\mu + cost = -(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) + cost$$

Per non appesantire la notazione, sottintendiamo gli indici ponendo $x = x^\mu$ e $S = S(x)$.

La funzione d'onda di una particella in moto rettilineo uniforme di azione S vale

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar} = e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar}$$

Funzione d'onda di particella libera

dove \hbar è una costante sperimentale, e si osserva che per $S \gg \hbar$ sono trascurabili i comportamenti ondulatori. Per un'onda piana monocromatica invece, la funzione che la descrive è del tipo

$$\psi(x) = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

e quindi affinché sussista il dualismo-onda particella, la funzione d'onda deve descrivere lo stesso oggetto e quindi devono valere le relazioni

$$\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar \quad \omega = E/\hbar$$

Notiamo che per $m = 0$, in base alla relazione di mass shell Eq.(6.8) si ha $E = pc$ e quindi ammettendo che una particella di massa nulla possieda comunque una quantità di moto, allora dato che la velocità della particella coincide con la velocità di gruppo del suo pacchetto d'onda corrispondente, si ha

Particelle di massa nulla

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{E}{p} = \frac{pc}{p} = c$$

cioè ogni particella di massa $m = 0$ ha velocità pari a c , e vale la legge lineare ultrarelativistica $\omega = ck$. Invece per una particella di massa $m \neq 0$, come un elettrone, se supponiamo abbia velocità non relativistica cosicché $E = p^2/2m$, la dipendenza tra ω e k non è lineare ma quadratica:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \implies \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Formulazione covariante dell'elettromagnetismo

CAPITOLO

7

L'interazione tra particelle si può descrivere mediante il concetto di *campo di forza*. Mentre in meccanica classica il campo risulta essere soltanto un mezzo per descrivere l'interazione tra particelle, nella teoria della relatività esso risulta essere una conseguenza del fatto che la velocità di propagazione delle interazioni è finita. Le forze agenti su una particella in un dato istante non sono determinate dalla posizione delle altre particelle nello stesso istante; infatti, il cambiamento di posizione di una delle particelle produce un effetto sulle altre solamente dopo un certo intervallo di tempo. Il campo diventa quindi una realtà fisica intrinseca: non si può più parlare di interazione diretta tra due particelle separate da una certa distanza ma di interazione della particella con il campo e dell'interazione successiva del campo con un'altra particella. Prima di passare allo studio delle interazioni tra particella e campo, è necessario fare qualche considerazione sul concetto di *particella* in meccanica relativistica. In meccanica classica, in virtù del fatto che i tempi di propagazione dei segnali non fossero finiti, è stato possibile introdurre il concetto di *corpo rigido*. Nella teoria della relatività, con corpo rigido dovremmo intendere un corpo le cui dimensioni restano invariate nel sistema di riferimento in cui esso è in quiete; in virtù del fatto che i segnali non possano però propagarsi con velocità infinita il corpo assolutamente rigido non può, però, esistere⁽¹⁾. Supponiamone per assurdo l'esistenza e ammettiamo che venga messo in moto da una causa esterna; se il corpo fosse rigido allora tutti i suoi punti dovrebbero mettersi in moto contemporaneamente al punto sottoposto all'azione; contrariamente il corpo non sarebbe più rigido. Tuttavia poiché la relatività rende impossibile la prima ipotesi in quanto i segnali si propagano a velocità finita, dunque i punti non possono muoversi tutti contemporaneamente. Il corpo rigido non può quindi esistere in relatività. Da tutto ciò possiamo trarre alcune conclusioni sulle particelle elementari: se una particella elementare avesse dimensioni finite, essa non potrebbe deformarsi, in quanto il concetto di deformazione è legato alla possibilità di movimenti indipendenti delle diverse parti di un corpo; tuttavia, come abbiamo visto prima, un corpo rigido non può esistere, dunque nella meccanica relativistica classica non si possono attribuire dimensioni finite alle particelle elementari, cioè le particelle elementari vanno considerate puntiformi.

7.1	Tensore del campo elettromagnetico	100
7.2	Invarianti del campo	103
7.3	Prima coppia delle equazioni di Maxwell	104
7.4	Invarianza di Gauge	104
7.5	Quadricorrente	105
7.6	L'azione del campo elettromagnetico	106
7.7	Equazioni di Lagrange di un campo	107
7.8	Seconda coppia delle equazioni di Maxwell	108
7.9	Osservazioni sulle onde elettromagnetiche	109

(1) Lombardo *docet*

7.1 Tensore del campo elettromagnetico

Sappiamo già dalla fisica classica che la lagrangiana per una particella carica immersa in un campo elettromagnetico è:

$$L = \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{v} - e\phi \quad (7.1)$$

essendo \vec{A} il potenziale vettore e ϕ il potenziale scalare. È banale verificare che questa sia la lagrangiana corretta: infatti se calcoliamo le equazioni di Lagrange classiche troveremo proprio che la particella risulta essere soggetta a una forza \vec{F} pari a

$$\vec{F} = e \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{H} \right)$$

che è proprio la forza di Lorentz che risente una particella di carica e immersa in un campo elettromagnetico descritto dal potenziale vettore \vec{A} e dal potenziale scalare ϕ ⁽²⁾. Possiamo quindi scrivere l'azione di interazione come

$$S_{int} = \int \left(\frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{v} - e\phi \right) dt = \frac{e}{c} \int \left(\vec{A} \cdot d\vec{r} - \phi c dt \right) \quad (7.2)$$

Poiché l'elettromagnetismo classico funziona anche al limite relativistico, ci aspettiamo che la lagrangiana Eq.(7.1) sia giusta anche in ambito relativistico⁽³⁾ e quindi anche la Eq.(7.2) deve essere la giusta azione di interazione. Tuttavia in relatività l'azione deve essere una grandezza scalare affinché le equazioni del moto siano invarianti in forma. Poiché nell'espressione dell'azione sono già presenti le componenti del quadrivettore $dx^\mu = (c dt, d\vec{r})$, possiamo introdurre il quadrivettore potenziale $A^\mu = (\phi, \vec{A})$ e quindi riscrivere la Eq.(7.2) come

$$S_{int} = -\frac{e}{c} \int A^\mu dx_\mu = -\frac{e}{c} \int A_\mu dx^\mu \quad (7.3)$$

L'azione di una particella carica immersa in un campo elettromagnetico è quindi:

$$S = -mc \int \sqrt{dx_\mu dx^\mu} - \frac{e}{c} \int A_\mu dx^\mu$$

Determiniamo adesso le equazioni del moto in forma covariante applicando il principio di minima azione. Ricordando che mediante uno sviluppo di Taylor possiamo scrivere

$$\delta A_\mu = \partial_\nu A_\mu \delta x^\nu + \dots$$

si ha

$$\delta S = -mc \int \frac{dx^\mu d(\delta x_\mu)}{ds} - \frac{e}{c} \int \partial_\nu A_\mu \delta x^\nu dx^\mu - \frac{e}{c} \int A_\mu d\delta x^\mu$$

Integrando per parti e ricordando che le variazioni sono ad estremi fissi, si ha:

$$\delta S = mc \int du^\mu \delta x_\mu - \frac{e}{c} \int \partial_\nu A_\mu \delta x^\nu d(x^\mu) + \frac{e}{c} \int \delta x^\mu dA_\mu$$

Poiché $dA_\mu = \partial_\nu A_\mu dx^\nu$, si ha

$$\delta S = \int \left[mc du_\mu + \frac{e}{c} (\partial_\nu A_\mu - \partial_\mu A_\nu) dx^\nu \right] \delta x^\mu$$

(2) Nel fare questo stiamo supponendo che la carica sia talmente piccola da rendere trascurabile la sua influenza sul campo elettromagnetico

(3) Vero entro un range di velocità testate

Per il principio di minima azione, $\delta S = 0 \quad \forall \delta x^\mu$ se e solo se valgono le equazioni di Lagrange, dunque

$$mc \, du_\mu = \frac{e}{c} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) dx^\nu$$

da cui dividendo per ds e introducendo il tensore del campo elettromagnetico

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (7.4)$$

si ha

$$mc \frac{du_\mu}{ds} = \frac{e}{c} F_{\mu\nu} u^\nu \quad (7.5)$$

Ricordando la definizione di 4-impulso, potremmo pensare di riscrivere la Eq.(7.5) nella forma

$$\frac{dP_\mu}{ds} = \frac{e}{c} F_{\mu\nu} u^\nu$$

avendo posto $P_\mu = mc u_\mu$. Questo approccio è però errato; infatti, considerando la lagrangiana Eq.(7.1), l'impulso è

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-\beta^2}} + \frac{e}{c} \vec{A} = \vec{\pi} + \frac{e}{c} \vec{A} \quad (7.6)$$

avendo definito l'impulso cinetico $\vec{\pi}$ come

$$\vec{\pi} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

Tutto questo implica che il generatore delle traslazioni non è più $\vec{\pi}$ come avveniva in meccanica classica, ma il nuovo \vec{p} . Sebbene ciò al momento possa sembrare una semplice pedanteria, sarà di fondamentale importanza nel momento in cui andremo a cercare i generatori delle traslazioni in ambito quantistico.

Andiamo quindi a calcolare l'energia di tale particella; essa sarà data da:

$$E = \vec{p} \cdot \vec{v} - L = \left(\vec{\pi} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \cdot \vec{v} + mc^2 \sqrt{1-\beta^2} - \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{v} + e\phi = \vec{\pi} \cdot \vec{v} + mc^2 \sqrt{1-\beta^2} + e\phi$$

Detta $E_0 = \vec{\pi} \cdot \vec{v} + mc^2 \sqrt{1-\beta^2}$ l'energia di una particella libera, possiamo scrivere l'energia totale come

$$E = E_0 + e\phi$$

Notiamo che apparentemente l'energia della particella non dipende da \vec{A} . È comunque possibile definire il quadrivettore $\pi^\mu = (E_0/c, \vec{\pi})$, in quanto $\pi^\mu \pi_\mu = m^2 c^2$. Invertendo quest'ultima relazione troviamo che

$$E_0 = \sqrt{m^2 c^4 + \vec{\pi}^2 c^2}$$

Con questa nuova forma di E_0 , possiamo scrivere l'energia totale della particella in funzione dell'impulso cinetico come

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + \vec{\pi}^2 c^2} + e\phi$$

Per ottenere adesso l'hamiltoniana del nostro sistema possiamo passare dall'impulso cinetico all'impulso mediante la definizione stessa di impulso cinetico Eq.(7.6) ottenendo quindi

$$\mathcal{H} = \sqrt{\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 c^2 + m^2 c^4} + e\phi$$

Nel limite non relativistico l'hamiltoniana si può scrivere come

$$\mathcal{H} = mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} + e\phi = mc^2 + \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi$$

Definiti il campo elettrico e il campo magnetico come:

$$\begin{cases} \vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \\ \vec{H} = \nabla \times \vec{A} \end{cases} \quad (7.7)$$

il tensore elettromagnetico definito in Eq.(7.4) assume la forma:

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -H_z & H_y \\ -E_y & H_z & 0 & -H_x \\ -E_z & -H_y & H_x & 0 \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

Ovviamente il tensore elettromagnetico è per definizione antisimmetrico. Se volessimo passare dal tensore 2-volte covariante al tensore 2-volte controvariante, dovremmo moltiplicare due volte per il tensore metrico; ciò equivale a cambiare di segno le sole componenti con indici temporali, cioè le sole componenti del campo elettrico

$$F^{\mu\nu} = g^{\mu\alpha} g^{\nu\beta} F_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -H_z & H_y \\ E_y & H_z & 0 & -H_x \\ E_z & -H_y & H_x & 0 \end{pmatrix}$$

Riprendiamo adesso le equazioni del moto Eq.(7.5), moltiplichiamo ambo i membri per ds e dividiamo per $c dt$ ottenendo:

$$mc \frac{dU_\mu}{c dt} = \frac{d\pi_\mu}{c dt} = \frac{e}{c} F_{\mu\nu} \frac{dx^\nu}{c dt}$$

Dalle componenti spaziali otteniamo

$$\frac{d\vec{\pi}}{dt} = \vec{F} = e \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{H} \right)$$

che è proprio l'espressione classica della forza di Lorentz, mentre per la componente temporale

$$\frac{d\pi_0}{dt} = -\frac{e}{c} F_{0\nu} = -\frac{e}{c} \vec{E} \cdot \vec{v} \Rightarrow \frac{d\mathcal{E}}{dt} = e \vec{E} \cdot \vec{v}$$

che esprime il teorema dell'energia cinetica per una particella in un campo elettromagnetico (la forza magnetica è ortogonale alla velocità, dunque non compie lavoro).

Campo elettrico e campo magnetico non sono invarianti in forma per trasformazioni di Lorentz, a differenza di quanto invece accade per il tensore elettromagnetico. Considerati due osservatori inerziali distinti si ha

$$F'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta F^{\alpha\beta} \quad (7.9)$$

dove Λ^μ_α è la matrice di Lorentz.

Supposto che l'asse x e l'asse x' siano sovrapposti che gli assi corrispondenti nei due riferimenti siano paralleli, la Eq.(7.9) dà luogo alle seguenti relazioni

$$\begin{cases} E_x = E'_x \\ E_y = \gamma(E'_y + \beta H'_z) \\ E_z = \gamma(E'_z - \beta H'_y) \end{cases} \quad \begin{cases} H_x = H'_x \\ H_y = \gamma(H'_y - \beta E'_z) \\ H_z = \gamma(H'_z + \beta E'_y) \end{cases}$$

Il campo elettrico e il campo magnetico sono quindi, relativi: le loro proprietà sono differenti in diversi sistemi di riferimento. In particolare in un dato riferimento un campo elettrico e un campo magnetico possono essere nulli in un dato sistema di riferimento ed essere nello stesso tempo presenti in un altro sistema di riferimento.

7.2 Invarianti del campo

A partire dal tensore elettromagnetico possiamo costruire alcune quantità scalari, che risultano, cioè, invarianti. In particolare, possiamo costruire due invarianti a partire dal tensore elettromagnetico:

$$F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = \text{invariante}$$

$$\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}F_{\mu\nu}F_{\rho\sigma} = \text{invariante}$$

dove $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ è il tensore completamente antisimmetrico di rango quattro, definito in §5.4. Notiamo che il secondo invariante non è propriamente tale: in seguito a un'inversione degli assi, infatti esso cambia il suo segno. Si può provare che a partire dalle componenti del campo elettromagnetico non è possibile costruire altri invarianti del campo⁽⁴⁾. Esprimendo le componenti di $F^{\mu\nu}$ in funzione delle componenti di $\vec{\mathbf{E}}$ e $\vec{\mathbf{H}}$, si prova immediatamente, a meno di costanti moltiplicative, che i due invarianti sono

$$H^2 - E^2 = \text{invariante} \quad (7.10)$$

$$\vec{\mathbf{E}} \cdot \vec{\mathbf{H}} = \text{invariante} \quad (7.11)$$

In questa scrittura il carattere pseudoscalare del secondo invariante è evidente, in quanto essa rappresenta il prodotto scalare del vettore $\vec{\mathbf{E}}$ per lo pseudovettore $\vec{\mathbf{H}}$. Dall'invarianza di queste due espressioni deduciamo quanto segue: se in un sistema di riferimento un campo elettrico e un campo magnetico sono ortogonali, allora in tutti i sistemi di riferimento essi saranno ortogonali; se in un dato sistema di riferimento campo elettrico e campo magnetico hanno la stessa ampiezza, allora avranno la stessa ampiezza in qualunque sistema di riferimento; se in un sistema di riferimento $E > H$ (o $E < H$), allora in tutti i sistemi di riferimento $E > H$ (o $E < H$); se in un dato sistema di riferimento i vettori $\vec{\mathbf{E}}$ e $\vec{\mathbf{H}}$ formano un angolo acuto (oppure ottuso), essi formeranno un angolo acuto (oppure ottuso) in qualsiasi altro sistema. Le trasformazioni di Lorentz permettono quindi di assegnare ad $\vec{\mathbf{E}}$ e $\vec{\mathbf{H}}$ valori arbitrari soggetti alla sola condizione che Eq.(7.10) e Eq.(7.11) abbiano valori prefissati. Se si ha $\vec{\mathbf{E}} \cdot \vec{\mathbf{H}} = 0$, allora è sempre possibile trovare un sistema di riferimento in cui $\vec{\mathbf{E}} = 0$ o $\vec{\mathbf{H}} = 0$ (a seconda che $H^2 - E^2$ sia positivo o negativo), cioè un riferimento in cui il campo è puramente elettrico o puramente magnetico; viceversa, se esiste un riferimento in cui $\vec{\mathbf{E}} = 0$ oppure $\vec{\mathbf{H}} = 0$, essi saranno mutuamente perpendicolari in tutti i sistemi di riferimento.

⁽⁴⁾ Questa affermazione in realtà è falsa. Chi ha seguito il corso di meccanica analitica prima dell'a.a. 2023/2024, saprà che quest'affermazione è uno dei pochi errori commessi da Landau. È possibile trovare un'altra coppia di invarianti del campo elettromagnetico che sono $\text{tr } F^2$ e $\text{tr } F^4$.

7.3 Prima coppia delle equazioni di Maxwell

(5)

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (7.4)$$

Dalla definizione di tensore elettromagnetico Eq.(7.4)⁽⁵⁾ è facile provare che

$$\partial_\alpha F_{\beta\gamma} + \partial_\beta F_{\gamma\alpha} + \partial_\gamma F_{\alpha\beta} = 0 \quad (7.12)$$

A primo membro abbiamo un tensore di rango tre antisimmetrico rispetto a tutti e tre gli indici. Questa equazione restituisce un'informazione fisica soltanto se i tre indici sono diversi, cioè $\alpha \neq \beta \neq \gamma$. Da Eq.(7.12) è possibile trovare la prima coppia delle equazioni di Maxwell

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{\mathbf{H}} = 0 \\ \nabla \times \vec{\mathbf{E}} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{H}}}{\partial t} \end{cases}$$

Queste due equazioni di Maxwell non contengono le cariche. La seconda coppia delle equazioni di Maxwell non può però essere ottenuta da queste semplici osservazioni: nell'equazione Eq.(7.12) non abbiamo infatti alcuna informazione sulle sorgenti del campo elettromagnetico. Per ottenere la seconda coppia delle equazioni di Maxwell è necessario introdurre l'azione del campo elettromagnetico, come faremo in §7.8.

7.4 Invarianza di Gauge

Proviamo adesso che la definizione dei potenziali elettromagnetici non è unica. Le equazioni del moto Eq.(7.5), infatti, dipendono soltanto dai campo $\vec{\mathbf{E}}$ e $\vec{\mathbf{H}}$ e non dai potenziali. Di conseguenza due campi sono fisicamente identici se descritti dagli stessi vettori $\vec{\mathbf{E}}$ e $\vec{\mathbf{H}}$. Dati i potenziali $\vec{\mathbf{A}}$ e ϕ , i campi $\vec{\mathbf{E}}$ e $\vec{\mathbf{H}}$ sono univocamente determinati dalla Eq.(7.7)⁽⁶⁾. Tuttavia differenti potenziali possono corrispondere a uno stesso campo. Infatti, introdotta la funzione $\Gamma(\vec{\mathbf{r}}, t)$ possiamo definire un nuovo quadripotenziale

(6)

$$\begin{cases} \vec{\mathbf{E}} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}}{\partial t} \\ \vec{\mathbf{H}} = \nabla \times \vec{\mathbf{A}} \end{cases} \quad (7.7)$$

$$A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu \Gamma \quad (7.13)$$

Con questa posizione, la nuova azione di interazione è data da

$$S_{int} = -\frac{e}{c} \int A_\mu dx^\mu - \frac{e}{c} \int \partial_\mu \Gamma dx^\mu = -\frac{e}{c} \int A_\mu dx^\mu - \frac{e}{c} \int d\Gamma \quad (7.14)$$

Applicando il principio di minima azione, cioè considerando variazioni ad estremi fissi, si ha

$$\delta \left(\frac{e}{c} \int d\Gamma \right) = 0$$

dunque le equazioni di Lagrange non vengono modificate dal termine aggiunto. Il 4-potenziale A_μ risulta quindi essere definito a meno di una trasformazione di Gauge. Ciò era, inoltre, desumibile dal fatto che per definizione il tensore elettromagnetico è Gauge invariante infatti:

$$F'_{\mu\nu} = \partial_\mu A'_\nu - \partial_\nu A'_\mu = \partial_\mu (A_\nu + \partial_\nu \Gamma) - \partial_\nu (A_\mu + \partial_\mu \Gamma) = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = F_{\mu\nu}$$

7.5 Quadricorrente

Per ragioni di comodità matematica, invece di considerare le cariche come puntiformi, si preferisce supporre che la carica sia distribuita nello spazio in modo continuo. Si può quindi introdurre il concetto di densità di carica ρ , definita in modo tale che ρdV sia la carica localizzata all'interno del volume dV . Con questo formalismo, la densità di carica associata a una carica puntiforme e localizzata in \vec{r}_0 è data da

$$\rho(\vec{r}) = e\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

mentre per un sistema di cariche puntiformi la densità di carica sarà data da

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i e_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

dove la sommatoria è estesa a tutte le cariche presenti e \vec{r}_i è il raggio vettore della carica e_i . Definiamo la densità di corrente \vec{J} come

$$\vec{J}(\vec{r}) = \sum_i e_i \vec{v}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

Posso, quindi, riscrivere l'azione di interazione come

$$\begin{aligned} S_{int} &= -\frac{e}{c} \int A_0 dx^0 - \vec{A} \cdot d\vec{r} = -\frac{1}{c} \int \sum_i e_i \left(\phi(\vec{r}_i) c dt - \vec{A}(\vec{r}_i) \cdot \vec{v}_i dt \right) = \\ &= -\frac{1}{c} \left[\int d^3\vec{r} \phi(\vec{r}, t) \rho(\vec{r}, t) c dt - \int d^3\vec{r} \vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) dt \right] \end{aligned}$$

Introdotta il quadrivettore $J^\mu = (c\rho, \vec{J})$ si ha che

$$S_{int} = -\frac{1}{c} \int d^3\vec{r} dt (A_\mu J^\mu) = -\frac{1}{c^2} \int J_\mu A^\mu d\Omega$$

dove $d\Omega = d^3\vec{r} c dt$ è l'elemento di ipervolume quadridimensionale. Si prova in maniera ovvia che J^μ è un quadrivettore; infatti poiché

- S_{int} è uno scalare;
- A^μ è un quadrivettore;
- $d\Omega$ è uno scalare;

J^μ deve essere un quadrivettore.

In questa forma, nell'azione di interazione figura la *densità di lagrangiana*

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{c^2} J_\mu A^\mu$$

che risulta essere uno scalare. Definita la lagrangiana come $L = c \int d^3\vec{r} \mathcal{L}$ si può passare dall'azione di interazione in forma covariante all'azione di interazione in forma non covariante

$$S_{int} = \int \mathcal{L} d\Omega \quad \Rightarrow \quad S_{int} = \int L dt$$

Proviamo adesso che in virtù della gauge invarianza di δS_{int} deve valere l'equazione di continuità. Considerando il 4-potenziale

$$A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu \Gamma$$

per il principio di minima azione si ha

$$\delta S_{int} = -\frac{1}{c^2} \int (\partial_\mu \Gamma) J^\mu d\Omega = -\frac{1}{c^2} \int \partial_\mu (\Gamma J^\mu) d\Omega + \frac{1}{c^2} \int \Gamma (\partial_\mu J^\mu) d\Omega = 0$$

L'integrale $\int \partial_\mu (\Gamma J^\mu) d\Omega$ con il teorema della 4-divergenza può essere scritto come un integrale su un'ipersuperficie che è la frontiera del volume di universo su cui stiamo integrando

$$\int \partial_\mu (\Gamma J^\mu) d\Omega = \int_{\partial\Omega} \Gamma J^\mu d\sigma_\mu = 0$$

dove $d\sigma_\mu$ è l'elemento di ipersuperficie quadridimensionale. Poiché l'integrale va effettuato su tutto il volume d'universo, l'ipersuperficie di frontiera si trova all'infinito dove assumiamo che non siano presenti sorgenti e che i campi siano nulli, esso è nullo⁽⁷⁾. Dunque al netto di questo termine si ha

$$\delta S_{int} = \frac{1}{c^2} \int \Gamma (\partial_\mu J^\mu) d\Omega = 0 \quad \forall \Gamma \iff \partial_\mu J^\mu = 0$$

Questa condizione implica che cariche e correnti non possono essere fissate arbitrariamente, ma devono essere tali da soddisfare l'equazione di continuità

$$\partial_\mu J^\mu = 0 \quad (7.15)$$

affinché la teoria sia Gauge invariante. In forma non covariante possiamo scrivere la Eq.(7.15) come

$$\nabla \cdot \vec{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (7.16)$$

Integrata su una certa regione V dello spazio tridimensionale, l'equazione di continuità restituisce l'equazione di conservazione della carica: la variazione temporale della carica contenuta all'interno di V è uguale e opposta al flusso della corrente attraverso la superficie che delimita V . Se assumiamo che V sia tutto lo spazio, la frontiera ∂V diventa la superficie all'infinito e il flusso della corrente attraverso essa è nulla, dunque la carica si conserva. Nel campo elettromagnetico la simmetria di Gauge può quindi essere associata alla conservazione della carica.

7.6 L'azione del campo elettromagnetico

L'azione S per un sistema formato da una particella immersa in un campo elettromagnetico deve essere costituita da tre parti

$$S = S_0 + S_{int} + S_{em}$$

dove S_0 è l'azione della particella libera, S_{int} è l'azione dovuta all'interazione delle particelle con il campo, mentre S_{em} è l'azione che dipende esclusivamente dalle proprietà del campo elettromagnetico, cioè l'azione per il campo in assenza di cariche. Finché eravamo interessati al solo moto delle particelle nel campo elettromagnetico abbiamo trascurato quest'ultimo termine in quanto esso descrive proprietà del campo e non della particella. Esso diventa, tuttavia, indispensabile se vogliamo trovare delle equazioni che determinino il campo stesso. Per determinare

(7) I termini di superficie possono essere trascurati anche per un ulteriore motivo: fissato un volume di universo, la variazione dei campi è fatta solamente all'interno di tale volume e non sulla superficie, dove supponiamo che i campi siano fissati

la forma di S_{em} partiamo dalla fondamentale proprietà del campo elettromagnetico, cioè il principio di sovrapposizione: il campo generato da un sistema di cariche è equivalente alla somma dei campi generati dalle singole cariche. Ogni soluzione delle equazioni del campo corrisponde a un campo che può esistere in natura e per il principio di sovrapposizione anche la somma di due campi è un campo che può esistere in natura e che, dunque, deve essere soluzione delle equazioni del campo. Ciò implica che le equazioni del campo elettromagnetico devono essere lineari. Dunque l'azione S_{em} deve contenere un termine quadratico rispetto al campo, in modo tale che dalla variazione prima dell'azione si ottenga un'espressione lineare. Costruiamo l'espressione dell'azione S_{em} mediante alcune semplici considerazioni: in virtù della loro non univocità, i potenziali del campo non possono essere parte dell'azione. Quindi l'unica grandezza fisica rimasta descrivente il campo risulta essere $F_{\mu\nu}$; l'azione deve, però, essere uno scalare dunque deve dipendere da $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$. Inoltre l'integranda in S_{em} non può contenere derivate di $F_{\mu\nu}$ in quanto la lagrangiana può contenere soltanto le derivate prime delle coordinate. In questo caso il ruolo di coordinate, cioè di variabili rispetto a cui effettuare una variazione, è svolto proprio dalle A_μ . L'azione del campo elettromagnetico deve quindi avere la forma

$$S_{em} = \alpha \int F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} d\Omega$$

dove α è una costante dipendente dalle unità di misura scelte per descrivere il problema. Nonostante non siamo interessati al valore effettivo di α , ci interessa conoscere il suo segno. Sotto integrale abbiamo $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \propto H^2 - E^2$. Il campo \vec{E} contiene la derivata parziale rispetto al tempo del potenziale vettore \vec{A} . In maniera del tutto ovvia, si ha che $(\partial\vec{A}/\partial t)^2$ deve apparire dentro l'integranda con segno positivo; infatti se esso entrasse in S_{em} con segno negativo, si potrebbe sempre, facendo variare il potenziale abbastanza velocemente nel tempo, rendere S_{em} negativa con un valore assoluto arbitrariamente grande e quindi S_{em} non avrebbe un minimo; poiché ciò nega il principio di minima azione, si ha che α deve essere negativo. Possiamo quindi riscrivere

$$S_{em} = -\alpha \int F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} d\Omega$$

dove abbiamo assunto $\alpha > 0$. In unità Gauss si ha $\alpha = -\frac{1}{16\pi c}$, dunque

$$S_{em} = -\frac{1}{16\pi c} \int F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} d\Omega \quad (7.17)$$

7.7 Equazioni di Lagrange di un campo

Sia ϕ la funzione scalare che descrive un campo. Possiamo costruire una lagrangiana del campo supponendo di sostituire le q^i con la funzione ϕ e le \dot{q}^i con la derivata parziale $\partial_\mu\phi$. La lagrangiana del campo è quindi data da

$$L = L(\phi, \partial_\mu\phi)$$

Supponiamo che il campo sia definito in una certa regione Ω dello spaziotempo e che esso sia fissato sull'ipersuperficie di frontiera. L'azione

associata al nostro problema risulta essere:

$$S = \int L(\phi, \partial_\mu \phi) d\Omega$$

e calcolando la sua variazione otteniamo

$$\delta S = \int \left[\frac{\partial L}{\partial \phi} \delta \phi + \frac{\partial L}{\partial (\partial_\mu \phi)} \delta (\partial_\mu \phi) \right] d\Omega$$

Poiché $\delta\{\partial_\mu \phi\} = \partial_\mu \delta \phi$, si ha

$$\frac{\partial L}{\partial (\partial_\mu \phi)} \delta (\partial_\mu \phi) = \partial_\mu \left[\frac{\partial L}{\partial (\partial_\mu \phi)} \delta \phi \right] - \partial_\mu \left(\frac{\partial L}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right) \delta \phi \quad (7.18)$$

Sfruttando il teorema della 4-divergenza possiamo riscrivere il primo addendo della Eq.(7.18) come un integrale sulla frontiera di Ω su cui, poiché il campo è fissato, $\delta \phi = 0$. Dunque

$$\delta S = \int \left[\frac{\partial L}{\partial \phi} - \partial_\mu \left(\frac{\partial L}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right) \right] \delta \phi d\Omega$$

Per il principio di minima azione, $\delta S = 0$ per ogni $\delta \phi$ arbitraria se e solo se

$$\frac{\partial L}{\partial \phi} = \partial_\mu \left(\frac{\partial L}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right) \quad (7.19)$$

che è l'equazione di Eulero-Lagrange per il campo ϕ .

7.8 Seconda coppia delle equazioni di Maxwell

Per ricavare le equazioni del campo elettromagnetico applichiamo le Eq.(7.19) nel caso in cui la funzione descrivente il campo sia $\phi = A^\mu$. Le equazioni di Lagrange sono quindi

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A^\nu} - \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu A^\nu)} \right) = 0 \quad (7.20)$$

dove $\mathcal{L} = -\frac{1}{c^2} J^\mu A_\mu - \frac{1}{16\pi c} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}$. Svolgendo i calcoli si ottiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A^\nu} &= -\frac{1}{c^2} J^\nu \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu A^\nu)} &= -\frac{1}{4\pi c} F^{\mu\nu} \end{aligned}$$

Sostituendo nella Eq.(7.20) si ottiene

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} J^\nu \quad (7.21)$$

che è la seconda coppia delle equazioni di Maxwell in forma covariante. In forma non covariante si ha

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{E} = \frac{4\pi}{c} \rho \\ \nabla \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{cases} \quad (7.22)$$

Se a partire da Eq.(7.21), calcoliamo la 4-divergenza di ambo i membri

$$\frac{4\pi}{c} \partial_\nu J^\mu = \partial_\nu \partial_\mu F^{\mu\nu} \quad (7.23)$$

L'operatore $\partial_\nu \partial_\mu$, simmetrico rispetto agli indici ν, μ , agendo sul tensore antisimmetrico $F^{\mu\nu}$ lo annulla identicamente e ritroviamo quindi l'equazione di continuità in forma quadridimensionale Eq.(7.15).

7.9 Osservazioni sulle onde elettromagnetiche

Consideriamo l'equazione per i potenziali in forma quadridimensionale

$$\square A^\nu - \partial^\nu(\partial_\mu A^\mu) = \frac{4\pi}{c} J^\nu \quad (7.24)$$

Se consideriamo un potenziale che soddisfi la Gauge di Landau

$$\partial_\mu A^\mu = 0 \quad (7.25)$$

otteniamo

$$\square A^\nu = \frac{4\pi}{c} J^\nu \quad (7.26)$$

In assenza di correnti e cariche localizzate la Eq.(7.26) diventa

$$\square A^\nu = 0 \iff \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right] A^\nu = 0 \quad (7.27)$$

Dal principio di sovrapposizione, qualunque combinazione lineare di soluzioni dell'equazione d'onda è ancora soluzione, dunque avremo uno spazio lineare di soluzioni, di cui le onde piane sono una base completa. Si può, quindi, scrivere la generica soluzione dell'equazione d'onda come una sovrapposizione di onde piane della forma

$$A^\nu = \varepsilon^\nu e^{-ik_\mu x^\mu} = \varepsilon^\nu e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (7.28)$$

dove abbiamo definito

$$k^\mu = \left(\frac{\omega}{c}, \vec{k} \right)$$

Inserendo la Eq.(7.28) nella Eq.(7.27) si ottiene

$$\left[\frac{1}{c^2} (-i\omega)^2 - (-i\vec{k})^2 \right] A^\nu = 0 \iff \omega^2 = c^2 \vec{k}^2$$

che è la relazione di dispersione per le onde elettromagnetiche. Inserendo la Eq.(7.28) nella Eq.(7.25) si ottiene

$$\partial_\nu A^\nu = \partial_\nu (\varepsilon^\nu e^{-ik_\mu x^\mu}) = -ik_\nu \varepsilon^\nu e^{-ik_\mu x^\mu} = 0 \iff k_\nu \varepsilon^\nu = 0$$

che esprime la condizione di ortogonalità tra il vettore d'onda k^ν e il vettore di polarizzazione ε^ν .

Consideriamo un'onda piana che si propaghi lungo l'asse z ; per essa si ha

$$k^\mu = \left(\frac{\omega}{c}, 0, 0, k \right)$$

Tuttavia, affinché valga la relazione di dispersione, deve essere

$$k^\mu = (k, 0, 0, k)$$

È dunque evidente che $k^\mu k_\mu = 0$. Nella gauge di Landau, tale vettore k^μ deve essere ortogonale al vettore polarizzazione. Posso quindi introdurre lo spazio dei vettori polarizzazione, una cui base è formata dai quadrivettori

- $\varepsilon_1^\mu = (0, 1, 0, 0)$
- $\varepsilon_2^\mu = (0, 0, 1, 0)$

$$\bullet \varepsilon_3^\mu = (k, 0, 0, k)$$

Essi definiscono tre polarizzazioni possibili per l'onda elettromagnetica: ε_1^μ e ε_2^μ sono ortogonali alla direzione di propagazione dell'onda mentre ε_3^μ è parallelo ad essa; soltanto i primi due hanno un significato fisico.

Consideriamo un quadripotenziale A^μ . Mediante una trasformazione di Gauge possiamo considerare il quadripotenziale $A'_\mu = A_\mu + \partial\Gamma$ con Γ funzione scalare. Mediante una trasformata di Fourier possiamo scrivere

$$\left\{ \begin{array}{l} A_\mu = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \tilde{A}_\mu(k) e^{ik_\nu x^\nu} \\ \Gamma = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \tilde{\Gamma}(k) e^{ik_\nu x^\nu} \\ \partial_\mu \Gamma = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} ik_\mu \tilde{\Gamma}(k) e^{ik_\nu x^\nu} \\ A'_\mu = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \tilde{A}'_\mu(k) e^{ik_\nu x^\nu} \end{array} \right. \quad (7.29)$$

Deve quindi essere

$$\tilde{A}'_\mu(k) = \tilde{A}_\mu(k) + ik_\mu \tilde{\Gamma}(k)$$

Dunque, fare una trasformata di gauge del potenziale significa aggiungere alla trasformata del potenziale un termine proporzionale al quadrivettore d'onda. Ricordando che $A^\nu = \varepsilon^\nu e^{-ik_\mu x^\mu}$ con ε^ν vettore di polarizzazione, se aggiungo un termine $k^\nu e^{-ik_\mu x^\mu}$ ottengo un nuovo potenziale A'^ν che soddisfa la gauge di Landau. Risulta evidente, come mostreremo in seguito, che il termine aggiunto non modifica la fisica del sistema e che quindi il 4-vettore di polarizzazione $\varepsilon'_3 = k^\nu$ è privo di significato fisico. Calcolando il campo elettromagnetico dovuto a un quadripotenziale della forma $K^\nu = k^\nu e^{-ik_\mu x^\mu}$ si ottiene

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla \phi = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{k} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) - \nabla \left(k e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) = \\ &= \frac{\omega}{c} \vec{k} e^{-ik_\mu x^\mu} - \frac{\omega}{c} \nabla e^{-ik_\mu x^\mu} = \frac{\omega}{c} \vec{k} e^{-ik_\mu x^\mu} - \frac{\omega}{c} \vec{k} e^{-ik_\mu x^\mu} = 0 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \vec{H} &= \nabla \times \vec{A} = \nabla \times \left(\vec{k} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) \Rightarrow \\ \Rightarrow \left(\vec{H} \right)_i &= \varepsilon_{irs} \partial_r A_s = \varepsilon_{irs} \frac{\partial k_s}{\partial x_r} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \vec{H} = 0 \end{aligned}$$

Infatti si ha che

$$\left[\nabla \times (f \vec{F}) \right] = \varepsilon_{irs} \partial_r (f F_s) = \varepsilon_{irs} (\partial_r f) F_s + \varepsilon_{irs} f \partial_r F_s$$

Posto $\vec{F} = \vec{k}$ e $f = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$, poiché \vec{k} non dipende dalle coordinate si ottiene

$$\begin{aligned} \left[\nabla \times (f \vec{F}) \right] &= f \nabla \times \vec{F} + \vec{F} \times \nabla f = \nabla e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \times \vec{k} = \\ &= e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{k} \times \vec{k} = 0 \end{aligned}$$

PARTE III
Fondamenti della Meccanica
Quantistica

I postulati della meccanica quantistica

CAPITOLO

8

Introduzione al capitolo

Da questo capitolo in poi ci occuperemo di meccanica quantistica. Dopo aver introdotto e discusso i postulati della meccanica quantistica e le loro conseguenze, vedremo come è possibile ricavare l'equazione di Schrödinger e come si possa descrivere l'evoluzione temporale di un sistema quantistico. In quest'ambito introdurremo una differente rappresentazione della meccanica quantistica: la rappresentazione di Heisenberg. Infine vedremo come sia possibile ricavare una formulazione alternativa della meccanica quantistica: la formulazione *path integral*, vedendone alcune semplici applicazioni. Questa formulazione ci tornerà molto utile nel trattare l'effetto Aharonov-Bohm.

Introduciamo adesso i postulati della meccanica quantistica

1. Lo stato di una particella è rappresentato da un vettore $|\psi\rangle$ appartenente a uno spazio di Hilbert. Lo spazio fisico ha, quindi, la struttura di uno spazio di Hilbert⁽¹⁾.
2. Le variabili indipendenti della meccanica classica sono rappresentate da operatori hermitiani X e P ⁽²⁾ e ciascuna osservabile fisica è rappresentata da un operatore hermitiano A .
3. Se la particella si trova in uno stato $|\psi\rangle$, la misura dell'osservabile A restituisce uno dei suoi autovalori a con una probabilità $P(a) \propto |\langle\psi|a\rangle|^2$. Come conseguenza della misura, lo stato del sistema cambia da $|\psi\rangle$ a $|a\rangle$, essendo quest'ultimo l'autostato (autovettore) associato all'autovalore a .

Adesso, analizzeremo meglio i postulati appena introdotti, per poi introdurre il principio di corrispondenza, l'operatore posizione e l'operatore impulso, che ci permetteranno di evidenziare il collegamento tra fisica classica e fisica quantistica.

8.1 Discussione dei postulati

8.1.1 Primo postulato

Il primo postulato afferma che una particella è descritta da un vettore $|\psi\rangle$ appartenente a uno spazio di Hilbert. Uno spazio di Hilbert contiene, in generale, vettori propri, normalizzabili all'unità, e vettori impropri,

8.1	Discussione dei postulati . . .	113
8.2	L'operatore posizione	118
8.3	Il principio di corrispondenza .	120
8.4	L'operatore impulso	122
8.5	Traslazione degli impulsi . . .	127
8.6	Relazioni di indeterminazione .	130
8.7	Meccanica classica o meccanica quantistica	134

(1) Ricordiamo che per definizione uno spazio di Hilbert è euclideo e completo, quindi non necessariamente separabile. In ogni caso, si può dimostrare che in alcuni casi lo spazio fisico di un sistema quantistico (specie di quelli più semplici) è anche separabile. Dunque, quando necessario, nel resto della trattazione, faremo uso di questa proprietà senza la necessità di postularla.

(2) Torneremo sulla loro definizione nei paragrafi §8.2 e §8.4.

normalizzabili alla delta di Dirac.

Poiché $|\psi\rangle$ è un elemento di uno spazio vettoriale, se $|\psi\rangle$ e $|\psi'\rangle$ rappresentano due possibili stati di una particella, allora anche $\alpha|\psi\rangle + \beta|\psi'\rangle$ è uno stato possibile. Ciò va sotto il nome di *principio di sovrapposizione*.

Il principio di sovrapposizione in quanto tale non è una novità: in meccanica classica se $f(x)$ e $g(x)$ sono due soluzioni dell'equazione di D'Alembert per l'oscillazione di una corda (con $f(0) = f(L) = g(0) = g(L) = 0$), allora anche $\alpha f(x) + \beta g(x)$ è una soluzione dell'equazione di D'Alembert.

Tuttavia lo "stato" $\alpha f(x) + \beta g(x)$ è profondamente differente dagli stati $f(x)$ e $g(x)$. Invece, in meccanica quantistica⁽³⁾, lo stato $\alpha|\psi\rangle + \beta|\psi'\rangle$ ha attributi che a volte sono più simili a quelli di $|\psi\rangle$ e a volte a quelli di $|\psi'\rangle$.

⁽³⁾ Nel seguito del discorso vedremo più in dettaglio questo aspetto della meccanica quantistica

8.1.2 Secondo postulato

Il secondo postulato afferma che le variabili indipendenti della meccanica classica x e p sono sostituite da degli operatori hermitiani X e P , e tutte le restanti variabili dinamiche sono rappresentate da operatori hermitiani, costruiti opportunamente tramite gli operatori X e P .

Osserviamo che, così facendo, ogni operatore ammetterà un set di autovettori che costituisce una base ortonormale dello spazio di Hilbert, e i corrispondenti autovalori saranno dei numeri reali.

Quindi, se in meccanica classica abbiamo uno stato (x, p) e una qualunque variabile dinamica ω che in tale stato ha un valore $\omega(x, p)$, misurando tale variabile otterremo proprio il valore $\omega(x, p)$. Vediamo cosa accade in meccanica quantistica attraverso l'analisi del terzo postulato.

8.1.3 Terzo postulato

Supponiamo di voler misurare il valore della variabile $\omega(x, p)$ precedentemente citata.

In primo luogo, è necessario costruire il corrispondente operatore quantistico Ω , che dipenderà dagli operatori X e P . In seguito bisogna trovare gli autovalori ω_i di Ω e i corrispondenti autovettori ortonormali $|\omega_i\rangle$. Visto che per il secondo postulato Ω è hermitiano, possiamo scrivere

$$|\psi\rangle = \sum_i |\omega_i\rangle \langle\omega_i|\psi\rangle,$$

dove i vari autovalori ω_i saranno reali.

Allora, il terzo postulato afferma che la probabilità $P(\omega_i)$ di ottenere l'autovalore ω_i è proporzionale al modulo quadro della proiezione di $|\psi\rangle$ lungo l'autovettore $|\omega_i\rangle$.

Da questo modo di procedere troviamo che la teoria quantistica fa solo delle predizioni probabilistiche del risultato della misura di ω .

Inoltre, gli unici valori possibili per la misura della variabile dinamica ω ⁽⁴⁾ sono proprio gli autovalori dell'operatore quantistico associato Ω .

Osserviamo che la quantità $|\langle\omega_i|\psi\rangle|^2$ è solo una probabilità relativa. Per ottenere la probabilità assoluta dobbiamo dividere la probabilità relativa per la somma di tutte le probabilità relative:

$$P(\omega_i) = \frac{|\langle\omega_i|\psi\rangle|^2}{\sum_i |\langle\omega_i|\psi\rangle|^2}.$$

⁽⁴⁾ Di seguito useremo indistintamente le espressioni "misurare ω " e "misurare Ω ".

Poiché $\sum_i |\langle \omega_i | \psi \rangle|^2 = \sum_i \langle \psi | \omega_i \rangle \langle \omega_i | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$, possiamo riscrivere la precedente relazione come

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

Se $|\psi\rangle$ è un vettore proprio, esso può essere normalizzato all'unità e lo assumeremo tale da qui in avanti⁽⁵⁾; dunque la probabilità di ottenere l'autovalore ω_i diventa proprio $|\langle \omega_i | \psi \rangle|^2$. Vedremo in seguito cosa accade se $|\psi\rangle$ è un vettore improprio.

In ogni caso, osserviamo che una volta proiettato uno stato $|\psi\rangle$ sulla base di autostati di un certo operatore Ω , il numero $\langle \psi | \psi \rangle$, in quanto somma delle probabilità relative di ottenere una misura di Ω , deve mantenersi costante, anche se $|\psi\rangle$ subisce un cambiamento.

Supponiamo che lo stato $|\psi\rangle$ cambi, subendo dunque una trasformazione. Essa dovrà essere rappresentata da un operatore lineare U ⁽⁶⁾ tale che $U|\psi\rangle = |\psi'\rangle$. In particolare, se $|\psi\rangle$ è un vettore è proprio, $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ e si dovrà continuare ad avere $\langle \psi' | \psi' \rangle = 1$, in quanto si dovrà sempre avere la certezza di ottenere una misura di Ω (si noti bene che in generale $|\langle \omega_i | \psi' \rangle|^2 \neq |\langle \omega_i | \psi \rangle|^2$, ma ciò che conta è che si conservi la probabilità globale). Allora, si deve avere necessariamente che U è un operatore unitario.

Dunque, dal terzo postulato, abbiamo dedotto che le trasformazioni che agiscono sugli stati del nostro spazio di Hilbert devono essere rappresentate da operatori unitari.

Proseguendo, se lo stato $|\psi\rangle$ coincide con un autostato $|\omega_i\rangle$, allora la misura di Ω restituisce certamente il risultato ω_i . Quando due stati $|\omega_1\rangle$ e $|\omega_2\rangle$ sono sovrapposti a formare uno stato normalizzato

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

la misura di Ω può portare a due risultati possibili: ω_1 con probabilità $|\alpha|^2 / (|\alpha|^2 + |\beta|^2)$ e ω_2 con probabilità $|\beta|^2 / (|\alpha|^2 + |\beta|^2)$. Questa è una conseguenza del principio di sovrapposizione in meccanica quantistica che non ha analoghi in meccanica classica.

Tutti questi processi possono essere complicati da svariati fattori. Può accadere che l'operatore Ω sia degenere. Supponiamo, come esempio, che esso abbia due autovalori coincidenti $\omega_1 = \omega_2 = \omega$. Sia $\{|\omega, 1\rangle, |\omega, 2\rangle\}$ la base ortonormale dell'autospazio associato a tale autovalore. La probabilità associata a tale autovalore è

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

che è il modulo quadro della proiezione di $|\psi\rangle$ nell'autospazio degenere. L'operatore proiezione su tale autospazio è

$$\mathbb{P}_\omega = |\omega, 1\rangle\langle \omega, 1| + |\omega, 2\rangle\langle \omega, 2|$$

e la probabilità $P(\omega)$ può essere scritta come

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

(5) Nello spazio di Hilbert, uno stato fisico in realtà non è individuato da un vettore, quanto, piuttosto, da una direzione. Quando parliamo di stato di una particella intendiamo il ket $|\psi\rangle$ normalizzato all'unità.

(6) La linearità della trasformazione è data dal primo postulato.

Un altro problema che può presentarsi è che lo spettro degli autovalori di Ω sia continuo. In questo caso possiamo scrivere $|\psi\rangle$ come

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

Poiché ω varia in maniera continua, allora anche $\langle\omega|\psi\rangle$ deve essere tale: ci aspettiamo, quindi, che $\langle\omega|\psi\rangle$ sia una funzione $\psi(\omega)$. Ciò significa che stiamo introducendo uno spazio ausiliario, lo spazio ω in cui $\psi(\omega)$ è una funzione detta *funzione d'onda nello spazio ω* . Quindi in generale il vettore di stato $|\psi\rangle$ in quanto tale è unico e appartiene allo spazio di Hilbert. Tutti gli spazi che introduciamo non sono altro che spazi ausiliari introdotti solamente per visualizzare le componenti di un vettore a dimensione infinita $|\psi\rangle$ nella base dell'autovettore considerato. Dobbiamo, però, fare una piccola osservazione. In questo caso la quantità $|\langle\omega|\psi\rangle|^2$ non è la probabilità di ottenere l'autovalore ω . Infatti, poiché i possibili valori per ω sono infiniti e la probabilità totale deve essere 1, allora a ciascun valore di ω può essere assegnata solo una probabilità infinitesima. Si interpreta, dunque, $P(\omega) = |\langle\omega|\psi\rangle|^2$ come la densità di probabilità; si ha, quindi, che $P(\omega)d\omega$ è la probabilità di ottenere un valore compreso tra ω e $\omega + d\omega$. Tutto questo viene fatto sotto la condizione che la probabilità totale sia uno, cioè che valga la condizione di normalizzazione

$$\int P(\omega) d\omega = \int |\langle\omega|\psi\rangle|^2 d\omega = \int \langle\psi|\omega\rangle \langle\omega|\psi\rangle d\omega = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

Se $\langle\psi|\psi\rangle = \delta(0)$ è l'unica normalizzazione possibile, lo stato non può essere normalizzato all'unità e quindi $P(\omega)$ va interpretata come una densità di probabilità relativa.

Esaminiamo adesso un altro aspetto del terzo postulato. Abbiamo già detto che la misura della variabile Ω cambia il vettore di stato, che in generale è una qualche sovrapposizione della forma

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

nell'autostato $|\omega\rangle$ corrispondente all'autovalore ω ottenuto nella misura. Tuttavia se fosse stato $|\psi\rangle = |\omega\rangle$ allora una misura della variabile dinamica Ω non avrebbe alterato lo stato del sistema, in quanto questo si trovava già in un autostato di Ω ; tale misura avrebbe restituito come risultato l'autovalore ω associato all'autostato $|\omega\rangle$.

Date un numero N di particelle in uno stato $|\psi\rangle$, la teoria quantistica ci permette di prevedere quale frazione di queste particelle si troverà in uno stato $|\omega\rangle$ dopo una misura di Ω . Vi sono, però, particolari casi in cui non ci interessa tanto il particolare stato in cui si trova una particella dopo una misura (o il valore della misura), quanto piuttosto un valor medio delle misure che possono essere ottenute.

Definizione 8.1. Si definisce *valor medio* di un operatore Ω la quantità

$$\langle\Omega\rangle = \sum_i P(\omega_i) \omega_i = \sum_i |\langle\omega_i|\psi\rangle|^2 \omega_i \quad (8.1)$$

Poiché si ha $\omega_i |\omega_i\rangle = \Omega |\omega_i\rangle$ possiamo riscrivere il valore medio di un operatore come

$$\langle \Omega \rangle = \sum_i \langle \psi | \Omega | \omega_i \rangle \langle \omega_i | \psi \rangle = \langle \psi | \Omega | \psi \rangle$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo sfruttato il fatto che la base sia completa, cioè che $1 = \sum_i |\omega_i\rangle \langle \omega_i|$. Per il calcolo del valore medio di Ω è quindi necessario conoscere solamente l'operatore Ω e il vettore di stato ψ . Se una particella si trova in un autostato $|\omega\rangle$ di Ω , allora si ha $\langle \Omega \rangle = \omega$ con ω autovalore associato all'autostato $|\omega\rangle$. In generale il valore medio di un operatore non si può ottenere direttamente dalla singola misura di Ω , in quanto potrebbe non coincidere con un suo autovalore; dunque, sperimentalmente va determinato come la media di una serie di misure della variabile dinamica Ω effettuate tutte a partire dallo stesso stato di partenza $|\psi\rangle$.

Un'altra quantità che ci preme introdurre è la deviazione standard, definita come

$$\sigma_\Omega = \langle (\Omega - \langle \Omega \rangle)^2 \rangle^{1/2}$$

Indicheremo spesso la deviazione standard come l'incertezza su Ω . Se Ω ha uno spettro discreto allora

$$\sigma_\omega^2 = \sum_i P(\omega_i) (\omega_i - \langle \Omega \rangle)^2$$

mentre se ha uno spettro continuo

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

Osserviamo che anche in questo caso per calcolare σ_Ω sono necessari soltanto l'operatore Ω e il vettore di stato $|\psi\rangle$.

Discutiamo adesso quando risulta essere possibile misurare più variabili dinamiche contemporaneamente. Partiamo considerando solo due operatori Ω e Λ . Supponiamo di misurare prima Ω ; le particelle che si trovavano nello stato $|\psi\rangle$ collassano in un autostato di Ω ; consideriamo le particelle che restituiscono ω come risultato. A questo punto procediamo con la misura di Λ e consideriamo solo le particelle che danno λ come risultato. In generale seguendo questo procedimento non si ottiene un set di particelle che hanno $\Omega = \omega$ e $\Lambda = \lambda$. Infatti dopo la prima misura lo stato collassa nell'autostato $|\omega\rangle$ che assicura ω come risultato di Ω , ma al momento non abbiamo informazioni su quale misura potrebbe restituire Λ , in quanto in generale $|\omega\rangle$ non è un autostato di Λ . A seguito della misura di Λ lo stato $|\omega\rangle$ collassa nell'autostato $|\lambda\rangle$ che assicura λ come risultato di Λ , ma ora abbiamo perso informazioni su Ω in quanto $|\lambda\rangle$ non è necessariamente un autostato di Ω . Dunque, generalmente la seconda misura altera il risultato prodotto dalla prima. Tuttavia vi è un'eccezione: se $|\omega\rangle$ è anche un autostato di Λ , allora la misura di Λ non altera il risultato prodotto dalla misura di Ω . Possiamo quindi realizzare una misura di due variabili solo se esse ammettono autostati simultanei $|\omega, \lambda\rangle$; essi soddisfano le equazioni:

$$\begin{aligned} \Omega |\omega, \lambda\rangle &= \omega |\omega, \lambda\rangle \\ \Lambda |\omega, \lambda\rangle &= \lambda |\omega, \lambda\rangle \end{aligned}$$

Condizione necessaria affinché ciò accada è che $[\Omega, \Lambda] = 0$. Possiamo classificare una coppia di operatori Ω e Λ come

1. compatibili se $[\Omega, \Lambda] = 0$
2. non compatibili se $[\Omega, \Lambda] = A$ dove A è un operatore che non ha autovalori nulli
3. altro

Se gli operatori sono compatibili, possiamo sempre trovare una base ortonormale di autostati simultanei $|\omega, \lambda\rangle$ di Ω e Λ . Se gli operatori non sono compatibili, allora non esiste una base ortonormale di autostati simultanei. Per gli operatori del terzo tipo esistono particolari stati che sono autostati simultanei di Ω e Λ , ma non è possibile trovare una base ortonormale di autostati.

8.2 L'operatore posizione

Definizione 8.2. Si definisce operatore posizione X l'operatore hermitiano i cui autovalori sono l'ascissa della particella nello spazio fisico.

La peculiarità di quest'osservabile consiste nel fatto che, fenomenologicamente, ha uno spettro di autovalori continuo. Ciò significa che se potessimo costruire dei rivelatori puntiformi e fare una misura di posizione, potremmo ottenere qualsiasi valore reale. Scrivendo l'equazione agli autovalori per questo operatore otteniamo:

$$X|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$$

con $x_0 \in \mathbb{R}$. Dunque il set di autovettori $\{|x_0\rangle\}$ non è numerabile, in quanto non può essere messo in corrispondenza biunivoca con i numeri naturali. Chiameremo questo set di autovettori *base* $|x\rangle$. Si può provare che essi costituiscono una base completa, cioè

$$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x| dx \quad (8.2)$$

Considerato un certo vettore posizione $|x'\rangle$ si ha

$$|x'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x|x'\rangle$$

dove $\langle x|x'\rangle$ rappresenta la componente di $|x'\rangle$ lungo la direzione $|x\rangle$. Affinché ciò abbia senso fisico deve essere

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \quad (8.3)$$

Chiameremo la Eq.(8.3) condizione di normalizzazione per vettori impropri. In generale, lo spazio di Hilbert fisico contiene sia vettori propri, normalizzabili all'unità, sia vettori impropri, normalizzabili alla delta di Dirac. Assunta quindi la normalizzazione Eq.(8.3), si può dire che il set $\{|x\rangle\}$ costituisce una base ortonormale e completa di autovettori di X . Per individuare completamente la posizione di una particella nello spazio sono quindi necessari tre operatori, uno per ciascuna coordinata. Introduciamo il vettore di operatori $\vec{R} \stackrel{\text{def}}{=} (X, Y, Z)$. Per individuare completamente la posizione di una particella nello spazio sono quindi necessari

tre operatori, uno per ciascuna coordinata. Introduciamo il vettore di operatori $\vec{R} \stackrel{\text{def}}{=} (X, Y, Z)$. Fenomenologicamente si nota che è possibile misurare contemporaneamente la posizione di una particella lungo tutte e tre le componenti; dunque in virtù del teorema Teo.1.8 si ha che

$$[X, Y] = [Y, Z] = [Z, X] = 0$$

Possiamo pervenire allo stesso risultato anche assumendo che

$$[X_i, X_j] = \text{costante} \neq 0$$

Confrontando i risultati derivanti da questa formulazione della meccanica quantistica con quelli ottenuti sperimentalmente, si trova che le differenze sono dell'ordine di questa costante, che è molto piccola. Al momento gli strumenti di misura non permettono di misurare tale costante, dunque possiamo assumere che sia nulla. Detto $|x, y, z\rangle$ il set di autovettori simultanei di \vec{R} ,

$$\begin{cases} X |x, y, z\rangle = x |x, y, z\rangle \\ Y |x, y, z\rangle = y |x, y, z\rangle \\ Z |x, y, z\rangle = z |x, y, z\rangle \end{cases}$$

Inoltre, essendo tale set completo, deve essere

$$\mathbb{1} = \int dx dy dz |x, y, z\rangle \langle x, y, z| = \int d^3\vec{r} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}|$$

La condizione di normalizzazione per tali autostati è quindi

$$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') \stackrel{\text{def}}{=} \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z')$$

dove $\delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$ è la delta di Dirac tridimensionale.

Dato uno stato $|\psi\rangle$, adoperando l'operatore identità definito da Eq.(8.2) possiamo scrivere

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

Si definisce *funzione d'onda* relativa allo stato ψ la funzione

$$\psi(x) \stackrel{\text{def}}{=} \langle x|\psi\rangle$$

Poiché stiamo lavorando con stati normalizzati all'unità, possiamo vedere il termine $|\psi(x)|^2$ come una densità di probabilità. Inoltre poiché

$$\int dx |\psi(x)|^2 = 1$$

si ha che $\psi(x) \in L^2$.

In realtà non è possibile costruire un autostato della posizione in quanto, per fare ciò, servirebbe un apparato sperimentale puntiforme che riveli la posizione della particella in un sol punto. I rivelatori, tuttavia, hanno una propria dimensione e, per quanto piccoli, non sono mai puntiformi. Tuttavia, supponendo che il rivelatore abbia spessore a , se esso individua una particella, la sua funzione d'onda dovrà certamente essere non nulla in un intervallo di larghezza a e nulla all'esterno di tale intervallo. Se $a \rightarrow 0$ la funzione d'onda resta normalizzata a 1 ma si riduce a una delta di Dirac.

8.3 Il principio di corrispondenza

Prima di introdurre l'operatore impulso, enunciamo il principio di corrispondenza, fondamentale ogni qual volta vorremo fare un passaggio dalla meccanica classica alla meccanica quantistica.

Proposizione 8.3 (Principio di corrispondenza). Sia A un'osservabile quantistica e A_{cl} la corrispondente osservabile classica. Allora al limite classico si deve avere

$$\langle A \rangle = A_{cl}.$$

Ma cosa si intende per limite classico? Consideriamo una trasformazione di simmetria; essa deve essere descritta, come tutte le trasformazioni su un certo stato $|\psi\rangle$, da un operatore unitario U . Applicando tale trasformazione all'operatore A otteniamo l'operatore

$$A' = UAU^\dagger.$$

Dati due stati $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ e introdotti gli stati trasformati $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ e $|\phi'\rangle = U|\phi\rangle$ si ha

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi' | \phi' \rangle;$$

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle \phi' | UAU^\dagger | \psi' \rangle = \langle \phi' | A' | \psi' \rangle.$$

Inoltre poiché vale Prop.1.13⁽⁷⁾, ad ogni osservabile fisica è associato un operatore unitario U che rappresenta la trasformazione di simmetria da lei generata e viceversa. Sia G il generatore della trasformazione di simmetria infinitesima U con parametro infinitesimo ε

$$U = e^{i\varepsilon G}$$

Sviluppando al primo ordine troviamo

$$U = \mathbb{1} + i\varepsilon G + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \simeq \mathbb{1} + i\varepsilon G \quad (8.4)$$

Per il principio di corrispondenza, dato che ogni trasformazione di simmetria è generata da osservabili, ricordando la forma della funzione generatrice in meccanica classica per una trasformazione canonica infinitesima, ci aspettiamo che i generatori G quantistici siano collegati ai generatori delle trasformazioni canoniche di simmetria classiche. Ciò ci permetterà di definire nella meccanica quantistica una molteplicità di operatori, ereditati dalla meccanica classica, come generatori di trasformazioni di simmetria. Vediamo adesso come procedere.

Sia A un operatore hermitiano e sia A' il suo trasformato mediante una trasformazione di simmetria U . Allora si ha

$$A' = UAU^\dagger = (\mathbb{1} + i\varepsilon G)A(\mathbb{1} - i\varepsilon G) = A + i\varepsilon[G, A] + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Dunque

$$\delta A = A' - A \simeq i\varepsilon[G, A].$$

Notiamo che questa relazione è del tutto analoga alla Eq.(4.38)⁽⁸⁾

$$(8) \quad \delta A_{cl} = -\varepsilon\{g, A_{cl}\}$$

$$\delta A = \frac{\partial A}{\partial q} \varepsilon \frac{\partial G}{\partial p} + \frac{\partial A}{\partial p} \left(-\varepsilon \frac{\partial G}{\partial q} \right) = \varepsilon\{A, G\} \quad (4.38)$$

della meccanica classica, dove g è il generatore della trasformazione di simmetria classica.

Dato uno stato $|\psi\rangle$, affinché valga il principio di corrispondenza si deve avere al limite classico

$$\langle\psi|\delta A|\psi\rangle = \delta A_{cl},$$

cioè

$$\langle\psi|\alpha[G, A]|\psi\rangle = i\alpha\{g, A_{cl}\}, \quad (8.5)$$

dove abbiamo introdotto la costante α con le dimensioni di un'azione, in quanto il prodotto $dq dp$, che nella parentesi di Poisson si trova a quoziente ha le dimensioni di un'azione.

A questo punto, associamo al generatore classico g l'operatore \hat{g} tale che

$$\hat{g} = \alpha G, \quad (8.6)$$

richiedendo inoltre che valga al limite classico

$$\langle\hat{g}\rangle = g, \quad (8.7)$$

in modo da poter scrivere, sempre al limite, la seguente uguaglianza:

$$\langle\psi|[\hat{g}, A]|\psi\rangle = i\alpha\{g, A_{cl}\}. \quad (8.8)$$

Vogliamo che al limite classico, il primo membro $[\hat{g}, A]$ vada a zero, in quanto si ha che $\langle\hat{g}\rangle \rightarrow g$ e $\langle A \rangle \rightarrow A_{cl}$, e poiché le variabili classiche commutano sempre deve essere $\langle[g, A_{cl}]\rangle = 0$. Dunque la costante α presente nella Eq.(8.8) deve essere molto piccola nel limite classico, in modo che possa far annullare il secondo membro dell'espressione sopra, che in generale è diverso da zero in quanto $\{g, A_{cl}\} = 0$ solo se A_{cl} si conserva nella trasformazione di simmetria generata da g ⁽⁹⁾.

In sintesi, stiamo ipotizzando l'esistenza di una costante della natura molto piccola nel limite classico, con le dimensioni di un'azione, che ci permetta di scrivere il valor medio di $[\hat{g}, A]$, dove $\hat{g} = \alpha G$, nella forma

$$\langle\psi|[\hat{g}, A]|\psi\rangle = i\alpha\{g, A_{cl}\} + \mathcal{O}(\alpha^2).$$

Sceglieremo come costante α la costante di Planck ridotta \hbar :

$$\langle\psi|[\hat{g}, A]|\psi\rangle = i\hbar\{g, A_{cl}\} + \mathcal{O}(\hbar^2).$$

Dunque poiché $\hbar \sim 10^{-34}$ Js, per un sistema in cui, ad esempio, $S \sim 1$ Js possiamo assolutamente trascurare il termine $i\hbar\{g, A_{cl}\}$ e trattare il sistema come sistema classico. Possiamo, quindi, usare il valore \hbar come un parametro e definire operativamente il limite classico come il limite per $\hbar \rightarrow 0$. Si può riformulare il principio di corrispondenza come segue

Proposizione 8.4 (Principio di corrispondenza). Sia A un'osservabile quantistica e A_{cl} la corrispondente osservabile classica. Allora si deve avere

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle A \rangle = A_{cl}.$$

Inoltre, se G è il generatore quantistico della trasformazione di simmetria $U = \mathbb{1} + i\varepsilon G + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ e g il generatore classico associato, si ha che

$$\langle\psi|[\hat{g}, A]|\psi\rangle = i\hbar\{g, A_{cl}\} + \mathcal{O}(\hbar^2), \quad (8.9)$$

con $\hat{g} = g(X, P) = \hbar G$. Se il generatore non dipende esplicitamente dal parametro ε , possiamo scrivere la precedente relazione in maniera esatta come

$$U = e^{i\varepsilon\hat{g}/\hbar}.$$

(9) Osserviamo che, facendo riferimento alla Eq.(8.5), non abbiamo richiesto che valesse $\langle G \rangle \rightarrow g$ poiché, oltre che per motivi dimensionali, $\langle[g, A_{cl}]\rangle = 0$ sarebbe stato sempre vero al limite classico, in quanto due variabili classiche commutano sempre, ma non sarebbe stato altrettanto vero che $\{g, A_{cl}\} = 0$. Dunque è necessaria l'inclusione di α in \hat{g} .

8.4 L'operatore impulso

Sfruttiamo adesso il principio di corrispondenza per ricavare l'operatore impulso. Ricordando che in meccanica classica deve essere $\{q, p\} = 1$, introdotti l'operatore posizione X e l'operatore impulso P per il principio di corrispondenza deve essere

$$\langle [X, P] \rangle = i\hbar\{q, p\} + \mathcal{O}(\hbar^2) = i\hbar + \mathcal{O}(\hbar^2) \neq 0$$

Da questa relazione possiamo dedurre immediatamente che l'operatore posizione e l'operatore impulso non commutano⁽¹⁰⁾. Per il teorema Teo.1.8 non possiamo diagonalizzare simultaneamente X e P : se lo stato ha un impulso definito, allora non potrà essere definita la posizione e viceversa. Andiamo adesso a determinare un'espressione per l'operatore impulso. Dalla meccanica classica sappiamo che gli impulsi p_x , p_y e p_z sono i generatori delle traslazioni rispettivamente lungo gli assi x , y e z . Fenomenologicamente sappiamo che il gruppo delle traslazioni è commutativo, cioè detti $U_{\delta x}$ e $U_{\delta y}$ gli operatori unitari che descrivono traslazioni lungo l'asse x di una quantità δx e lungo l'asse y di una quantità δy rispettivamente, allora si ha

$$[U_{\delta x}, U_{\delta y}] = 0$$

Ricordando la Eq.(8.4) arrestata al primo ordine otteniamo

$$\left[\mathbb{1} + i\delta x \frac{P_x}{\hbar}, \mathbb{1} + i\delta y \frac{P_y}{\hbar} \right] = 0$$

da cui con banali calcoli si ricava

$$[P_x, P_y] = 0$$

Possiamo quindi avere autostati simultanei di P_x , P_y e P_z . Detto $\{|p_x, p_y, p_z\rangle\}$ il set di autostati simultanei di P_x , P_y e P_z , si ha

$$\begin{cases} P_x |p_x, p_y, p_z\rangle = p_x |p_x, p_y, p_z\rangle \\ P_y |p_x, p_y, p_z\rangle = p_y |p_x, p_y, p_z\rangle \\ P_z |p_x, p_y, p_z\rangle = p_z |p_x, p_y, p_z\rangle \end{cases}$$

Introdotta il vettore di operatori $\vec{P} = (P_x, P_y, P_z)$ e indicato l'autostato simultaneo con $|\vec{p}\rangle = |p_x, p_y, p_z\rangle$, le tre relazioni precedenti si possono scrivere come

$$\vec{P} |\vec{p}\rangle = \vec{p} |\vec{p}\rangle \quad (8.10)$$

Consideriamo l'operatore unitario che descriva una traslazione infinitesima lungo l'asse x e applichiamo allo stato $|\psi\rangle$; si ha

$$U_{\delta x} |\psi\rangle = |\psi_{\delta x}\rangle$$

dove $|\psi_{\delta x}\rangle$ è lo stato traslato di una quantità δx lungo l'asse x . Per vedere "com'è fatto" lo stato traslato è necessario proiettare il tutto su una base. Scegliamo la base $\{|\vec{r}\rangle\}$ (l'unica che conosciamo al momento) e moltiplichiamo scalarmente ambo i membri della precedente equazione per $\langle \vec{r} |$; si ha

$$\langle \vec{r} | U_{\delta x} |\psi\rangle = \langle \vec{r} | \psi_{\delta x}\rangle$$

(10) Se per assurdo commutassero allora il valore medio di $[X, P_x]$ dovrebbe essere nullo, in contraddizione da ciò che sappiamo dalla meccanica classica

ma $\langle \vec{r} | \psi_{\delta x} \rangle$ è la funzione d'onda dello stato traslato, cioè

$$\langle \vec{r} | \psi_{\delta x} \rangle = \psi_{\delta x}(\vec{r}) = \psi(x + \delta x, y, z)$$

Esplicitando la forma dell'operatore si ottiene

$$\langle \vec{r} | \mathbb{1} + i \delta x \frac{P_x}{\hbar} | \psi \rangle = \psi(x + \delta x, y, z) + \mathcal{O}(\delta x^2) \quad (8.11)$$

Possiamo ulteriormente riscrivere il primo membro come

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \mathbb{1} + i \delta x \frac{P_x}{\hbar} | \psi \rangle &= \langle \vec{r} | \psi \rangle + i \frac{\delta x}{\hbar} \langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle = \\ &= \psi(\vec{r}) + i \frac{\delta x}{\hbar} \langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle \end{aligned}$$

Sostituendo tale risultato in Eq.(8.11) e moltiplicando ambo i membri per $\frac{\hbar}{i\delta x}$ otteniamo

$$\langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\psi(x + \delta x, y, z) - \psi(x, y, z)}{\delta x} + \mathcal{O}(\delta x) \quad (8.12)$$

Passando dunque al limite per $\delta x \rightarrow 0$ si ottiene

$$\langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

da cui generalizzando alle tre dimensioni

$$\langle \vec{r} | \vec{P} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

cioè deve essere

$$\vec{P} = -i\hbar \nabla \quad (8.13)$$

Esempio 8.5. Calcoliamo esplicitamente

$$[X_i, P_j]$$

Per fare questo consideriamo uno stato $|\psi\rangle$ e applichiamo il commutatore a tale stato. Per visualizzare il tutto dobbiamo proiettare su una base, che scegliamo essere la base $|\vec{r}\rangle$, cioè la base di autostati dell'operatore posizione.

$$\langle \vec{r} | [X_i, P_j] | \psi \rangle$$

Esplicitando il commutatore si ha

$$\langle \vec{r} | [X_i, P_j] | \psi \rangle = \langle \vec{r} | X_i P_j | \psi \rangle - \langle \vec{r} | P_j X_i | \psi \rangle$$

Nel primo addendo possiamo applicare l'operatore X_i a sinistra ottenendo l'autovalore x_i ; per quanto riguarda il secondo addendo, detto $|\phi\rangle = X_i |\psi\rangle$ otteniamo

$$\langle \vec{r} | X_i P_j | \psi \rangle - \langle \vec{r} | P_j X_i | \psi \rangle = x_i \langle \vec{r} | P_j | \psi \rangle - \langle \vec{r} | P_j | \phi \rangle$$

Usando la definizione dell'operatore impulso Eq.(8.12) possiamo riscrivere la precedente equazione come

$$\begin{aligned}
 x_i \langle \vec{r} | P_j | \psi \rangle - \langle \vec{r} | P_j | \phi \rangle &= x_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \vec{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \vec{r} | \phi \rangle = \\
 &= x_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \vec{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \vec{r} | x_i \psi \rangle = \\
 &= x_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \vec{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} [x_i \langle \vec{r} | \psi \rangle] = \\
 &= i\hbar \delta_{ij} \langle \vec{r} | \psi \rangle = \\
 &= \langle \vec{r} | i\hbar \delta_{ij} | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

Abbiamo trovato quindi

$$\langle \vec{r} | [X_i, P_j] | \psi \rangle = \langle \vec{r} | i\hbar \delta_{ij} | \psi \rangle$$

Poiché tale relazione deve valere indipendentemente dalla base e dallo stato scelti deve essere

$$[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (8.14)$$

Notiamo che

$$[X_i, P_j] = i\hbar \{x_i, p_j\} \quad (8.15)$$

in maniera esatta, senza termini correttivi. Ciò significa che si possono misurare contemporaneamente posizione e impulso non coniugati senza errore, mentre non è possibile misurare contemporaneamente posizione e impulso coniugati. Inoltre si può anche provare che non solo non esiste una base di autostati simultanei per i due operatori, ma non esiste nemmeno un autostato simultaneo, in quanto $[X_i, P_i] = i\hbar$. Per fissare questo concetto consideriamo due operatori A e B tali che $[A, B] = \alpha$ con $\alpha \neq 0$ e supponiamo che esista un autostato simultaneo dei due operatori; sia esso $|a, b\rangle$. Allora si ha

$$\begin{aligned}
 AB |a, b\rangle &= ab |a, b\rangle \\
 BA |a, b\rangle &= ba |a, b\rangle
 \end{aligned}$$

Sottraendo membro a membro le due equazioni si ottiene

$$[A, B] |a, b\rangle = 0$$

cioè $[A, B] = 0$, che è in contraddizione con l'ipotesi iniziale. Dunque dati due operatori il cui commutatore ha tutti autovalori non nulli, essi non ammettono nessun autostato simultaneo.

Determiniamo adesso, se esiste, la base formata dagli autostati di \vec{P} . Riprendiamo la Eq.(8.10)⁽¹¹⁾ e proiettiamola sulla base dell'operatore posizione:

$$\vec{P} |\vec{p}\rangle = \vec{p} |\vec{p}\rangle \quad (8.10)$$

$$\langle \vec{r} | \vec{P} | \vec{p} \rangle = \vec{p} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$$

Sfruttando la definizione di operatore impulso Eq.(8.13) possiamo riscrivere la precedente equazione come

$$-i\hbar \nabla \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \vec{p} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$$

(11)

Dunque, se lo stato $|\psi\rangle$ della particella coincide con l'autostato $|\vec{p}\rangle$ dell'operatore impulso, possiamo introdurre la funzione d'onda dello stato $\psi_p(\vec{r})$ e la precedente equazione diventa

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \psi_p(\vec{r}) = \vec{p} \psi_p(\vec{r})$$

che ha come soluzione

$$\psi_p(\vec{r}) = N \exp \left\{ \frac{i \vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\} \quad (8.16)$$

Gli autostati di \vec{P} sono, quindi, tutti gli stati $|\vec{p}\rangle$ che nella rappresentazione della base $\{|\vec{r}\rangle\}$ assumono la forma vista in Eq.(8.16), dove N è una costante di normalizzazione. A rigore, dunque, l'operatore \vec{P} non ammette autostati nello spazio di Hilbert perché tutte le funzioni del tipo Eq.(8.16) non sono a quadrato sommabile. Possiamo, però, introdurre tali elementi all'interno di uno spazio di Hilbert considerando il fatto che essi non sono stati realizzabili fisicamente; se infatti fosse possibile generare uno stato con impulso definito, allora l'onda associata sarebbe un'onda piana. Introdotto il vettore d'onda $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$, possiamo riscrivere la funzione d'onda associata allo stato $|\vec{p}\rangle$ come

$$\psi_p(\vec{r}) = N \exp \left\{ i \vec{k} \cdot \vec{r} \right\}$$

che è un'onda avente lunghezza d'onda

$$\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$$

Abbiamo quindi trovato che una particella che si muove di moto rettilineo uniforme, cioè che ha impulso costante, deve essere un autostato dell'impulso. Questo è l'unico stato che ha un valore definito dell'impulso; tutti gli altri stati sono sovrapposizioni di stati aventi impulso definito. Le funzioni d'onda degli stati aventi impulso hanno senso soltanto se il sistema fisico studiato è definito all'interno di una regione di spazio finita. Se il sistema è definito in tutto lo spazio, allora esisterà una regione in cui la funzione d'onda dello stato $|\vec{p}\rangle$ è data dalla Eq.(8.16), mentre altrove essa risulterà essere una sovrapposizione di funzioni d'onda. Tuttavia, poiché ogni funzione a quadrato sommabile si può scrivere come sovrapposizione di onde piane monocromatiche, possiamo introdurre la base $\{|\vec{p}\rangle\}$ formata dagli autostati dell'operatore impulso. Tale base sarà, inoltre, completa. Abbiamo quindi determinato due basi fondamentali della meccanica quantistica, che presentano entrambe delle "problematiche":

- la base $\{|\vec{r}\rangle\}$, che non è costituita da stati fisici perché se così fosse lo stato sarebbe una distribuzione δ
- la base $\{|\vec{p}\rangle\}$, che non è costituita da stati fisici perché se così fosse lo stato sarebbe un'onda piana che non è a quadrato sommabile

Osserviamo immediatamente che le funzioni d'onda associate agli stati $|\vec{r}\rangle$ e $|\vec{p}\rangle$ sono una la trasformata di Fourier dell'altra.

Avendo visto che la funzione d'onda associata allo stato $|\vec{p}\rangle$ non è normalizzabile possiamo assumere $N = 1$ e riscrivere la Eq.(8.16) come

$$\psi_p(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \exp \left\{ \frac{i \vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\}$$

Avendo definito in questo modo gli autostati dell'operatore posizione, possiamo andare a descrivere un qualunque stato $|\psi\rangle$ nella base $\{|\vec{p}\rangle\}$. Considerato uno stato $|\psi\rangle$ si ha

$$\langle\vec{p}|\psi\rangle = \int d^3\vec{r} \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\psi\rangle = \int d^3\vec{r} \exp\{-i\vec{k} \cdot \vec{r}\} \psi(\vec{r})$$

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

$$\tilde{\psi}(\vec{p}) = \int d^3\vec{r} \exp\{-i\vec{k} \cdot \vec{r}\} \psi(\vec{r})$$

cioè $\tilde{\psi}(\vec{p})$ è la trasformata di Fourier della funzione d'onda $\psi(\vec{r})$. Possiamo quindi vedere la trasformata di Fourier come una trasformazione che permette un cambiamento di base. In maniera analoga possiamo scrivere

$$\psi(\vec{r}) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{i\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r}\right\} \tilde{\psi}(\vec{p})$$

Ricordando che

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \langle\vec{r}|\psi\rangle \\ \tilde{\psi}(\vec{p}) &= \langle\vec{p}|\psi\rangle \\ \exp\left\{i\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r}\right\} &= \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle \end{aligned}$$

possiamo scrivere la precedente relazione come

$$\langle\vec{r}|\psi\rangle = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle \langle\vec{p}|\psi\rangle$$

cioè possiamo introdurre l'operatore identità per la base $\{|\vec{p}\rangle\}$ e scrivere

$$1 = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\vec{p}\rangle \langle\vec{p}|$$

Abbiamo quindi provato che la base $\{|\vec{p}\rangle\}$ è completa. Possiamo adesso provare banalmente che la trasformata di Fourier è una trasformazione unitaria in quanto

$$\int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2 = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \langle\psi|\vec{p}\rangle \langle\vec{p}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = \int d^3\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2$$

Dato uno stato $|\psi\rangle$ possiamo calcolare il valore medio dell'operatore impulso in tale stato ottenendo

$$\langle\vec{P}\rangle = \langle\psi|\vec{P}|\psi\rangle = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \langle\psi|\vec{P}|\vec{p}\rangle \langle\vec{p}|\psi\rangle = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \vec{p} |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2$$

La distribuzione $\tilde{\psi}(\vec{p})$ risulta essere la distribuzione di probabilità per l'impulso.

Possiamo quindi calcolare l'indeterminazione sull'impulso

$$\sigma_{p_x}^2 = \langle P_x^2 \rangle - \langle P_x \rangle^2$$

Ricordando che $p_x = \hbar k_x$ possiamo scrivere

$$\sigma_{p_x}^2 = \hbar^2 \sigma_{k_x}^2$$

E poiché per le relazioni sulle trasformate di Fourier

$$\sigma_x \sigma_{k_x} \geq \frac{1}{2}$$

deve essere

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}$$

che è la relazione di indeterminazione di Heisenberg.

Fino a ora abbiamo visto la funzione d'onda dello stato $|\vec{p}_0\rangle$ soltanto nella rappresentazione delle coordinate. Ci chiediamo, adesso, quale sia la sua rappresentazione della base $\{|\vec{p}\rangle\}$.

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | \vec{p}_0 \rangle &= \int d^3 \vec{r} \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p}_0 \rangle = \int d^3 \vec{r} \exp \left\{ -i \frac{\vec{r} \cdot \vec{p}}{\hbar} \right\} \exp \left\{ i \frac{\vec{r} \cdot \vec{p}_0}{\hbar} \right\} = \\ &= \int d^3 \vec{r} \exp \left\{ i \frac{\vec{r} \cdot (\vec{p}_0 - \vec{p})}{\hbar} \right\} = (2\pi)^3 \delta^3 \left(\frac{\vec{p} - \vec{p}_0}{\hbar} \right) \end{aligned}$$

Ricordando la proprietà della delta di Dirac

$$\int \delta \left(\frac{x}{\lambda} \right) dx = \lambda$$

posiamo scrivere

$$\langle \vec{p} | \vec{p}_0 \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\vec{p} - \vec{p}_0)$$

Come potevamo aspettarci la rappresentazione dello stato $|\vec{p}_0\rangle$ nella base $\{|\vec{p}\rangle\}$ è una delta di Dirac: infatti se potessimo avere una particella nello stato $|\vec{p}_0\rangle$, questa non potrebbe trovarsi in nessun altro stato con impulso definito.

8.5 Traslazione degli impulsi

In meccanica classica considerata una funzione generatrice

$$F_2(q, p') = qp' + \varepsilon g$$

si trovava con facilità

$$\begin{aligned} \delta q &= \varepsilon \frac{\partial g}{\partial p} \\ \delta p &= -\varepsilon \frac{\partial g}{\partial q} \end{aligned}$$

Se il generatore della trasformazione canonica risulta essere $g = -q$, allora abbiamo $\varepsilon = \delta p$, cioè g è il generatore della traslazione degli impulsi.

Il corrispondente quantistico è un operatore unitario $U_{\delta p_i}$ che genera una traslazione degli impulsi. Procedendo in maniera analoga a quanto fatto nel caso dell'operatore impulso troviamo che

$$U_{\delta p_i} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta p_i X_i$$

da cui passando alla forma integrale

$$U_{\delta p_i} = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \delta p_i X_i \right)$$

e generalizzando alle tre dimensioni

$$U_{\delta\vec{p}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \delta\vec{p} \cdot \vec{R}\right)$$

Determiniamo, adesso, come opera l'operatore posizione nella base $\{|\vec{p}\rangle\}$. Per fare questo consideriamo uno stato $|\psi\rangle$ e andiamo a vedere cosa succede proiettando $\vec{R}|\psi\rangle$ su $|\vec{p}\rangle$

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}|\vec{R}|\psi\rangle &= \int d^3\vec{r} \langle\vec{p}|\vec{R}|\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\psi\rangle = \int d^3\vec{r} \vec{r} \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\psi\rangle = \\ &= \int d^3\vec{r} \vec{r} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right\} \langle\vec{r}|\psi\rangle\end{aligned}$$

Poiché

$$\vec{r} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right\} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right\}$$

abbiamo

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}|\vec{R}|\psi\rangle &= i\hbar \int d^3\vec{r} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right\} \langle\vec{r}|\psi\rangle = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \int d^3\vec{r} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right\} \langle\vec{r}|\psi\rangle = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \int d^3\vec{r} \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\psi\rangle = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \langle\vec{p}|\psi\rangle\end{aligned}$$

Abbiamo dunque trovato come agisce l'operatore posizione nella base $\{|\vec{p}\rangle\}$ su uno stato $|\psi\rangle$

$$\vec{R} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}$$

Esempio 8.6. Calcolare

$$[X_i, f(\vec{P})]$$

Per fare questo devo determinare come il commutatore agisce su un dato stato $|\psi\rangle$ in una data base. Che base scelgo? Poiché non sappiamo come agisce $f(\vec{P})$ sugli autostati della posizione, ma solo come agisce sugli autostati dell'impulso, scegliamo come base proprio $\{|\vec{p}\rangle\}$. In tale base calcoliamo

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}|[X_i, f(\vec{P})]|\psi\rangle &= \langle\vec{p}|X_i f(\vec{P})|\psi\rangle - \langle\vec{p}|f(\vec{P})X_i|\psi\rangle = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} \langle\vec{p}|f(\vec{P})|\psi\rangle - f(\vec{p}) \langle\vec{p}|X_i|\psi\rangle = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} [f(\vec{p}) \langle\vec{p}|\psi\rangle] - f(\vec{p}) \langle\vec{p}|X_i|\psi\rangle = \\ &= i\hbar \frac{\partial f(\vec{p})}{\partial p_i} \langle\vec{p}|\psi\rangle = \\ &= \langle\vec{p}|i\hbar \frac{\partial f(\vec{P})}{\partial p_i}|\psi\rangle\end{aligned}$$

Poiché questa relazione deve valere rispetto a qualunque vettore di

base $|\vec{p}\rangle$ e rispetto a qualunque stato $|\psi\rangle$, allora deve essere

$$[X_i, f(\vec{P})] = i\hbar \frac{\partial f(\vec{P})}{\partial P_i}$$

Notiamo la stretta analogia con

$$\{x_i, f(\vec{p})\} = \frac{\partial f(\vec{p})}{\partial p_i}$$

Tuttavia mentre nel caso classico la relazione precedente è vera anche per una funzione del tipo $f(\vec{r}, \vec{p})$, lo stesso non accade in meccanica quantistica, in cui la funzione deve dipendere solamente dall'operatore impulso.

Esempio 8.7. Calcolare

$$[X, PXP]$$

Si ha

$$\begin{aligned} [X, PXP] &= P[X, XP] + [X, P]XP = \\ &= PX[X, P] + P[X, X]P + [X, P]XP = \\ &= PX[X, P] + [X, P]XP = i\hbar(PX + XP) \end{aligned} \quad (8.17)$$

La corrispondente parentesi di Poisson classica è

$$\{x, pxp\} = \{x, xp^2\} = 2xp$$

Se volessimo portare la Eq.(8.17) in una forma più simile a quella classica basta osservare che sfruttando la definizione di commutatore e la nota relazione $[X, P] = i\hbar$ si ha

$$PX = XP - [X, P] = XP - i\hbar$$

e quindi si ottiene

$$[X, PXP] = i\hbar(PX + XP) = i\hbar(XP + XP - i\hbar) = i\hbar 2XP + \hbar^2$$

Tale relazione al limite classico restituisce proprio il risultato precedentemente trovato.

Notiamo che la sostituzione delle parentesi di Poisson $\{, \}$ con $i\hbar[,]$ in questo caso è valida solo trascurando il termine $\mathcal{O}(\hbar)$.

Esempio 8.8. Calcolare

$$[P_i, f(\vec{R})]$$

Per fare questo devo determinare come il commutatore agisce su un dato stato $|\psi\rangle$ in una data base. Scelta come base quella formata

dagli autostati della posizione si ottiene

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{r} | [P_i, f(\vec{R})] | \psi \rangle &= \langle \vec{r} | P_i f(\vec{R}) | \psi \rangle - \langle \vec{r} | f(\vec{R}) P_i | \psi \rangle = \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \vec{r} | f(\vec{R}) | \psi \rangle - f(\vec{r}) \langle \vec{r} | P_i | \psi \rangle = \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} [f(\vec{r}) \langle \vec{r} | \psi \rangle] - f(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \vec{r} | \psi \rangle = \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x_i} \langle \vec{r} | \psi \rangle = \\
 &= \langle \vec{r} | \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(\vec{R})}{\partial X_i} | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

Poiché questa relazione deve valere per ogni vettore di base $|\vec{r}\rangle$ e per ogni stato $|\psi\rangle$, deve essere

$$[P_i, f(\vec{R})] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(\vec{R})}{\partial X_i} = -i\hbar \frac{\partial f(\vec{R})}{\partial X_i} \quad (8.18)$$

Notiamo la stretta analogia con

$$\{p_i, f(\vec{r})\} = -\frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x_i}$$

8.6 Relazioni di indeterminazione

Teorema 8.9. Siano A e B due operatori hermitiani e sia

$$[A, B] = iC$$

con C operatore hermitiano. Definito

$$\sigma_A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

e analogamente σ_B^2 , proviamo che

$$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle|$$

Dimostrazione. Per definizione si ha

$$|\langle C \rangle| = |\langle [A, B] \rangle|$$

Introdotti gli scalari $a = \langle A \rangle$, $b = \langle B \rangle$, poiché $[A, B] = [A - a, B - b]$ si ha

$$\begin{aligned}
 |\langle C \rangle| &= |\langle [A - a, B - b] \rangle| = |\langle \psi | [A - a, B - b] | \psi \rangle| = \\
 &= |\langle \psi | (A - a)(B - b) | \psi \rangle - \langle \psi | (B - b)(A - a) | \psi \rangle| =
 \end{aligned}$$

Introdotti

$$\begin{aligned}
 |\phi_A\rangle &= (A - a) |\psi\rangle \\
 |\phi_B\rangle &= (B - b) |\psi\rangle
 \end{aligned}$$

si ha

$$\begin{aligned} |\langle \psi | (A - a)(B - b) | \psi \rangle - \langle \psi | (B - b)(A - a) | \psi \rangle| &= \\ = |\langle \phi_A | \phi_B \rangle - \langle \phi_B | \phi_A \rangle| &= |2i \operatorname{Im}\{\langle \phi_A | \phi_B \rangle\}| = \\ = 2|\operatorname{Im}\{\langle \phi_A | \phi_B \rangle\}| &\leq \\ \leq 2|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| \end{aligned}$$

In questo caso l'uguaglianza vale se e solo se $\langle \phi_A | \phi_B \rangle$ è puramente immaginario. Sfruttando la disuguaglianza di Schwarz si ha

$$2|\langle \phi_A | \phi_B \rangle| \leq 2\sqrt{\langle \phi_A | \phi_A \rangle \langle \phi_B | \phi_B \rangle}$$

dove l'uguaglianza vale se e solo se $|\phi_A\rangle$ e $|\phi_B\rangle$ sono paralleli. Esplicitando i termini sotto radice si ottiene

$$|\langle \phi_A | \phi_A \rangle| = \langle \psi | (A - a)^2 | \psi \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \sigma_A^2$$

e in maniera del tutto analoga

$$|\langle \phi_B | \phi_B \rangle| = \sigma_B^2$$

Si ottiene quindi

$$|\langle C \rangle| \leq 2\sigma_A\sigma_B$$

cioè la tesi. \square

Se consideriamo $A = X$ e $B = P$ dal teorema Teo.8.9 si ottiene

$$\sigma_X\sigma_P \geq \frac{\hbar}{2}$$

che è la relazione di indeterminazione di Heisenberg.

In linea di principio può accadere che, seppur $C \neq 0$, $\langle C \rangle = 0$. Questo, però, accade solamente per alcuni stati $|\psi\rangle$, dunque non è possibile costruire una base ortonormale di autostati di C in cui si abbia sempre $\langle C \rangle = 0$.

Andiamo adesso a studiare i particolari casi per cui valga l'uguaglianza nella relazione di indeterminazione. Supponiamo che sia $|\phi_A\rangle = k|\phi_B\rangle$ con $k \in \mathbb{C}$. Moltiplicando scalarmente tale relazione per $|\phi_B\rangle$ si ottiene

$$\langle \phi_B | \phi_A \rangle = k \langle \phi_B | \phi_B \rangle$$

Poiché $\langle \phi_B | \phi_B \rangle \in \mathbb{R}$, imporre che $\langle \phi_B | \phi_A \rangle$ sia puramente immaginario equivale a imporre che k sia puramente immaginario. Possiamo quindi riscrivere la precedente relazione come

$$|\phi_A\rangle = i\alpha |\phi_B\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

Ricordando le definizioni di $|\phi_A\rangle$ e $|\phi_B\rangle$ si ottiene

$$(A - \langle A \rangle) |\psi\rangle = i\alpha (B - \langle B \rangle) |\psi\rangle$$

Questa equazione restituisce una condizione su $|\psi\rangle$. Poniamoci nel caso specifico in cui $A = X$ e $B = P$. In questo caso si ha

$$(X - \langle X \rangle) |\psi\rangle = i\alpha (P - \langle P \rangle) |\psi\rangle$$

Se proiettiamo sulla base $\{|x\rangle\}$ si ottiene

$$\langle x | X - \langle X \rangle | \psi \rangle = i\alpha \langle x | P - \langle P \rangle | \psi \rangle$$

Questa è un'equazione differenziale per la funzione d'onda, infatti si ha

$$(x - \langle X \rangle) \psi(x) = i\alpha \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \langle P \rangle \right) \psi(x)$$

che può essere riscritta come

$$(x - \langle X \rangle + i\alpha \langle P \rangle) \psi(x) = \alpha \hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$$

dove la derivata parziale è diventata totale perché la funzione d'onda dipende solamente da x . Introdotto il numero complesso $z = \langle X \rangle - i\alpha \langle P \rangle$ si ottiene

$$(x - z) \psi(x) = \alpha \hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$$

che è un'equazione differenziale a variabili separabili di immediata risoluzione

$$\begin{aligned} (x - z) dx &= \hbar \alpha \frac{d\psi}{\psi} \\ \int (x - z) dx &= \hbar \alpha \log \psi \\ \frac{1}{2} (x - z)^2 &= \hbar \alpha \log \psi \\ \log \psi &= \frac{1}{2\hbar \alpha} (x - z)^2 \\ \psi(x) &= N \exp \left\{ \frac{1}{2\hbar \alpha} (x - z)^2 \right\} \end{aligned}$$

dove N è una costante di normalizzazione. Seppur il problema sia stato formalmente risolto, resta da capire qual è il significato fisico del risultato trovato. Affinché $\psi(x)$ rappresenti uno stato fisicamente realizzabile è necessario che $\alpha < 0$; infatti se fosse $\alpha > 0$ allora $\psi(x) \notin L^2(\mathbb{R})$. Ridefinendo α e ponendo

$$\lambda = -\frac{1}{2\hbar \alpha}$$

possiamo riscrivere la funzione d'onda come

$$\psi(x) = N \exp \left\{ -\lambda (x - z)^2 \right\}$$

Ricordando la definizione di z si ottiene

$$\begin{aligned} \psi(x) &= N \exp \left\{ -\lambda (x - \langle X \rangle + i\alpha \langle P \rangle)^2 \right\} = \\ &= N \exp \left\{ -\lambda \left[(x - \langle X \rangle)^2 - \alpha^2 \langle P \rangle^2 + 2i\alpha \langle P \rangle (x - \langle X \rangle) \right] \right\} \end{aligned}$$

Assorbendo tutte le costanti nella costante di normalizzazione N si ottiene

$$\begin{aligned} \psi(x) &= N \exp \left\{ -\lambda \left[(x - \langle X \rangle)^2 + 2i\alpha \langle P \rangle x \right] \right\} = \\ &= N \exp \left\{ -\lambda \left[(x - \langle X \rangle)^2 \right] - \frac{i \langle P \rangle x}{\hbar} \right\} \end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo sfruttato la definizione di λ . Dunque una funzione d'onda soddisfa le relazioni di indeterminazione attraverso l'uguaglianza se e solo se è della forma

$$\psi(x) = N \exp \left\{ -\lambda (x - \langle X \rangle)^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{i \langle P \rangle x}{\hbar} \right\} \quad (8.19)$$

Tale funzione d'onda restituisce una densità di probabilità

$$|\psi(x)|^2 = N^2 \exp\left\{-2\lambda(x - \langle X \rangle)^2\right\}$$

che è una gaussiana centrata in $x = \langle X \rangle$. Poiché avevamo già dimostrato nel paragrafo §3.5 che per una gaussiana valevano le relazioni di indeterminazione in maniera esatta, possiamo affermare che

Proposizione 8.10. Condizione necessaria e sufficiente affinché valga l'uguaglianza nelle relazioni di indeterminazione è che la funzione d'onda sia una gaussiana.

Notiamo che il termine

$$\exp\left\{\frac{i \langle P \rangle x}{\hbar}\right\}$$

è un fattore di fase che non contribuisce alla probabilità $|\psi(x)|^2$. Qual è allora il suo significato fisico?

Ricordiamo che l'operatore traslazione degli impulsi è proprio

$$U_{\delta p} = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \delta p X\right\}$$

Applicando tale operatore a uno stato $|\psi\rangle$ e mettendoci nella rappresentazione delle coordinate otteniamo

$$\langle x|U_{\delta p}|\psi\rangle = \langle x|\exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \delta p X\right\}|\psi\rangle = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \delta p x\right\}\psi(x)$$

che è proprio la funzione d'onda con gli impulsi traslati che chiamiamo $\psi_{\delta p}(x)$. Dunque $\psi_{\delta p}(x)$ è quella funzione tale che la trasformata sia

$$\tilde{\psi}_{\delta p}(p) = \tilde{\psi}(p + \delta p)$$

Quindi moltiplicare, nella rappresentazione delle coordinate, la funzione d'onda $\psi(x)$ per il fattore

$$\exp\left\{\frac{i \delta p x}{\hbar}\right\}$$

equivale a traslare l'impulso di δp nella funzione trasformata $\tilde{\psi}(p)$. Allo stesso modo il fattore

$$\exp\left\{\frac{i \langle P \rangle x}{\hbar}\right\}$$

trasla il valor medio dell'impulso da 0 a $\langle P \rangle$.

Calcoliamo adesso il valore medio di P usando la definizione. Per fare questo dobbiamo calcolare

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left(N \exp\left\{-\lambda(x - \langle X \rangle)^2\right\} \exp\left\{\frac{i \langle P \rangle x}{\hbar}\right\} \right) = \\ &= N \frac{\hbar}{i} [-2\lambda(x - \langle X \rangle)] \exp\left\{-\lambda(x - \langle X \rangle)^2\right\} \exp\left\{\frac{i \langle P \rangle x}{\hbar}\right\} + \\ &\quad + N \frac{\hbar}{i} \exp\left\{-\lambda(x - \langle X \rangle)^2\right\} \frac{i \langle P \rangle}{\hbar} \exp\left\{\frac{i \langle P \rangle x}{\hbar}\right\} \end{aligned}$$

Se adesso andiamo a moltiplicare questo termine per $\psi^*(x)$ otteniamo

$$\begin{aligned} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) &= \\ &= N^2 \frac{\hbar}{i} [-2\lambda(x - \langle X \rangle)] \exp\left\{-2\lambda(x - \langle X \rangle)^2\right\} + \\ &\quad N^2 \langle P \rangle \exp\left\{-2\lambda(x - \langle X \rangle)^2\right\} \end{aligned}$$

Si ha quindi

$$\begin{aligned} \langle P \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \\ &= -2\lambda N^2 \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} dx [(x - \langle X \rangle)] \exp\left\{-2\lambda(x - \langle X \rangle)^2\right\} + \\ &\quad + N^2 \langle P \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left\{-2\lambda(x - \langle X \rangle)^2\right\} = \end{aligned}$$

L'integrale al primo addendo è il valore medio di $X - \langle X \rangle$ e quindi è nullo. Il termine

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx N^2 \exp\left\{-2\lambda(x - \langle X \rangle)^2\right\}$$

è proprio il modulo quadro della funzione d'onda normalizzata, dunque è uguale a 1. Si ottiene quindi

$$\langle P \rangle = \langle P \rangle$$

Ciò significa che la gaussiana "si muove", cioè se passiamo alla trasformata di Fourier non otteniamo una gaussiana centrata in $p = 0$, ma una gaussiana centrata in $p = \langle P \rangle$.

8.7 Meccanica classica o meccanica quantistica

Meccanica classica o
meccanica quantistica

Esempio 8.11. Abbiamo visto che in meccanica quantistica valgono le relazioni di indeterminazione di Heisenberg

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

In generale possiamo sempre asserire che

$$\sigma_A \sigma_B \sim \hbar$$

Questa condizione ci permette di capire qual è il comportamento della meccanica quantistica e quindi quando studiare un problema con la meccanica quantistica e quando con la meccanica classica. Infatti seppur la meccanica quantistica generalizzi la meccanica classica, essa è più complicata e spesso non permette di trovare soluzioni analitiche ma solamente soluzioni approssimate.

Consideriamo un granello di polvere di densità $\rho = 10^3 \text{ kg/m}^3$ e raggio $r = 10^{-6} \text{ m}$ e supponiamo sia in moto con velocità $v \sim 10^{-2} \text{ m/s}$. È abbastanza piccolo da dover applicare le leggi della meccanica quantistica? Per rispondere a questa domanda calcoliamo l'azione del granello di polvere. Il granello ha una massa

$m \sim \rho r^3 = 10^{-15}$ kg e supponendo che esso abbia percorso un tratto $\Delta x \sim 10^{-6}$ m l'azione sarà

$$S \sim \Delta x p = 10^{-6} 10^{-2} 10^{-15} = 10^{-23} \text{ Js}$$

Sfruttando le relazioni di indeterminazione di Heisenberg si ha

$$\frac{\sigma_x \sigma_p}{xp} \geq \frac{\hbar}{S} \sim 10^{-11}$$

cioè possiamo ottenere degli errori relativi

$$\frac{\sigma_x}{x} \sim 10^{-5} \quad \frac{\sigma_p}{p} \sim 10^{-6}$$

che non cadono nei limiti della meccanica quantistica⁽¹²⁾.

Supponiamo di fare gli stessi calcoli per l'atomo di idrogeno. Poiché il raggio atomico è $r \sim 0.5 \text{ \AA}$ calcolando il momento angolare dell'elettrone supponendo che questo abbia la velocità dedotta dal modello classico risulta

$$S = rmv \sim 10^{-34} \text{ Js}$$

e quindi il rapporto

$$\frac{\sigma_x \sigma_p}{xp} \geq \frac{\hbar}{S} \sim 1$$

Un modello classico non può quindi descrivere l'atomo di idrogeno.

Esempio 8.12. Riprendiamo in considerazione l'atomo di idrogeno ($R \sim 10^{-10}$ m, $m \sim 10^{-30}$ kg, $v \sim 10^6$ m/s). Con i dati a disposizione possiamo calcolare l'azione dell'elettrone nell'atomo di idrogeno che è pari a

$$S = mvR = 10^{-34} \text{ Js} \sim \hbar$$

In queste condizioni quindi abbiamo

$$\frac{\sigma_x}{x} \frac{\sigma_{p_x}}{p_x} \sim \frac{\hbar}{\hbar} = 1$$

e quindi la meccanica classica non è più applicabile. La traiettoria classica viene, dunque, a perdere di significato.

Supponiamo che l'elettrone sia una particella classica che ruoti attorno al nucleo con un'orbita circolare di raggio R dovuta al potenziale coulombiano presente tra elettrone e nucleo che nel sistema di Gauss è pari a

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

Dal punto di vista classico il sistema non è stabile: l'elettrone, in quanto particella carica in moto accelerato, dovrebbe emettere energia sotto forma di onde elettromagnetiche e perdendo energia dovrebbe collassare sul nucleo. Ciò però non accade. Possiamo già adesso, sfruttando le sole relazioni di indeterminazione di Heisenberg, spiegare perché l'atomo di idrogeno è stabile.

Consideriamo l'energia cinetica dell'elettrone nell'orbita circolare

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

(12) Affinché sia d'obbligo usare la meccanica quantistica nella risoluzione di un problema è necessario che gli errori relativi siano dell'ordine dell'unità.

Prime osservazioni sull'atomo di idrogeno

Classicamente essa può essere piccola a piacere: se l'elettrone collassa sul nucleo, si ottiene il caso limite in cui $E_c = 0$ e il potenziale è $V(r) = -\infty$, cioè l'elettrone precipita in una buca di potenziale. Dal punto di vista della meccanica quantistica si ha che

$$\bar{E}_c = \langle \frac{\vec{P}^2}{2m} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \vec{P}^2 \rangle$$

Supponendo di studiare il problema nel riferimento del centro di massa in cui

$$\langle \vec{P} \rangle = 0$$

si ha che

$$\sigma_p^2 = \langle \vec{P}^2 \rangle - \langle \vec{P} \rangle^2 = \langle \vec{P}^2 \rangle$$

e quindi il valore medio dell'energia cinetica è

$$\bar{E}_c = \frac{\sigma_p^2}{2m}$$

Se l'elettrone collassasse sul nucleo, la sua posizione sarebbe determinata con un σ_x molto piccolo e quindi σ_p molto grande. Ciò significa che più è stretto nelle posizioni un pacchetto, più è grande l'energia cinetica in questo stato. Si ha infatti

$$\langle \frac{\vec{P}^2}{2m} \rangle = \frac{\sigma_p^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{4m\sigma_x^2}$$

e quindi affinché uno stato abbia energia cinetica nulla, deve avere σ_x infinito, cioè lo stato deve essere un'onda delocalizzata in tutto lo spazio. Nel momento in cui l'onda viene localizzata, l'energia cinetica non può più essere nulla. Ci riferiremo a questo effetto con il nome di *claustrofobia quantistica*: la particella tende a rifuggire spazi troppo piccoli in quanto questi farebbero aumentare l'energia cinetica. Ciò ci permette di capire perché la materia è principalmente vuota.

Cosa succede se sfruttiamo queste considerazioni per studiare il problema dal punto di vista energetico? Supposto di avere un elettrone nello stato $|\psi\rangle$ si ha

$$\begin{aligned} \bar{V} &= \langle -\frac{e^2}{r} \rangle = \int -\frac{e^2}{r} |\psi(\vec{r})|^2 d^3r \sim -\frac{e^2}{\sigma} \\ \bar{E} &= \langle \frac{\vec{P}^2}{2m} \rangle \sim \frac{\sigma_p^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2m\sigma^2} \end{aligned}$$

dove σ è la dimensione caratteristica dello stato $|\psi\rangle$. Se adesso rappresentiamo su un grafico queste due funzioni di σ otteniamo la figura Fig.8.1. È evidente che esiste un minimo per l'energia totale del sistema e supponiamo che tale minimo si abbia per $\sigma = a_0$. Andiamo quindi a calcolare il valore di a_0 . A meno di fattori dell'ordine dell'unità si ha

$$E(\sigma) = \bar{V} + \bar{E} = -\frac{e^2}{\sigma} + \frac{\hbar^2}{2m\sigma^2}$$

e quindi

$$\frac{dE}{d\sigma} = -\frac{\hbar^2}{m\sigma^3} + \frac{e^2}{\sigma^2} = 0 \iff \sigma = a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

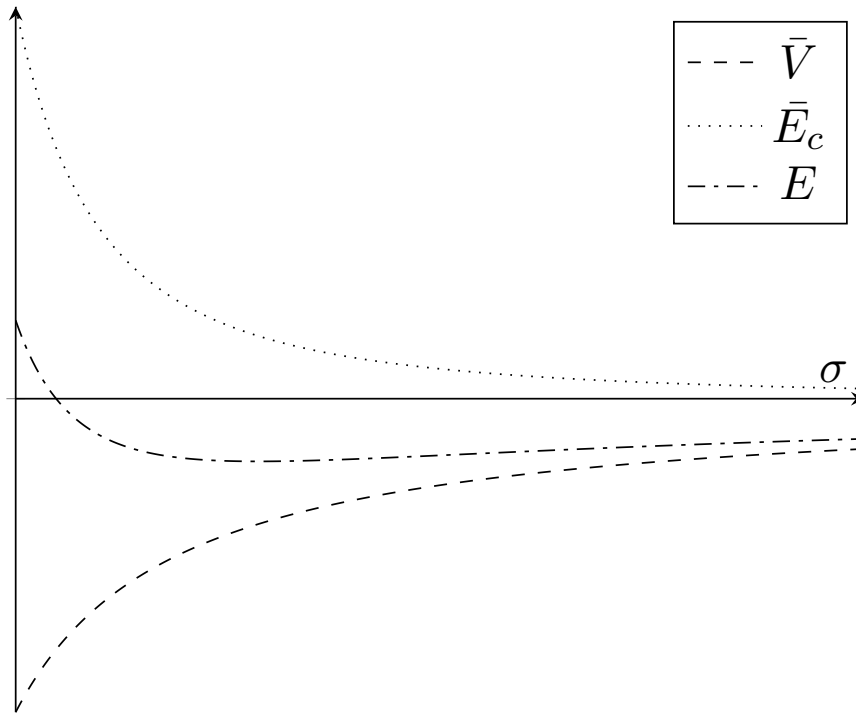


Figura 8.1 : *Grafico delle energie.*

Si ottiene, quindi, che l'energia dell'elettrone ha un minimo quando questo si trova a una distanza dal nucleo pari a $a_0 = 0.5 \cdot 10^{-10}$ m, che è il raggio di Bohr.

Sorge spontanea una domanda: come fa il protone a stare all'interno del nucleo, che ha un raggio di $r = 10^{-15}$ m? Detta m la massa dell'elettrone, avremo che la massa del protone è $M \simeq 2000m$. L'energia cinetica del protone sarà quindi

$$\langle \frac{\vec{P}^2}{2M} \rangle = \frac{\hbar^2}{2Mc^2} = \frac{\hbar^2}{2m\sigma^2} \frac{m}{M} \frac{e^2}{\sigma^2} = \frac{1}{2a_0} a_0^2 \frac{m}{M} \frac{e^2}{\sigma^2} \sim 10 \text{ MeV}$$

dove σ è proprio il raggio nucleare. Il termine $e^2/a_0 \simeq 27.2$ ev prende il nome di Hartree ed è il doppio del Rydberg. Il risultato trovato è in perfetto accordo con i dati sperimentali. Se invece l'elettrone dovesse essere confinato in una regione delle dimensioni del nucleo atomico, allora la sua energia cinetica dovrebbe essere 10^{10} volte maggiore di quella che osserviamo.

Evoluzione temporale degli stati

9.1	L'equazione di Schrödinger . .	139
9.2	Operatore evoluzione temporale	142
9.3	Operatore hamiltoniano	143
9.4	Dal propagatore alla formulazione <i>path-integral</i>	146
9.5	Propagatore della particella libera	149

9.1 L'equazione di Schrödinger

Consideriamo uno stato $|\psi\rangle$ e studiamo la sua evoluzione temporale. L'evoluzione temporale di uno stato è descritta da un operatore unitario $U_{\delta t}$ tale che

$$U_{\delta t} |\psi\rangle = |\psi_{\delta t}\rangle$$

essendo $|\psi_{\delta t}\rangle$ lo stato traslato di un tempo δt . Fissato un tempo di riferimento t_0 si ha che

$$U_{\delta t} |\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0 + \delta t)\rangle$$

Parleremo in questo caso di rappresentazione di Schrödinger della meccanica quantistica: il sistema è descritto da un vettore $|\psi\rangle$ dello spazio di Hilbert che dipende dal tempo. Ricordiamo che, essendo l'operatore che descrive l'evoluzione temporale un operatore unitario, i prodotti scalari restano invariati. Per visualizzare come evolve lo stato $|\psi\rangle$ nel tempo si può studiare l'evoluzione temporale della funzione d'onda a esso associato. Per fare questo dobbiamo supporre che il set di vettori di base $\{|\vec{r}\rangle\}$ non evolva nel tempo. Abbiamo quindi

$$\psi(\vec{r}, t_0 + \delta t) = \langle \vec{r} | \psi_{\delta t} \rangle$$

In maniera equivalente si potrebbe far variare $|\vec{r}\rangle$ e mantenere fisso lo stato $|\psi\rangle$, infatti

$$\psi(\vec{r}, t_0 + \delta t) = \langle \vec{r} | \psi_{\delta t} \rangle = \langle \vec{r} | U_{\delta t} | \psi \rangle = \langle \vec{r}_{-\delta t} | \psi \rangle$$

dove

$$U_{\delta t}^\dagger = U_{-\delta t}$$

Non esiste, quindi, un modo univoco per descrivere l'evoluzione temporale di uno stato.

Da questo momento in poi assumeremo che lo stato dipenda dal tempo e che il set di vettori di base sia fisso in maniera tale che l'evoluzione temporale di uno stato si possa descrivere mediante la funzione d'onda

$$\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle$$

Parleremo, dunque, di evoluzione temporale in senso attivo degli stati. L'operatore unitario che descrive l'evoluzione temporale sarà, dunque, in forma infinitesima

$$U_{\delta t} = \mathbb{1} - i \frac{\delta t}{\hbar} H \quad (9.1)$$

essendo H il generatore della trasformazione e δt il suo parametro. Per il principio di corrispondenza, poiché nella meccanica classica il generatore dell'evoluzione temporale è l'hamiltoniana \mathcal{H} , l'operatore H è proprio l'hamiltoniana quantistica. Il segno meno è dovuto al fatto che l'evoluzione temporale è intesa in senso attivo. Possiamo adesso vedere cosa succede agli stati a seguito di un'evoluzione temporale infinitesima; fissato un tempo di riferimento t_0 si ha

$$\begin{aligned} U_{\delta t} |\psi(t_0)\rangle &= |\psi(t_0 + \delta t)\rangle \implies \\ \implies |\psi(t_0 + \delta t)\rangle &= \left(\mathbb{1} - i \frac{\delta t}{\hbar} H \right) |\psi(t_0)\rangle = \\ &= |\psi(t_0)\rangle - i \frac{\delta t}{\hbar} H |\psi(t_0)\rangle + \mathcal{O}(\delta t^2) \implies \\ \implies i\hbar \frac{|\psi(t_0 + \delta t)\rangle - |\psi(t_0)\rangle}{\delta t} &= H |\psi(t_0)\rangle + \mathcal{O}(\delta t) \end{aligned}$$

Passando al limite per $\delta t \rightarrow 0$ e ponendo $t_0 = 0$ si ottiene

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\psi(t)\rangle \quad (9.2)$$

⁽¹⁾ Molti testi danno l'equazione di Schrödinger come un postulato della meccanica quantistica. Con i postulati da noi fatti e sfruttando il principio di corrispondenza è invece possibile ricavarla senza dover fare un postulato aggiuntivo

che è l'equazione di Schrödinger ⁽¹⁾. Moltiplicando scalarmente per $|\vec{r}\rangle$ si ottiene l'equazione di Schrödinger per la funzione d'onda

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{r} | \psi \rangle = \langle \vec{r} | H | \psi(t) \rangle \quad (9.3)$$

Resta da definire come agisce l'operatore H sugli stati. Poiché l'hamiltoniana classica è

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

e per il principio di corrispondenza si ha che al limite classico valgono le relazioni

$$\begin{aligned} \langle \vec{P} \rangle &\rightarrow \vec{p} \\ \langle \vec{R} \rangle &\rightarrow \vec{r} \end{aligned}$$

allora possiamo scrivere l'operatore hamiltoniana come

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$$

Questo discorso è del tutto generale: non stiamo facendo assunzioni sulla forma dell'hamiltoniana e quindi può essere applicato anche in ambito relativistico. Tuttavia, nel formalismo hamiltoniano il tempo ha un ruolo privilegiato. Osserviamo che nella base della posizione, l'operatore H agisce sugli stati $\langle \vec{r} |$ come $i\hbar \partial / \partial t$, mentre l'operatore impulso agisce come $-i\hbar \nabla$. Possiamo quindi considerare il 4-operatore

$$\hat{P}_\mu = \left(\frac{H}{c}, -\vec{P} \right) = \left(i\hbar \frac{\partial}{c \partial t}, +i\hbar \nabla \right) = i\hbar \partial_\mu$$

che è il corrispondente quantistico del 4-vettore impulso

$$P_\mu = \left(\frac{E}{c}, -\vec{p} \right)$$

L'equazione di Schrödinger che otteniamo dipende quindi strettamente dal tipo di hamiltoniana associata al sistema.

Andiamo adesso a vedere come si possa trasformare l'equazione di Schrödinger in un'equazione tra operatori. Sia $U(t, t_0)$ l'operatore evoluzione temporale che agisce sullo stato $|\psi(t_0)\rangle$ come

$$U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = |\psi(t)\rangle$$

Se adesso inseriamo questo risultato nella Eq.(9.2) otteniamo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle) = HU(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

e poiché questa equazione deve valere qualunque sia lo stato $|\psi(t_0)\rangle$ deve essere

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad (9.4)$$

Abbiamo, dunque, trasformato l'equazione di Schrödinger in un'equazione tra operatori la cui soluzione è l'operatore evoluzione temporale $U(t, t_0)$.

Consideriamo adesso un qualsiasi sistema a regime non relativistico, descritto dall'hamiltoniana

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$$

e l'equazione di Schrödinger è

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}) | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t)$$

Invece, in ambito relativistico sappiamo che

$$P_\mu = \left(\frac{H}{c}, -\vec{P} \right) = i\hbar \partial_\mu,$$

e perciò, si ha che

$$P_\mu \hat{P}^\mu = \frac{H^2}{c^2} - \vec{P}^2.$$

Osserviamo che, per il principio di corrispondenza, in ambito relativistico si ha:

$$H^2 = c^2 \vec{P}^2 + m^2 c^4 \mathbf{1}.$$

In tale maniera, otteniamo

$$P_\mu P^\mu = m^2 c^2 \mathbf{1}.$$

Dunque, usando la definizione dell'operatore

$$-\hbar^2 \partial_\mu \partial^\mu \psi(\vec{r}, t) = m^2 c^2 \psi(\vec{r}, t)$$

da cui sfruttando la definizione dell'operatore d'Alembertiano si ottiene

$$\square \psi(\vec{r}, t) = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi(\vec{r}, t)$$

che è l'equazione di Klein-Gordon. Per una particella di massa nulla (i fotoni) l'equazione di Klein-Gordon diventa

$$\square \psi(\vec{r}, t) = 0$$

che è proprio l'equazione di D'Alembert per le onde elettromagnetiche. Questo vale solamente per una trattazione a particella singola. Nel caso relativistico, però, i fotoni vengono emessi e assorbiti e quindi non è possibile trattare il sistema come una particella singola.

9.2 Operatore evoluzione temporale

Cerchiamo adesso una forma esplicita per l'operatore evoluzione temporale, differenziando i vari casi in cui l'hamiltoniana dipende o meno dal tempo.

Proviamo che se l'hamiltoniana non dipende esplicitamente dal tempo la soluzione di Eq.(9.4)⁽²⁾ è

(2)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \quad (9.4) \quad U(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) H \right) \quad (9.5)$$

Dividendo l'intervallo di tempo $[t_0, t]$ in N intervalli ciascuno di ampiezza $\delta t = (t - t_0)/N$ molto piccola possiamo scrivere

$$U(t, t_0) = \prod_{j=0}^{N-1} U(t_j + \delta t, t_j) = \prod_{j=0}^{N-1} \left[\mathbb{1} - i \frac{\delta t}{\hbar} H \right] = \left(\mathbb{1} - i \frac{\delta t}{\hbar} H \right)^N$$

da cui risostituendo $\delta t = (t - t_0)/N$ e passando alla forma continua per $N \rightarrow \infty$ si ottiene, per il limite notevole che definisce il numero e

$$U(t, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \frac{t - t_0}{N} H \right)^N = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) H \right)$$

Se l'hamiltoniana dipende esplicitamente dal tempo, la produttoria non moltiplica più fattori uguali e quindi ci limitiamo a scrivere

$$U(t, t_0) = \prod_{j=0}^{N-1} \left[\mathbb{1} - i \frac{\delta t}{\hbar} H(t_j) \right] = \prod_{j=0}^{N-1} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \delta t H(t_j) \right]$$

(3) Tale situazione avviene ad esempio se $H(t) = f(t)A$ con A operatore indipendente dal tempo.

Se⁽³⁾

$$[H(t_i), H(t_j)] = 0 \quad \forall t_i, t_j$$

allora vale la formula $e^A e^B = e^{A+B}$ ⁽⁴⁾ e quindi

(4) Si tratta di una conseguenza della formula di BCH che abbiamo visto nel capitolo 1.

$$U(t, t_0) = \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \sum_{i=1}^{N-1} H(t_i) \delta t \right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right]$$

Riepilogando si ha che:

H indipendente dal tempo	H dipendente dal tempo	
$U(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) H \right)$	$[H(t), H(t')] = 0 \quad \forall t, t' \in [t_0, t]$	$[H(t), H(t')] \neq 0 \quad \forall t, t' \in [t_0, t]$
	$U(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right]$	Non esiste un modo analitico per determinare una forma finita dell'operatore evoluzione temporale

Se l'hamiltoniana dipende dal tempo possiamo procedere come segue. Integriamo la Eq.(9.4)⁽⁵⁾ tra t_0 e t e ricordando che $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ si ottiene

(5)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \quad (9.4) \quad U(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt' \quad (9.6)$$

È quindi possibile trasformare l'equazione di Schrödinger nella forma Eq.(9.4) in un'equazione integrale, che può essere risolta mediante procedimenti iterativi e scrivere quindi

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t H(t') \int_{t_0}^{t'} H(t'') dt'' dt' + \dots$$

Notiamo che in ogni termine compare un determinato ordinamento temporale all'interno degli integrali, infatti $t > t' > t'' > \dots$. Questo fa sì che il problema sia difficile da risolvere analiticamente.

Proviamo che presi due stati $|\phi(t_1)\rangle$ e $|\psi(t_2)\rangle$ se l'hamiltoniana non dipende esplicitamente dal tempo il loro prodotto scalare $\langle\phi(t_1)|\psi(t_2)\rangle$ dipende soltanto da $t_2 - t_1$. Infatti

$$\begin{aligned} \langle\phi(t_1)|\psi(t_2)\rangle &= \langle\phi|U^\dagger(t_1, t_0)U(t_2, t_0)|\psi\rangle = \\ &= \langle\phi|\exp\left(i\frac{t_1 - t_0}{\hbar}H\right)\exp\left(-i\frac{t_2 - t_0}{\hbar}H\right)|\psi\rangle = \\ &= \langle\phi|\exp\left(-i\frac{t_2 - t_1}{\hbar}H\right)|\psi\rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo indicato per semplicità $\langle\phi(t_0)| = \langle\phi|$ e $|\psi(t_0)\rangle = |\psi\rangle$. Il risultato ottenuto quindi non dipende dal particolare t_0 scelto, ma solo dalla differenza $t_2 - t_1$.

9.3 Operatore hamiltoniano

Il formalismo hamiltoniano riveste un ruolo di primaria importanza nella meccanica quantistica, in quanto permette di descrivere l'evoluzione temporale di un sistema fisico. Assumiamo che esista un set di autostati dell'operatore hamiltoniano, questi formano una base $\{|\phi_n\rangle\}$ ortonormale. In generale non sappiamo se l'operatore hamiltoniano abbia uno spettro continuo o discreto, dunque se la base sia o meno numerabile. Supponendo che l'hamiltoniana non dipenda esplicitamente dal tempo possiamo scrivere l'operatore evoluzione temporale, posto $t_0 = 0$, come

$$U(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}Ht\right\}$$

cioè l'operatore evoluzione temporale è una funzione dell'operatore hamiltoniana. Il problema agli autovalori dell'operatore hamiltoniana è quindi fondamentale per andare a determinare l'evoluzione temporale degli stati. Sia $|\phi_n\rangle$ un autostato dell'operatore hamiltoniano; la sua evoluzione temporale è data da

$$\begin{aligned} |\phi_n(t)\rangle &= U(t)|\phi_n(0)\rangle = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}Ht\right\}|\phi_n(0)\rangle = \\ &= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E_nt\right\}|\phi_n(0)\rangle \end{aligned}$$

essendo E_n l'autovalore corrispondente all'autostato $|\phi_n\rangle$. Detta

$$\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$$

la frequenza associata all'energia E_n , l'evoluzione temporale di uno stato è data da

$$|\phi_n(t)\rangle = \exp\{-i\omega_n t\} |\phi_n(0)\rangle$$

L'evoluzione temporale è quindi descritta da un fattore di fase oscillante. Gli stati $|\phi_n\rangle$ sono detti stati stazionari. La funzione d'onda associata a tale stato è

$$\phi_n(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \phi_n(t) \rangle = \exp\{-i\omega_n t\} \langle \vec{r} | \phi_n(0) \rangle = \exp\{-i\omega_n t\} \phi_n(\vec{r}, 0)$$

La densità di probabilità associata a tale stato è

$$|\phi_n(\vec{r}, t)|^2 = |\phi_n(\vec{r}, 0)|^2$$

cioè la distribuzione di probabilità associata a questi stati non cambia nel tempo.

Proposizione 9.1. Il valore medio di una qualunque osservabile A in uno stato stazionario è costante nel tempo.

Dimostrazione. Sia ϕ_n uno stato stazionario, allora

$$\begin{aligned} \langle \phi_n(t) | A | \phi_n(t) \rangle &= \langle \phi_n(0) | A | \phi_n(0) \rangle \exp\{i\omega_n t\} \exp\{-i\omega_n t\} \\ &= \langle \phi_n(0) | A | \phi_n(0) \rangle \end{aligned}$$

□

Nota l'evoluzione temporale degli stati stazionari, possiamo descrivere l'evoluzione temporale di un qualunque stato. Sfruttando il fatto che gli stati stazionari formano una base completa possiamo riscrivere l'operatore evoluzione temporale come

$$\begin{aligned} U(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} H t\right\} &= \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_n t\right\} = \\ &= \sum_n |\phi_n\rangle \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_n t\right\} \langle \phi_n| \end{aligned}$$

Abbiamo, cioè, ottenuto la rappresentazione spettrale dell'operatore evoluzione temporale. Applicando tale operatore a un qualunque stato $|\psi\rangle$ otteniamo

$$U(t) |\psi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_n t\right\} \langle \phi_n | \psi \rangle = |\psi(t)\rangle$$

Tuttavia, poiché gli stati stazionari formano una base ortonormale, possiamo riscrivere lo stato $|\psi\rangle$ come

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle$$

Dall'uguaglianza tra le due relazioni otteniamo

$$c_n(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_n t\right\} \langle \phi_n | \psi \rangle$$

Dunque, noti autostati e autovalori dell'operatore hamiltoniano, possiamo descrivere l'evoluzione temporale di un qualunque stato. Il problema agli autovalori di H acquisisce dunque un ruolo fondamentale nella meccanica quantistica in quanto

1. permette di determinare i valori di energia possibili per quel sistema fisico e la corrispondente probabilità di misura;
2. permette di descrivere l'evoluzione temporale di un qualunque stato.

Esempio 9.2. Consideriamo una particella libera. L'hamiltoniana di tale sistema è

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m}$$

Essendo l'hamiltoniana una funzione dell'operatore impulso, gli autostati di \vec{P} sono autostati anche dell'operatore hamiltoniana. Considerati il set di autostati $\{|\vec{p}\rangle\}$ che soddisfano l'equazione agli autovalori dell'operatore impulso

$$\vec{P}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$$

essi sono anche autostati dell'operatore hamiltoniana, cioè risolvono l'equazione agli autovalori

$$H|\vec{p}\rangle = \frac{p^2}{2m}|\vec{p}\rangle$$

Nella base posizione abbiamo che

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right\} = \psi_{\phi}(\vec{r})$$

Per una particella libera non è presente quantizzazione dell'energia, dunque lo spettro dell'operatore hamiltoniano è continuo. La dipendenza temporale di questi stati è data da

$$\psi_{\phi}(\vec{r}, t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E(p)t\right\}$$

dove

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

Per una particella libera, uno stato in cui l'energia è fissata corrisponde a uno stato in cui è fissato l'impulso e l'autofunzione corrispondente a uno stato con energia e impulso fissati è un'onda piana monocromatica con numero d'onda e frequenza rispettivamente

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

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

Inserendo la prima nella seconda si ricava la relazione di dispersione

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Osserviamo che se l'hamiltoniana dipendesse esplicitamente dal tempo i suoi autostati sarebbero dipendenti dal tempo e non si potrebbe più parlare di stati stazionari.

9.4 Dal propagatore alla formulazione *path-integral*

Consideriamo un sistema fisico descritto da un'hamiltoniana H che non dipenda dal tempo. Dati due stati $|\psi_1(t_1)\rangle$ e $|\psi_2(t_2)\rangle$, calcoliamo la probabilità che lo stato $|\psi_2(t_2)\rangle$ venga osservato nello stato $|\psi_1(t_1)\rangle$

$$\begin{aligned}\langle\psi_1(t_1)|\psi_2(t_2)\rangle &= \langle\psi_1(0)|\exp\left(\frac{i}{\hbar}Ht_1\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht_2\right)|\psi_2(0)\rangle = \\ &= \langle\psi_1(0)|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t_2 - t_1)\right]|\psi_2(0)\rangle = \langle\psi_1(0)|U(t_2, t_1)|\psi_2(0)\rangle\end{aligned}$$

dove $U(t_2, t_1)$ è l'operatore evoluzione temporale. Questo concetto assume una particolare importanza quando gli stati $|\psi_1(t_1)\rangle$ e $|\psi_2(t_2)\rangle$ sono autostati dell'operatore posizione ad istanti differenti. Chiameremo *propagatore* l'oggetto

$$\langle\vec{r}_1, t_1|\vec{r}_2, t_2\rangle = \langle\vec{r}_1|U(t_2, t_1)|\vec{r}_2\rangle \quad (9.7)$$

Qual è l'informazione fisica contenuta all'interno di questo oggetto? Il propagatore ci permette di stabilire, data una particella nel punto \vec{r}_2 al tempo t_2 , qual è la probabilità di trovare la stessa particella nel punto \vec{r}_1 al tempo t_1 . Esso, quindi, contiene tutte le informazioni sulla dinamica del sistema. Sia $\psi(\vec{r}, t)$ la funzione d'onda che descrive un sistema; sfruttando il propagatore possiamo riscriverla come

$$\psi(\vec{r}, t) = \langle\vec{r}|\psi(t)\rangle = \langle\vec{r}|U(t)|\psi(0)\rangle = \int d^3\vec{r}' \langle\vec{r}|U(t)|\vec{r}'\rangle \langle\vec{r}'|\psi(0)\rangle$$

Quindi abbiamo riscritto la funzione d'onda al tempo t come una sovrapposizione di funzioni d'onda al tempo $t = 0$ pesate dal propagatore. Tutta l'informazione sull'evoluzione temporale di un qualunque stato è contenuta all'interno del propagatore.

Vediamo adesso come il propagatore possa essere messo in relazione con l'azione. Consideriamo una variazione temporale infinitesima δt e andiamo a calcolare il propagatore a essa associato

$$\begin{aligned}\langle\vec{r}|U_{\delta t}|\vec{r}'\rangle &= \langle\vec{r}|\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta t H|\vec{r}'\rangle = \\ &= \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle \langle\vec{p}|\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta t H|\vec{r}'\rangle.\end{aligned}$$

dove abbiamo inserito la risoluzione dell'identità in termini degli autostati dell'operatore impulso. Osserviamo che $H = H(\vec{R}, \vec{P})$ e genericamente la dipendenza da \vec{R} e \vec{P} è tale per cui risulta possibile, sfruttando opportune relazioni di commutazione, ordinare gli operatori in modo di avere tutti gli operatori impulso a sinistra e tutti gli operatori posizione a destra (ad esempio possiamo scrivere $\vec{R} \cdot \vec{P} = \vec{P} \cdot \vec{R} + i\hbar\mathbb{1}$). Dopo aver effettuato questa operazione, possiamo scrivere:

$$\langle\vec{p}|H|\vec{r}'\rangle = H(\vec{r}', \vec{p}) \langle\vec{p}|\vec{r}'\rangle,$$

dove con un abuso di notazione stiamo indicando con $H(\vec{r}', \vec{p})$ una funzione degli autovalori \vec{r}' e \vec{p} in generale differente dalla funzione $H(\vec{R}, \vec{P})$ degli operatori, in quanto per ordinare gli operatori \vec{R} e \vec{P} come detto

sopra, è necessario usare le relazioni di commutazione, facendo comparire termini aggiuntivi.

Il propagatore si può quindi scrivere come

$$\begin{aligned}\langle \vec{r} | U_{\delta t} | \vec{r}' \rangle &= \int \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \right\} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \delta t H(\vec{r}', \vec{p}) \right] = \\ &= \int \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \delta t H(\vec{r}', \vec{p}) \right\},\end{aligned}$$

dove l'ultimo passaggio è lecito in quanto $\delta t \rightarrow 0$ e quindi stiamo apportando correzioni al più del secondo ordine.

Inoltre, a meno di infinitesimi di ordine superiore al primo, visto che δt è infinitesimo, possiamo scrivere

$$\vec{r}' = \vec{r} + \mathcal{O}(\delta t),$$

e quindi possiamo vedere il termine

$$\frac{\vec{r} - \vec{r}'}{\delta t}$$

come una velocità $\dot{\vec{r}}$. Possiamo quindi riscrivere il propagatore come

$$\langle \vec{r} | U_{\delta t} | \vec{r}' \rangle = \int \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\dot{\vec{r}} \cdot \vec{p} - H(\vec{r}', \vec{p}) \right] \delta t \right\}$$

Il termine

$$\dot{\vec{r}} \cdot \vec{p} - H(\vec{r}', \vec{p})$$

è la trasformata di Legendre dell'hamiltoniana, in cui però non abbiamo ancora scritto \vec{p} come una funzione della posizione e della velocità.

In generale data una funzione $f(p) = ap^2 + bp + c + \dots$, detto p_0 un suo estremo relativo, possiamo riscrivere $f(p)$ come

$$f(p) = a(p - p_0)^2 + f(p_0)$$

Ciò ci permette di fare quanto segue

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp\{-f(p)\} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp\{-f(p_0)\} \exp\{-a(p - p_0)^2\} = \\ &= \exp(-f(p_0)) \int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp\{-a(p - p_0)^2\} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp(-f(p_0))\end{aligned}$$

Questo metodo prende il nome di *saddle point approximation* e in generale permette di calcolare integrali molto complessi approssimandoli a integrali gaussiani. Nel caso di una funzione quadratica nella variabile di integrazione il metodo non è più approssimato, ma esatto.

Cosa accade utilizzando questo metodo nel nostro problema? Il punto \vec{p}_0 è dato da

$$\frac{\partial}{\partial p} [\dot{\vec{r}} \cdot \vec{p} - H(\vec{p}, \vec{r})] = 0 \implies \dot{\vec{r}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}$$

Quest'equazione è l'equazione del moto e risolta rispetto a \vec{p}_0 posso scrivere l'impulso in funzione delle velocità ottenendo, a meno di una costante moltiplicativa,

$$\langle \vec{r} | U_{\delta t} | \vec{r}' \rangle = \exp \left(\frac{i}{\hbar} L \delta t \right)$$

e poiché al primo ordine si ha

$$S = \int L dt \simeq L \delta t$$

si può scrivere

$$\langle \vec{r}' | U_{\delta t} | \vec{r} \rangle = \text{costante} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \quad (9.8)$$

dove S è l'azione. Questo è il punto di partenza per costruire una formulazione alternativa della meccanica quantistica, detta *formulazione path-integral*, introdotta da Feynman. Il vantaggio di questa formulazione è dato dal fatto che S non è un operatore, ma una funzione e quindi si presta più facilmente a una generalizzazione al caso relativistico. Invece di introdurre i postulati della meccanica quantistica come abbiamo fatto, si può partire postulando che il propagatore sia quello visto in Eq.(9.8) e da esso ricavare tutti i postulati della meccanica quantistica.

Supponiamo di avere un sistema che evolva da una posizione iniziale \vec{r}_i all'istante t_i ad una posizione finale \vec{r}_f all'istante t_f . Calcoliamo il propagatore

$$\langle \vec{r}_f | U_{\Delta t} | \vec{r}_i \rangle$$

dove $\Delta t = t_f - t_i$. Per fare ciò divido l'intervallo di tempo in N parti, in modo tale da poter considerare ciascun intervallo infinitesimo per $N \rightarrow \infty$. Per ognuno dei tempi intermedi t_n posso individuare un set di autostati ortonormale completo della posizione in modo da poter scrivere l'identità come

$$\mathbb{1} = \int d^3 \vec{r}_n | \vec{r}_n t_n \rangle \langle \vec{r}_n t_n |$$

Possiamo riscrivere il propagatore come

$$\langle \vec{r}_f | U_{\delta t_1} U_{\delta t_2} \dots U_{\delta t_N} | \vec{r}_i \rangle \quad (9.9)$$

Introducendo l'operatore identità tra ogni coppia di operatori otteniamo

$$\int d^3 \vec{r}_1 \int d^3 \vec{r}_2 \dots \int d^3 \vec{r}_N \langle \vec{r}_f | U_{\delta t_1} | \vec{r}_1 t_1 \rangle \langle \vec{r}_1 t_1 | U_{\delta t_2} | \vec{r}_2 t_2 \rangle \dots \langle \vec{r}_{N-1} t_{N-1} | U_{\delta t_N} | \vec{r}_i t_i \rangle$$

Sfruttando Eq.(9.8) su ciascun termine, abbiamo

$$\langle \vec{r}_f | U_{\Delta t} | \vec{r}_i \rangle = \int d^3 \vec{r}_1 \int d^3 \vec{r}_2 \dots \int d^3 \vec{r}_N \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum S_i\right)$$

Per $N \rightarrow \infty$ otteniamo

$$\langle \vec{r}_f | U_{\Delta t} | \vec{r}_i \rangle = \int \mathcal{D}[\vec{r}(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\vec{r}(t)]\right) \quad (9.10)$$

dove con il simbolo

$$\int \mathcal{D}[\vec{r}(t)] \quad (9.11)$$

intendiamo che bisogna integrare su tutte le possibili traiettorie del sistema che abbiano estremi iniziali e finali fissati. Il formalismo path-integral sembra quindi essere piuttosto complesso: in generale, infatti, non è possibile ottenere risultati analitici. Esiste, tuttavia, una particolare classe di problemi che risolti operatorialmente appaiono più complessi rispetto a una risoluzione con questo formalismo. Questo formalismo viene, soprattutto, utilizzato in teoria quantistica dei campi. Mediante questo

formalismo, inoltre, possiamo vedere qual è il limite classico della meccanica quantistica. In meccanica classica presi un punto iniziale e uno finale, il sistema segue una traiettoria ben definita: quella su cui l'azione è minima. In meccanica quantistica, invece, al propagatore contribuiscono tutte le traiettorie e non solo quella classica. Tuttavia, per $S \gg \hbar$, detta S_0 l'azione sulla traiettoria classica, discretizzando la Eq.(9.10) si ha

$$\sum_{r(t)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[r(t)]\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0\right) \sum_{r(t)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (S[r(t)] - S_0)\right)$$

Poiché $S - S_0 \gg \hbar$ la sommatoria ha termini oscillanti che interferiscono tra loro e quindi si ottiene il propagatore classico

$$\exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_0\right\}$$

riottenendo, dunque, il principio di minima azione. Se invece $S - S_0 \sim \hbar$ allora l'interferenza tra i termini della sommatoria non è trascurabile e ottengo contributi da ogni traiettoria.

9.5 Propagatore della particella libera

Ricordiamo di aver definito il propagatore come:

$$\langle x | U_t | x' \rangle$$

dove U_t è l'operatore di evoluzione temporale. Se applicassimo tale oggetto a un qualsiasi stato ψ , utilizzando l'identità dell'operatore posizione, otterremmo:

$$\int \langle x | U_t | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx' = \langle x | U_t | \psi \rangle = \langle x | \psi(t) \rangle = \psi(x, t)$$

dove $\psi(x, t)$ è la funzione d'onda.

Vogliamo adesso considerare come sistema fisico la particella libera e calcolarne il propagatore. Per la particella libera infatti l'operatore evoluzione temporale è definito come

$$U_t = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right)$$

dove $H_0 = P^2/2m$ è l'operatore hamiltoniana della particella libera. Allora per calcolare il propagatore ci serviamo dell'identità per la base dell'operatore impulso, ovvero:

$$\begin{aligned} \langle x | \exp\left(-i\frac{P^2 t}{2m\hbar}\right) | x' \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle x | \exp\left(-i\frac{P^2 t}{2m\hbar}\right) | p \rangle \langle p | x' \rangle = \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(-i\frac{p^2 t}{2m\hbar}\right) \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle \end{aligned}$$

dove $\langle x|p\rangle = \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$, come già visto per le autofunzioni dell'operatore impulso. Per cui nel calcolo precedente possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{ip(x-x')}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{p^2t}{2m\hbar}\right) = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^2t}{2m} + 2p\sqrt{\frac{t}{2m}}(x'-x)\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{t}} + \frac{m}{2t}(x'-x)^2\right]\right) \\ & \exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m(x'-x)^2}{2t}\right) = \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left[p\sqrt{\frac{t}{2m}} + \sqrt{\frac{m}{2t}}\frac{(x'-x)}{2}\right]^2\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m(x'-x)^2}{2t}\right) \end{aligned}$$

Osserviamo che l'integranda ricorda vagamente la forma di una funzione gaussiana nella variabile p , seppur con una fondamentale differenza: la presenza dell'unità immaginaria. Nonostante questo dettaglio, possiamo comunque ricondurci al calcolo di un integrale gaussiano sfruttando il prolungamento analitico della funzione esponenziale. Allora, detto $\lambda = \frac{i}{\hbar}\frac{t}{2m}$, avremo che

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left[p\sqrt{\frac{t}{2m}} + \sqrt{\frac{m}{2t}}\frac{(x'-x)}{2}\right]^2\right) = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

e dunque, in definitiva il propagatore della particella libera è dato da

$$\langle x|\exp\left(-i\frac{p^2t}{2m\hbar}\right)|x'\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \exp\left(\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}\right) \quad (9.12)$$

Esempio 9.3 (Applicazione propagatore della particella libera al pacchetto gaussiano). Consideriamo una particella libera e una funzione d'onda gaussiana del tipo⁽⁶⁾

$$\psi(x) = N \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right) \exp\left(i\frac{p_0x}{\hbar}\right)$$

Ricordiamo che è stato già mostrato che, per una gaussiana centrata nell'origine, si ha

- $\langle x \rangle = 0$;
- $\langle p \rangle = p_0$;
- $\langle x^2 \rangle = 2\sigma^2$.

⁽⁷⁾ Vogliamo calcolare la funzione d'onda al tempo t servendoci del propagatore, che per il sistema particella libera è stato appena determinato. Allora:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \exp\left(\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}\right) N \exp\left(-\frac{x'^2}{4\sigma^2}\right) \\ &\exp\left(i\frac{p_0x'}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

Per semplicità di calcolo, inglobiamo tutti i termini che non dipendono da x' in una costante di normalizzazione che dipende

(6) Il termine $\exp\left(i\frac{p_0x}{\hbar}\right)$ rappresenta una traslazione degli impulsi di p_0 , dunque in totale la nostra $\psi(x)$ è un pacchetto gaussiano inizialmente centrato in $x = 0$ avente un impulso $p_0 \neq 0$

(7) N.B.: tale funzione d'onda non è un'autofunzione dell'hamiltoniana per la particella libera, dunque non è stazionaria, nel senso che nel tempo evolverà in qualche modo.

eventualmente dal tempo. Allora si avrà:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp \left(i \frac{m}{2\hbar t} [x^2 + x'^2 - 2xx'] \right) \exp \left(-\frac{x'^2}{4\sigma^2} \right) \exp \left(i \frac{p_0 x'}{\hbar} \right) = \\ & = \exp \left(i \frac{m}{2\hbar t} x^2 \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp \left(i \frac{mx'}{2\hbar t} - i \frac{mx x'}{\hbar t} - \frac{x'^2}{4\sigma^2} + i \frac{p_0 x'}{\hbar} \right) \end{aligned}$$

Da cui consideriamo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp \left(-x'^2 \left[\frac{1}{4\sigma^2} - i \frac{m}{2\hbar t} \right] + 2x' \left[i \frac{p_0}{2\hbar} - i \frac{mx}{2\hbar t} \right] \right)$$

E definendo λ il coefficiente di x'^2 , $b\lambda$ il coefficiente di $2x'$, da cui

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \exp (-\lambda x'^2 + 2b\lambda x') dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \exp (-\lambda(x'^2 - 2bx')) dx' = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} \exp (-\lambda(x' - b)^2) \exp \{ \lambda b^2 \} dx' = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \exp \{ \lambda b^2 \} \end{aligned}$$

dove chiaramente il termine sotto radice va ad essere inglobato nella costante di normalizzazione. In definitiva, abbiamo trovato la seguente dipendenza per la funzione d'onda $\psi(x, t)$:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= N(t) \exp \left(i \frac{m}{2\hbar t} x^2 \right) \exp (\lambda b^2) = N(t) \exp \left(i \frac{m}{2\hbar t} x^2 \right) \\ & \exp \left(\frac{(b\lambda)^2}{\lambda} \right) = N(t) \exp \left(i \frac{m}{2\hbar t} x^2 \right) \exp \left(-\frac{\left(\frac{p_0}{2\hbar} - \frac{mx}{2\hbar t} \right)^2}{\frac{1}{4\sigma^2} - i \frac{m}{2\hbar t}} \right) \end{aligned}$$

dove $N(t)$ è la costante di normalizzazione che dipende dal tempo. Interrogiamoci adesso sul modulo quadro della funzione d'onda:

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= |N(t)|^2 \left| \exp \left(-\frac{\left(\frac{p_0}{2\hbar} - \frac{mx}{2\hbar t} \right)^2}{\frac{1}{4\sigma^2} - i \frac{m}{2\hbar t}} \right) \right|^2 = \\ &= |N(t)|^2 \left| \exp \left(-\frac{\left(\frac{1}{4\sigma^2} + i \frac{m}{2\hbar t} \right) \left(\frac{p_0}{2\hbar} - \frac{mx}{2\hbar t} \right)^2}{\left(\frac{1}{4\sigma^2} \right)^2 + \left(\frac{m}{2\hbar t} \right)^2} \right) \right|^2 = \\ &= |N(t)|^2 \exp \left(-\frac{2}{4\sigma^2} \frac{\left(\frac{p_0}{2\hbar} - \frac{mx}{2\hbar t} \right)^2}{\left(\frac{1}{4\sigma^2} \right)^2 + \left(\frac{m}{2\hbar t} \right)^2} \right) = \\ &= |N(t)|^2 \exp \left(-\frac{\left(x - \frac{p_0}{m} t \right)^2}{2\sigma_t^2} \right) \end{aligned}$$

dove abbiamo definito

$$\sigma_t^2 = \sigma^2 \frac{\left(\frac{1}{4\sigma^2} \right)^2 + \left(\frac{m}{2\hbar t} \right)^2}{\left(\frac{m}{2\hbar t} \right)^2}$$

Riscrivendo questo nuovo termine σ_t possiamo fare alcune osservazioni, infatti:

$$\sigma_t^2 = \sigma^2 \left[1 + \frac{1}{(4\sigma^2)^2} \left(\frac{2\hbar t}{m} \right)^2 \right] = \sigma^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma} \right)^2$$

e dunque è soddisfatta la relazione ricavata in precedenza dalle relazioni di Heisenberg:

$$\sigma_t \geq \frac{\hbar t}{2m\sigma} \quad (9.13)$$

In definitiva, quali risultati abbiamo ricavato per l'evoluzione temporale di un pacchetto gaussiano, mediante l'applicazione di un propagatore?

Innanzitutto, partendo da un pacchetto gaussiano che inizialmente ha larghezza σ e impulso p_0 , al tempo t il pacchetto sarà ancora gaussiano e si troverà centrato in $x = \frac{p_0}{m}t$ e avrà larghezza σ_t . Dunque il pacchetto, oltre a spostarsi, si allarga. In particolare, dovendo essere soddisfatta la relazione (9.13), se si considera un pacchetto inizialmente molto stretto, esso si allargherà molto rapidamente. L'allargamento è inoltre accompagnato da uno schiacciamento, in quanto l'evoluzione temporale conserva la normalizzazione, e non a caso abbiamo trovato che la costante di normalizzazione dipende esplicitamente dal tempo.

9.5.1 Propagatore della particella libera con formalismo *path-integral*

Il risultato che abbiamo trovato in precedenza per il propagatore della particella libera Eq.(9.12) poteva essere previsto in maniera più semplice utilizzando il formalismo "Path integral". Il grande vantaggio infatti del formalismo introdotto da Feynmann consiste nella possibilità di calcolare i propagatori in maniera più semplice e immediata rispetto al metodo tradizionale.

Secondo tale formalismo, il propagatore è dato da

$$\int \mathcal{D}_x \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}[x] \right)$$

dove $\mathcal{S}[x]$ è l'azione della particella libera su un generico cammino $x(t)$. Nel caso particolare della particella libera, al propagatore contribuisce soltanto l'azione calcolata sulla traiettoria classica, e solo per un sistema come questo il risultato è esatto e non approssimato⁽⁸⁾. Scriveremo allora, a meno di costanti di normalizzazione dipendenti dal tempo, il propagatore come

$$\int \mathcal{D}_x \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int \mathcal{S}[x] \right) = \exp \left(\frac{i}{\hbar} S \right)$$

dove $S = \int L dt$ è l'azione calcolata sulla traiettoria classica.

Per la particella libera, la lagrangiana è quadratica, ovvero $L = \frac{1}{2}mv^2$, e la velocità costante è data da $v = \frac{x' - x}{t}$. Allora l'azione sarà

$$S = \int \frac{1}{2}mv^2 dt = \frac{1}{2}mv^2 t = \frac{1}{2}m \frac{(x' - x)^2}{t}$$

(8) Vedi legame tra equazione di Hamilton-Jacobi ed equazione di Schrödinger

e dunque il propagatore sarà

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m(x' - x)^2}{2t}\right)$$

che è esattamente il risultato che avevamo trovato precedentemente, a meno di costanti moltiplicative dipendenti dal tempo.

Approfondimento

Vediamo, per esercizio, come calcolare il fattore di normalizzazione $N(t)$ e verifichiamo, come controllo di buon senso, che sia lo stesso ottenuto precedentemente. Scriviamo il propagatore come

$$N \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m(x' - x)^2}{2t}\right)$$

Per trovare N sfruttiamo il fatto che, per $t \rightarrow 0$, il propagatore deve tendere alla delta di Dirac. In particolare utilizziamo la seguente rappresentazione della funzione delta:

$$\delta(x' - x) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi\Delta^2}} \exp\left(-\frac{(x' - x)^2}{\Delta^2}\right)$$

dunque, in base alla definizione del propagatore, si ha

$$\frac{im}{2\hbar(t' - t)} = -\frac{1}{\Delta^2} \implies \Delta^2 = \frac{2i\hbar(t' - t)}{m}$$

da cui

$$N(t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}$$

che è esattamente il risultato che avevamo trovato precedentemente.

Limite classico

10.1 Dinamica dei valori medi

Ci chiediamo adesso se, in generale, la dinamica dei valori medi di un'osservabile in meccanica quantistica coincide con la dinamica delle variabili classiche.

Sicuramente, se siamo nel limite classico per cui $\hbar \rightarrow 0$, allora si ha questa coincidenza, ovvero $\langle A \rangle_t \rightarrow A(t)$. Questo è vero perchè al limite classico per il principio di corrispondenza si ha la coincidenza di valor medio e osservabile classica.

Tuttavia, se siamo in un regime quantistico, allora la dinamica dei valori medi in generale non coincide con la dinamica delle variabili classiche.

Vediamo il caso particolare per un sistema di hamiltoniana H non dipendente esplicitamente dal tempo nello stato

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle]$$

dove $|\phi_1\rangle$ e $|\phi_2\rangle$ sono autostati di H con autovalori E_1 e E_2 rispettivamente.

Se supponiamo per semplicità che il potenziale è pari allora le autofunzioni sono tutte o pari o dispari ($|\phi_n\rangle$ stati simmetrici), come vedremo più avanti nei prossimi capitoli studiando l'operatore parità, e dunque il valor medio della posizione in ciascuno di questi stati è nullo.

Ci interessiamo allora al calcolo del valor medio della posizione nello stato $|\psi\rangle$, e alla sua evoluzione temporale $\langle\psi(t)|x|\psi(t)\rangle$.

Ricordiamo che, nella rappresentazione di Schrödinger, l'evoluzione temporale di uno stato è data da

$$|\psi(t)\rangle = U_t |\psi(0)\rangle = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} |\psi(0)\rangle$$

dove U_t è l'operatore evoluzione temporale.

Dunque utilizzando la definizione dello stato in questione si ha:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[U_t |\phi_1\rangle + U_t |\phi_2\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} |\phi_1\rangle + e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} |\phi_2\rangle\right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-i\omega_1 t} |\phi_1\rangle + e^{-i\omega_2 t} |\phi_2\rangle\right] \end{aligned}$$

dove si è definito $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$.

A questo punto passiamo al calcolo del valor medio dell'operatore posizione:

$$\langle\psi(t)|X|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2} [\langle\phi_1| e^{i\omega_1 t} + \langle\phi_2| e^{i\omega_2 t}] X [|\phi_1\rangle e^{-i\omega_1 t} + |\phi_2\rangle e^{-i\omega_2 t}]$$

10.1	Dinamica dei valori medi . .	155
10.2	Rappresentazioni di Schrödinger e di Heisenberg	156
10.3	Teorema di Ehrenfest	158

E, osservando che $\langle \phi_n | X | \phi_n \rangle = 0$ per quanto supposto prima, si ottiene

$$\langle \psi(t) | X | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left[\langle \phi_1 | X | \phi_2 \rangle e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} + \langle \phi_2 | X | \phi_1 \rangle e^{-i(\omega_1 - \omega_2)t} \right]$$

Infine, è possibile notare che $\langle \phi_1 | X | \phi_2 \rangle = ae^{i\varphi}$, con a e φ reali, in quanto trattasi di un numero complesso. Dunque, detto $\omega = \omega_1 - \omega_2$, si ha

$$\langle \psi(t) | X | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left[ae^{i(\omega t + \varphi)} + ae^{-i(\omega t + \varphi)} \right] = a \cos(\omega t + \varphi)$$

cioè, in definitiva, il valor medio della posizione in uno stato che è somma di due autostati dell'hamiltoniana oscilla nel tempo come

$$\langle X \rangle_t = a \cos(\omega t + \varphi)$$

L'aspetto importante di questo risultato, valido per una combinazione di autostati dell'hamiltoniana, è la sua generalità: infatti, oltre alla simmetria degli autostati dell'hamiltoniana, non è stata fatta alcuna ipotesi sulla forma del potenziale del sistema, dunque il risultato è valido in generale. Si noti dunque la grande differenza con la meccanica classica, dove chiaramente la legge oraria della posizione non è in generale oscillatoria.

Se invece avessimo considerato l'evoluzione in singoli autostati, il risultato sarebbe stato una costante rispetto al tempo, e in particolare per autostati simmetrici il valor medio sarebbe stato nullo, come visto in precedenza.

Un'altra osservazione interessante è legata alla frequenza di oscillazione del valor medio della posizione. Essa è data dalla differenza dei livelli energetici, infatti $\omega = \frac{E_1 - E_2}{\hbar}$.

10.2 Rappresentazioni di Schrödinger e di Heisenberg

Nello studio fatto finora della meccanica quantistica abbiamo supposto che l'evoluzione temporale del sistema sia interamente contenuta nel vettore di stato $|\psi_S(t)\rangle$ e ricavabile dall'equazione di Schrödinger. Questo approccio alla meccanica quantistica è detto *rappresentazione di Schrödinger*. Sappiamo, però, che tutte le previsioni della meccanica quantistica sono espresse in termini di prodotti scalari o in termini di elementi di matrice di un operatore e queste quantità sono invarianti per trasformazioni unitarie. Possiamo scegliere una particolare trasformazione unitaria in modo tale che trasformi il vettore di stato $|\psi_S(t)\rangle$ in un vettore di stato indipendente dal tempo. Questo fa sì che l'evoluzione temporale del sistema non sia più contenuta nel vettore di stato, ma nelle osservabili fisiche, ottenendo quella che viene chiamata *rappresentazione di Heisenberg*.

Il vettore di stato $|\psi_S(t)\rangle$ al tempo t è espresso in termini di un vettore di stato $|\psi_S(t_0)\rangle$ dalla relazione

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi_S(t_0)\rangle$$

dove $U(t, t_0)$ è l'operatore evoluzione temporale. Poiché esso è un operatore unitario, è sufficiente realizzare la trasformazione unitaria associata all'operatore $U^\dagger(t, t_0)$ per ottenere un vettore trasformato costante $|\psi_H\rangle$:

$$|\psi_H\rangle = U^\dagger(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle$$

Nella rappresentazione di Heisenberg, il vettore di stato è costante e uguale al vettore di stato nella rappresentazione di Schrödinger al tempo iniziale. Il trasformato $A_H(t)$ di un operatore $A_S(t)$ è dato da

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) A_S(t) U(t, t_0) \quad (10.1)$$

In generale A_H dipende dal tempo, anche se A_S è indipendente dal tempo. Esiste tuttavia un particolare caso in cui se A_S è indipendente dal tempo, allora A_H è indipendente dal tempo. Ciò avviene quando l'hamiltoniana non dipende dal tempo e A_S commuta con essa; in tal caso, poiché $U(t, t_0) = \exp\{-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0)\}$, si ha che anche $U(t, t_0)$ commuta con A_S e quindi

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) A_S U(t, t_0) = U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) A_S = A_S$$

In questo caso gli operatori A_S e A_H sono uguali in entrambe le rappresentazioni. Discorso a parte va fatto per le hamiltoniane nelle due rappresentazioni: seguendo un ragionamento analogo a quello fatto precedentemente si dimostra in maniera immediata che $H_H(t) = H_S$.

Presa un'osservabile arbitraria $A_S(t)$, determiniamo l'evoluzione dell'operatore $A_H(t)$ nella rappresentazione di Heisenberg. Riprendendo la Eq.(9.4)⁽¹⁾ e la sua aggiunta, possiamo scrivere

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = & -U^\dagger(t, t_0) H_S(t) A_S(t) U(t, t_0) + \\ & + i\hbar U^\dagger(t, t_0) \frac{dA_S(t)}{dt} U(t, t_0) + \\ & + U^\dagger(t, t_0) A_S(t) H_S(t) U(t, t_0) \end{aligned} \quad (1) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \quad (9.4)$$

Inseriamo nel primo e nel terzo addendo dell'espressione tra A_S e H_S l'identità in funzione dell'operatore evoluzione temporale $U(t, t_0)$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = & -U^\dagger(t, t_0) H_S(t) U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) A_S(t) U(t, t_0) + \\ & + i\hbar U^\dagger(t, t_0) \frac{dA_S(t)}{dt} U(t, t_0) + \\ & + U^\dagger(t, t_0) A_S(t) U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) H_S(t) U(t, t_0) \end{aligned}$$

Sfruttando la definizione di operatore nella rappresentazione di Heisenberg Eq.(10.1), si ottiene l'equazione di Heisenberg

$$i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \left(\frac{dA_S(t)}{dt} \right)_H \quad (10.2)$$

Notiamo la grande analogia tra l'equazione ottenuta e l'equazione che descrivere l'evoluzione temporale di una osservabile classica Eq.(4.6)⁽²⁾. In particolare, passando ai valori medi e ricordando che al limite classico $\langle [A_H, H_H] \rangle \rightarrow i\hbar \{A, H\}$, si ha che al limite classico la Eq.(10.2) si riduce alla Eq.(4.6).

Supposto che A_S non dipenda dal tempo la Eq.(10.2) si riduce a

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A_H, H_H] \quad (10.3)$$

Quindi ricaviamo che tutte e sole le grandezze che sono conservate sono quelle che hanno un commutatore nullo con l'hamiltoniana e che sono,

quindi, generatori di trasformazioni di simmetria. Proviamo, adesso, che questo risultato è in accordo con l'analogo ottenuto nella rappresentazione di Schrödinger. Infatti poiché date due osservabili A_S e B_S si ha che il trasformato del loro prodotto è uguale al prodotto dei trasformati⁽³⁾, allora

$$^{(3)} \quad U^\dagger A_S B_S U = U^\dagger A_S U U^\dagger B_S U = A_H B_H$$

$$[A_H, H_H] = ([A_S, H_S])_H$$

10.3 Teorema di Ehrenfest

Nella rappresentazione di Heisenberg è spesso più semplice ricavare dei risultati generali per l'evoluzione temporale di un sistema, perché lavoriamo direttamente sull'osservabile indipendentemente dallo stato e il risultato ottenuto si applica, poi, a qualunque stato considerato. Consideriamo un'hamiltoniana della forma

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$$

Mentre nella rappresentazione di Schrödinger \vec{R} e \vec{P} non dipendono dal tempo, nella rappresentazione di Heisenberg essi dipendono dal tempo. Possiamo, in particolare, studiare l'evoluzione temporale di posizione e impulso nella rappresentazione di Heisenberg. Dalla Eq.(10.2) troviamo che

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\vec{R}_H}{dt} &= [\vec{R}_H, H_H] \\ i\hbar \frac{d\vec{P}_H}{dt} &= [\vec{P}_H, H_H] \end{aligned}$$

Iniziamo studiando la prima equazione del set. Dalla forma dell'hamiltoniana si trova che

$$[\vec{R}_H, H_H] = [\vec{R}_H, \frac{P_H^2}{2m}] = i\hbar \frac{d}{d\vec{P}_H} \frac{P_H^2}{2m} = i\hbar \frac{\vec{P}_H}{m}$$

Quindi si ha che

$$\frac{d\vec{R}_H}{dt} = \frac{\vec{P}_H}{m}$$

Passando ai valori medi e osservando che poiché nella rappresentazione di Heisenberg lo stato non dipende dal tempo e dunque

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{R}_H \rangle = \langle \psi(0) | \frac{d}{dt} \vec{R}_H | \psi(0) \rangle = \langle \dot{\vec{R}}_H \rangle$$

si ha che

$$\langle \dot{\vec{R}}_H \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{P}_H \rangle$$

Abbiamo, cioè, ottenuto l'analogo quantistico della definizione dell'impulso in meccanica classica. Inoltre, poiché adesso non ci stiamo più riferendo agli operatori ma ai loro valori medi, il risultato appena trovato vale in qualunque rappresentazione, sia in quella di Heisenberg sia in quella di Schrödinger, in quanto il valore medio di un'osservabile non dipende dalla rappresentazione scelta. Analogamente, dalla seconda equazione del set si trova che, poiché

$$[\vec{P}_H, H_H] = [\vec{P}_H, V(\vec{R})] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{R}_H} V(\vec{R}_H)$$

allora

$$\frac{d}{dt} \vec{P}_H = - \frac{\partial V(\vec{R}_H)}{\partial \vec{R}_H}$$

Possiamo quindi enunciare il teorema di Ehrenfest:

Teorema 10.1 (Teorema di Ehrenfest). Nella rappresentazione di Heisenberg, l'evoluzione dinamica degli operatori è data dalle relazioni

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{R}_H}{dt} &= \frac{\vec{P}_H}{m} \\ \frac{d\vec{P}_H}{dt} &= - \frac{\partial V(\vec{R}_H)}{\partial \vec{R}_H} \end{aligned}$$

Alcuni testi indicano come teorema di Ehrenfest il seguente

Teorema 10.2 (Teorema di Ehrenfest). L'evoluzione dei valori medi di posizione e impulso è regolata dalle leggi

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \vec{P} \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle &= - \left\langle \frac{\partial V(\vec{R})}{\partial \vec{R}} \right\rangle \end{aligned}$$

Notiamo che queste due equazioni sono formalmente analoghe alle classiche

$$\begin{aligned} \dot{\vec{r}} &= \frac{\vec{p}}{m} \\ \dot{\vec{p}} &= -\nabla V(\vec{r}) \end{aligned}$$

che sono le equazioni di Hamilton quando $H = p^2/2m + V$.

Analizziamo adesso il significato fisico del teorema di Ehrenfest. Consideriamo un pacchetto d'onda $\psi(\vec{r}, t)$, avente valor medio di posizione $\langle \vec{r} \rangle$. Indicheremo con $\langle \vec{r} \rangle(t)$ il centro del pacchetto d'onda all'istante t . L'insieme di punti corrispondenti a differenti valori di t costituiscono la traiettoria seguita dal centro del pacchetto d'onda. Ci chiediamo se il moto del centro del pacchetto d'onda segue le leggi della meccanica classica. La risposta a questa domanda arriva in maniera immediata dal teorema di Ehrenfest nella forma Teo.10.2. Inserendo la prima equazione del teorema nella seconda si ottiene

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{R} \rangle = - \left\langle \frac{\partial V(\vec{R})}{\partial \vec{R}} \right\rangle$$

La risposta alla domanda che ci stiamo ponendo è affermativa se il secondo membro della precedente relazione coincide con la forza classica \vec{F}_{cl} calcolata sul punto in cui si trova il centro del pacchetto d'onda:

$$\vec{F}_{cl} = - \left. \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \right|_{\vec{r}=\langle \vec{R} \rangle}$$

In generale, però, si ha che

$$\left\langle \frac{\partial V(\vec{R})}{\partial \vec{R}} \right\rangle \neq \left. \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \right|_{\vec{r}=\langle \vec{R} \rangle}$$

cioè il valor medio di una funzione è generalmente diverso dal valore che la funzione assume nel valor medio della sua variabile. Consideriamo un esempio concreto: poniamoci in un modello unidimensionale e assumiamo che $V(x) = \lambda x^n$, con λ costante reale e n intero positivo. Da questo possiamo dedurre immediatamente l'operatore associato a tale potenziale che risulta essere $V(X) = \lambda X^n$. Osserviamo che

$$\left\langle \frac{dV(X)}{dX} \right\rangle = \lambda n \langle X^{n-1} \rangle$$

e poiché in generale $\langle X^{n-1} \rangle \neq \langle X \rangle^{n-1}$, si ha la tesi. Tuttavia, se $n = 1$ (particella in un campo costante) o $n = 2$ (oscillatore armonico) si ha che $\langle X^{n-1} \rangle = \langle X \rangle^{n-1}$ e quindi il valor medio della forza coincide con la forza classica calcolata nel valor medio. In tali casi il moto del centro del pacchetto d'onda segue le leggi della meccanica classica.

Nonostante il valor medio della forza sia differente dalla forza calcolata nel valor medio della posizione, esistono particolari situazioni (dette quasi-classiche) in cui la differenza tra le due quantità è trascurabile; ciò accade quando il pacchetto d'onda è sufficientemente localizzato. In tal caso, infatti, si ha che

$$\left\langle \frac{\partial V(\vec{R})}{\partial \vec{R}} \right\rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \psi(\vec{r}, t) = \int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}}$$

Assumiamo che il pacchetto d'onda sia fortemente localizzato, cioè che $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ assuma valori non trascurabili soltanto in un dominio le cui dimensioni siano molto più piccole delle distanze su cui $V(\vec{r})$ varia in maniera apprezzabile. In tal caso, entro questo dominio centrato su $\langle \vec{R} \rangle$, si ha che $\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}}$ può essere considerata costante e pari al valore che assume in $\langle \vec{R} \rangle$ e poiché la funzione d'onda è normalizzata si ha che

$$\left\langle \frac{\partial V(\vec{R})}{\partial \vec{R}} \right\rangle \simeq \left. \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \right|_{\vec{r}=\langle \vec{R} \rangle}$$

Esempio 10.3. Si calcoli $[X(t), X(t + \delta t)]$. Cosa si può dire sul prodotto $\sigma_{X(t)} \sigma_{X(t+\delta t)}$. Si assuma $\delta t > 0$.

Per calcolare quanto richiesto sviluppiamo in serie di Taylor la quantità $X(t + \delta t)$.

$$X(t + \delta t) = X(t) + \frac{dX}{dt} \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

Ma ricordando che per il teorema di Ehrenfest Teo.10.1 si ha che $\dot{X} = P/m$, allora si ha che

$$X(t + \delta t) = X(t) + \frac{P}{m} \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

Trascurando termini di ordine superiore al primo si ottiene

$$[X(t), X(t + \delta t)] = [X(t), P] \frac{\delta t}{m} = i\hbar \frac{\delta t}{m}$$

Ricordiamo che

$$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{|\langle [A, B] \rangle|}{2}$$

e quindi nel caso in esame si ha

$$\sigma_{X(t)}\sigma_{X(t+\delta t)} \geq \frac{\hbar}{2m} \delta t$$

Notiamo che per una particella libera, o a tale approssimabile, la larghezza del pacchetto aumenta al passare del tempo, quindi risulta essere sempre meno localizzata. Inoltre, un pacchetto molto stretto al tempo iniziale tenderà ad allargarsi rapidamente.

Simmetrie e loro conseguenze

CAPITOLO

11

11.1 Trasformazioni di fase

In meccanica classica possiamo operare due trasformazioni di simmetria in successione e se il gruppo di simmetria non è commutativo si ottiene un risultato differente in base all'ordine di applicazione delle trasformazioni. Consideriamo adesso due operatori U_{ε_1} e U_{ε_2} che descrivano due trasformazioni di simmetria e che abbiano generatori rispettivamente g_1 e g_2 .

$$U_{\varepsilon_1} = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \varepsilon_1 g_1$$

$$U_{\varepsilon_2} = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \varepsilon_2 g_2$$

Calcolando il commutatore tra i due operatori si ottiene

$$[U_{\varepsilon_1}, U_{\varepsilon_2}] = \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\hbar^2} [g_1, g_2]$$

Analogamente al caso classico le due trasformazioni commutano se i generatori commutano. Inoltre affinché le trasformazioni formino un gruppo è necessario che valga

$$[g_i, g_j] = i \sum_k c_{ijk} g_k$$

Esempio 11.1. Consideriamo le traslazioni nello spazio. L'operatore di traslazione può essere scritto come

$$U_{\delta \vec{r}} = \exp \left(i \frac{\delta \vec{r} \cdot \vec{P}}{\hbar} \right)$$

e poiché

$$[P_i, P_j] = 0$$

allora il gruppo delle traslazioni è commutativo.

Analogamente se consideriamo le traslazioni degli impulsi otteniamo

$$U_{\delta \vec{p}} = \exp \left(-i \frac{\delta \vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right)$$

e poiché

$$[X_i, X_j] = 0$$

allora il gruppo delle traslazioni degli impulsi è commutativo.

Se consideriamo l'insieme formato dai generatori delle traslazioni spaziali e delle traslazioni degli impulsi, esso non genera un gruppo in quanto

$$[X_i, P_j] = i \hbar \delta_{ij} \mathbb{1}$$

11.1 Trasformazioni di fase	163
11.2 Simmetrie e leggi di conservazione	164
11.3 Operatore parità	166

che non può essere espresso come combinazione lineare dei generatori. Affinché questo set di generatori formi un gruppo bisogna aggiungere l'operatore identità.

Consideriamo il set di generatori

$$\{X_i, P_i, \mathbb{1}\}$$

Come abbiamo visto in Es.11.1 questo set di generatori genera un gruppo. Sappiamo già quali sono le trasformazioni di simmetria generate dagli operatori X_i e P_i , ma che trasformazione genera l'operatore identità? Sia $U_{\delta\varphi}$ la trasformazione generata da $\mathbb{1}$, allora

$$U_{\delta\varphi} = \exp(i\delta\varphi \mathbb{1}) = e^{i\delta\varphi} \mathbb{1}$$

che agisce sugli stati come

$$U_{\delta\varphi} |\psi\rangle = e^{i\delta\varphi} |\psi\rangle$$

Questa trasformazione è detta trasformazione di fase. Essa è una trasformazione di simmetria per la meccanica quantistica: lo stato normalizzato, infatti, ha comunque "un grado di libertà", cioè la fase. Applicando la trasformazione di fase solo ad alcuni stati, i prodotti scalari vengono sfasati di un fattore $e^{i\delta\varphi}$. Queste differenze di fase sono fondamentali nella descrizione delle interferenze. Quindi $U_{\delta\varphi}$ è una trasformazione di simmetria soltanto se si cambia la fase di tutti gli stati e può essere vista come un elemento di $U(1)$. Vedremo in seguito che essa ha un collegamento con le trasformazioni di gauge e la conservazione della carica.

Esempio 11.2. Studiamo cosa succede componendo gli operatori $U_{\delta\vec{r}}$ e $U_{\delta\vec{p}}$ in ordine differente. Sappiamo già che

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | U_{\delta\vec{r}} | \psi \rangle &= \psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) \\ \langle \vec{r} | U_{\delta\vec{p}} | \psi \rangle &= \langle \vec{r} | \exp\left(i \frac{\delta\vec{p} \cdot \vec{R}}{\hbar}\right) | \psi \rangle = \exp\left(i \frac{\delta\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

Si prova in modo abbastanza semplice che applicando in sequenza i due operatori si ottiene

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | U_{\delta\vec{r}} U_{\delta\vec{p}} | \psi \rangle &= \exp\left(i \frac{\delta\vec{p} \cdot (\vec{r} + \delta\vec{r})}{\hbar}\right) \psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) \\ \langle \vec{r} | U_{\delta\vec{p}} U_{\delta\vec{r}} | \psi \rangle &= \exp\left(i \frac{\delta\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right) \psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) \end{aligned}$$

Le due trasformazioni sono uguali a meno di un fattore di fase

$$\exp\left(i \frac{\delta\vec{p} \cdot \delta\vec{r}}{\hbar}\right) \psi(\vec{r} + \delta\vec{r})$$

generato dall'identità $\mathbb{1}$.

11.2 Simmetrie e leggi di conservazione

Consideriamo un'hamiltoniana che non dipenda esplicitamente dal tempo. Risolto il problema agli autovalori di H , si trova un set ortonormale

di autostati $\{|\phi_n\rangle\}$ ciascuno associato all'autovalore E_n . Sfruttando la completezza di tale base di autostati e ricordando che nel caso di hamiltoniana non dipendente dal tempo possiamo scrivere l'operatore evoluzione temporale nella forma Eq.(9.5)⁽¹⁾, si può scrivere il propagatore nella forma

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}' | U(t) | \vec{r} \rangle &= \sum_n \langle \vec{r}' | \phi_n \rangle \langle \phi_n | U(t) | \vec{r} \rangle = \\ &= \sum_n \langle \vec{r}' | \phi_n \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \langle \phi_n | \vec{r} \rangle = \\ &= \sum_n \phi_n^*(\vec{r}') \phi_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \end{aligned} \quad (1) \quad (9.5)$$

Abbiamo già visto che in seguito a una trasformazione unitaria di generatore g un'osservabile fisica subisce una variazione δA data da

$$\delta A = \frac{i}{\hbar} \varepsilon [g, A]$$

Quanto visto ha le stesse conseguenze che avevano le parentesi di Poisson in meccanica classica: se $[g, A] = 0$ allora l'osservabile A è invariante per la trasformazione di simmetria generata da g . In particolare possiamo interpretare la scrittura $[H, A] = 0$ come:

- H è il generatore dell'evoluzione temporale e dunque A si conserva nel tempo
- A il generatore di una qualche trasformazione di simmetria del sistema per cui H è invariante

Anche in meccanica quantistica, dunque, tutte e sole le grandezze conservate sono i generatori di trasformazioni di simmetria che lasciano invariata l'hamiltoniana.

Vediamo, adesso, come questo possa aiutarci nel risolvere il problema agli autovalori dell'hamiltoniana. Gli autostati dell'hamiltoniana sono gli unici stati in cui l'energia è determinata. Tutte le grandezze che si possono misurare insieme all'energia sono quelle conservate, cioè quelle che hanno commutatore nullo con l'hamiltoniana e che quindi sono generatori di trasformazioni di simmetria per l'hamiltoniana. Ad esempio, se $[H, \vec{P}] = 0$, allora si conserva la quantità di moto e quindi l'hamiltoniana è invariante per traslazioni. Inoltre, per il teorema Teo.1.8 esiste una base di autostati simultanei di energia e impulso, cioè

$$\begin{aligned} H |E, \vec{p}\rangle &= E |E, \vec{p}\rangle \\ \vec{P} |E, \vec{p}\rangle &= \vec{p} |E, \vec{p}\rangle \end{aligned}$$

L'esistenza di questa base di autostati simultanei ci permette di misurare contemporaneamente energia e quantità di moto.

Come risolviamo il problema agli autovalori dell'hamiltoniana? Considerata l'hamiltoniana, andiamo a cercare eventuali sue simmetrie da cui possiamo ricavare le grandezze conservate. Per ogni grandezza conservata è possibile trovare una base completa di autostati simultanei di energia e della grandezza conservata. Questo, però, non è sufficiente. Se l'hamiltoniana presenta più simmetrie, allora è possibile trovare più

basi complete di autostati simultanei di energia e di ciascuna delle grandezze conservate, ma ciò è del tutto inutile se il commutatore tra due grandezze conservate non è nullo. Bisogna quindi prendere il più grande set di osservabili fisiche che commutano fra loro e commutano con l'hamiltoniana. Per chiarire ciò facciamo un esempio.

Esempio 11.3. Consideriamo una particella libera. L'hamiltoniana di tale sistema è

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m}$$

Poiché $H = H(\vec{P})$, è banale provare che $[H, \vec{P}] = 0$. Il sistema è dunque invariante per traslazioni e la base $|\vec{p}\rangle$ dell'operatore impulso è anche base dell'operatore hamiltoniana. Si ha

$$\vec{P} |\vec{p}\rangle = \vec{p} |\vec{p}\rangle \quad (11.1)$$

$$H |\vec{p}\rangle = E(p^2) |\vec{p}\rangle \quad (11.2)$$

Come abbiamo visto in Es.9.2, le autofunzioni dell'operatore hamiltoniana sono

$$\psi(\vec{r}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E(p^2) t\right)$$

e, per quanto detto prima, esse sono anche le autofunzioni dell'operatore impulso.

Questo sistema, però, è invariante anche per rotazioni, dunque esisterà un altro set di grandezze conservate: i momenti angolari. Tuttavia, come in meccanica classica

$$\{l_i, p_j\} \neq 0 \quad \forall i \neq j$$

allora per il principio di corrispondenza in meccanica quantistica deve essere

$$[L_i, P_j] \neq 0 \quad \forall i \neq j$$

Dunque L_x , L_y e L_z sono un set di grandezze fisiche conservate che però non commutano con gli impulsi: è, dunque, impossibile trovare un set di autostati simultanei di energia, impulso e momento angolare (e dunque è impossibile misurarli simultaneamente).

11.3 Operatore parità

Definizione 11.4 (Operatore parità). Definiamo l'operatore parità \mathbb{P} come l'operatore che agisce sugli stati nel seguente modo

$$\langle \vec{r} | \mathbb{P} | \psi \rangle = \langle -\vec{r} | \psi \rangle = \psi(-\vec{r})$$

Proviamo che tale operatore agisce allo stesso modo anche sugli im-

pulsi.

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{p} | \mathbb{P} | \psi \rangle &= \int d^3 \vec{r} \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \mathbb{P} | \psi \rangle = \\
 &= \int d^3 \vec{r} \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle -\vec{r} | \psi \rangle = \int d^3 \vec{r} \langle \vec{p} | -\vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle = \\
 &= \int d^3 \vec{r} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (-\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = \\
 &= \int d^3 \vec{r} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (-\vec{p}) \cdot \vec{r} \right\} \psi(\vec{r}) = \\
 &= \int d^3 \vec{r} \langle -\vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle = \\
 &= \langle -\vec{p} | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

Proviamo che l'operatore parità è autoaggiunto. Presi due stati qualunque $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$, calcoliamo $\langle \phi | \mathbb{P} | \psi \rangle^*$

$$\begin{aligned}
 \langle \phi | \mathbb{P} | \psi \rangle^* &= \left(\int d^3 \vec{r} \langle \phi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \mathbb{P} | \psi \rangle \right)^* = \\
 &= \left(\int d^3 \vec{r} \langle \phi | \vec{r} \rangle \langle -\vec{r} | \psi \rangle \right)^* = \\
 &= \int d^3 \vec{r} \langle \psi | -\vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \phi \rangle = \\
 &= \int d^3 \vec{r} \langle \psi | \vec{r} \rangle \langle -\vec{r} | \phi \rangle = \\
 &= \int d^3 \vec{r} \langle \psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \mathbb{P} | \phi \rangle = \\
 &= \langle \psi | \mathbb{P} | \phi \rangle
 \end{aligned}$$

Poiché per definizione $\langle \phi | \mathbb{P} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \mathbb{P}^\dagger | \phi \rangle$, deve essere $\mathbb{P} = \mathbb{P}^\dagger$, dunque l'operatore parità è autoaggiunto.

Notiamo che una duplice applicazione dell'operatore \mathbb{P} a uno stato $|\psi\rangle$ restituisce lo stesso stato $|\psi\rangle$, dunque $\mathbb{P}^2 = \mathbb{I}$. L'operatore parità, in quanto autoaggiunto, ha autovalori reali e, poiché $\mathbb{P}^2 = \mathbb{I}$, i suoi autovalori devono essere tali che $\lambda^2 = 1$, cioè $\lambda = \pm 1$.

Consideriamo un'hamiltoniana del tipo

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$$

e calcoliamo $[H, \mathbb{P}]$ usando una funzione d'onda di prova.

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{r} | [H, \mathbb{P}] | \psi \rangle &= \langle \vec{r} | H \mathbb{P} | \psi \rangle - \langle \vec{r} | \mathbb{P} H | \psi \rangle = \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(-\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(-\vec{r}) + \\
 &+ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(-\vec{r}) - V(-\vec{r}) \psi(-\vec{r}) = \\
 &= \psi(-\vec{r}) (V(\vec{r}) - V(-\vec{r}))
 \end{aligned}$$

Se $V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$, allora si ha che

$$[H, \mathbb{P}] = 0$$

cioè esiste una base di autostati simultanei dei due operatori.

Quindi, nel caso di potenziale simmetrico, possiamo classificare tutti gli

autostati dell'hamiltoniana in base all'autovalore associato all'operatore parità. Infatti, ricordando la definizione dell'operatore parità, dato che gli autovalori permessi per \mathbb{P} sono ± 1 , è possibile scrivere

$$\langle \vec{r} | \mathbb{P} | \psi \rangle = \psi(-\vec{r}) = \lambda \psi(\vec{r}) = \pm \psi(\vec{r}).$$

Dunque le autofunzioni dell'operatore parità sono funzioni pari o funzioni dispari e, nel caso di potenziale simmetrico, saranno tali anche le autofunzioni dell'hamiltoniana.

Ad esempio, considerando la buca di potenziale, poiché il potenziale è simmetrico rispetto al centro della buca, tutte le autofunzioni dell'hamiltoniana dovranno essere funzioni pari o dispari.

PARTE IV
Applicazioni della Meccanica
Quantistica

Problemi unidimensionali

CAPITOLO

12

Introduzione al capitolo

Dopo aver introdotto la definizione di corrente di probabilità, vedremo come risolvere alcuni problemi unidimensionali, anche sfruttando . L'oscillatore armonico, pur essendo un problema unidimensionale, non verrà trattato in questo capitolo, ma verrà ad esso dedicato un capitolo a sè stante in virtù della grande importanza che tale sistema riveste nella fisica.

12.1 Problemi fisici nel caso unidimensionale	171
12.2 Buca di potenziale a pareti infinite	173
12.3 L'equazione di continuità per la probabilità	174
12.4 Scattering unidimensionale	177
12.5 Alcuni teoremi	178
12.6 Gradino di potenziale	181
12.7 Buca di potenziale	183
12.8 Barriera di potenziale (effetto tunnel)	185

12.1 Problemi fisici nel caso unidimensionale

Poniamoci nel caso unidimensionale e consideriamo un'hamiltoniana della forma

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$$

dove con P stiamo adesso intendendo la componente x dell'operatore impulso. Il problema agli autovalori per tale hamiltoniana è

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$$

Per fare questo proiettiamo sulla base posizione⁽¹⁾ ottenendo

$$\langle x | H | \phi_n \rangle = E_n \langle x | \phi_n \rangle$$

da cui esplicitando l'hamiltoniana si ottiene

$$\begin{aligned} \langle x | \frac{P^2}{2m} | \phi_n \rangle + \langle x | V(X) | \phi_n \rangle &= E_n \langle x | \phi_n \rangle \implies \\ \implies -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi_n(x) + V(x) \phi_n(x) &= E_n \phi_n(x) \end{aligned} \quad (12.1)$$

Quest'equazione va sempre considerata insieme a un set di condizioni al contorno. Facciamo una serie di considerazioni. In generale l'energia è definita sempre a meno di una costante additiva, dunque parlare di energia positiva (o negativa) ha senso solo quando è stato fissato lo zero dell'energia. Come possiamo fare ciò? In generale se il potenziale all'infinito tende a un valore costante allora possiamo scegliere come zero dell'energia proprio tale valore. Ciò permette di fissare la costante nell'energia potenziale. Fisicamente questa scelta è comoda perché ci permette di affermare che all'infinito non si hanno interazioni. Fissato in questo modo lo zero del potenziale e dunque dell'energia, in meccanica classica si ha che dato un sistema di energia \mathcal{E} , poiché l'energia cinetica è definita positiva deve essere

$$\mathcal{E} - V \geq 0$$

⁽¹⁾ La scelta della base posizione è quasi obbligata, in quanto il potenziale potrebbe avere forme complesse e in generale potrebbe non essere semplice applicarlo ad autostati differenti dagli autostati dell'operatore posizione

e dunque il moto è possibile soltanto in tutte quelle regioni in cui $\mathcal{E} \geq V$. Le restanti regioni sono classicamente proibite. Poiché con questa scelta dello zero dell'energia si ha che se $\mathcal{E} < 0$ allora asintoticamente si raggiungono delle regioni proibite. Diciamo che i sistemi con energia $\mathcal{E} < 0$ sono legati. In meccanica quantistica, invece, bisogna risolvere il problema dato da Eq.(12.1); quest'equazione differenziale è, tuttavia, spesso complessa da risolvere in quanto presenta un coefficiente non costante $V(x)$ la cui forma funzionale è, in genere, abbastanza complessa. Procediamo dunque per approssimazioni. Discretizziamo il potenziale rendendolo costante a tratti. In questo modo l'equazione Eq.(12.1) diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi_n(x) + V_i \phi_n(x) = E_n \phi_n(x)$$

dove V_i è il valore del potenziale nella regione i -esima. Questa approssimazione è tanto più buona quanto più piccola è la distanza tra due punti in cui il potenziale cambia.

Consideriamo quindi un potenziale che sia asintoticamente nullo e costante a tratti. Riscriviamo l'equazione Eq.(12.1) come

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

dove con $\phi''(x)$ stiamo indicando la derivata seconda rispetto a x . Quest'equazione è di immediata risoluzione e la soluzione generale è

- una combinazione lineare di $\exp(\pm ikx)$ (cioè di moti armonici) con $k = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}$ se $E > V$
- una combinazione lineare di $\exp(\pm qx)$ con $q = \sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}}$ se $E < V$

A questo punto bisogna imporre delle condizioni al contorno. Per ogni tratto abbiamo determinato una singola funzione d'onda. Quale condizioni deve verificare la funzione d'onda dello stato? Tale funzione deve essere continua e deve avere derivata prima continua (questo in quanto è condizione necessaria affinché possa esistere la derivata seconda)⁽²⁾. A queste condizioni si aggiunge la condizione che la funzione d'onda sia a quadrato sommabile e affinché ciò accada la funzione d'onda deve andare a zero all'infinito. Quest'ultima condizione si può imporre solamente se lo stato è localizzato nello spazio. Uno stato con $E < 0$ avrà asintoticamente un'energia minore del potenziale e dunque si ha una regione classicamente proibita. In questa regione la funzione d'onda è un'esponenziale reale; tuttavia l'esponenziale divergente non ha significato fisico e quindi nei tratti finali bisogna scegliere esponenziali crescenti per $x \rightarrow -\infty$ e decrescenti per $x \rightarrow +\infty$. Se invece considero uno stato con $E > 0$ la funzione d'onda all'infinito è oscillante e quindi lo stato non è a quadrato sommabile, dunque non localizzato. Questi stati hanno significato fisico allo stesso modo in cui hanno significato fisico gli autostati dell'impulso, cioè come stati non localizzati nello spazio. Sfruttando le condizioni al contorno è possibile determinare la funzione d'onda associata a tale stato. Imponendo le condizioni al contorno si viene a trovare un sistema lineare con più equazioni che incognite; tale sistema dunque non ammette soluzioni a meno che il determinante della matrice dei coefficienti sia

(2) Notiamo che per quanto detto la derivata seconda potrebbe divergere. Una divergenza della derivata seconda è tollerabile solamente se è presente una divergenza nel potenziale.

nullo. Affinché ciò sia vero è necessario che q e k assumano valori ben precisi e dunque l'energia del sistema è quantizzata.

La quantizzazione dell'energia è, però, prevedibile anche riprendendo il discorso fatto in precedenza sulla claustrofobia quantistica. Dato uno stato localizzato, infatti, l'energia cinetica è sempre strettamente maggiore di un certo valore minimo non nullo e più è piccola la regione in cui è localizzata la particella maggiore è la minima energia cinetica che può avere la particella. Quindi mentre classicamente si può avere una particella ferma, dunque con energia cinetica nulla, ciò non è possibile in meccanica quantistica. Quindi mentre classicamente $\mathcal{E} \geq \min V(x)$ in quanto $T > 0$ e $\mathcal{E} = \min V(x) \iff T = 0$, in meccanica quantistica $E > \min V(x)$ in quanto $T > 0$, dunque non si può raggiungere lo stato in cui $E = \min V(x)$ a meno che la particella sia delocalizzata in tutto lo spazio.

12.2 Buca di potenziale a pareti infinite

Consideriamo una buca di potenziale a pareti infinite. In questo caso il potenziale è

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq x \leq L \\ +\infty & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Nella regione in cui il potenziale è infinito la funzione d'onda è ovviamente nulla in quanto, se così non fosse, il termine $V(x)\phi(x)$ divergerebbe. Nella regione in cui il potenziale è nullo, l'equazione di Schrödinger diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = E\phi(x)$$

che ammette soluzione

$$\phi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{con} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

A questo punto bisogna imporre che la funzione sia continua⁽³⁾ nei punti $x = 0$ e $x = L$. Imponendo la continuità in $x = 0$ si ottiene

$$\phi(0) = 0 \implies B = 0$$

Imponendo la continuità in $x = L$ si ottiene

$$\phi(L) = 0 \implies kL = n\pi \implies k_n = \frac{n\pi}{L} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Inserendo questi risultati nell'equazione di Schrödinger per la buca di potenziale ricaviamo che gli autovalori dell'hamiltoniana e, dunque, le energie ammesse per il sistema sono:

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

cioè l'energia del sistema è quantizzata. Normalizzando le autofunzioni, otteniamo un set completo e ortonormale di autofunzioni dell'hamiltoniana, cioè

$$\int_0^L \phi_n^*(x) \phi_m(x) dx = \delta_{nm}$$

⁽³⁾ In questo caso non imponiamo che anche la derivata prima sia continua perché abbiamo un potenziale divergente e un'eventuale divergenza della derivata prima è accettabile.

Questo ha un particolare significato fisico: ciascun autostato dell'hamiltoniana ha un'energia ben definita.

Dal punto di vista delle funzioni d'onda esiste una particolare relazione tra l'ortogonalità e la loro distribuzione spaziale. Considerate due funzioni d'onda che non si sovrappongono quasi completamente come quelle in figure Fig.??, allora banalmente si ha che

$$\int_0^L \phi_n^*(x) \phi_m(x) dx \simeq 0$$

cioè il loro prodotto scalare è praticamente nullo. Il viceversa però non è vero. Posso avere due funzioni d'onda che si trovano praticamente nella stessa regione dello spazio, ma tali che, per ragioni di simmetria, il loro prodotto scalare sia nullo.

12.3 L'equazione di continuità per la probabilità

È possibile introdurre per la probabilità una equazione di continuità del tutto analoga a quella introdotta in elettromagnetismo. Consideriamo uno stato $|\psi\rangle$ normalizzato all'unità; poiché l'operatore evoluzione temporale è unitario, i prodotti scalari si conservano e dunque nell'evoluzione temporale la funzione d'onda resta sempre normalizzata all'unità. Il fatto che la probabilità si conservi nel tempo ci induce a introdurre un'equazione di continuità per la probabilità.

Consideriamo

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (12.2)$$

Dall'equazione di Schrödinger si ha

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

e considerando l'aggiunto

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = H\psi^*$$

Inserendo questi risultati in Eq.(12.2) si ottiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 &= -\frac{1}{i\hbar} (H\psi^*)\psi + \psi^* \frac{1}{i\hbar} H\psi = \\ &= \frac{1}{i\hbar} (\psi^* H\psi - \psi H\psi^*) \end{aligned}$$

Ricordando che nella base dell'operatore posizione possiamo scrivere H come un'operatore differenziale della forma

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

si ottiene

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

Ricordando che

$$\nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*$$

e detti ρ e \vec{j} i termini

$$\begin{aligned}\rho &= |\psi|^2 \\ \vec{j} &= \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)\end{aligned}$$

si ottiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\nabla \cdot \vec{j} \quad (12.3)$$

che è l'equazione di continuità per la probabilità in forma locale. Passando alla forma integrale si ha, per il teorema della divergenza

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho d^3\vec{r} = - \int_{\partial\Omega} \vec{j} \cdot d\vec{S} \quad (12.4)$$

dove Ω è un volume arbitrario e $\partial\Omega$ è la frontiera di Ω . Osserviamo che si può anche scrivere

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}\{\psi^* \nabla \psi\} \quad (12.5)$$

e dunque si vede in maniera immediata che se la funzione d'onda è reale, la densità di corrente è nulla e quindi la probabilità non dipende esplicitamente dal tempo.

Vediamo adesso come l'equazione di continuità per la probabilità possa essere usata per interpretare gli stati non normalizzabili.

Esempio 12.1. (Esercizio 5.3.3 di [Sha80])

Consideriamo l'autofunzione dell'impulso

$$\psi(\vec{r}) = A \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right\}$$

Questa funzione d'onda non può essere normalizzata. Qual è quindi il significato della costante di normalizzazione A ? Consideriamo un fascio di particelle che si propagano lungo la direzione di \vec{p} e tali che i loro fronti d'onda possano essere approssimati a fronti d'onda piani. Per ottenere questo risultato basta che le dimensioni del fronte d'onda siano molto più grandi dell'osservatore (in questo caso un atomo). Fissata una regione dello spazio Ω , la probabilità di trovare la particella in tale volume è

$$|\psi(r)|^2 = |A|^2 = \rho$$

cioè la probabilità di trovare la particella in tale regione dello spazio è costante nel tempo. Supponendo che il fascio sia formato da un numero N di particelle, posso legare la probabilità A di trovare una particella nel volume Ω al numero totale di particelle. Posso quindi andare a determinare una densità di particelle nel volume Ω e dunque introdurre anche una densità di corrente associata alle particelle. Calcoliamo la densità di corrente associata alla funzione

d'onda $\psi(\vec{r}) = A \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right\}$. Si ha

$$\begin{aligned}\nabla\psi &= A \frac{i}{\hbar} \vec{p} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right\} \implies \\ \implies \psi^* \nabla\psi &= |A|^2 \frac{i}{\hbar} \vec{p} \implies \\ \implies \vec{j} &= \frac{\hbar}{m} |A|^2 \frac{1}{\hbar} \vec{p} = \frac{\vec{p}}{m} |A|^2\end{aligned}$$

Possiamo dunque interpretare il termine \vec{p}/m come la velocità con cui la probabilità di trovare una particella in un dato punto dello spazio si sposta.

Possiamo quindi identificare tale funzione d'onda con la densità di particelle normalizzandola in maniera opportuna, in maniera tale da dare un significato fisico alla costante di normalizzazione A .

Supponiamo adesso che avvenga un processo di collisione. L'impulso del fascio può essere determinato in maniera opportuna e dunque si ha uno spettro continuo dell'energia. Quando il fascio incontra il bersaglio si va incontro a un processo di diffusione. Le particelle vengono diffuse in tutte le direzioni e lungo ogni direzione la particella avrà un differente impulso e dunque una differente funzione d'onda. Mediante dei rivelatori posso conoscere quante particelle arrivano lungo ogni direzione e dunque conoscere la probabilità con cui una particella viene diffusa lungo una certa direzione. La normalizzazione della funzione d'onda è quindi legata fenomenologicamente ai processi di diffusione.

Esempio 12.2. (Esercizio 5.3.4 di [Sha80])

Consideriamo una funzione d'onda della forma

$$\psi(\vec{r}) = A \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right\} + B \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right\}$$

dove A e B sono costanti complesse. Questa è la sovrapposizione di due onde piane aventi lo stesso impulso in modulo e che viaggiano in direzioni opposte. Calcoliamo la densità di corrente associata. Si ha

$$\begin{aligned}\psi^* \nabla\psi &= \left[A^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right) + B^* \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right) \right] \cdot \\ &\cdot \left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} A \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right) - \frac{i}{\hbar} \vec{p} B \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right) \right) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \vec{p} \left[|A|^2 - |B|^2 \right] + \\ &+ \frac{i}{\hbar} \vec{p} \left[B^* A \exp\left(\frac{2i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right) - A^* B \exp\left(-\frac{2i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right) \right]\end{aligned}$$

e dunque

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}\{\psi^* \nabla\psi\} = \frac{\vec{p}}{m} \left[|A|^2 - |B|^2 \right]$$

Osserviamo che il termine

$$\left[B^* A \exp\left(\frac{2i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right) - A^* B \exp\left(-\frac{2i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p}\right) \right]$$

è un immaginario puro in quanto differenza tra un numero e il suo complesso coniugato.

Notiamo che l'interpretazione della funzione d'onda data all'inizio è corroborata dal risultato ottenuto.

12.4 Scattering unidimensionale

Consideriamo un potenziale che sia nullo in tutto lo spazio tranne in una regione approssimabile puntiforme. Consideriamo una particella che si propaga lungo la direzione positiva dell'asse x con un'energia fissata e calcoliamo la probabilità che a seguito dell'interazione con il potenziale la particella venga trasmessa o riflessa. A seguito della diffusione, ammesso che si conservi l'impulso, troverò due funzioni d'onda:

- nella regione incidente la funzione d'onda che descrive il problema è

$$\psi_1(x) = A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}px\right\} + B \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}px\right\}$$

- nella regione trasmessa la funzione d'onda che descrive il problema è

$$\psi_2(x) = C \exp\left\{\frac{i}{\hbar}px\right\}$$

dove A , B e C sono costanti complesse.

Nella regione incidente trovo una corrente complessiva pari a

$$\vec{j}_1 = \frac{p}{m}(|A|^2 - |B|^2)$$

mentre nella regione trasmessa trovo una corrente complessiva pari a

$$\vec{j}_2 = \frac{p}{m}|C|^2$$

In tale caso l'equazione di continuità Eq.(12.3) si riduce a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$$

Se consideriamo stati stazionari, per cui dunque

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

allora si ha

$$\frac{\partial j}{\partial x} = 0$$

dunque la corrente è costante in tutto lo spazio. Deve, dunque, essere

$$\vec{j}_1 = \vec{j}_2$$

Interpretando adesso i termini

$$\begin{aligned}\vec{j}_i &= \frac{p}{m}|A|^2 \\ \vec{j}_r &= \frac{p}{m}|B|^2 \\ \vec{j}_t &= \vec{j}_2 = \frac{p}{m}|C|^2\end{aligned}$$

rispettivamente come la corrente incidente, la corrente riflessa e la corrente trasmessa, si ottiene

$$j_i = j_r + j_t$$

che è l'equazione che esprime la conservazione del numero di particelle. Possiamo quindi definire il coefficiente di riflessione R e il coefficiente di trasmissione T come

Coefficienti di riflessione e
trasmissione

$$R = \frac{j_r}{j_i} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

$$T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{|C|^2}{|A|^2}$$

Questi coefficienti non dipendono dalla normalizzazione della funzione d'onda.

12.5 Alcuni teoremi

Proposizione 12.3. Non c'è degenerazione per stati legati unidimensionali.

Dimostrazione. Siano ψ_1 e ψ_2 due autofunzioni distinte dell'hamiltoniana associate allo stesso autovalore E . Allora si ha

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1'' + V\psi_1 = E\psi_1$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2'' + V\psi_2 = E\psi_2$$

Moltiplicando la prima equazione per ψ_2 e la seconda per ψ_1 e sottraendo membro a membro si ottiene

$$\psi_2\psi_1'' - \psi_1\psi_2'' = 0$$

che possiamo riscrivere come

$$\frac{d}{dx}(\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2') = 0 \quad (12.6)$$

da cui integrando rispetto x

$$\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2' = \text{costante}$$

Poiché ψ_1 e ψ_2 descrivono stati legati, esse devono annullarsi asintoticamente, dunque la costante deve essere nulla. Si ha quindi

$$\frac{1}{\psi_1} \frac{d\psi_1}{dx} = \frac{1}{\psi_2} \frac{d\psi_2}{dx}$$

da cui integrando e passando agli esponenziali si trova

$$\psi_1 = k\psi_2$$

Poiché autofunzioni proporzionali descrivono lo stesso autostato, si ha che l'autospazio associato ad E ha dimensione 1. Per l'arbitrarietà di E segue la tesi. \square

Proposizione 12.4. Nel caso unidimensionale il numero dei nodi di una funzione d'onda è pari al livello energetico.

Questo teorema non è banale da dimostrare. Per una dimostrazione più rigorosa si veda Landau terzo volume. Se il potenziale è pari (simmetrico) abbiamo visto che le funzioni d'onda possono essere o pari o dispari. La parità è ovviamente legata al numero di nodi: una funzione d'onda pari (dispari), infatti, presenta un numero di nodi pari (dispari). Lo stato fondamentale è pari e non presenta nodi, dunque il primo stato eccitato è dispari e presenta un nodo. Il secondo stato eccitato è pari e presenta due nodi. Procedendo in questo modo si ottiene il risultato voluto.

Proposizione 12.5. Per stati legati, le autofunzioni dell'hamiltoniana possono sempre essere scelte reali nella base delle coordinate.

Dimostrazione. Abbiamo già visto che per stati stazionari si ha

$$\frac{dj}{dx} = 0$$

Dunque j è costante e per uno stato legato deve essere necessariamente $j = 0$. Sfruttando la definizione di j si ha

$$\frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) = 0$$

da cui

$$\frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{\psi^*} \frac{d\psi^*}{dx}$$

Integrando e passando agli esponenziali si ottiene

$$\psi^* = k\psi$$

Passando al complesso coniugato e sfruttando il risultato appena ottenuto si ha

$$\psi = (\psi^*)^* = \psi^* k^* = |k|^2 \psi$$

da cui segue banalmente

$$|k|^2 = 1 \implies k = \exp(i\theta)$$

dunque si ha

$$\psi^* = \exp(i\theta)\psi$$

Si può quindi moltiplicare per un fattore di fase e rendere la funzione d'onda reale. Infatti moltiplicando per $\exp(-i\theta/2)$ si ottiene

$$\exp(-i\theta/2)\psi^* = \exp(i\theta/2)\psi$$

e poiché il primo membro è il complesso coniugato del secondo, si ha che la funzione d'onda

$$\psi_1 = \exp(i\theta/2)\psi$$

è reale. È dunque sempre possibile trovare un fattore di fase che renda la funzione d'onda reale. \square

Mostriamo adesso che questo teorema non vale nel caso bidimensio-

nale.

Esempio 12.6. Consideriamo una funzione d'onda della forma

$$\psi(r, \varphi) = \exp(im\varphi)f(r)$$

descritta in coordinate polari con

$$\begin{cases} x = r \cos \varphi \\ y = r \sin \varphi \end{cases}$$

La funzione d'onda $\psi(r, \varphi)$ è l'autofunzione dell'operatore momento angolare con autovalore $L = m\hbar$. Imponendo che queste funzioni siano periodiche di periodo 2π si ha che m deve essere intero, cioè il momento angolare è quantizzato in multipli interi di \hbar . Ciò permette di calcolare immediatamente l'energia rotazionale del sistema. Infatti per un rotatore rigido libero si ha

$$H = \frac{L^2}{2I}$$

dove I è il momento di inerzia del rotatore rigido. Il set di funzioni

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \right\}$$

forma una base ortonormale di autofunzioni dell'operatore momento angolare e poiché l'hamiltoniana commuta con il momento angolare esse sono anche autofunzioni dell'hamiltoniana con autovalore

$$E_m = \frac{m^2 \hbar^2}{2I}$$

Questo risultato ci permette di fare alcune previsioni sui livelli rotazionali di una molecola. Essendo m intero, l'energia rotazionale è quantizzata. Per una molecola possiamo scrivere $I = MR^2$ e quindi riscrivere l'energia come:

$$E_m = \frac{m^2 \hbar^2}{2MR^2} = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \frac{m_e e^2}{M} \frac{1}{R^2} m^2 = \frac{m_e}{M} \frac{e^2}{a_0} \frac{a_0^2}{R^2} m^2$$

Possiamo supporre come ordini di grandezza ragionevoli

$$\begin{aligned} \frac{m_e}{M} &\sim 10^{-4} \\ \frac{e^2}{a_0} &\sim 27.2 \text{ eV} \\ \frac{a_0^2}{R^2} &\sim \frac{1}{4} \end{aligned}$$

La spaziatura tra due livelli energetici consecutivi è quindi di circa $10^{-3} - 10^{-4}$ eV. Una tale spaziatura corrisponde a una differenza di temperatura di circa 10 – 30 K. Ciò significa che alle temperature ordinarie i livelli rotazionali presentano valori di m molto elevati e si comportano in maniera continua. Tuttavia, a temperature molto basse si mette in evidenza la discretizzazione dei livelli rotazionali. Questo ha un effetto sui calori specifici. Sotto i 10 K i livelli rotazionali non contribuiscono più ai calori specifici.

Se calcoliamo la corrente associata alla funzione d'onda ψ notiamo immediatamente che essa è non nulla, dunque la funzione d'onda non può essere resa reale. Poiché dalle relazioni sulle coordinate polari si ha

$$\varphi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right)$$

si ha che

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi}{\partial x} &= -\frac{y}{x^2 + y^2} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{x}{x^2 + y^2}\end{aligned}$$

e dunque

$$\begin{aligned}\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = im \frac{\partial \varphi}{\partial x} \psi^* \psi \\ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial y} &= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} = im \frac{\partial \varphi}{\partial y} \psi^* \psi\end{aligned}$$

cioè

$$\psi^* \nabla \psi = \frac{im}{r^2} (-y, x)$$

da cui trovo che la corrente è

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{M} \text{Im}\{\psi^* \nabla \psi\} = \frac{\hbar m}{Mr^2} (-y, x)$$

Abbiamo dunque ottenuto una corrente non nulla. Ciò significa che non è possibile rendere la funzione d'onda reale. Inoltre abbiamo anche degenerazione nei livelli energetici: infatti a uno stesso valore di energia possiamo associare le autofunzioni ψ_m e ψ_{-m} .

12.6 Gradino di potenziale

Consideriamo un potenziale della forma

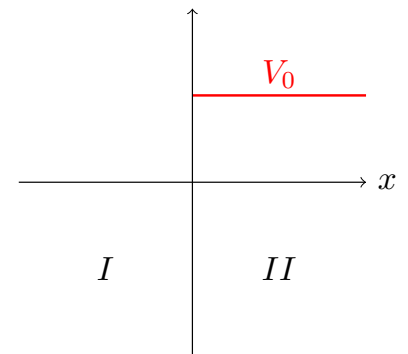
$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases} \quad (12.7)$$

Il problema che stiamo prendendo in esame è un problema di diffusione: una sorgente produce un fascio di particelle che incide su un gradino dove è presente una discontinuità del potenziale. Andiamo a risolvere l'equazione di Schrödinger per questo sistema. Iniziamo dal caso in cui l'energia della particella incidente sia minore dell'altezza del gradino, $E < V_0$. Classicamente la particella non ha abbastanza energia per superare il gradino e quindi viene riflessa indietro. In meccanica quantistica invece troviamo una funzione d'onda sia a sinistra che a destra del punto di discontinuità. Nella regione I si ha che $E > V(x)$, dunque definito

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

si ha che la soluzione dell'equazione di Schrödinger è⁽⁴⁾

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (12.8)$$



⁽⁴⁾ Poiché la funzione d'onda è definita a meno di una costante moltiplicativa, posso assumere un coefficiente unitario, cioè $A = 1$

La corrente a essa associata è

$$J = \frac{\hbar k}{m} (1 - |B|^2)$$

cioè essa presenta un termine di corrente incidente (positivo) e un termine di corrente riflessa (negativa). Possiamo quindi definire i coefficienti di riflessione e trasmissione come

$$R = \frac{|J_R|}{|J_I|} = |B|^2$$

$$T = \frac{|J_T|}{|J_I|} = (1 - |B|^2)$$

Nella regione II si ha che $E < V(x)$, dunque la soluzione dell'equazione di Schrödinger è

$$\psi_{II}(x) = Ce^{-qx} \quad (12.9)$$

dove

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

Nota che manca il termine De^{qx} , in quanto nella regione II non ci sono sorgenti di particelle. In tale regione si ha che la corrente trasmessa è nulla in quanto la funzione d'onda è reale, dunque $T = 0$ e di conseguenza $R = 1$. Complessivamente la funzione d'onda che descrive il sistema è

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{se } x < 0 \\ Ce^{-qx} & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \quad (12.10)$$

Come condizioni al contorno dobbiamo imporre che essa sia continua e ammetta derivata prima continua nel punto di discontinuità del potenziale $x = 0$, cioè bisogna imporre che valgano le condizioni

$$\begin{cases} 1 + B = C \\ ik(1 - B) = -qC \end{cases} \quad (12.11)$$

da cui ricaviamo con semplici calcoli

$$\begin{cases} B = \frac{k - iq}{k + iq} \\ C = \frac{2k}{k + iq} \end{cases} \quad (12.12)$$

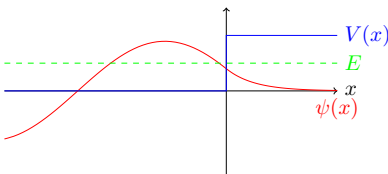


Figura 12.1: Andamento della funzione d'onda per un gradino di potenziale nel caso $E < V_0$

Osserviamo che il fatto che B sia un numero complesso implica che onda incidente e onda riflessa siano sfasate.

Cosa succede nel caso in cui $E > V_0$? In questo caso la particella ha abbastanza energia per superare il gradino e quindi non viene riflessa indietro. Nella regione I l'equazione di Schrödinger ammetterà sempre la soluzione Eq.(12.8) mentre nella regione II l'equazione di Schrödinger ammetterà una soluzione della forma

$$\psi_{II}(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx} \quad (12.13)$$

con

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

Supponendo che non vi sia nulla che rifletta la corrente da destra verso sinistra, la funzione d'onda che descrive il sistema nella sua totalità è

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{se } x < 0 \\ Ce^{iqx} & \text{se } x \geq 0 \end{cases}$$

Notiamo la profonda differenza con il caso classico: mentre classicamente non si notava alcuna riflessione ma un semplice rallentamento, quantisticamente si osserva anche in questo caso una riflessione. Imponendo le condizioni al contorno nel punto di raccordo troviamo

$$\begin{cases} 1 + B = C \\ ik(1 - B) = iqC \end{cases}$$

da cui con semplici passaggi algebrici si trova

$$\begin{cases} B = \frac{k-q}{k+q} \\ C = \frac{2k}{k+q} \end{cases} \quad (12.14)$$

Calcolando la corrente trasmessa e quella riflessa si ha

$$\begin{aligned} J_R &= \frac{\hbar k}{m} |B|^2 = \frac{\hbar k}{m} \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2} \\ J_T &= \frac{\hbar q}{m} |C|^2 = \frac{\hbar k}{m} \frac{4kq}{(k+q)^2} \end{aligned}$$

da cui sommando si ha

$$J_R + J_T = \frac{\hbar k}{m}$$

che è la corrente incidente.

12.7 Buca di potenziale

Consideriamo un potenziale della forma

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

con $V_0 > 0$. Consideriamo stati legati, cioè stati per cui $E < 0$. Ovviamente per quanto abbiamo già visto l'energia deve essere tale che $E > -V_0$. Dividendo il problema in tre regioni *I*, *II* e *III* abbiamo che in ciascuna regione la soluzione dell'equazione di Schrödinger è data da

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= e^{qx} \\ \psi_{II}(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi_{III}(x) &= Ce^{-qx} \end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} \\ q &= \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

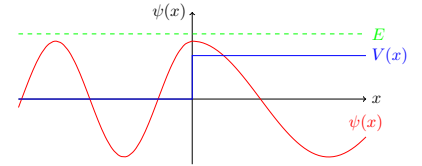
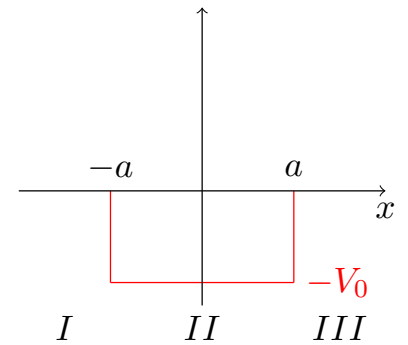


Figura 12.2: Andamento della funzione d'onda per un gradino di potenziale nel caso $E > V_0$



Imponendo le condizioni al contorno (continuità della funzione e della sua derivata prima nei punti $x = \pm a$) si ottengono 4 equazioni in solo 3 incognite A, B, C . Dunque tale sistema, se ammette soluzioni, deve averne infinite, e per trovarle dovremmo risolvere equazioni trascendenti: è difficile trovare una soluzione analitica.

Possiamo, però, fare alcune considerazioni sull'esistenza e sulla forma degli stati legati. Poiché il potenziale è simmetrico, le funzioni d'onda saranno tutte o pari o dispari. Nella regione *II* la funzione d'onda può essere riscritta come

$$\psi_{II}(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) \quad (12.15)$$

e poiché le due funzioni sono rispettivamente pari e dispari, per mantenere la parità della funzione d'onda complessiva è necessario che uno dei due coefficienti sia nullo (per stati pari $B = 0$, per stati dispari $A = 0$).⁽⁵⁾ Restringiamoci all'intervallo $[0, +\infty[$. Per le funzioni d'onda pari dobbiamo porre le condizioni al contorno

$$\begin{cases} \cos(ka) = Be^{-qa} \\ -k \sin(ka) = -qBe^{-qa} \end{cases} \quad (12.16)$$

Dividendo membro a membro si ottiene

$$\tan(ka) = \frac{q}{k}$$

Questa è la condizione affinché esista uno stato legato. È immediato osservare che essa non è soddisfatta da qualunque valore di q e k e dunque da qualunque valore dell'energia. Analogamente per le funzioni d'onda dispari dobbiamo imporre le condizioni al contorno

$$\begin{cases} \sin(ka) = Be^{-qa} \\ k \cos(ka) = -qBe^{-qa} \end{cases} \quad (12.17)$$

da cui si ottiene la condizione

$$\cot(ka) = -\frac{q}{k}$$

Possiamo capire per quali valori di q e k si ottengono soluzioni per via grafica. Per fare ciò osserviamo che

$$k^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

dunque facendo le seguenti posizioni

$$\begin{aligned} x &= ka > 0 \\ y &= qa > 0 \\ \eta^2 &= (k^2 + q^2)a^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2 = x^2 + y^2 \end{aligned} \quad (12.18)$$

possiamo riscrivere le condizioni di esistenza degli stati legati come

$$\begin{cases} \tan(x) = \frac{y}{x} \\ x^2 + y^2 = \eta^2 \end{cases} \quad (12.19)$$

(5) Piccola nota a margine: affinché la funzione d'onda sia pari o dispari è necessario che i coefficienti dell'esponenziale crescente della regione *I* e dell'esponenziale decrescente della regione *III* siano uguali in modulo. Da qui in avanti porremo quindi uguale a 1 il coefficiente del seno o del coseno e pari a B il coefficiente dell'esponenziale decrescente

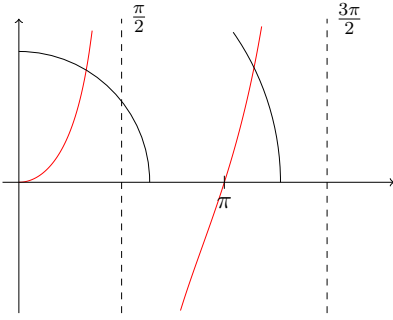


Figura 12.3: Condizione per la quantizzazione dell'energia nel caso di funzioni d'onda pari

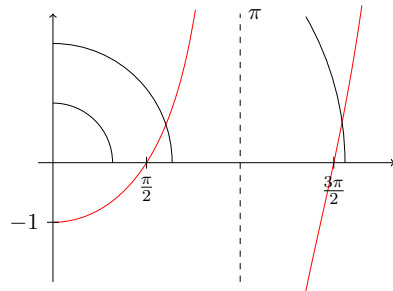


Figura 12.4: Condizione per la quantizzazione dell'energia nel caso di funzioni d'onda dispari

per le funzioni d'onda pari e

$$\begin{cases} \cot(x) = -\frac{y}{x} \\ x^2 + y^2 = \eta^2 \end{cases} \quad (12.20)$$

per le funzioni d'onda dispari. Osservando il grafico in Fig.12.3 si deduce che il sistema di Eq.(12.19) ammette soluzioni per qualunque valore di η e in generale se $\eta > n\pi$ con $n \in \mathbb{N}$ si avranno $n + 1$ soluzioni. Inoltre per $\eta \rightarrow \infty$ si ha che $ka \rightarrow (2n + 1)\frac{\pi}{2}$, cioè gli stessi valori che si otterrebbero per gli stati pari di una buca di potenziale infinita. Osservando il grafico in Fig.12.4 si deduce, invece, che il sistema di Eq.(12.20) ammette soluzioni soltanto per $\eta > \frac{\pi}{2}$ e in generale se $\eta > (2n + 1)\frac{\pi}{2}$ si hanno $n + 1$ soluzioni. Inoltre per $\eta \rightarrow \infty$ si ha che $ka \rightarrow n\pi$, cioè gli stessi valori che si otterrebbero per gli stati dispari di una buca di potenziale infinita. Ovviamente questa procedura ci permette soltanto di conoscere il numero di stati legati; per conoscere i valori esatti di k e q è necessario risolvere numericamente le equazioni Eq.(12.19) e Eq.(12.20). Osserviamo che fissato η il numero di stati legati è finito e che la condizione $\eta \rightarrow \infty$ equivale alla condizione $V_0 \rightarrow \infty$ se la larghezza della buca è fissata, cioè il sistema degenera nella buca di potenziale infinita.

12.8 Barriera di potenziale (effetto tunnel)

Consideriamo un potenziale della forma

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } 0 < x < a \\ 0 & \text{se } x < 0 \vee x > a \end{cases}$$

con $V_0 > 0$. Il problema che stiamo trattando risulta essere un problema di diffusione, quindi non saranno presenti stati legati. La soluzione dell'equazione di Schrödinger nelle tre regioni è

$$\psi_I(x) = e^{iqx} + Be^{-iqx}$$

$$\psi_{II}(x) = \begin{cases} Ce^{kx} + De^{-kx} & \text{con } k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \text{ se } E < V_0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{con } k = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \text{ se } E > V_0 \end{cases}$$

$$\psi_{III}(x) = Fe^{iqx}$$

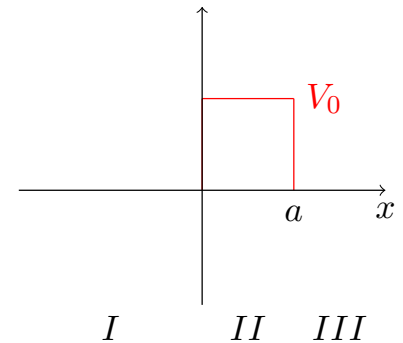
Omettendo i calcoli⁽⁶⁾ andiamo a mostrare i coefficienti di riflessione e trasmissione nei casi $E > V_0$ e $E < V_0$. Nel caso $E > V_0$ si ha

$$T = \frac{1}{1 + \eta^2}$$

$$R = \frac{1}{1 + \frac{1}{\eta^2}}$$

$$\text{con } \eta^2 = \frac{(q^2 - k^2)^2 \sin^2(ka)}{4k^2 q^2} = \frac{V_0^2 \sin^2(ka)}{4E(E - V_0)}$$

Graficando la funzione T in funzione di E/V_0 si può vedere immediatamente che il coefficiente di trasmissione va asintoticamente a 1, cioè per elevati valori dell'energia la riflessione è trascurabile. Inoltre si può vedere che esso è esattamente pari a 1 quando $ka = n\pi$.



⁽⁶⁾ Dei calcoli sono presenti nel

(7) Per trovare η^2 nel caso $E < V_0$ basta sostituire k con ik

Nel caso $E < V_0$, la forma funzionale dei fattori di trasmissione e riflessione è identica ma con⁽⁷⁾

$$\eta^2 = \frac{(q^2 + k^2)^2 \sinh^2(ka)}{4k^2 q^2} = \frac{V_0^2 \sinh^2(ka)}{4E(V_0 - E)}$$

Ricordando che per definizione si ha

$$\sinh(ka) = \frac{e^{ka} - e^{-ka}}{2}$$

se $ka \gg 1$ possiamo adoperare l'approssimazione

$$\sinh(ka) \approx \frac{e^{ka}}{2} \quad \Rightarrow \quad \eta^2 \approx \frac{V_0^2 e^{2ka}}{16E(V_0 - E)}$$

da cui si trova che essendo $\eta \gg 1$

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2ka}$$

cioè per una barriera alta rispetto all'energia della particella il fattore di trasmissione va come un'esponenziale decrescente.

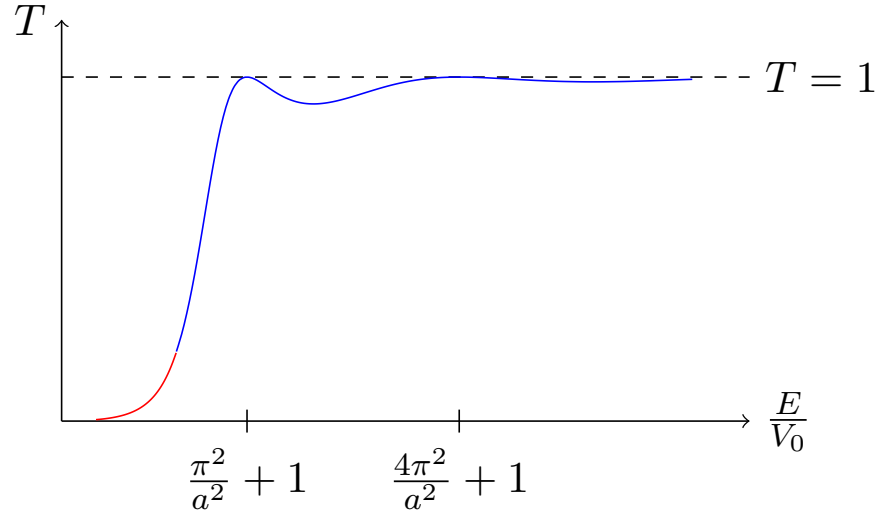


Figura 12.5 : Fattore di trasmissione per una barriera di potenziale. In blu il tratto corrispondente a $E > V_0$, in rosso il tratto corrispondente a $E < V_0$. Si noti come i due tratti si raccordino con continuità.

In questo caso parliamo di effetto tunnel perché, se $E < V_0$, classicamente la particella non avrebbe potuto superare la barriera, mentre la meccanica quantistica prevede che esiste una probabilità non nulla che la barriera venga attraversata, dato che continua ad aversi $T \neq 0$. Il principio fisico dietro tale meccanismo è lo stesso alla base di tutti gli altri tipi di fenomeni ondulatori, in cui un'onda attraversa mezzi con indici di rifrazione diversi.

Oscillatore armonico 1D

CAPITOLO

13

Perché studiare l'oscillatore armonico? L'oscillatore armonico riveste nella fisica un ruolo molto importante: non solo è un sistema che può essere risolto in maniera esatta sia classicamente sia quantisticamente, ma possiede anche una grande rilevanza fisica. Infatti ciascun sistema che oscilla attorno a una posizione di equilibrio stabile può essere approssimato a un oscillatore armonico o, più in generale, da un insieme di oscillatori armonici disaccoppiati.

L'hamiltoniana che descrive un tale sistema è

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

dove m è la massa del corpo, ω è la pulsazione dell'oscillatore. Per risolvere l'equazione di Schrödinger per l'oscillatore armonico si adopera il metodo dell'operatore di creazione e distruzione. Prima di descrivere tale metodo, risulta utile introdurre delle unità naturali per lunghezze e impulsi. Siano

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\frac{\hbar}{b} = \sqrt{m\hbar\omega}$$

le unità naturali per posizione e impulso. Definiti i nuovi operatori posizione e impulso adimensionali come

$$X = b\hat{X}$$

$$P = \frac{\hbar}{b}\hat{P}$$

possiamo riscrivere l'hamiltoniana dell'oscillatore armonico nella forma:

$$\frac{H}{\hbar\omega} = \frac{\hat{P}^2}{2} + \frac{\hat{X}^2}{2}$$

In virtù di ciò che faremo in seguito determiniamo la relazione di commutazione tra i nuovi operatori:

$$i\hbar = [X, P] = \left[b\hat{X}, \frac{\hbar}{b}\hat{P} \right] = b\frac{\hbar}{b} [\hat{X}, \hat{P}] \implies [\hat{X}, \hat{P}] = i$$

13.1 Operatori distruzione e creazione

Introduciamo gli operatori *distruzione* (o annichilazione) e *creazione* definiti rispettivamente come

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \quad (13.1)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \quad (13.2)$$

13.1	Operatori distruzione e creazione	187
13.2	Autostati dell'oscillatore armonico	190
13.3	Oscillatore armonico nella rappresentazione di Heisenberg . .	193
13.4	Stati coerenti	194

Osserviamo che con le definizioni date si ha

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2} [\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] = \frac{1}{2} (-i[\hat{X}, \hat{P}] + i[\hat{P}, \hat{X}]) = 1$$

Inoltre, in funzione degli operatori appena definiti si può riscrivere l'hamiltoniana dell'oscillatore armonico come

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

cioè il problema agli autovalori di H si riduce al problema agli autovalori di $a^\dagger a$, che è un operatore banalmente autoaggiunto. Definito l'operatore numero N come

$$N = a^\dagger a$$

determiniamo le relazioni di commutazione tra l'operatore numero e gli operatori di creazione e distruzione:

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

L'utilità di usare gli operatori di creazione e distruzione sta nel fatto che dato un autostato di H essi permettono di generarne altri. Sia $|n\rangle$ un autostato di N con autovalore n , cioè $N|n\rangle = n|n\rangle$. Vediamo cosa succede applicando l'operatore N allo stato $a|n\rangle$; ricordando che $Na = [N, a] + aN$ si ha

$$\begin{aligned} Na|n\rangle &= [N, a]|n\rangle + aN|n\rangle = -a|n\rangle + na|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \implies \\ &\implies Na|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \end{aligned}$$

e questa relazione è soddisfatta se

- $a|n\rangle$ è il vettore nullo
- $a|n\rangle$ è un autostato di N con autovalore $n-1$, cioè $a|n\rangle = \beta|n-1\rangle$ ⁽¹⁾

Questo permette di giustificare il nome di operatore annichilazione: tale operatore distrugge un quanto di energia. Analogamente se applichiamo l'operatore N allo stato $a^\dagger|n\rangle$ si ottiene

$$\begin{aligned} Na^\dagger|n\rangle &= [N, a^\dagger]|n\rangle + a^\dagger N|n\rangle = a^\dagger|n\rangle + na^\dagger|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle \implies \\ &\implies Na^\dagger|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle \end{aligned}$$

e questa relazione è soddisfatta se

- $a^\dagger|n\rangle$ è il vettore nullo
- $a^\dagger|n\rangle$ è un autostato di N con autovalore $n+1$, cioè $a^\dagger|n\rangle = \beta'|n+1\rangle$

Questo permette di giustificare il nome di operatore creazione: tale operatore crea un quanto di energia. Supposto di aver ortonormalizzato gli autostati di N in modo tale che si abbia $\langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'}$, si può dimostrare che gli autovalori di N sono non negativi in quanto

$$\begin{cases} \langle n|N|n\rangle = n \\ \langle n|N|n\rangle = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle \psi|\psi\rangle \geq 0 \end{cases} \implies n \geq 0$$

⁽¹⁾ Dato che in una dimensione non c'è degenerazione per stati legati (Prop.12.3) e $a|n\rangle$ ha lo stesso autovalore di $|n-1\rangle$, allora $a|n\rangle$ è necessariamente proporzionale a $|n-1\rangle$.

Andiamo adesso a determinare quali valori può assumere n . Sia $|n_0\rangle$ un autostato di N con $0 < n_0 \leq 1$. Applicando l'operatore a allo stato $|n_0\rangle$ si ottiene lo stato $|n_0 - 1\rangle$ con $n_0 - 1 \leq 0$. Poiché, come precedentemente dimostrato, gli autovalori dell'operatore numero sono tutti positivi, deve necessariamente essere $n_0 = 1$, dunque tutti gli autovalori di N sono numeri naturali. Poiché H e N ammettono una base simultanea di autostati, si ha che

$$H|n\rangle = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})|n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle$$

cioè l'hamiltoniana del sistema ammette autovalori

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (13.3)$$

Ciò permette di affermare che anche lo stato fondamentale $|0\rangle$ presenta un'energia non nulla pari ad

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

Dimostriamo che questi livelli energetici sono gli unici che può assumere un oscillatore armonico. Supponiamo per assurdo che esso possa assumere altri livelli energetici; sarebbe quindi presente un ulteriore stato fondamentale $|0'\rangle$ tale che

$$a|0'\rangle = 0 \implies N|0'\rangle = 0 \implies \frac{H}{\hbar\omega}|0'\rangle = \frac{1}{2}|0'\rangle$$

Tuttavia, poiché in una dimensione non si ha degenerazione, si ha che lo stato fondamentale precedentemente trovato e lo stato $|0'\rangle$ coincidono. Dunque non esistono altri livelli energetici per l'oscillatore armonico. Andiamo, adesso, a determinare le costanti β e β' introdotte precedentemente. Determiniamo prima la costante β presente nell'equazione

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

Moltiplicando scalarmente tale equazione per sè stessa otteniamo

$$\begin{aligned} \langle n|a^\dagger a|n\rangle &= |\beta|^2 \langle n-1|n-1\rangle \implies \\ \implies \langle n|N|n\rangle &= |\beta|^2 \implies \\ \implies |\beta|^2 &= n \implies \\ \implies |\beta| &= \sqrt{n} \implies \\ \implies \beta &= \sqrt{n}e^{i\varphi} \end{aligned}$$

dove φ è una fase arbitraria. Convenzionalmente si può scegliere di porre $\varphi = 0$ in modo da avere

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

Determiniamo ora la costante β' presente nell'equazione

$$a^\dagger|n\rangle = \beta'|n+1\rangle$$

Avendo già definito la fase $\varphi = 0$, evitiamo di ripetere la stessa procedura in maniera tale da non avere ambiguità nella scelta della fase. Osserviamo che

$$a^\dagger a|n\rangle = \sqrt{n}a^\dagger|n-1\rangle = \sqrt{n}\beta'|n\rangle \quad (13.4)$$

$$a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle \quad (13.5)$$

da cui si ottiene

$$\sqrt{n}\beta' = n \implies \beta' = \sqrt{n}$$

Tuttavia in questo caso l'operatore a^\dagger risultava essere applicato allo stato $|n-1\rangle$, dunque si ha

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

In conclusione si ha che

$$\begin{aligned} a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \\ a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \end{aligned}$$

13.2 Autostati dell'oscillatore armonico

Andiamo adesso a costruire le funzioni d'onda degli stati dell'oscillatore armonico. Osserviamo che, essendo il potenziale una funzione simmetrica, gli stati saranno pari o dispari. Iniziamo determinando la funzione d'onda dello stato fondamentale. Per quanto visto prima deve essere

$$a |0\rangle = 0$$

Ricordando la definizione dell'operatore annichilazione Eq.(13.1) e osservando che dalla definizione dell'operatore impulso P nella base dell'operatore posizione X segue che

$$\hat{P} = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \bar{x}}$$

dove \bar{x} è la variabile di posizione adimensionale, si ha che proiettando la precedente equazione sulla base $|\bar{x}\rangle$ dell'operatore posizione adimensionale \hat{X} si ha

$$\begin{aligned} \langle \bar{x} | \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) | 0 \rangle = 0 &\implies \implies \bar{x}\phi_0(\bar{x}) + i\frac{1}{i} \frac{d}{d\bar{x}}\phi_0(\bar{x}) = 0 \implies \\ &\implies \frac{d}{d\bar{x}}\phi_0(\bar{x}) = -\bar{x}\phi_0(\bar{x}) \implies \\ &\implies \phi_0(\bar{x}) = N \exp\left(-\frac{\bar{x}^2}{2}\right) \end{aligned}$$

da cui ricordando che

$$\bar{x} = \frac{x}{b}$$

si ottiene

$$\phi_0(x) = N \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)$$

cioè lo stato fondamentale dell'oscillatore armonico è una gaussiana. Osservando che

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

si ha che la funzione d'onda del generico stato è data da

$$\phi_n(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \bar{x} | (a^\dagger)^n | 0 \rangle$$

da cui sfruttando la definizione dell'operatore creazione Eq.(13.2) si ha

$$\begin{aligned}\phi_n(\bar{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \langle \bar{x} | (\hat{X} - i\hat{P})^n | 0 \rangle \implies \\ \implies \phi_n(\bar{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\bar{x} - \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \right)^n \phi_0(\bar{x})\end{aligned}$$

Definiti i polinomi di Hermite come

$$H_n(\bar{x}) = e^{\frac{\bar{x}^2}{2}} \left(\bar{x} - \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \right)^n e^{-\frac{\bar{x}^2}{2}}$$

si può scrivere la funzione d'onda del generico stato stazionario, non normalizzata, come

$$\phi_n(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\bar{x}) e^{-\frac{\bar{x}^2}{2}}$$

Si avrà quindi che l'evoluzione temporale del generico autostato dell'oscillatore armonico è data da

$$\phi_n(x, t) = N_n H_n\left(\frac{x}{b}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \exp\left(-i \frac{E_n t}{\hbar}\right)$$

dove N_n è una costante di normalizzazione. Andiamo adesso ad osservare più nel dettaglio alcune proprietà di autovalori e autofunzioni dell'oscillatore armonico.

1. L'energia è quantizzata. Differentemente dall'oscillatore armonico classico la cui energia può variare con continuità, l'oscillatore armonico quantistico ha un set discreto di livelli energetici dati da Eq.(13.3). Tale quantizzazione è dovuta al fatto che l'operatore numero N ammette solo autovalori naturali. Ciò sembrerebbe violare il principio di corrispondenza. Perché l'oscillatore armonico classico sembra avere uno spettro energetico continuo? La risposta a questa domanda risiede nelle dimensioni relative del gap energetico tra due livelli e dell'energia totale dell'oscillatore classico. Consideriamo, come esempio esplicativo, una massa di 2 g che oscilla con una frequenza 1 rad/s con un'ampiezza di 1 cm. L'energia totale dell'oscillatore è data da

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 = 10^{-7} J$$

Confrontiamo questo valore con la differenza in energia di due livelli consecutivi pari a

$$\Delta E = \hbar \omega = 10^{-34} J$$

A livello macroscopico, risulta quindi impossibile distinguere tra un set continuo di livelli energetici e un set discreto di livelli energetici. Possiamo esprimere questo concetto anche in funzione del numero quantico n ; infatti, per un tale oscillatore armonico avremmo

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

e ciò rende impossibile distinguere un livello energetico dal successivo. Si ha quindi un caso speciale del principio di corrispondenza per cui quando il numero quantico tende a infinito si riottiene il risultato classico.

2. I livelli presentano una spaziatura uniforme. Possiamo assumere che associato a un oscillatore di frequenza classica ω esistano particelle fittizie che diremo *quanti* ciascuna dotata di un'energia $\hbar\omega$. Quando il numero quantico n aumenta (o diminuisce) di Δn , diremo che Δn quanti di energia sono stati creati (o distrutti).
3. La più bassa energia permessa è $\hbar\omega/2$ e non 0. Questa energia, detta *energia di punto zero*, è una conseguenza del fatto che l'autostato simultaneo $|x=0, p=0\rangle$ non è permesso dalla relazione di commutazione $[X, P] = i\hbar$.
4. Gli stati stazionari dell'oscillatore armonico $\phi_n(x)$ contengono solo potenze pari o dispari di x a seconda che n sia pari o dispari.
5. La funzione d'onda dello stato non si annulla nei punti in cui classicamente la particella inverte il suo cammino, ma decade esponenzialmente quando $x \rightarrow \infty$.
6. ⁽²⁾La distribuzione di probabilità $P(x)$ è profondamente differente da quella classica. Supposto che un oscillatore classico in una posizione x abbia una velocità $v(x)$ la probabilità di trovare la particella attorno a x è proporzionale al tempo che essa spende in tale intorno, dunque

$$P(x) dx = \frac{dx}{v(x)} = \frac{dx}{\omega \sqrt{x_0^2 - x^2}}$$

Quantisticamente, soprattutto per lo stato fondamentale, la probabilità $|\phi_0(x)|^2$ sembra andare in maniera profondamente differente. Per il principio di corrispondenza, però, per elevati valori di n le due distribuzioni di probabilità devono diventare indistinguibili, ed effettivamente ciò accade.

Esempio 13.1. Determinare $\langle X \rangle$, $\langle P \rangle$, $\langle X^2 \rangle$, $\langle P^2 \rangle$ e $\sigma_X \sigma_P$ per il generico stato $|n\rangle$ dell'oscillatore armonico.

Scriviamo l'operatore posizione e l'operatore impulso in funzione degli operatori creazione e annichilazione

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a)$$

$$P = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a - a^\dagger)$$

in quanto sappiamo già come operano gli operatori creazione e distruzione sugli autostati dell'hamiltoniana.

$$\begin{aligned} \langle n | X^2 | n \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (a + a^\dagger)^2 | n \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (a + a^\dagger)(a + a^\dagger) | n \rangle \end{aligned}$$

Osservando che $a + a^\dagger$ è autoaggiunto e posto $|\psi\rangle = (a + a^\dagger) |n\rangle$ si ha

$$\langle n | X^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi | \psi \rangle$$

Esplicitiamo lo stato $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = (a + a^\dagger) |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle + \sqrt{n} |n-1\rangle$$

⁽²⁾ Qua sarebbe carina un'immagine della probabilità classica vs quantistica per $n=0$ e $n=20$ dal konishi-paffuti pag.89

Ricordando che gli stati $|n\rangle$ formano una base ortonormale, si ha che

$$\langle\psi|\psi\rangle = n + n + 1 = 2n + 1$$

e quindi

$$\langle n|X^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n + 1)$$

Calcoliamo adesso $\langle P^2 \rangle$.

$$\langle n|P^2|n\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \langle n|\frac{a - a^\dagger}{i} \frac{a - a^\dagger}{i}|n\rangle$$

Osservando che $(a - a^\dagger)/i$ è autoaggiunto e detto $|\psi\rangle = (a - a^\dagger)/i|n\rangle$ si ha

$$\langle n|P^2|n\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \langle\psi|\psi\rangle$$

Esplicitiamo lo stato $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{i}(a - a^\dagger)|n\rangle = \frac{1}{i}(\sqrt{n}|n-1\rangle - \sqrt{n+1}|n+1\rangle)$$

Ricordando che gli stati $|n\rangle$ formano una base ortonormale, si ha che

$$\langle\psi|\psi\rangle = n + n + 1 = 2n + 1$$

da cui segue in maniera immediata

$$\langle n|P^2|n\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(2n + 1)$$

Per motivi di simmetria si ha che $\langle X \rangle = \langle P \rangle = 0$ dunque $\sigma_X^2 = \langle X^2 \rangle$ e $\sigma_P^2 = \langle P^2 \rangle$. Si ha quindi

$$\begin{aligned} \sigma_X^2 \sigma_P^2 &= \frac{\hbar^2}{4}(2n + 1)^2 \implies \\ \implies \sigma_X \sigma_P &= \frac{\hbar}{2}(2n + 1) \geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

Osserviamo che nello stato fondamentale si ha $\sigma_X \sigma_P = \hbar/2$ e questo è in accordo con il fatto che lo stato fondamentale sia una gaussiana.

13.3 Oscillatore armonico nella rappresentazione di Heisenberg

Vediamo adesso come sia possibile descrivere l'oscillatore armonico nella rappresentazione di Heisenberg. Ricordiamo che, in funzione degli operatori di creazione e distruzione, l'hamiltoniana dell'oscillatore armonico è data da

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

Sfruttando l'equazione di Heisenberg Eq.(10.3)⁽³⁾ si ottiene

(3)

$$i\hbar\dot{a} = [a, H] = \hbar\omega[a, a^\dagger a] = \hbar\omega([a, a^\dagger]a + a^\dagger[a, a]) = \hbar\omega a$$

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_H, H_H] \quad (10.3)$$

da cui si ricava che

$$\dot{a} = -i\omega a$$

Integrando si ricava

$$a(t) = a(0)e^{-i\omega t}$$

Calcolando l'aggiunto si ottiene

$$a^\dagger(t) = a^\dagger(0)e^{i\omega t}$$

Ricordiamo che, sfruttando la definizione di a e a^\dagger , si ha

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a)$$

e passando alla rappresentazione di Heisenberg si ottiene

$$X(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_0e^{-i\omega t} + a_0^\dagger e^{i\omega t})$$

dove si è posto $a_0 = a(0)$ e $a_0^\dagger = a^\dagger(0)$.

Dato un qualunque stato $|\psi\rangle$, adesso è immediato l'evoluzione temporale del valore medio della posizione in tale stato:

$$\begin{aligned} \langle\psi|X|\psi\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle\psi|a(t) + a^\dagger(t)|\psi\rangle = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle\psi|a_0|\psi\rangle e^{-i\omega t} + \langle\psi|a_0^\dagger|\psi\rangle e^{i\omega t} \right) \end{aligned}$$

Scrivendo $\langle\psi|a_0|\psi\rangle = Ae^{i\varphi}$ con A e φ reali, si ottiene

$$\langle\psi|X|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (Ae^{-i\omega t+i\varphi} + Ae^{i\omega t-i\varphi}) = 2A\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t - \varphi)$$

Osserviamo che la forma funzionale dell'evoluzione temporale del valore medio della posizione è la stessa qualunque sia lo stato $|\psi\rangle$ considerato. La dipendenza dallo stato viene ritrovata soltanto nelle costanti A e φ , che vanno determinate imponendo le condizioni iniziali.

13.4 Stati coerenti

Consideriamo gli operatori creazione e annichilazione a e a^\dagger e determiniamo, se esistono, i loro autovettori.

Scriviamo un qualsiasi stato come $|\phi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, dove $|n\rangle$ sono gli autostati dell'hamiltoniano dell'oscillatore armonico. Per cercare autostati di a^\dagger scriviamo:

$$a^\dagger \left(\sum_n c_n |n\rangle \right) = \sum_n c_n a^\dagger |n\rangle = \sum_n c_n \sqrt{n+1} |n+1\rangle = \alpha \sum_n c_n |n\rangle$$

e ci chiediamo se l'ultima uguaglianza sia soddisfatta. Si conclude facilmente che ciò non è possibile, infatti non esiste nel membro a sinistra neanche un termine in $|0\rangle$, presente invece nel membro a destra, dunque

a^\dagger non ha autostati.

Proviamo ora a fare lo stesso ragionamento con a :

$$\begin{aligned} a \left(\sum_n c_n |n\rangle \right) &= \sum_n c_n a |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle = \alpha \sum_n c_n |n\rangle \end{aligned} \quad (13.6)$$

L'ultima uguaglianza è verificata se e solo se:

$$c_{n+1} \sqrt{n+1} = c_n \alpha \quad \forall n$$

da cui si ricava la relazione di ricorrenza:

$$c_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} c_n$$

Osserviamo che, fissando il coefficiente c_0 , possiamo determinare tutti gli altri coefficienti, e in particolare, dopo aver fatto alcune prove per i primi termini, possiamo generalizzare scrivendo:

$$c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0$$

Dunque, facendo riferimento all'equazione agli autovalori 13.6, possiamo scrivere:

$$a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$$

dove $|\alpha\rangle$ sono detti *stati coerenti* e si definiscono come:

$$|\alpha\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (13.7) \quad \text{Stati coerenti}$$

Vediamo adesso alcune proprietà degli stati coerenti.

Innanzitutto, non avendo fatto alcuna specifica particolare sulla natura di α , e inoltre non essendo gli operatori creazione e annichilazione autoaggiunti, è evidente che esso sia un complesso, $\alpha \in \mathbb{C}$.

In base alla definizione (13.7), inoltre possiamo notare come $|\alpha\rangle$ sia una sovrapposizione di stati con energie diverse, dunque sicuramente gli stati coerenti non sono autostati dell'hamiltoniano.

Un'altra caratteristica degli stati coerenti è inoltre che essi non sono ortogonali tra di loro. Infatti, se consideriamo due stati $|\alpha\rangle$ e $|\alpha'\rangle$, possiamo scrivere

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \sum_{n,m} \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \frac{\alpha'^m}{\sqrt{m!}} \langle n | m \rangle = \sum_n \frac{(\alpha^* \alpha')^n}{n!} = e^{\alpha^* \alpha'}$$

e in particolare si ha che $\langle \alpha | \alpha \rangle = e^{|\alpha|^2}$.

Vogliamo adesso trovare un'altra espressione per gli stati degeneri. Per prima cosa osserviamo che il generico autostato dell'hamiltoniano si può scrivere come:

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

ed è facile convincersene ancora una volta per induzione. Allora, utilizzando la (13.7), possiamo scrivere:

$$|\alpha\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = \sum_n \frac{(a^\dagger \alpha)^n}{n!} |0\rangle$$

da cui si ottiene l'espressione

$$\text{Altra forma degli stati coerenti} \quad |\alpha\rangle = e^{a^\dagger \alpha} |0\rangle \quad (13.8)$$

Per renderci conto dell'importante significato fisico nascosto negli stati coerenti, risulta essere utile calcolare il valor medio di alcune osservabili su di essi.

- Operatore posizione $X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger)$:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \alpha | X | \alpha \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\langle \alpha | (a + a^\dagger) | \alpha \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{(\alpha + \alpha^*) \langle \alpha | \alpha \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle} = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha + \alpha^*) \end{aligned}$$

dove abbiamo utilizzato il fatto che $a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$ e quindi $\langle \alpha | \alpha^* = \langle \alpha | a^\dagger$. Inoltre, poiché $(\alpha + \alpha^*) = 2\text{Re}(\alpha)$, si ottiene il seguente risultato:

$$\text{Valor medio di } X \quad \langle X \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} 2\text{Re}(\alpha) \quad (13.9)$$

- Operatore impulso $P = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (a - a^\dagger)$:
Con calcoli analoghi ai precedenti si ottiene:

$$\text{Valor medio di } P \quad \langle P \rangle = \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} 2\text{Im}(\alpha) \quad (13.10)$$

- Operatore numero $N = a^\dagger a$ ed energia:

$$\langle N \rangle = \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = \alpha^* \alpha = |\alpha|^2$$

Utilizziamo questa espressione per calcolare il valor medio dell'hamiltoniano:

$$\text{Valor medio di } H \quad \langle H \rangle = \hbar \omega \langle N \rangle = \hbar \omega |\alpha|^2 \quad (13.11)$$

Calcoliamo in conclusione la probabilità P_n di ottenere l'energia E_n , a partire dagli stati coerenti. Per definizione di probabilità si ha:

$$P_n = |\langle n | \alpha \rangle|^2$$

da cui, utilizzando la (13.7) con la normalizzazione degli stati, si ottiene:

$$\begin{aligned} \langle n | \alpha \rangle &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_k \frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}} \langle n | k \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_k \frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}} \delta_{nk} = \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \end{aligned}$$

Allora la probabilità sarà:

$$P_n = \exp(-|\alpha|^2) \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} \quad (13.12) \quad \text{Probabilità di ottenere l'energia } E_n$$

Ricordando che $|\alpha|^2 = \langle N \rangle$ e indicando tale valore medio con μ , possiamo scrivere la probabilità come

$$P_n = \frac{\mu^n}{n!} \exp(-\mu)$$

che non è altro se non la distribuzione di Poisson, il cui scarto quadratico medio è $\sqrt{\mu}$.

Andiamo adesso a calcolare i valori medi delle stesse osservabili quadratiche negli stati coerenti, supposti normalizzati.

- Posizione:

$$\begin{aligned} \langle X^2 \rangle &= \langle \alpha | (a + a^\dagger)^2 | \alpha \rangle \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | (a^2 + a^{\dagger 2} + 2a^\dagger a + 1) | \alpha \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (\alpha^2 + \alpha^{*2} + 2\alpha^* \alpha + 1) = \frac{\hbar}{2m\omega} [(\alpha + \alpha^*)^2 + 1] \end{aligned}$$

da cui si ottiene il risultato

$$\langle X^2 \rangle = \langle X \rangle^2 + \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Volendo esplicitare lo scarto quadratico medio della posizione, si ha:

$$\sigma_X^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (13.13)$$

- Impulso:

$$\begin{aligned} \langle P^2 \rangle &= -\langle \alpha | (a - a^\dagger)^2 | \alpha \rangle \frac{\hbar m\omega}{2} = -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle \alpha | (a^2 + a^{\dagger 2} - 2a^\dagger a - 1) | \alpha \rangle = \\ &= -\frac{\hbar m\omega}{2} (\alpha^2 + \alpha^{*2} - 2\alpha^* \alpha - 1) = -\frac{\hbar m\omega}{2} [(\alpha - \alpha^*)^2 - 1] \end{aligned}$$

da cui si ottiene il risultato

$$\langle P^2 \rangle = \langle P \rangle^2 + \frac{\hbar m\omega}{2}$$

Volendo esplicitare lo scarto quadratico medio dell'impulso, si ha:

$$\sigma_P^2 = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2 = \frac{\hbar m\omega}{2} \quad (13.14)$$

Una volta noti gli scarti quadratici medi, è interessante calcolarne il prodotto e verificare la validità delle relazioni di indeterminazione:

$$\sigma_X \sigma_P = \frac{\hbar}{2}$$

In particolare, abbiamo ottenuto il caso limite dell'uguaglianza esatta, che sappiamo essere valida solo per distribuzioni di tipo gaussiano. Questo risultato ci dice in sostanza che la funzione d'onda associata a uno stato coerente è una gaussiana centrata intorno a $\langle X \rangle$ che si muove con un impulso medio $\langle P \rangle$. Osserviamo che tale gaussiana non è centrata

nell'origine, per cui è evidente che non si tratti di un'autofunzione dell'hamiltoniano.

Andiamo adesso ad occuparci dell'evoluzione temporale degli stati coerenti. Sia U_t l'operatore evoluzione temporale. Allora:

$$U_t |\alpha\rangle = U_t \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} U_t |n\rangle$$

Osservando che gli stati $|n\rangle$ hanno energia $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} U_t |n\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) |n\rangle = \exp\left(-i\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)t\right) |n\rangle = \\ &= \exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\right) \exp(-i\omega n t) |n\rangle \end{aligned}$$

da cui si ottengono gli stati coerenti dipendenti dal tempo:

$$|\alpha(t)\rangle = U_t |\alpha\rangle = \exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\right) \sum_n \frac{\alpha(t)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (13.15)$$

dove abbiamo definito $\alpha(t) = \alpha \exp(-i\omega t)$. Risulta essere interessante notare che, a meno di un fattore di fase e dell'evoluzione temporale dell'autovalore α , gli stati coerenti mantengono la stessa forma nel tempo. Per quanto riguarda l'evoluzione dell'autovalore, possiamo scrivere, utilizzando la rappresentazione polare dei numeri complessi:⁽⁴⁾

$$\alpha(t) = \alpha \exp(-i\omega t) = \rho \exp(i\theta) \exp(-i\omega t) = \rho \exp(i(\theta - \omega t))$$

da cui, estraendo la parte reale e la parte immaginaria dell'autovalore:

$$\begin{cases} \text{Re}(\alpha(t)) = \rho \cos(\omega t - \theta) \\ \text{Im}(\alpha(t)) = \rho \sin(\omega t - \theta) \end{cases}$$

Il fatto che $\alpha(t)$ mantenga la stessa forma nel tempo implica che gli stati coerenti evolvono mantenendo la loro forma di pacchetti gaussiani. Infatti gli scarti quadratici medi sono costanti, non dipendendo dall'autovalore $\alpha(t)$.

13.4.1 Stati coerenti o stati quasi-classici

In questo piccolo paragrafetto andiamo a discutere altre importanti proprietà degli stati coerenti, che li rendono meritevoli di una particolare nomenclatura utilizzata in letteratura, cioè quella di *stati quasi-classici*. Andiamo al limite per $N \rightarrow \infty$, dove N è l'autovalore dell'operatore numero. Poiché la distribuzione delle energie è una poissoniana, lo scarto quadratico medio è $\sigma_N = \sqrt{\langle N \rangle}$, dunque si avrà che:

$$\frac{\sigma_N}{\langle N \rangle} = \frac{1}{\sqrt{\langle N \rangle}} \rightarrow 0$$

Per N grandi significa che la dispersione in energia del pacchetto è piccola, dunque una particella in uno stato coerente si comporta come una particella classica che oscilla. Si tratta di una descrizione molto vicina al caso classico, che invece non ci viene restituita dagli autostati dell'hamiltoniano, anche a grandi energie.

Gli stati coerenti sono molto utilizzati in ottica quantistica per descrivere, ad esempio, un segnale luminoso oppure nell'ambito del path integral in quanto permettono di calcolare facilmente gli elementi di matrice richiesti.

⁽⁴⁾ Osserviamo che gli stessi risultati si sarebbero potuti ricavare molto più velocemente utilizzando la rappresentazione di Heisenberg. Infatti abbiamo già visto che l'operatore creazione evolve come $a(t) = a(0) \exp(-i\omega t)$, dunque ciò implica che l'autovalore evolva allo stesso modo, cioè $\alpha(t) = \alpha(0) \exp(-i\omega t)$, dove $\alpha(0)$ è l'autovalore all'istante iniziale, ovvero il nostro α .

Momento angolare

CAPITOLO

14

Introduzione al capitolo

La trattazione sull'operatore momento angolare in meccanica quantistica è talmente ampia, delicata, e importante da meritare un capitolo a sé stante. Per comodità e chiarezza espositiva, la nostra trattazione inizierà con il caso bidimensionale §14.1, per poi generalizzare al caso tridimensionale §14.2. Infine vedremo come applicare i risultati ottenuti a problemi che presentano invarianza rotazionale.

14.1 Rotazioni in due dimensioni	199
14.2 Momento angolare e rotazioni in 3 dimensioni	203
14.3 Problema agli autovalori	206
14.4 Autofunzioni del momento angolare orbitale	212

14.1 Rotazioni in due dimensioni

Per prima cosa soffermiamoci sul seguente esempio di sistema piano.

Consideriamo un rotatore rigido libero che ruota nel piano attorno a un asse fisso. La lagrangiana di tale sistema è data da

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{1}{2}I\dot{\varphi}^2$$

L'impulso coniugato a tale angolo è

$$p_{\varphi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} = I\dot{\varphi}$$

e l'hamiltoniana è

$$H = \frac{p_{\varphi}^2}{2I} = \frac{L^2}{2I}$$

dove L è il momento angolare. L'assenza di un potenziale fa sì che si conservi l'impulso coniugato alla variabile lagrangiana φ , cioè p_{φ} è una costante del moto. Dunque il sistema è invariante per rotazioni. Qual è la forma dell'operatore P_{φ} ? Facendo le stesse considerazioni fatte in precedenza troviamo che

$$P_{\varphi} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Passando quindi alla meccanica quantistica, introduciamo il corrispondente operatore del momento angolare e poichè $[H, L] = 0$, allora L, H ammettono una base simultanea di autostati. Il nostro problema consiste dunque nel risolvere il seguente sistema:

$$\begin{cases} H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \\ L |\phi_n\rangle = l |\phi_n\rangle \end{cases}$$

Proiettando la seconda equazione nella base della posizione $|\varphi\rangle$ otteniamo

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \phi_n(\varphi) = l \phi_n(\varphi)$$

che offre come soluzione funzioni della forma $\exp(i\frac{l}{\hbar}\varphi)$. Imponendo che esse siano soluzioni anche dell'equazione agli autovalori dell'hamiltoniana

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2}{d\varphi^2} \phi_n(\varphi) = E_n \phi_n(\varphi)$$

si ottiene che $l^2 = 2IE$, e quindi, posto $k = \sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}$, si ha $k^2 = \frac{l^2}{\hbar^2}$. In questo caso, però, la condizione al contorno da imporre alla funzione è più stringente: la funzione d'onda deve essere periodica di periodo 2π cioè deve essere

$$\begin{aligned} \phi_n(\varphi + 2\pi) &= \phi_n(\varphi) \implies \\ \implies \exp(2\pi i k) &= 1 \implies k = n \quad \text{con} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned}$$

Essendo k un numero intero si ha che

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2 n^2}{2I} \\ l_n &= \hbar n \end{aligned}$$

cioè energia e momento angolare sono quantizzati.

Esempio 14.1. Dato un rotatore rigido nello stato $\psi(\varphi) = \sin^2(\varphi)$, si determinino i valori dell'energia che possono essere misurati e con quale probabilità. Si determini in seguito l'energia media dello stato

Ricordiamo che il momento angolare e l'hamiltoniana commutano, dunque ammettono una base simultanea di autostati, le cui autofunzioni associate sono $\phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$ con $m \in \mathbb{Z}$. Prima di risolvere il problema in questione esplicitiamo la procedura classica di risoluzione per problemi di questa tipologia.

- *Step 1:* normalizzare la funzione d'onda data
- *Step 2:* normalizzare gli autostati dell'hamiltoniana
- *Step 3:* calcolare i prodotti scalari tra la funzione d'onda data e gli autostati dell'hamiltoniana che restituiscono i valori della probabilità cercati.

Normalizziamo gli autostati dell'hamiltoniana.

$$\int_0^{2\pi} e^{im\varphi} e^{-im\varphi} d\varphi = 2\pi \implies \phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Notiamo che con questa definizione della costante moltiplicativa gli autostati del momento angolare sono ortonormali, cioè

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{im\varphi} e^{-in\varphi} d\varphi = \delta_{mn}$$

Normalizziamo la funzione d'onda data.

$$\int_0^{2\pi} \sin^4(\varphi) d\varphi = \frac{3}{4}\pi \implies \psi(\varphi) = \frac{2}{\sqrt{3\pi}} \sin^2(\varphi)$$

A questo punto dovremmo andare a calcolare i prodotti scalari tra la funzione d'onda dello stato e gli autostati dell'hamiltoniana. Tuttavia, in questo caso possiamo seguire una procedura più semplice. Ricordiamo che per definizione si ha

$$\sin(\varphi) = \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}$$

e dunque

$$\psi(\varphi) = \sin^2(\varphi) = -\frac{e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi} - 2}{4}$$

cioè la funzione d'onda risulta già essere una combinazione lineare di autostati dell'hamiltoniana. Ricordando che gli autostati dell'hamiltoniana sono ortonormali e essa ammette autovalori della forma

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$$

si ricava in maniera immediata che i valori dell'energia misurabili sono

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} \quad \text{con} \quad m = 0, \pm 2$$

e la probabilità associata a ciascun valore dell'energia è

$$P_{-2} = P_2 = \frac{1}{6}$$

$$P_0 = \frac{2}{3}$$

L'energia media di tale stato è

$$\langle E \rangle = \sum_m E_m P_m = \frac{2\hbar^2}{3I}$$

Si può ottenere lo stesso risultato anche sfruttando il fatto che l'hamiltoniana del sistema è

$$H = \frac{L^2}{2I} = \frac{1}{2I} \left(\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2$$

e quindi

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2I} \int_0^{2\pi} \psi^*(\varphi) \frac{d^2}{d\varphi^2} \psi(\varphi) d\varphi$$

Dopo aver approcciato l'operatore momento angolare con un esempio, adesso siamo pronti per una definizione generale, sempre nel caso bidimensionale (operatore L_z se considero il piano xy).

Osservazione. In virtù del principio di corrispondenza, definiamo l'operatore momento angolare come il generatore delle rotazioni. In particolare se classicamente la componente z del momento angolare è data da

$$l_z = xp_y - yp_x$$

ci aspettiamo che in meccanica quantistica l'operatore L_z abbia la forma⁽¹⁾

$$L_z = XP_y - YP_x$$

(1) La definizione è ben posta in quanto $[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$: dato che X_i, P_j commutano se $i \neq j$ possiamo porre equivalentemente $L_z = P_y X - P_x Y$.

In virtù del principio di corrispondenza, inoltre, deve valere la relazione

$$\langle [L_x, L_y] \rangle = i\hbar \{l_x, l_y\} + \mathcal{O}(\hbar^2)$$

dunque all'ordine \hbar ci aspettiamo che valga la relazione

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (14.1)$$

Andremo, in seguito, a provare che tale relazione è esatta.

E' possibile dedurre la forma di L_z in maniera più breve ed elegante definendolo dapprima come il generatore di una rotazione infinitesima di un angolo $\delta\theta$ nel piano xy , e poi ricavarne la forma nella rappresentazione delle coordinate cartesiane, optando per un cambio di coordinate dell'operatore $\frac{\partial}{\partial\theta}$ oppure seguendo la strada del Landau, scrivendo l'azione della rotazione su una funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate.

Consideriamo una rotazione infinitesima $\theta\hat{k}$ attorno all'asse z . Detto L_z il generatore della rotazione, l'operatore unitario che rappresenta la rotazione infinitesima è

$$U_R(\theta\hat{k}) = 1 + i\frac{\theta}{\hbar}L_z$$

Il nostro obiettivo iniziale è determinare la forma esplicita di tale generatore.

Per andare a snellire la notazione rinominiamo l'operatore di rotazione come $U(\theta)$. Detta $|xy\rangle$ la base della posizione nel piano, si ha che la rotazione infinitesima trasforma la base come

$$U_R |xy\rangle = |x + y\theta, y - x\theta\rangle$$

Ciò deriva dal fatto che lo stato ruotato è:

$$\begin{pmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \cos(\theta) + y \sin(\theta) \\ -x \sin(\theta) + y \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

Ma poichè stiamo considerando rotazioni infinitesime, in seguito allo sviluppo in un intorno dell'identità si ha quanto cercato.

Determiniamo l'azione dell'operatore di rotazione infinitesima su uno stato generico $|\psi\rangle$. Per fare questo proiettiamo il problema sulla base della posizione andiamo a determinare $\langle \vec{r} | U(\theta) | \psi \rangle^{(2)}$. Possiamo applicare l'operatore U_θ allo stato $|\psi\rangle$ ottenendo lo stato ruotato $|\psi_\theta\rangle$ oppure possiamo anche applicarlo a $\langle \vec{r} |$ avendo l'accortezza di farne l'aggiunto e ottenendo $\langle \vec{r}_{-\theta} |$. Deve dunque essere

$$\langle \vec{r} | U(\theta) | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \psi_\theta \rangle = \langle \vec{r}_{-\theta} | \psi \rangle \quad (14.2)$$

Sviluppiamo il primo membro di tale relazione

$$\langle \vec{r} | U(\theta) | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \theta L_z | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \psi \rangle + \frac{i}{\hbar} \theta \langle \vec{r} | L_z | \psi \rangle \quad (14.3)$$

Osserviamo che per $\theta \rightarrow 0$ si ha

$$\vec{r}_{-\theta} = R(-\theta)\vec{r} = \begin{pmatrix} 1 & -\theta & 0 \\ \theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x - \theta y \\ y + \theta x \\ z \end{pmatrix}$$

e dunque il terzo membro della Eq.(14.2) può essere scritto come

$$\langle \vec{r}_{-\theta} | \psi \rangle = \psi(R(-\theta)\vec{r}) = \psi(x - \theta y, y + \theta x, z)$$

Sviluppando tale espressione al primo ordine in θ si ottiene

$$\psi(x - \theta y, y + \theta x, z) = \psi(x, y, z) - \theta y \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{\theta=0} + \theta x \left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{\theta=0} + \mathcal{O}(\theta^2) \quad (14.4)$$

(2) Nonostante ci troviamo nel piano xy è conveniente utilizzare una notazione tridimensionale, aggiungendo nella matrice di rotazione una riga e una colonna $(0, 0, 1)$.

Confrontando la Eq.(14.3) con la Eq.(14.4) si ottiene

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \theta \langle \vec{r} | L_z | \psi \rangle &= \theta \left(x \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Rightarrow \\ \Rightarrow \langle \vec{r} | L_z | \psi \rangle &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \langle \vec{r} | X P_y - Y P_x | \psi \rangle \end{aligned}$$

dunque abbiamo determinato che

$$L_z = X P_y - Y P_x$$

è il generatore delle rotazioni attorno all'asse z .

Osservazione. Se si volesse passare alla trasformazione in forma finita si avrebbe

$$U(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\theta}{N} L_z \right)^N = \exp \left(+i \frac{\theta}{\hbar} L_z \right)$$

Diamo adesso un'interpretazione fisica all'operatore L_z .

Definizione 14.2 (operatore momento angolare). Identifichiamo l'operatore $L_z = X P_y - Y P_x$ come il **momento angolare** rispetto all'asse z , in quanto:

- deriva dal principio di corrispondenza;
- abbiamo mostrato che L_z , così definito, è il generatore delle rotazioni attorno all'asse z .

14.2 Momento angolare e rotazioni in 3 dimensioni

Estendiamo i risultati ottenuti nel piano al caso tridimensionale. Considerando un sistema di coordinate cartesiane, possiamo esprimere gli operatori componenti del momento angolare come

$$\begin{aligned} L_x &= Y P_z - Z P_y \\ L_y &= Z P_x - X P_z \\ L_z &= X P_y - Y P_x \end{aligned} \quad (14.5)$$

oppure utilizzando una notazione più compatta

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} \quad (14.6)$$

Siamo adesso pronti per andare a dimostrare le relazioni di commutazione del tipo Eq.(14.1).

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [Y P_z - Z P_y, L_y] = \\ &= [Y P_z, L_y] - [Z P_y, L_y] = \\ &= Y [P_z, L_y] + [Y, L_y] P_z - Z [P_y, L_y] - [Z, L_y] P_y \end{aligned}$$

Osserviamo che i commutatori $[Y, L_y]$ e $[P_y, L_y]$ sono nulli in quanto y e p_y sono invarianti per rotazioni attorno all'asse y . Si ha dunque

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= Y [P_z, L_y] - [Z, L_y] P_y = \\ &= Y [P_z, Z P_x - X P_z] - [Z, Z P_x - X P_z] P_y = \\ &= Y (-i\hbar P_x) - (-i\hbar X) P_y = i\hbar (X P_y - Y P_x) = i\hbar L_z \end{aligned}$$

In generale, per qualunque asse, possiamo scrivere

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad (14.7)$$

Proviamo adesso la seguente proposizione valida per le componenti del momento angolare.

Proposizione 14.3. Non esiste una base di autostati simultanei per le tre componenti del momento angolare L_x , L_y , L_z .

Dimostrazione. Supponiamo per assurdo che esista un autostato simultaneo di L_x ed L_y e sia esso $|\phi_0\rangle$. Allora si avrebbe

$$\begin{cases} L_x L_y |\phi_0\rangle = ab |\phi_0\rangle \\ L_y L_x |\phi_0\rangle = ba |\phi_0\rangle \end{cases}$$

da cui sottraendo membro a membro si ottiene

$$[L_x, L_y] |\phi_0\rangle = i\hbar L_z |\phi_0\rangle = 0$$

e quindi affinché $|\phi_0\rangle$ sia anche autostato di L_z esso deve essere associato all'autovalore nullo. Questo ragionamento può essere ripetuto per ogni coppia di operatori momento angolare ricavando che deve essere

$$L_x |\phi_0\rangle = L_y |\phi_0\rangle = L_z |\phi_0\rangle = 0$$

e quindi avremo che i valori medi dei tre operatori in tale stato saranno nulli. Dunque l'unico autostato simultaneo di L_x , L_y ed L_z è lo stato con momento angolare nullo e quindi non è possibile costruire una base di autostati simultanei. \square

Una volta esplicitate le componenti del momento angolare, andiamo a definire il seguente operatore.

Definizione 14.4. Definiamo l'operatore **quadrato del momento angolare** come

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (14.8)$$

Tale operatore è particolarmente importante nello studio del problema agli autovalori perchè presenta delle particolari relazioni di commutazione con le componenti del momento angolare.

Proposizione 14.5 (Base di autostati simultanei di L^2 e L_i). L'operatore L^2 commuta con tutte le componenti del momento angolare, cioè

$$[L^2, L_i] = 0 \quad \text{con } i = x, y, z \quad (14.9)$$

dunque esiste una base di autostati simultanei di L^2 ed L_i .

Dimostrazione. Considero per comodità $i = x$.

$$\begin{aligned}
 [L^2, L_x] &= [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x] = \\
 &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] = \\
 &= L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z = \\
 &= -i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y + i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z = 0
 \end{aligned}$$

e analogamente si dimostra per $i = y$ e $i = z$. \square

14.2.1 Momento angolare totale e momento angolare orbitale

Andiamo a fare alcune osservazioni sul legame tra operatore momento angolare e rotazioni.

Osservazione (Generatore delle rotazioni nello spazio). Per quanto visto nel paragrafo precedente §14.1, l'operatore L_z è il generatore delle rotazioni attorno all'asse z , così come L_x rispetto all'asse x e L_y rispetto all'asse y . Utilizzando la notazione compatta, possiamo esprimere l'operatore di rotazioni nello spazio in forma infinitesima come

$$U(\vec{\theta}) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \vec{\theta} \cdot \vec{L} \quad (14.10)$$

e in forma finita come

$$U(\vec{\theta}) = \exp\left(+\frac{i}{\hbar} \vec{\theta} \cdot \vec{L}\right) \quad (14.11)$$

dunque l'operatore $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P}$ è il generatore delle rotazioni nello spazio.

Come vedremo in seguito, in meccanica quantistica non è sufficiente considerare rotazioni in senso classico, ovvero rotazioni nello spazio fisico. Per la trattazione che segue risulta essere essenziale definire il seguente operatore.

Definizione 14.6 (Momento angolare totale). Definiamo l'**operatore momento angolare totale** \vec{J} , soddisfacente le relazioni di commutazione $[J_i, J_j] = \varepsilon_{ijk} i\hbar J_k$, come il generatore delle rotazioni, il quale non coincide in generale con l'operatore $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P}$. Alla luce di questa definizione, diremo **momento angolare orbitale** l'operatore \vec{L} .

Vista la validità delle relazioni di commutazione, è evidente che anche per \vec{J} si ha $[J^2, J_i] = 0$ e dunque esiste una base di autostati simultanei di J^2 ed J_i .

A questo punto, il risultato ottenuto sulla commutazione di L^2 con L_z ci permette di studiare il problema agli autovalori e di affrontare la determinazione degli autostati in maniera più agevole. Ricordando che L_z ammette autovalori quantizzati $\hbar m$, con m intero, possiamo scrivere

$$\begin{cases} L^2 |\beta, m\rangle = \hbar^2 \beta |\beta, m\rangle \\ L_z |\beta, m\rangle = \hbar m |\beta, m\rangle \end{cases}$$

con $|\beta, m\rangle$ generico autostato simultaneo di L^2 ed L_z .

In realtà, come sarà più chiaro dopo aver svolto i calcoli, risulta essere più conveniente risolvere il problema agli autovalori utilizzando J^2 e J_z .

14.3 Problema agli autovalori

Scriviamo il problema agli autovalori come

$$\begin{cases} J^2 |\beta, m\rangle = \hbar^2 \beta |\beta, m\rangle \\ J_z |\beta, m\rangle = \hbar m |\beta, m\rangle \end{cases}$$

Definiamo gli operatori

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$$

Osserviamo che J_{\pm} non sono hermitiani, ma si trova che $J_{\pm}^{\dagger} = J_{\mp}$. Determiniamo i commutatori tra questi due nuovi operatori e i due operatori J_z ed J^2

$$[J_z, J_{\pm}] = [J_z, J_x \pm iJ_y] = [J_z, J_x] \pm i[J_z, J_y] = i\hbar J_y \pm i(-i\hbar J_x) = \pm\hbar J_{\pm}$$

$$[J^2, J_{\pm}] = 0$$

In particolare la seconda relazione deriva dal fatto che $[J^2, J_i] = 0 \quad \forall i$ e J_{\pm} è una combinazione lineare di J_x e J_y .

Come agiscono i due operatori J_{\pm} sugli stati $|\beta, m\rangle$? Poiché J_{\pm} commuta con J^2 , allora $J_{\pm} |\beta, m\rangle$ sarà ancora un autostato di J^2 con autovalore $\hbar^2 \beta$. Andiamo ad esplicitare l'azione di J_z su tali stati. Si ha

$$\begin{aligned} J_z J_{\pm} |\beta, m\rangle &= [J_z, J_{\pm}] |\beta, m\rangle + J_{\pm} J_z |\beta, m\rangle = \\ &= \pm\hbar J_{\pm} |\beta, m\rangle + \hbar m J_{\pm} |\beta, m\rangle = \\ &= \hbar(m \pm 1) J_{\pm} |\beta, m\rangle \end{aligned}$$

cioè $J_{\pm} |\beta, m\rangle$ è autostato di J_z con autovalore $\hbar(m \pm 1)$ e si può quindi scrivere

$$J_{\pm} |\beta, m\rangle = C_{\pm}(\beta, m) |\beta, m \pm 1\rangle$$

con $C_{\pm}(\beta, m)$ costante di proporzionalità. Andiamo ad esplicitare i valori che può assumere m . Notiamo che, essendo in autostati con modulo del momento angolare fissato⁽³⁾, si ha che

⁽³⁾ β non cambia

$$J_x^2 + J_y^2 = J^2 - J_z^2 \quad (14.12)$$

Calcoliamo dunque il loro valor medio nello stato $|\beta, m\rangle$

$$\langle \beta, m | J_x^2 + J_y^2 | \beta, m \rangle = \langle \beta, m | J^2 - J_z^2 | \beta, m \rangle = \hbar^2 \beta - \hbar^2 m^2 = \hbar^2 (\beta - m^2) \geq 0$$

cioè deve essere $m^2 \leq \beta$. In realtà deve essere $m^2 < \beta$, in quanto se fosse $m^2 = \beta$ allora avremmo determinato tutte e tre le componenti del momento angolare senza errore, ma in tale condizione esse devono essere contemporaneamente nulle. Abbiamo quindi che m può variare tra un valore minimo m_{\min} e un valore massimo m_{\max} e devono valere le condizioni

$$J_+ |\beta, m_{\max}\rangle = 0$$

$$J_- |\beta, m_{\min}\rangle = 0$$

Andando ad applicare alla prima l'operatore J_- e alla seconda l'operatore J_+ si ottiene

$$\begin{aligned} J_- J_+ |\beta, m_{\max}\rangle &= 0 \\ J_+ J_- |\beta, m_{\min}\rangle &= 0 \end{aligned}$$

da cui in funzione della definizione di J_{\pm} si ottiene

$$\begin{aligned} J_+ J_- &= (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 - i[J_x, J_y] \\ J_- J_+ &= (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i[J_x, J_y] \end{aligned}$$

e ricordando che valgono la Eq.(14.12) e la relazione di commutazione $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ si ha

$$\begin{aligned} J_+ J_- &= J^2 - J_z^2 - i(i\hbar J_z) = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \\ J_- J_+ &= J^2 - J_z^2 + i(i\hbar J_z) = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \end{aligned}$$

e quindi si ottiene

$$\begin{aligned} J_+ J_- |\beta, m_{\min}\rangle &= \hbar^2(\beta - m_{\min}^2 + m_{\min}) |\beta, m_{\min}\rangle \\ J_- J_+ |\beta, m_{\max}\rangle &= \hbar^2(\beta - m_{\max}^2 - m_{\max}) |\beta, m_{\max}\rangle \end{aligned}$$

Affinché esse restituiscano gli stati nulli, devono valere le equazioni

$$\beta - m_{\min}^2 + m_{\min} = 0 \quad (14.13)$$

$$\beta - m_{\max}^2 - m_{\max} = 0 \quad (14.14)$$

cioè

$$m_{\min}^2 - m_{\max}^2 - m_{\max} - m_{\min} = 0$$

Risolvendo tale equazione si ottiene

$$m_{\min} = \frac{1 \pm (1 + 2m_{\max})}{2} = \begin{cases} 1 + m_{\max} \\ -m_{\max} \end{cases}$$

La prima soluzione ovviamente non è accettabile (si avrebbe $m_{\min} > m_{\max}$), dunque deve essere $m_{\min} = -m_{\max}$, con ovviamente $m_{\max} > 0$ altrimenti il risultato trovato sarebbe assurdo. Posto $j = m_{\max}$ si ha che m può assumere i valori $-j, -j+1, \dots, j-1, j$, cioè m può assumere $2j+1$ valori⁽⁴⁾. Si ha quindi che $2j+1 \in \mathbb{N}$ e affinché ciò sia vero j deve essere intero o semi-intero. Sostituendo quanto trovato nella Eq.(14.14) si trova che

$$\beta = j(j+1)$$

Il problema agli autovalori di J^2 e J_z può quindi essere riscritto nella forma

$$\begin{aligned} J^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \\ J_z |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle \end{aligned}$$

Con quanto trovato è ancora più evidente che deve essere $\beta > m^2$ in quanto $j(j+1) > j^2$. Sfruttando questa tecnica posso costruire una rappresentazione del gruppo delle rotazioni di dimensione $2j+1$. In particolare per $2j+1 = 3$ si ottiene la rappresentazione del gruppo delle rotazioni nello spazio tridimensionale, con la differenza che mentre classicamente esse vengono descritte mediante matrici ortogonali, in questo

⁽⁴⁾ $2j+1$ è proprio la dimensione del sottospazio di autostati degeneri aventi stesso β e differente m

caso sono descritte da matrici unitarie. Nel caso del momento angolare orbitale però conosciamo già quali sono le autofunzioni dell'operatore L_z . In coordinate sferiche, infatti, esso può essere espresso come

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

e le autofunzioni sono del tipo $e^{im\varphi}$, con autovalore $L_z = \hbar m$ ed m intero. Nel caso del momento angolare orbitale, quindi, non tutti i valori di j sono ammissibili, ma solo quelli interi. Infatti se j fosse semi-intero, allora m potrebbe assumere valori non interi. Nel caso del momento angolare orbitale porremo $l = j$ e si avrà che m può assumere valori interi tra $-l$ e l .

Restano da determinare le costanti di proporzionalità $C_{\pm}(j, m)$. Per farlo, sfruttiamo la relazione

$$J_+ |j, m\rangle = C_+(j, m) |j, m+1\rangle$$

e ricordando che $J_- = J_+^\dagger$, calcolando la norma quadra del secondo membro si ottiene, avendo supposto di aver normalizzato gli autostati $|j, m\rangle$,

$$\langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle = |C_+(j, m)|^2$$

Ricordando che, per quanto visto, prima si ha

$$\langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m] \langle j, m | j, m \rangle$$

e si ottiene quindi

$$\begin{aligned} |C_+(j, m)|^2 &= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m] \implies \\ \implies |C_+(j, m)| &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \end{aligned}$$

Assumendo, in maniera analoga a quanto fatto nel caso dell'oscillatore armonico, una fase nulla avremo

$$C_+(j, m) = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \quad (14.15)$$

Determiniamo adesso $C_-(j, m)$. Procediamo analogamente a quanto fatto nella determinazione della seconda costante nell'oscillatore armonico. Sfruttiamo la relazione

$$J_- J_+ |j, m\rangle = C_+(j, m) C_-(j, m+1) |j, m\rangle$$

e sviluppiamone il primo membro

$$J_- J_+ |j, m\rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] |j, m\rangle = C_+^2(j, m) |j, m\rangle$$

Affinché i secondi membri delle due precedenti relazioni siano uguali deve essere

$$C_+^2(j, m) = C_+(j, m) C_-(j, m+1) \implies C_-(j, m+1) = C_+(j, m)$$

e quindi

$$C_-(j, m) = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \quad (14.16)$$

14.3.1 Forma di \vec{J} nella base degli autostati simultanei. Introduzione al momento angolare di spin

Sfruttando quanto fatto in precedenza, andiamo a determinare la forma degli operatori J_x e J_y nella base $|j, m\rangle$. Dalla definizione degli operatori J_{\pm} si ricava che

$$J_x = \frac{J_+ + J_-}{2}$$

$$J_y = \frac{J_+ - J_-}{2i}$$

Iniziamo costruendo la forma matriciale dell'operatore J_x . Consideriamo lo stato $|0, 0\rangle$. In tale caso è banale trovare che $\langle 0, 0 | J_x | 0, 0 \rangle = 0$. Passiamo adesso agli autostati con $j = \frac{1}{2}$. In tal caso m può assumere i valori $\pm \frac{1}{2}$. Osservando che in generale dato lo stato $|j, m\rangle$ l'elemento di matrice $\langle j, m | J_x | j, m \rangle$ è banalmente nullo⁽⁵⁾, dobbiamo calcolare solamente gli elementi di matrice della forma

$$\langle j, m' | J_x | j, m \rangle \quad \text{con} \quad m' \neq m$$

Inoltre si ha che

$$\langle j, m | J_x | j', m' \rangle = 0 \quad \text{se} \quad j \neq j'$$

In maniera del tutto generale si ha che

$$\langle j, m | J_x | j', m' \rangle = \frac{1}{2} (\delta_{j,j'} \delta_{m,(m'+1)} C_+(j', m') + \delta_{j,j'} \delta_{m,(m'-1)} C_-(j', m'))$$

$$\langle j, m | J_y | j', m' \rangle = \frac{1}{2i} (\delta_{j,j'} \delta_{m,(m'+1)} C_+(j', m') - \delta_{j,j'} \delta_{m,(m'-1)} C_-(j', m'))$$

Ricordiamo inoltre che, per i postulati della meccanica quantistica, J_x deve essere un operatore hermitiano. Calcoliamo quindi

$$\begin{aligned} \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | J_x | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle &= \frac{1}{2} \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | J_+ | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle + \frac{1}{2} \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | J_- | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | J_- | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{2} C_- \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

Per quanto detto prima si ha che

$$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | J_x | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \frac{\hbar}{2}$$

Determiniamo adesso gli elementi di matrice di J_x per $j = 1$. In tal caso m può assumere i valori $-1, 0, 1$. Calcoliamo quindi

$$\begin{aligned} \langle 1, -1 | J_x | 1, 0 \rangle &= \frac{1}{2} \langle 1, -1 | J_+ | 1, 0 \rangle + \frac{1}{2} \langle 1, -1 | J_- | 1, 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle 1, -1 | J_- | 1, 0 \rangle = \frac{1}{2} C_-(1, 0) = \hbar \frac{\sqrt{2}}{2} \end{aligned}$$

Si ha inoltre che

$$\langle 1, 0 | J_x | 1, -1 \rangle = \hbar \frac{\sqrt{2}}{2}$$

(5) Banale da dimostrare: J_x è combinazione lineare di J_{\pm} . Poiché l'applicazione di tali operatori allo stato $|j, m\rangle$ ci permette di passare agli stati $|j, m \pm 1\rangle$ e ricordando che tali stati formano una base ortonormale, si ha la tesi.

Calcoliamo infine

$$\begin{aligned}\langle 1, 1 | J_x | 1, 0 \rangle &= \frac{1}{2} \langle 1, 1 | J_+ | 1, 0 \rangle + \frac{1}{2} \langle 1, 1 | J_- | 1, 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle 1, 1 | J_+ | 1, 0 \rangle = \frac{1}{2} C_+(1, 0) = \hbar \frac{\sqrt{2}}{2}\end{aligned}$$

Si ha inoltre che

$$\langle 1, 0 | J_x | 1, 1 \rangle = \hbar \frac{\sqrt{2}}{2}$$

L'operatore J_x risulta dunque essere un'operatore diagonale a blocchi e tale che

J_x	$ 0, 0\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ 1, -1\rangle$	$ 1, 0\rangle$	$ 1, 1\rangle$
$\langle 0, 0 $	0	0	0	0	0	0
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} $	0	0	$\frac{\hbar}{2}$	0	0	0
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} $	0	$\frac{\hbar}{2}$	0	0	0	0
$\langle 1, -1 $	0	0	0	0	$\hbar \frac{\sqrt{2}}{2}$	0
$\langle 1, 0 $	0	0	0	$\hbar \frac{\sqrt{2}}{2}$	0	$\hbar \frac{\sqrt{2}}{2}$
$\langle 1, 1 $	0	0	0	0	$\hbar \frac{\sqrt{2}}{2}$	0

Ripetendo le stesse osservazioni si trova che la forma matriciale dell'operatore J_y è la seguente

J_y	$ 0, 0\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ 1, -1\rangle$	$ 1, 0\rangle$	$ 1, 1\rangle$
$\langle 0, 0 $	0	0	0	0	0	0
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} $	0	0	$i\frac{\hbar}{2}$	0	0	0
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} $	0	$-i\frac{\hbar}{2}$	0	0	0	0
$\langle 1, -1 $	0	0	0	0	$i\hbar \frac{\sqrt{2}}{2}$	0
$\langle 1, 0 $	0	0	0	$-i\hbar \frac{\sqrt{2}}{2}$	0	$i\hbar \frac{\sqrt{2}}{2}$
$\langle 1, 1 $	0	0	0	0	$-i\hbar \frac{\sqrt{2}}{2}$	0

Andiamo a considerare più in dettaglio gli elementi di matrice con $j = \frac{1}{2}$ e scriviamo tali sotto-matrici nella seguente forma

J_x	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} $	0	$\frac{\hbar}{2}$
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} $	$\frac{\hbar}{2}$	0

J_y	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} $	0	$-i\frac{\hbar}{2}$
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} $	$i\frac{\hbar}{2}$	0

J_z	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} $	$\frac{\hbar}{2}$	0
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} $	0	$-\frac{\hbar}{2}$

Ricordando che le matrici di Pauli sono

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Possiamo scrivere le sottomatrici J_x , J_y e J_z a dimensione 2 come

$$J_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_1 \quad J_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_2 \quad J_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_3$$

oppure in maniera sintetica

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

Fenomenologicamente osserviamo che questo operatore esiste, però non ammette un analogo classico.

Definizione 14.7 (Momento angolare di spin). Si definisce **momento angolare di spin** l'operatore \vec{S} tale che

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

Dal punto di vista sperimentale si osserva che preso un elettrone e fissati i gradi di libertà che presentano un analogo classico, esso può trovarsi in due stati distinti: preso un campo magnetico diretto come z , la proiezione del momento magnetico dell'elettrone su tale direzione può assumere due valori distinti. Quindi se facessimo incidere un fascio di elettroni su un campo magnetico diretto lungo z , non otterremo una distribuzione di momenti magnetici, ma gli elettroni si dividerebbero in due fasci, uno con proiezione su z del momento magnetico positiva e uno con proiezione su z del momento magnetico negativa entrambe pari in valore assoluto a $\frac{\hbar}{2}$. A differenza del momento angolare orbitale, lo spin è una caratteristica intrinseca della particella. Esso può essere detto momento angolare perché l'osservabile che lo descrive si comporta come un momento angolare. Tuttavia non è un momento angolare dinamico, cioè non può cambiare. Quindi per un elettrone deve essere $j = \frac{1}{2}$ e tale valore resterà costante nel tempo. Tuttavia può variare la sua proiezione sull'asse z . In questa descrizione del momento angolare è quindi contenuta gran parte della teoria di Pauli dello spin.

Sfruttando la teoria fino ad adesso sviluppata, risulta immediato determinare l'azione sugli autostati di J^2 e J_z di operatori che risultano essere combinazione di J_{\pm} . Ad esempio consideriamo gli operatori J_x^2 e J_y^2 . Si ha che questi possono essere scritti come

$$J_x^2 = \left(\frac{J_+ + J_-}{2} \right)^2 = \frac{1}{4}(J_+^2 + J_-^2 + J_+J_- + J_-J_+)$$

$$J_y^2 = \left(\frac{J_+ - J_-}{2i} \right)^2 = \frac{1}{4}(-J_+^2 - J_-^2 + J_+J_- + J_-J_+)$$

Osserviamo che

$$\langle j, m | J_x^2 | j, m \rangle = \frac{1}{4} \langle j, m | J_+J_- + J_-J_+ | j, m \rangle = \langle j, m | J_y^2 | j, m \rangle$$

cioè negli stati $|j, m\rangle$ i valori medi degli operatori J_x^2 e J_y^2 coincidono e sono tali che

$$\begin{aligned}\langle j, m | J_x^2 | j, m \rangle &= \langle j, m | J_y^2 | j, m \rangle = \frac{1}{2} \langle j, m | J_x^2 + J_y^2 | j, m \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle j, m | J^2 - J_z^2 | j, m \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2]\end{aligned}$$

Andiamo a verificare che per la coppia di operatori J_x , J_y valgano le relazioni di indeterminazione. Osserviamo che negli stati $|j, m\rangle$ si ha $\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$ e quindi $\sigma_{J_x}^2 = \langle J_x^2 \rangle$ e $\sigma_{J_y}^2 = \langle J_y^2 \rangle$. Per quanto visto prima, però, si ottiene

$$\sigma_{J_x} \sigma_{J_y} = \sigma_{J_x}^2 = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2]$$

Affinché siano soddisfatte le relazioni di indeterminazione deve essere

$$\sigma_{J_x} \sigma_{J_y} \geq \frac{|\langle [J_x, J_y] \rangle|}{2} = \frac{\hbar^2}{2} |m|$$

e cioè deve essere

$$[j(j+1) - m^2] \geq |m| \implies j(j+1) \geq |m|(|m| + 1)$$

ed essa è soddisfatta se $j \geq |m|$, che è in accordo con i valori che può assumere m . Nel caso in cui tale relazione valesse nella forma $j = |m|$, si ha il valore minimo dell'indeterminazione.

Sia

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

determiniamo S^2 .

$$S^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2)$$

Ricordando che $\sigma_i^2 = \mathbb{1}$ si ha

$$S^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\mathbb{1} + \mathbb{1} + \mathbb{1}) = \frac{3\hbar^2}{4}$$

e quanto trovato è in accordo col fatto che il modulo quadro del momento angolare debba essere $j(j+1)$.

Osserviamo che l'operatore unitario U definito come

$$U = \exp\left(i \frac{\vec{\theta} \cdot \vec{J}}{\hbar}\right)$$

è anch'esso un operatore diagonale a blocchi. Dunque se ci troviamo in uno stato con momento angolare j , a seguito di una rotazione lo stato presenterà ancora lo stesso momento angolare, ma saranno cambiate le sue proiezioni sugli assi.

14.4 Autofunzioni del momento angolare orbitale

Consideriamo il momento angolare orbitale $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$. Come già visto, nella base delle coordinate cartesiane si ottiene un'operatore differenziale. Per esempio la componente L_z si scrive come:

$$\langle \vec{r} | L_z | \psi \rangle = \langle \vec{r} | x P_y - y P_x | \psi \rangle = \left(x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(\vec{r})$$

Risulta però essere più conveniente passare in un sistema di coordinate polari sferiche. Notiamo che l'impulso coniugato dell'angolo azimutale ϕ è la componente L_z del momento angolare orbitale, dunque valgono gli stessi discorsi fatti tra coordinate cartesiane e impulsi. La forma dell'operatore L_z in coordinate polari sferiche è dunque:

$$\langle r, \theta, \varphi | L_z | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \theta, \varphi)$$

Osserviamo inoltre che l'assenza di un termine differenziale rispetto ad r è un aspetto generale che riguarda anche le altre componenti del momento angolare, in base a delle questioni di simmetria. Infatti, se considero $L_y = zP_x - xP_z$, si ottiene la seguente forma nella base delle coordinate cartesiane:

$$\frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Passando in coordinate sferiche, ricordando che $x = x(r, \theta, \varphi)$, si ottiene:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Osservando che $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, è immediato vedere che $\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}$, e analogamente per le altre coordinate. Concentrandosi sui termini differenziali in r , si ottiene:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \dots$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{z}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \dots$$

dove i puntini indicano gli altri termini differenziali. Allora nell'espressione esplicita di L_y in coordinate sferiche, i termini differenziali in r si semplificano:

$$z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} = \frac{zx}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{xz}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \dots$$

Andiamo adesso a considerare il problema agli autovalori di L^2 e L_z . Avendo già determinato algebricamente gli autovalori, possiamo determinare le autofunzioni in coordinate sferiche.

$$\begin{cases} L^2 \psi(r, \theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) \psi(r, \theta, \varphi) \\ L_z \psi(r, \theta, \varphi) = \hbar m \psi(r, \theta, \varphi) \end{cases}$$

Per quanto abbiamo detto prima sulle simmetrie, le autofunzioni possono essere scritte nella forma:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$$

Dunque, a meno di fattori moltiplicativi radiali, le autofunzioni simultanee di L^2 e L_z possono essere viste come funzioni esclusivamente angolari.

$$\begin{cases} L^2 Y(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y(\theta, \varphi) \\ L_z Y(\theta, \varphi) = \hbar m Y(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (14.17)$$

Osserviamo che la determinazione delle autofunzioni di L_z in coordinate sferiche è analogo a quanto già svolto in 2 dimensioni, utilizzando la sola coordinata lagrangiana φ , per cui possiamo scrivere:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi = \hbar m \psi$$

che restituisce

$$\psi = e^{im\varphi}$$

Dunque, una volta esplicitata la dipendenza da φ , possiamo scrivere

$$Y(\theta, \varphi) = \Phi(\theta) e^{im\varphi}$$

dove Φ è una funzione del solo angolo zenitale.

Esprimiamo adesso l'operatore L^2 in coordinate sferiche. Ricordiamo che:

$$L^2 = -\hbar^2 \Delta(\theta, \varphi)$$

dove

$$\Delta(\theta, \varphi) = \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (14.18)$$

In questo modo il sistema del problema agli autovalori diventa:

$$\begin{cases} -\hbar^2 \Delta(\theta, \varphi) Y(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y(\theta, \varphi) \\ L_z Y(\theta, \varphi) = \hbar m Y(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (14.19)$$

Le soluzioni del problema sono del tipo $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ e vengono chiamate *armoniche sferiche*.

Andiamo a determinare le soluzioni nuovamente in maniera algebrica, ovvero adoperando gli operatori di scala L_{\pm} . Se si considera l'autostato simultaneo $|l, m\rangle$, in coordinate sferiche si ha:

$$\langle \theta, \varphi | l, m \rangle = Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Ricordando che $m = l$ è il massimo valore che può essere assunto da m , applicando L_+ all'autostato $|l, l\rangle$ si ottiene:

$$L_+ |l, l\rangle = 0$$

dunque mettendoci nella base delle coordinate sferiche si ottiene:

$$\langle \theta, \varphi | L_+ |l, l\rangle = \langle \theta, \varphi | L_x + iL_y |l, l\rangle = 0$$

e una volta ottenuta la forma in coordinate sferiche di L_x ed L_y , si otterrà un'equazione differenziale del primo ordine, più semplice da risolvere rispetto all'equazione del secondo ordine che compare per gli autovalori di L^2 . Si può dimostrare che:

$$\begin{cases} L_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \left(\frac{\sin \varphi \cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{cases}$$

dunque gli operatori di scala diventano:

$$L_{\pm} = i\hbar e^{\pm i\varphi} \left(\cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \mp i \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

L'equazione, essendo $(\langle \theta, \varphi | l, l \rangle = Y_{l,l}(\theta, \varphi) = e^{il\varphi} \Phi(\theta))$ diventa allora:

$$e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{il\varphi} \Phi(\theta) = 0$$

$$e^{i(l+1)\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta (il) \right] \Phi(\theta) = 0$$

Si ottiene dunque un'equazione differenziale del primo ordine per $\Phi(\theta)$:

$$\Phi(\theta)' = l \cot \theta \Phi(\theta)$$

integrando l'equazione si ottiene:

$$\log \Phi(\theta) = l \log \sin \theta + k$$

da cui:

$$\Phi(\theta) = c \sin^l \theta$$

In definitiva, abbiamo determinato a meno di costanti moltiplicative, l'autofunzione angolare per lo stato massimo:

$$Y_{l,l}(\theta, \varphi) = \sin^l \theta e^{il\varphi}$$

Il metodo utilizzato ci permette di determinare le autofunzioni per ogni m , una volta fissato l . Infatti, a partire dallo stato massimo, possiamo ottenere gli altri stati applicando l'operatore di abbassamento L_- . Trascurando il coefficiente moltiplicativo, si ha:

$$e^{-i\varphi} \left[e^{il\varphi} l (\sin \theta)^{l-1} \cos \theta + l e^{il\varphi} \cot \theta (\sin \theta)^l \right] = 2l e^{i(l-1)\varphi} \left[(\sin \theta)^{l-1} \cos \theta \right]$$

Dunque, sempre a meno di fattori moltiplicativi, per $m = l - 1$ si ottiene l'armonica sferica

$$Y_{l,l-1}(\theta, \varphi) = e^{i(l-1)\varphi} (\sin \theta)^{l-1} \cos \theta$$

Iterando il procedimento, si ottiene la forma compatta delle armoniche sferiche, ovvero:

$$Y_{l,m} = P_l^{|m|}(\theta) e^{im\varphi} \quad (14.20)$$

dove $P_l^{|m|}$ sono le funzioni associate di Legendre, definite come:

$$P_l^{|m|}(\theta) = (\sin \theta)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{d \cos \theta^{|m|}} P_l(\cos \theta)$$

e $P_l(\cos \theta)$ sono i polinomi di Legendre, cioè:

$$P_l(x) = \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

14.4.1 Proprietà sulla normalizzazione

Si consideri adesso lo spazio delle funzioni esclusivamente angolari; le armoniche sferiche costituiscono un set completo di tale spazio. Infatti esse sono le autofunzioni di un operatore autoaggiunto, dunque costituiscono una base ortogonale, chiaramente normalizzabile. Allora $\forall \Phi(\theta, \varphi)$ si ha:

$$\Phi(\theta, \varphi) = \sum_{l,m} c_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sum_{l,m} c_{l,m} \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$$

e per la completezza:

$$\sum_{l,m} |l, m\rangle \langle l, m| = \mathbb{I} \quad (14.21)$$

Dunque, $\forall |\psi\rangle$ si ha:

$$\langle \theta, \varphi | \psi \rangle = \sum_{l,m} \langle \theta, \varphi | l, m \rangle \langle l, m | \psi \rangle$$

dove $\langle l, m | \psi \rangle = c_{l,m}$.

Nella pratica, la condizione di normalizzazione si scrive come:

$$\int Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) Y_{l',m'}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

dove l'integrazione viene fatta sull'angolo solido tale che

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d\cos\theta = 4\pi$$

Quando bisogna normalizzare le autofunzioni di L^2 ed L_z , tenendo conto anche della parte radiale, ovvero le funzioni $\psi_{l,m}(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, occorre osservare che le armoniche sferiche sono normalizzate per conto proprio in base a quanto appena visto, dunque bisognerà anche imporre che

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1$$

Il fatto che queste funzioni siano un set completo (14.21), implica che il prodotto $\langle \theta, \varphi | \theta', \varphi' \rangle$ sarà una δ di Dirac sotto l'integrale sull'angolo solido, cioè

$$\int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

e si scriverà la seguente relazione per i vettori della base angolare:

$$\langle \theta, \varphi | \theta', \varphi' \rangle = \delta(\cos\theta - \cos\theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (14.22)$$

Un'ulteriore proprietà delle armoniche sferiche è esplicitata dalla seguente identità:

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 = \text{cost} = \frac{2l+1}{4\pi} \quad (14.23)$$

Cioè la somma su tutti gli m dei moduli quadri delle armoniche sferiche, quindi le densità di probabilità, una volta fissato l , è una costante rispetto agli angoli, ovvero una costante a simmetria sferica⁽⁶⁾.

Il valore della costante viene determinato come segue: sia c la costante,

$$4\pi c = \int c d\Omega = \sum_{m=-l}^l \int |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 2l+1$$

da cui si ottiene il valore della costante.

(6) Questa proprietà equivale a dire che se in un atomo tutti i livelli in un guscio sono riempiti, alla fine la distribuzione di carica è a simmetria sferica

14.4.2 Alcune armoniche sferiche: Stati S e P

Definizione 14.8 (Stati S). Si definiscono **stati S** quelli tali che il momento angolare è nullo, per cui $l = 0$ e l'unico valore che può assumere m è $m = 0$. Le armoniche sferiche per $l = 0$ sono:

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \text{cost}$$

Si osservi che fissato l , si ha un sottospazio di dimensione $2l + 1$, in cui vi sono gli stati con i possibili valori della componente L_z , e quindi in questo caso si ha un solo stato S possibile. La simmetria sferica dell'armonica è dunque ovvia, in quanto per qualunque rotazione generata da L_x, L_y, L_z nel sottospazio invariante⁽⁷⁾ lo stato non cambia una volta fissato il momento angolare, in questo caso nullo.

(7) con invariante si intende che adoperando una rotazione non si uscirà da questo sottospazio

Definizione 14.9 (Stati P). Si definiscono **stati P** quelli tali che $l = 1$ ed $m = 0, \pm 1$. Le armoniche sferiche per $l = 1$ sono, a meno di costanti di normalizzazione:

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \cos \theta$$

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

Andiamo adesso a normalizzare queste armoniche sferiche. Nel caso dello stato S si ha:

$$\int |Y_{0,0}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = \text{cost} \int d\Omega = \text{cost} 4\pi$$

dunque la funzione normalizzata sarà:

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Nel caso degli stati P si ha:

- $l = 1, m = 0$:

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = N \cos \theta$$

con N costante di normalizzazione.

$$\begin{aligned} N^2 \int_{-1}^1 d\cos \theta \int_0^{2\pi} \cos^2 \theta d\varphi &= 2\pi N^2 \int_{-1}^1 \cos^2 \theta d\cos \theta = \\ &= 2\pi N^2 \left[\frac{\cos^3 \theta}{3} \right]_{-1}^1 = \frac{4}{3} \pi N^2 = 1 \iff N = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \end{aligned}$$

dunque

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

- $l = 1, m = \pm 1$: con calcoli analoghi si ricava l'autofunzione normalizzata

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

dove il segno \mp è stato inserito per avere consistenza con la definizione della costante $C_{\pm}(l, m)$, nata dall'applicazione degli operatori di scala.

Andiamo adesso a esprimere le armoniche sferiche ricavate utilizzando le coordinate cartesiane. Nel caso dello stato P con $m = 0$, si ha, a meno del fattore di normalizzazione:

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \cos \theta = \frac{z}{r}$$

in quanto $z = r \cos \theta$ nel passaggio da coordinate cartesiane a sferiche. Risulta dunque evidente che, fissato un sistema di assi cartesiani, tale funzione ha valore massimo lungo l'asse z , e si annulla sul piano xy , per poi cambiare di segno lungo semiasse z negativo. Graficamente si ottiene quello che viene chiamato "diagramma polare", che per armoniche di questo tipo non è altro che la tipica forma degli orbitali P. Nel caso invece $m = \pm 1$, sempre a meno della costante di normalizzazione si ha:

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sin \theta e^{\pm i\varphi} = (\cos \varphi \pm \sin \varphi) \sin \theta = \frac{x \pm iy}{r}$$

Si osservi che nella combinazione lineare, positiva o negativa, di $Y_{1,1}$ e $Y_{1,-1}$, si ottiene rispettivamente, a meno di fattori, x e y in unità di r . Dunque scegliendo opportune combinazioni lineari delle armoniche sferiche nel diagramma polare si ottiene una figura a lobi analoga al caso precedente, ma diretta lungo gli assi x e y . Bisogna però evidenziare il fatto che graficamente il lobo lungo l'asse z rappresenta un'autofunzione simultanea, mentre gli altri lobi rappresentano combinazioni lineari di autofunzioni, e quindi non sono autostati di L_z , ma soltanto di L^2 .

Andando ad inserire le costanti di normalizzazione già ricavate otteniamo:

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x \pm iy) \frac{1}{r}$$

da cui:

$$\mp \sqrt{\frac{8\pi}{3}} r Y_{1,\pm 1} = x \pm iy$$

e isolando x e y si ottiene:

$$\begin{cases} 2x = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}} r (Y_{1,+1} - Y_{1,-1}) \\ 2y = i\sqrt{\frac{8\pi}{3}} r (Y_{1,+1} + Y_{1,-1}) \end{cases}$$

Problemi a invarianza rotazionale

Consideriamo un'hamiltoniana della forma

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$$

Se il momento angolare orbitale si conserva, cioè se

$$[H, L_i] = 0$$

allora l'hamiltoniana è invariante per rotazioni e quindi il potenziale $V(\vec{R})$ è una funzione solamente del modulo del vettore posizione. Il più ampio set di osservabili che ammette una base comune di autostati è quindi formato da H , L^2 e L_z e il problema agli autovalori si riduce a

$$\begin{cases} H |n, l, m\rangle = E_n |n, l, m\rangle \\ \vec{L}^2 |n, l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |n, l, m\rangle \\ L_z |n, l, m\rangle = \hbar m |n, l, m\rangle \end{cases}$$

Abbiamo già visto che, poiché $[L^2, L_i] = 0$, gli autospazi di L_i sono invarianti per azione di L^2 . Allo stesso modo si ha che gli autospazi di L_i sono invarianti per azione di H . Cioè se diagonalizzo l'hamiltoniana, trovo dei sottospazi di dimensione $2l+1$ in cui l'energia è uguale, cioè vi è una degenerazione sull'energia. Diremo che un set di n osservabili è completo se ciascuno stato è determinato univocamente da n autovalori, cioè se due stati presentano gli stessi autovalori $\alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}$ allora devono essere associati a valori distinti dell'autovalore α_n ⁽¹⁾. Come faccio a capire che il set di osservabili è completo? Se il set non fosse completo, allora esisterebbero due stati distinti associati agli stessi autovalori. Ciò implica la presenza di un'ulteriore osservabile che distingue tali stati e che commuta con le altre osservabili del set.

15.1 Particella con momento angolare in un campo magnetico uniforme	219
15.2 Rotatore rigido 3D	221
15.3 Problemi a simmetria centrale	222
15.4 Precessione del momento angolare	225
15.5 Oscillatore armonico 2D	227
15.6 Oscillatore armonico 3D	232
15.7 Buca di potenziale infinita 3D	232
15.8 Buca di potenziale finita 3D	233

⁽¹⁾ Scritto con i piedi. Va sistemato

15.1 Particella con momento angolare in un campo magnetico uniforme

Andiamo a studiare una particella avente un momento angolare \vec{L} che si muove in un campo magnetico uniforme \vec{B} diretto lungo l'asse z . Costruiamo l'hamiltoniana del sistema. Introduciamo un potenziale vettore \vec{A} tale che $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$; possiamo scrivere

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} = \left(-\frac{By}{2}, \frac{Bx}{2}, 0 \right)$$

Possiamo quindi scrivere l'hamiltoniana di un tale sistema come

$$H = \frac{1}{2M} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi =$$

$$= \frac{\vec{P}^2}{2M} - \frac{e}{2Mc} \left(\vec{P} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P} \right) + \frac{e^2}{2Mc^2} \vec{A}^2 + e\phi$$

In generale $[\vec{P}, \vec{A}] \neq 0$, però nella gauge di Landau, in cui $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, si ha che

$$[\vec{P}, \vec{A}] = \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \vec{A} = 0$$

Nel caso in esame, ci troviamo proprio nella gauge di Landau, dunque possiamo riscrivere l'hamiltoniana come

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} - \frac{e}{Mc} \vec{P} \cdot \vec{A} + \frac{e^2}{2Mc^2} \vec{A}^2 + e\phi$$

Osserviamo che il contributo del termine

$$\frac{e^2}{2Mc^2} \vec{A}^2$$

(2) Questo termine dà luogo ad effetti diamagnetici.

(3) Da qui in avanti trascureremo anche il termine $e\phi$ in quanto trovandoci nella gauge di radiazione pura $\phi = 0$

è trascurabile rispetto ai restanti contributi^{(2),(3)}. Sviluppiamo adesso il prodotto scalare

$$\vec{P} \cdot \vec{A} = \vec{P} \cdot \left(\frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{R} \right) = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{R}) \cdot \vec{P} = \frac{1}{2} (\vec{R} \times \vec{P}) \cdot \vec{B}$$

Ricordando che $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$, possiamo scrivere

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} - \frac{e}{2Mc} \vec{L} \cdot \vec{B}$$

Posto

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2Mc} \vec{L}$$

si ha che

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

La quantità $\vec{\mu}$ è il momento magnetico della particella ed essa risulta essere proporzionale al suo momento angolare orbitale. L'inserimento di un campo magnetico ha rotto la simmetria rotazionale e l'energia viene a dipendere da tutti e tre i numeri quantici. Nel caso in esame, essendo \vec{B} diretto lungo l'asse z , si può riscrivere l'hamiltoniana come

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} - \frac{e}{2Mc} L_z B$$

e gli autovalori E_n che si avrebbero in assenza di campo magnetico diventano

$$E_n - \frac{e\hbar}{2Mc} mB$$

essendo m l'autovalore associato ad L_z . Viene quindi a mancare la degenerazione che si aveva nel caso in cui non fosse presente un campo magnetico. Chiameremo *magnetone di Bohr* la quantità

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2Mc}$$

Cosa succede se ruotiamo l'asse z del riferimento di un certo angolo $-\theta$ nel piano $y-z$? Consideriamo un sistema con momento angolare orbitale $l = 1$; ci troviamo, dunque, in uno stato della forma $|1, m\rangle$. L'operazione che stiamo facendo è equivalente a tenere fermo il riferimento e ruotare gli stati di un angolo θ . Lo stato ruotato $|\psi_\theta\rangle$ sarà dato da

$$|\psi_\theta\rangle = U(\theta) |1, m\rangle$$

Andiamo a determinare l'operatore $U(\theta)$. Facciamo un esempio fisico. Consideriamo un fascio di particelle di momento angolare orbitale $l = 1$; se esso attraversa un campo magnetico diretto lungo z verrà diviso in tre fasci, ciascuno avente proiezione del momento angolare sull'asse z univocamente determinata. Focalizziamo la nostra attenzione sul fascio avente proiezione del momento angolare su z pari a 1. Se misurassimo tale proiezione, otterremmo un valore $m = 1$ in quanto ci troviamo già in un autostato dell'operatore L_z . Cosa succede, però, se ruotiamo l'asse z del riferimento di un certo angolo θ ? In tal caso lo stato che avevamo non si trova più in un autostato dell'operatore L_z . Partendo dallo stato $|1, 1\rangle$ nel riferimento originario, qual è la probabilità associata a ciascuno degli autovalori di L_z nel nuovo riferimento? L'operatore $U(\theta)$ che cerchiamo è definito come

$$U(\theta) = \exp\left(i \frac{\theta L_x}{\hbar}\right)$$

Ricordando la forma di L_x si trova che

$$U(\theta) = \begin{pmatrix} \frac{1+\cos(\theta)}{2} & \frac{i \sin(\theta)}{\sqrt{2}} & \frac{\cos(\theta)-1}{2} \\ \frac{i \sin(\theta)}{\sqrt{2}} & \cos(\theta) & \frac{i \sin(\theta)}{\sqrt{2}} \\ \frac{\cos(\theta)-1}{2} & \frac{i \sin(\theta)}{\sqrt{2}} & \frac{1+\cos(\theta)}{2} \end{pmatrix}$$

Quindi se inizialmente il sistema si trova nello stato $|1, 1\rangle = (0, 0, 1)^T$, a seguito della rotazione si troverà nello stato

$$|\psi_\theta\rangle = U(\theta) |1, 1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{\cos(\theta)-1}{2} \\ \frac{i \sin(\theta)}{\sqrt{2}} \\ \frac{1+\cos(\theta)}{2} \end{pmatrix}$$

Gli autovalori di L_z non sono più equiprobabili, ma presentano probabilità pari a

$$\begin{aligned} P_{m=-1} &= \left(\frac{\cos(\theta)-1}{2}\right)^2 \\ P_{m=0} &= \frac{1}{2} \sin^2(\theta) \\ P_{m=1} &= \left(\frac{1+\cos(\theta)}{2}\right)^2 \end{aligned}$$

Un procedimento simile venne seguito da Stern e Gerlach per misurare il momento angolare di spin di un elettrone.

15.2 Rotatore rigido 3D

Consideriamo un rotatore rigido 3D. L'hamiltoniana di un tale sistema è data da

$$H = \frac{\vec{L}^2}{2I}$$

dove I è il momento di inerzia del rotatore. Le energie saranno date da

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}$$

Rispetto al caso bidimensionale cambia poco: invece di m^2 si ha $l(l+1)$, però abbiamo comunque una quantizzazione dei livelli energetici e dunque dei livelli rotazionali. Una molecola può oscillare attorno allo stato di equilibrio, assumendo le energie dell'oscillatore armonico, e avere moti traslazionali e rotazionali. Tutti questi termini contribuiscono al calore specifico della molecola. In generale i livelli rotazionali sono molto più piccoli di quelli traslazionali, circa due ordini di grandezza. A temperatura ambiente si ha quindi un'alta popolazione dei livelli rotazionali, mentre quelli vibrazionali possono essere assunti allo stato fondamentale⁽⁴⁾.

⁽⁴⁾ *Fun fact*: quando si mette qualcosa nel forno a microonde si fanno ruotare le molecole.

15.3 Problemi a simmetria centrale

Consideriamo un problema a simmetria centrale, per cui l'hamiltoniana si possa scrivere come

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r) \quad (15.1)$$

dove $V(r)$ è una funzione di $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Come abbiamo già visto, tale hamiltoniana commuta con L^2 e L_i , dunque possiamo risolvere il problema agli autovalori di H , L^2 e L_z . Osserviamo che, in maniera analoga a quanto fatto classicamente, possiamo dividere l'energia cinetica in una componente radiale e una componente angolare. Infatti consideriamo l'equazione agli autovalori dell'hamiltoniana e proiettiamola sulla base della posizione. In tal modo otteniamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(r) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (15.2)$$

con $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Passando in coordinate sferiche si ha che

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta(\theta, \varphi) \quad (15.3)$$

essendo $\Delta(\theta, \varphi)$ l'operatore definito in Eq.(14.18). In questo modo l'equazione agli autovalori per l'hamiltoniana diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \Delta(\theta, \varphi) \psi + V(r) \psi = E \psi \quad (15.4)$$

Ricordando che $L^2 = -\hbar^2 \Delta(\theta, \varphi)$, possiamo scrivere l'equazione precedente come

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2mr^2} \psi + V(r) \psi = E \psi \quad (15.5)$$

Dunque abbiamo diviso l'energia cinetica in un termine radiale (il primo addendo) e in un termine angolare (il secondo addendo). In virtù di ciò, possiamo scrivere la funzione d'onda come il prodotto di una parte radiale e di una parte angolare, e poiché la parte angolare deve essere autofunzione di L^2 e L_z , possiamo scrivere

$$\psi(\vec{r}) = R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (15.6)$$

Con questa posizione si ha

$$-Y_{l,m} \frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R}{2mr^2} L^2 Y_{l,m} + V(r) R(r) Y_{l,m} = E R(r) Y_{l,m} \quad (15.7)$$

e ricordando che $L^2 Y_{l,m} = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}$ si ottiene

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R = ER \quad (15.8)$$

Notiamo che al potenziale si aggiunge un termine centrifugo ⁽⁵⁾, presente solo se il momento angolare è non nullo. L'energia sarà quindi quantizzata e andrà a dipendere da due numeri quantici: n e l . Inoltre essa non dipenderà da m , dunque fissati i valori di n e l vi sono $2l+1$ stati degeneri, ovvero con la stessa energia ma differente m . Possiamo semplificare ulteriormente il problema ponendo

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$$

Quali condizioni dobbiamo imporre a $\chi(r)$? Poiché $R(r)$ deve essere una funzione continua che si annulli all'infinito abbastanza rapidamente da rendere finito l'integrale

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr \quad (15.9)$$

allora $\chi(r)$ deve essere una funzione continua e deve annullarsi per $r \rightarrow 0$ almeno linearmente e inoltre deve essere finito l'integrale

$$\int_0^\infty |\chi(r)|^2 dr \quad (15.10)$$

Andiamo a vedere quale equazione deve soddisfare la $\chi(r)$. Osserviamo che

$$r^2 \frac{\partial R}{\partial r} = r \frac{\partial \chi}{\partial r} - \chi \quad \implies \quad \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) = \frac{\partial \chi}{\partial r} + r \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} - \frac{\partial \chi}{\partial r} = r \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2}$$

e quindi sostituendo nella Eq.(15.8) si ottiene

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] \frac{\chi}{r} = E \frac{\chi}{r}$$

da cui

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] \chi = E \chi$$

Ci siamo ricondotti a una forma simile all'equazione di Schrödinger unidimensionale, eccetto che per le seguenti differenze:

- la variabile r varia da 0 a $+\infty$, e non in $]-\infty, +\infty[$;
- in aggiunta al potenziale $V(r)$ è presente la barriera centrifuga;
- le condizioni a contorno saranno diverse.

⁽⁵⁾ il termine aggiuntivo è sicuramente positivo, quindi centrifugo. Come si può notare dalla sua dipendenza da r , il contributo in questione allontana la particella dall'origine, essendo divergente in intorni di essa.

La forma funzionale di χ dipende strettamente dal potenziale presente nel sistema. Possiamo però fare già delle considerazioni preliminari sulla χ . Intanto, affinché si abbiano stati legati, il potenziale in considerazione deve essere attrattivo. La funzione χ deve annullarsi almeno linearmente per $r \rightarrow 0$, quindi in un intorno di 0 si può scrivere

$$\chi(r) = r^n + \mathcal{O}(r^{n+1}) \quad (15.11)$$

con $n \geq 1$. Inoltre supponendo che il potenziale vada come $1/r^n$ con $n < 2$ (cioè $V(r) \ll 1/r^2$), allora esso sarà trascurabile rispetto al termine centrifugo e in un intorno di $r = 0$ l'equazione Eq.(15.8) diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \chi = 0$$

Sfruttando la condizione Eq.(15.11) si ottiene

$$-n(n-1)r^{n-2} + l(l+1)r^{n-2} = 0$$

da cui risolvendo per n si ottiene ⁽⁶⁾

$$n = l + 1$$

Dunque in un intorno di $r = 0$ la χ si comporta come

$$\chi(r) = r^{l+1} + \mathcal{O}(r^{l+2}) \quad (15.12)$$

e la funzione d'onda radiale si comporta come

$$R(r) = \frac{r^{l+1}}{r} + \mathcal{O}(r^{l+1}) = r^l + \mathcal{O}(r^{l+1}) \quad (15.13)$$

Osserviamo che se $l = 0$, la parte radiale della funzione d'onda non si annulla per $r \rightarrow 0$, mentre se $l \neq 0$ essa si annulla per $r \rightarrow 0$. Quantisticamente ciò significa che quando la particella non ha momento angolare, la probabilità di trovarla per $r = 0$ è non nulla, mentre quando la particella ha momento angolare tale probabilità sarà nulla. Tale aspetto è in perfetto accordo con quanto avevamo preannunciato riguardo la presenza di una barriera centrifuga, il cui comportamento è simile a quello di una barriera di potenziale a pareti infinite visto il carattere divergente. Tutto ciò trova un riscontro fenomenologico nella cattura $K^{(7)}$. In tale fenomeno si ha che un elettrone collassa sul nucleo e, annichilendosi con un protone, dà origine a un neutrone e a un neutrino.

$$e^- + p^+ \rightarrow n^0 + \nu_e$$

Facciamo adesso delle osservazioni sulla simmetria delle autofunzioni di tale problema. Se $V(r)$ presenta simmetria centrale, allora l'hamiltoniana commuta con l'operatore parità, dunque la simmetria delle autofunzioni è ben definita. Osserviamo che la parte radiale è certamente simmetrica per inversione degli assi, dunque possiamo concentrarci esclusivamente sulla parte angolare. A seguito di un'inversione degli assi si ha che

$$\begin{aligned} \theta &\rightarrow \pi - \theta \\ \varphi &\rightarrow \pi + \varphi \\ \cos \theta &\rightarrow -\cos \theta \\ \sin \theta &\rightarrow \sin \theta \\ e^{im\varphi} &\rightarrow (-1)^m e^{im\varphi} \end{aligned}$$

⁽⁶⁾ l'altra soluzione dell'equazione di secondo grado che viene fuori è $n = -l$, ma essa non è accettabile in quanto $\chi \sim r^{-l}$ non rispetta la condizione di annullarsi all'origine

⁽⁷⁾ Con K si intende la shell più bassa in energia, cioè quelli che chiamiamo stati s .

Ricordiamo che i polinomi di Legendre presentano la stessa parità di l , dunque, per la loro definizione, le funzioni associate di Legendre presentano la stessa parità di $l - |m|$. A seguito di un'inversione degli assi le armoniche sferiche si possono scrivere come

$$\begin{aligned} Y_{l,m}(\pi - \theta, \pi + \varphi) &= (\sin \theta)^{|m|} (-1)^{l-|m|} \frac{d^{|m|}}{d(\cos \theta)^{|m|}} P_l(\cos \theta) (-1)^m e^{im\varphi} = \\ &= (-1)^l Y_{l,m}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (15.14)$$

cioè la parità della funzione d'onda dipende solamente da l .

15.4 Precessione del momento angolare

Consideriamo un rotatore rigido⁽⁸⁾ avente momento di inerzia I e momento magnetico $\vec{\mu} = -g\vec{L}$, dove g è il fattore giromagnetico. In presenza di un campo magnetico esterno \vec{B} , l'hamiltoniana del sistema sarà data da

$$H = \frac{L^2}{2I} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Supponendo che il campo magnetico sia diretto lungo l'asse z ⁽⁹⁾ possiamo riscrivere l'hamiltoniana nella forma

$$H = \frac{L^2}{2I} + gBL_z$$

Studiamo la dinamica dei valori medi delle componenti del momento angolare. Sappiamo che per un tale sistema classico vale l'equazione del moto

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

che per componenti, con le assunzioni fin qui fatte, si scrive come

$$\begin{aligned} \frac{dl_x}{dt} &= \mu_y B = -gBl_y \\ \frac{dl_y}{dt} &= -\mu_x B = gBl_x \\ \frac{dl_z}{dt} &= 0 \end{aligned}$$

Osserviamo fin da subito che l_z è una costante del moto. Per risolvere il sistema possiamo disaccoppiarlo calcolando la derivata di ambo i membri delle prime due equazioni ottenendo, a seguito di una sostituzione e ponendo $\omega = gB$,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 l_x}{dt^2} &= -gB \frac{dl_y}{dt} = -g^2 B^2 l_x = -\omega^2 l_x \\ \frac{d^2 l_y}{dt^2} &= gB \frac{dl_x}{dt} = -g^2 B^2 l_y = -\omega^2 l_y \end{aligned}$$

Passiamo adesso al caso quantistico. In tale caso si ha che, poiché l'hamiltoniana H commuta con L^2 e L_z ⁽¹⁰⁾, la soluzione del suo problema agli autovalori è costituita dalle armoniche sferiche $Y_{l,m}$ e l'energia può assumere i valori

$$E_{l,m} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} + \omega \hbar m$$

(8) Con rotatore rigido qui si intende un sistema non avente gradi di libertà radiali.

(9) Ciò equivale a scegliere un sistema di riferimento avente asse z diretto come il campo

(10) Nota che il sistema in questo caso è invariante solo per rotazioni attorno all'asse z , in quanto $[H, L_x]$ e $[H, L_y]$ sono non nulli.

Prima di calcolare esplicitamente la variazione temporale delle osservabili L_x , L_y e L_z , facciamo alcune osservazioni di carattere generale sul problema in esame. Si ha infatti che $\langle L_x \rangle$ e $\langle L_y \rangle$ sono in generale funzioni del tempo; tuttavia, se lo stato coincide con un autostato del momento angolare, allora $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$.

Andiamo adesso a calcolare l'evoluzione temporale delle componenti del momento angolare sfruttando la rappresentazione di Heisenberg⁽¹¹⁾

(11) Per evitare una notazione troppo pesante non inseriamo i pedici H nei calcoli che seguono. Si ricordi, però, che ciascun operatore è nella rappresentazione di Heisenberg, altrimenti non potremmo determinarne l'evoluzione temporale

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{L}_x &= [L_x, H] = [L_x, \frac{L^2}{2I} + \omega L_z] = \omega[L_x, L_z] = -\omega i\hbar L_y \\ i\hbar\dot{L}_y &= [L_y, H] = [L_y, \frac{L^2}{2I} + \omega L_z] = \omega i\hbar L_x \\ i\hbar\dot{L}_z &= [L_z, H] = 0 \end{aligned}$$

cioè

$$\begin{aligned} \dot{L}_x &= -\omega L_y \\ \dot{L}_y &= \omega L_x \\ \dot{L}_z &= 0 \end{aligned}$$

Passando ai valori medi e ricordando che $\langle dA/dt \rangle = d\langle A \rangle/dt$ si ottiene

$$\begin{cases} \frac{d\langle L_x \rangle}{dt} = -\omega \langle L_y \rangle \\ \frac{d\langle L_y \rangle}{dt} = \omega \langle L_x \rangle \\ \frac{d\langle L_z \rangle}{dt} = 0 \end{cases}$$

cioè si ottengono le stesse equazioni classiche. Risolviamo tali equazioni sfruttando lo stesso artificio usato in meccanica classica per disaccoppiarle, ottenendo dunque il sistema di equazioni differenziali

$$\begin{aligned} \frac{d^2\langle L_x \rangle}{dt^2} &= -\omega^2 \langle L_x \rangle \\ \frac{d^2\langle L_y \rangle}{dt^2} &= -\omega^2 \langle L_y \rangle \end{aligned}$$

che ammette come soluzioni

$$\begin{aligned} \langle L_x \rangle(t) &= A \cos(\omega t + \varphi) \\ \langle L_y \rangle(t) &= A' \cos(\omega t + \varphi') \end{aligned}$$

In realtà, però, le costanti A e A' e φ e φ' non sono indipendenti; poiché le equazioni disaccoppiate che abbiamo determinato provengono da un set di equazioni differenziali accoppiate, trovata una delle due funzioni incognite, ad esempio $\langle L_x \rangle$, si trova l'altra sostituendo la soluzione già calcolata nell'equazione che contiene la funzione incognita non derivata:

$$\langle L_y \rangle = -\frac{1}{\omega} \frac{d\langle L_x \rangle}{dt} = A \sin(\omega t + \varphi)$$

In definitiva, le soluzioni per l'evoluzione temporale dei valori medi di L_x e L_y sono date da

$$\begin{aligned} \langle L_x \rangle(t) &= A \cos(\omega t + \varphi) \\ \langle L_y \rangle(t) &= A \sin(\omega t + \varphi) \\ \langle L_z \rangle(t) &= cost \end{aligned}$$

dunque le costanti di ampiezza e sfasamento sono uguali sia per $\langle L_x \rangle$ che per $\langle L_y \rangle$. Esse dipendono dal particolare stato; infatti, noto lo stato a un tempo fissato, ad esempio $|\psi(0)\rangle$, è possibile calcolare $\langle L_x \rangle(0)$ e $\langle L_y \rangle(0)$ e quindi determinare le costanti A e φ .

15.5 Oscillatore armonico 2D

Consideriamo un sistema bidimensionale descritto dall'hamiltoniana

$$H = \frac{P_x^2}{2\mu} + \frac{P_y^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2(X^2 + Y^2)$$

e risolviamo la sua equazione agli autovalori. Osserviamo che l'hamiltoniana può essere scritta nella forma

$$H = H_x + H_y$$

dove H_x e H_y sono le hamiltoniane di due oscillatori armonici unidimensionali aventi frequenza ω , di cui conosciamo i rispettivi autostati, $|n_x\rangle$ e $|n_y\rangle$ e i relativi autovalori, $E_{n_x} = (n_x + 1/2)\hbar\omega$ ed $E_{n_y} = (n_y + 1/2)\hbar\omega$. Gli autostati dell'hamiltoniana H possono quindi essere scelti nella forma⁽¹²⁾

$$|n_x, n_y\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle$$

e la corrispondente energia è

$$E_{n_x, n_y} = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega$$

Posto $n = n_x + n_y$ possiamo riscrivere le energie come

$$E_n = (n + 1)\hbar\omega$$

A ciascun valore di energia corrispondono differenti autovettori ortogonali:

$$|n_x = n, n_y = 0\rangle, |n_x = n - 1, n_y = 1\rangle, \dots, |n_x = 0, n_y = n\rangle$$

Poiché sono presenti $n + 1$ stati, l'autovalore E_n presenta una degenerazione $n + 1$. Deve quindi essere presente un'ulteriore osservabile che commuti con l'hamiltoniana e che formi insieme ad essa un set completo di osservabili.

Osserviamo che il problema è invariante per rotazioni attorno all'asse z , dunque dovrà essere

$$[H, L_z] = 0$$

Tuttavia, gli autostati dell'hamiltoniana $|n_x, n_y\rangle$ non sono contemporaneamente autostati di L_z . Dobbiamo quindi cercare una nuova base di autostati di H che siano anche autostati di L_z . Possiamo procedere in modi differenti:

- Fissato n , scrivere la funzione d'onda associata all'autostato $|n_x, n_y\rangle$ per tutti i valori di n_x e n_y tali che $n_x + n_y = n$, passare in coordinate polari e cercare quelle particolari combinazioni lineari delle funzioni d'onda tali che siano autofunzioni di L_z , cioè tali che siano proporzionali a $e^{im\varphi}$;

(12) Il simbolo \otimes si chiama prodotto diretto ed è il prodotto di vettori di spazi differenti. Con questa notazione si intende che l'oscillatore armonico lungo x è nello stato $|n_x\rangle$ e l'oscillatore armonico lungo y è nello stato $|n_y\rangle$.

- Fissato n , diagonalizzare l'operatore L_z all'interno di tale sottospazio e trovare quindi gli autostati di L_z , come combinazione lineare degli autostati di H .
- Sfruttare una trasformazione canonica in maniera tale da introdurre dei nuovi operatori a_{\pm} e i corrispondenti aggiunti che permettano di risolvere il problema in maniera algebrica.

15.5.1 Primo metodo

Fissiamo $n = 1$. In coordinate cartesiane le funzioni d'onda associate agli unici due stati permessi $|1, 0\rangle$ e $|0, 1\rangle$, a meno di un'eventuale costante di normalizzazione, sono

$$\begin{aligned}\langle x, y|1, 0\rangle &= \frac{x}{b} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \exp\left(-\frac{y^2}{2b^2}\right) \\ \langle x, y|0, 1\rangle &= \frac{y}{b} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) \exp\left(-\frac{y^2}{2b^2}\right)\end{aligned}$$

Passando in coordinate polari, si ha

$$\begin{aligned}\langle r, \varphi|1, 0\rangle &= \frac{r \cos \varphi}{b} \exp\left(-\frac{r^2}{2b^2}\right) \\ \langle r, \varphi|0, 1\rangle &= \frac{r \sin \varphi}{b} \exp\left(-\frac{r^2}{2b^2}\right)\end{aligned}$$

Cerchiamo ora le combinazioni lineari di queste funzioni d'onda tali che siano autostati di L_z . Osserviamo che affinché tali funzioni siano autofunzioni di L_z esse devono essere proporzionali a un termine della forma $e^{im\varphi}$. Le combinazioni lineari

$$\begin{aligned}\langle r, \varphi|1, 0\rangle + i \langle r, \varphi|0, 1\rangle &= \frac{r}{b} \exp\left(-\frac{r^2}{2b^2}\right) e^{i\varphi} \\ \langle r, \varphi|1, 0\rangle - i \langle r, \varphi|0, 1\rangle &= \frac{r}{b} \exp\left(-\frac{r^2}{2b^2}\right) e^{-i\varphi}\end{aligned}$$

risultano essere autofunzioni del momento angolare L_z con autovalori $\lambda = \pm\hbar$. Abbiamo quindi determinato gli autostati di L_z per $n = 1$.

$$\begin{aligned}|1, 0\rangle + i |0, 1\rangle \\ |1, 0\rangle - i |0, 1\rangle\end{aligned}$$

Possiamo già adesso fare delle congetture sui valori permessi per m , fissato il valore di n . Infatti, poiché in coordinate cartesiane la parità della funzione d'onda è data da $(-1)^n$ e in coordinate polari è data da $(-1)^m$ e poiché essa non deve dipendere dal sistema di coordinate scelto, allora deve m e n devono avere la stessa parità. Inoltre possiamo congetturare che il valore di m sia compreso tra $-n$ e n .

15.5.2 Secondo metodo

Fissiamo $n = 2$ e determiniamo la rappresentazione matriciale di L_z in tale sottospazio con base $\{|2, 0\rangle, |1, 1\rangle, |0, 2\rangle\}$. Per fare questo è utile esprimere tale operatore in funzione degli operatori creazione e distruzione.

$$L_z = XP_y - YP_x = \frac{\hbar}{2i} \left[(a_x + a_x^\dagger)(a_y - a_y^\dagger) - (a_y + a_y^\dagger)(a_x - a_x^\dagger) \right]$$

Sfruttando il fatto che $[X_i, P_j] = 0 \quad \forall i \neq j$, si ha che gli operatori creazione e annichilazione lungo x commutano con quelli lungo y e quindi

$$L_z = \frac{\hbar}{i} [a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x]$$

Preso uno stato $|n_x, n_y\rangle$ si ha che

$$L_z |n_x, n_y\rangle = \frac{\hbar}{i} [\sqrt{n_x+1}\sqrt{n_y} |n_x+1, n_y-1\rangle - \sqrt{n_x}\sqrt{n_y+1} |n_x-1, n_y+1\rangle]$$

Osserviamo che lo stato ottenuto è una combinazione lineare di autostati dell'hamiltoniana avente energia pari a quella dello stato iniziale. Per rendere lo stato trovato un autostato di L_z è necessario effettuare una trasformazione di base che, però, lasci invariata l'energia degli stati. Sfruttando il risultato ricavato precedentemente, possiamo determinare la rappresentazione matriciale di L_z in questo sottospazio

L_z	$ 2, 0\rangle$	$ 1, 1\rangle$	$ 0, 2\rangle$
$\langle 2, 0 $	0	$-i\hbar\sqrt{2}$	0
$\langle 1, 1 $	$+i\hbar\sqrt{2}$	0	$-i\hbar\sqrt{2}$
$\langle 0, 2 $	0	$i\hbar\sqrt{2}$	0

Si trova immediatamente che esso ammette autovalori $\lambda = 0$ e $\lambda = \pm 2$. Calcoliamo adesso, in maniera esplicita, gli autostati dell'operatore L_z nel caso in esame.

- Se $\lambda = 0$, otteniamo le equazioni

$$\begin{cases} -i\hbar\sqrt{2}y = 0 \\ i\hbar\sqrt{2}x - i\hbar\sqrt{2}z = 0 \end{cases}$$

cioè le componenti dell'autostato nella base $\{|2, 0\rangle, |1, 1\rangle, |0, 2\rangle\}$ sono $(1, 0, 1)$. Normalizzando lo stato ottenuto si trova che esso è $\frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 0\rangle + |0, 2\rangle)$.

- Se $\lambda = \pm 2$ otteniamo le equazioni

$$\begin{cases} \mp 2x - i\sqrt{2}y = 0 \\ i\sqrt{2}y \mp 2z = 0 \end{cases}$$

cioè le componenti dell'autostato nella base $\{|2, 0\rangle, |1, 1\rangle, |0, 2\rangle\}$ sono $(1, \pm i\sqrt{2}, -1)$. Normalizzando lo stato ottenuto si trova che esso è $\frac{1}{2}(|2, 0\rangle \pm i\sqrt{2}|1, 1\rangle - |0, 2\rangle)$.

Verifichiamo che il secondo di questi stati è un autostato di L_z . Posto $|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|2, 0\rangle \pm i\sqrt{2}|1, 1\rangle - |0, 2\rangle)$ e ricordando che i polinomi di Hermite già normalizzati sono

$$H_0(x) = 1 \quad H_1(x) = \frac{2}{\sqrt{2}}x \quad H_2(x) = \frac{2}{\sqrt{8}}(2x^2 - 1)$$

e che in una dimensione

$$\langle x|n\rangle = H_n\left(\frac{x}{b}\right)e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

allora la funzione d'onda associata a $|\psi\rangle$ è

$$\begin{aligned}
 \langle x, y | \psi \rangle &= \\
 &= H_2\left(\frac{x}{b}\right) H_0\left(\frac{y}{b}\right) e^{-\frac{r^2}{2b^2}} \pm i\sqrt{2} H_1\left(\frac{x}{b}\right) H_1\left(\frac{y}{b}\right) e^{-\frac{r^2}{2b^2}} + H_0\left(\frac{x}{b}\right) H_2\left(\frac{y}{b}\right) e^{-\frac{r^2}{2b^2}} = \\
 &= e^{-\frac{r^2}{2b^2}} \left[\frac{2}{\sqrt{8}} (2\frac{x^2}{b^2} - 1) \pm i\sqrt{2} \frac{4xy}{2b^2} - \frac{2}{\sqrt{8}} (2\frac{y^2}{b^2} - 1) \right] = \\
 &= 2e^{-\frac{r^2}{2b^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{x^2}{b^2} - \frac{1}{\sqrt{8}} \pm i\sqrt{2} \frac{xy}{b^2} - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{y^2}{b^2} + \frac{1}{\sqrt{8}} \right] = \\
 &= 2e^{-\frac{r^2}{2b^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{x^2}{b^2} - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{y^2}{b^2} \pm i\sqrt{2} \frac{xy}{b^2} \right] = \\
 &= 2e^{-\frac{r^2}{2b^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}b^2} (x^2 - y^2 \pm i\sqrt{2}xy) \right] = \\
 &= 2e^{-\frac{r^2}{2b^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}b^2} (x \pm iy)^2 \right] = \\
 &= \frac{2r^2}{\sqrt{2}b^2} e^{-\frac{r^2}{2b^2}} (\cos \varphi \pm i \sin \varphi)^2 = \\
 &= \frac{2r^2}{\sqrt{2}b^2} e^{-\frac{r^2}{2b^2}} e^{\pm 2i\varphi}
 \end{aligned}$$

cioè la funzione d'onda associata a $|\psi\rangle$ è proprio un'autofunzione di L_z con autovalore $\lambda = \pm 2\hbar$. Il metodo usato in questo caso, pur essendo generalizzabile a qualunque valore di n , diventa estremamente complesso all'aumentare del numero di stati degeneri. Vediamo come sia possibile evitare questo metodo in favore di uno più immediato.

15.5.3 Terzo metodo: trattazione algebrica

Introduciamo gli operatori a_r e a_l definiti come

$$\begin{aligned}
 a_r &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y) \\
 a_l &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y)
 \end{aligned}$$

L'azione di a_r (o a_l) su uno stato $|n_x, n_y\rangle$ porta a uno stato che è combinazione lineare di $|n_x - 1, n_y\rangle$ e $|n_x, n_y - 1\rangle$, cioè uno stato stazionario che ha un quanto di energia in meno rispetto allo stato iniziale. In maniera simile, l'azione di a_r^\dagger (o a_l^\dagger) porta a uno stato che è combinazione lineare di $|n_x + 1, n_y\rangle$ e $|n_x, n_y + 1\rangle$, cioè uno stato stazionario che ha un quanto di energia in più rispetto allo stato iniziale. Possiamo vedere che tali operatori sono simili ad a_x e a_y ; gli operatori a_r e a_l possono essere interpretati come operatori di distruzione di un "quanto circolare" destro e sinistro rispettivamente. Si può dimostrare che valgono le seguenti relazioni di commutazione

$$\begin{aligned}
 [a_l, a_l^\dagger] &= [a_r, a_r^\dagger] = 1 \\
 [a_l, a_r] &= [a_l^\dagger, a_r^\dagger] = [a_l, a_r^\dagger] = [a_l^\dagger, a_r] = 0
 \end{aligned}$$

Sfruttando le loro definizioni, inoltre, si ha che

$$\begin{aligned}a_x^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_l^\dagger + a_r^\dagger) \\a_y^\dagger &= -\frac{1}{i\sqrt{2}}(a_l^\dagger - a_r^\dagger) \\a_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_l + a_r) \\a_y &= \frac{1}{i\sqrt{2}}(a_l - a_r)\end{aligned}$$

Possiamo quindi riscrivere l'hamiltoniana e il momento angolare del sistema come

$$\begin{aligned}H &= \hbar\omega(a_r^\dagger a_r + a_l^\dagger a_l + 1) \\L_z &= \hbar(a_r^\dagger a_r - a_l^\dagger a_l)\end{aligned}$$

Introdotti gli operatori N_r e N_l numero di quanti circolari destri e sinistri definiti come

$$\begin{aligned}N_r &= a_r^\dagger a_r \\N_l &= a_l^\dagger a_l\end{aligned}$$

possiamo riscrivere hamiltoniana e momento angolare come

$$\begin{aligned}H &= \hbar\omega(N_r + N_l + 1) \\L_z &= \hbar(N_r - N_l)\end{aligned}$$

Si può provare che per gli operatori a_r e a_l valgono le stesse considerazioni fatte per a_x e a_y . Da ciò segue che gli spettri di N_r e N_l sono composti da interi non negativi. Specificando una coppia di tali interi n_r, n_l è possibile determinare in maniera univoca uno stato, che è autovettore comune di N_r e N_l , associato a tali autovalori e che si può scrivere nella forma

$$|n_r, n_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_r!n_l!}}(a_r^\dagger)^{n_r}(a_l^\dagger)^{n_l}|n_r=0, n_l=0\rangle$$

N_r e N_l formano un set completo di osservabili che commutano fra loro e con l'hamiltoniana. Quindi lo stato $|n_r, n_l\rangle$ è anche autostato di H e L_z , con autovalori rispettivamente $(n+1)\hbar\omega$ e $m\hbar$ dove

$$\begin{aligned}n &= n_r + n_l \\m &= n_r - n_l\end{aligned}$$

La forma funzionale di m ci permette di capire l'origine del nome di quanti circolari destri o sinistri. L'azione dell'operatore a_r^\dagger sullo stato $|n_r, n_l\rangle$ porta a uno stato con un quanto di energia $\hbar\omega$ in più e avente un momento angolare $+1\hbar$ rispetto a quello iniziale; ciò corrisponde a una rotazione antioraria attorno l'asse z . In maniera simile, l'azione dell'operatore a_l^\dagger porta a uno stato con un quanto di energia $\hbar\omega$ in più e avente un momento angolare $-1\hbar$ rispetto a quello iniziale; ciò corrisponde a una rotazione oraria attorno l'asse z . Osserviamo che, fissati n ed m i valori di n_r e n_l sono determinati in maniera univoca.

15.6 Oscillatore armonico 3D

Consideriamo un sistema descritto dall'hamiltoniana

$$H = \frac{P_x^2}{2\mu} + \frac{P_y^2}{2\mu} + \frac{P_z^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2(X^2 + Y^2 + Z^2)$$

Tale problema risulta essere invariante per rotazione attorno a un qualunque asse, dunque le autofunzioni dell'hamiltoniana possono essere riscritte nella forma

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$

tuttavia risolvere l'equazione di Schrödinger per la parte radiale risulta essere molto complicato. Sappiamo, però, quali sono le autofunzioni dell'hamiltoniana in coordinate cartesiane. Infatti, poiché l'hamiltoniana può essere riscritta come somma di hamiltoniane di oscillatori armonici indipendenti su assi mutuamente ortogonali, gli autostati dell'hamiltoniana sono della forma

$$|n_x, n_y, n_z\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |n_z\rangle$$

e le autofunzioni associate sono

$$\begin{aligned}\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) &= \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) = \\ &= H_{n_x}\left(\frac{x}{b}\right)H_{n_y}\left(\frac{y}{b}\right)H_{n_z}\left(\frac{z}{b}\right)e^{-\frac{r^2}{2b^2}}\end{aligned}$$

In funzione degli operatori numero N_x , N_y e N_z l'hamiltoniana si può scrivere come

$$H = \hbar\omega\left(N_x + N_y + N_z + \frac{3}{2}\right)$$

Notiamo che poiché in coordinate sferiche la parità dipende da $(-1)^l$ e in coordinate cartesiane da $(-1)^n$, allora n e l devono avere la stessa parità. In particolare, fissato n , l può assumere valori non negativi della forma

$$l = n, n-2, n-4, \dots$$

Si osserva che nonostante siano fissati n ed l , è ancora presente una degenerazione. Ciò è dovuto al fatto che l'hamiltoniana è invariante non solo per trasformazioni di $SO(3)$, ma anche per trasformazioni di $SU(3)$ e ciò introduce un'ulteriore grandezza conservata.

15.7 Buca di potenziale infinita 3D

Consideriamo un potenziale della forma

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{se } r < R \\ +\infty & \text{se } r > R \end{cases}$$

dove r è la distanza dall'origine. L'hamiltoniana di un tale sistema è

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r)$$

e il problema presenta una completa invarianza per rotazioni. Ciò ci permette di scrivere le autofunzioni dell'hamiltoniana come

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$

dove $R(r)$ è la parte radiale e $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ è l'armonica sferica. Passando all'equazione per la parte radiale si ha

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''(r) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi(r) = E\chi(r)$$

dove abbiamo posto $R(r) = \chi(r)/r$. Da questa equazione vediamo che, in presenza di momento angolare anche all'interno della buca è presente un termine di potenziale non nullo. Risolviamo l'equazione solo per stati s . In tal caso l'equazione diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''(r) = E\chi(r)$$

Questa equazione è formalmente identica all'equazione che si ottiene per la buca infinita unidimensionale e quindi ammette come soluzioni

$$\chi(r) = A \sin\left(n \frac{\pi}{R} r\right)$$

con n intero positivo. Le energie permesse sono date da

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

dove si è posto

$$k_n = \frac{n\pi}{R}$$

Passando, adesso, alla parte radiale si ottiene

$$R(r) = \frac{1}{r} \sin\left(n \frac{\pi}{R} r\right)$$

15.8 Buca di potenziale finita 3D

Sia $V > 0$; consideriamo un potenziale della forma

$$V(r) = \begin{cases} -V & \text{se } r < R \\ 0 & \text{se } r > R \end{cases}$$

Anche in questo caso il sistema presenta invarianza rotazionale. Cerchiamo se esistono stati legati del sistema, cioè stati in cui $E < 0$. Per fare questo possiamo sempre scrivere la funzione d'onda come

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$

e passare all'equazione della parte radiale

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''(r) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi(r) = E\chi(r)$$

Cerchiamo fin da subito soluzioni per stati s . In tal caso l'equazione diventa, per $0 < r < R$

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

che possiamo riscrivere nella forma

$$\chi''(r) = -\frac{2m(E+V)}{\hbar^2}\chi(r) = -\frac{2m(V-|E|)}{\hbar^2}\chi(r) = -k^2\chi(r)$$

dove abbiamo posto

$$k^2 = \frac{2m(V-|E|)}{\hbar^2}$$

e quindi ammette soluzioni che siano combinazione lineare di seni e coseni. Se invece $r > R$ l'equazione diventa

$$\chi''(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\chi(r) = q^2\chi(r)$$

con

$$q^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

e quindi ammette soluzioni che siano combinazione lineare di un esponenziale crescente e uno decrescente. Sfruttando le condizioni al contorno $\chi(0) = 0$ e $\lim_{r \rightarrow \infty} \chi(r) = 0$ possiamo scrivere la soluzione come

$$\chi(r) = \begin{cases} \sin(kr) & \text{se } 0 < r < R \\ A \exp(-qr) & \text{se } r > R \end{cases}$$

Imponiamo continuità e derivabilità della funzione d'onda in $r = R$. Otteniamo

$$\begin{cases} \sin(kR) = A \exp(-qR) \\ k \cos(kR) = -qA \exp(-qR) \end{cases}$$

Dividendo membro a membro si ottiene

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

che è la stessa condizione che si otteneva per gli stati dispari della buca di potenziale a pareti finite.

Atomo idrogenoide

CAPITOLO

16

16.1 Introduzione al problema

Consideriamo un atomo idrogenoide, cioè un atomo con un solo elettrone di massa m e un nucleo di carica Ze e massa M . L'hamiltoniana del sistema si può scrivere come

$$H = \frac{P_N^2}{2M} + \frac{P_e^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_N|} \quad (16.1)$$

Possiamo risolvere questo problema come un problema a due corpi e riscrivere l'hamiltoniana del sistema come

$$H = \frac{P_{tot}^2}{2m_{tot}} + \frac{P_r^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}$$

Osserviamo che in questa nuova hamiltoniana il termine $\frac{P_{tot}^2}{2m_{tot}}$ permette di studiare il moto del centro di massa del sistema mentre il termine $\frac{P_r^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}$ permette di studiare il moto del sistema attorno al centro di massa. In virtù di questa possibile separazione dell'hamiltoniana, possiamo scrivere la funzione d'onda del sistema come

$$\psi(\vec{r}, \vec{R}_{CM}) = \phi(\vec{R}_{CM})\varphi(\vec{r})$$

dove $\phi(\vec{R}_{CM})$ è la funzione d'onda che descrive il centro di massa, mentre $\varphi(\vec{r})$ è la funzione d'onda che descrive il moto relativo. Osserviamo che, poiché l'atomo è isolato, il centro di massa si muove di moto rettilineo uniforme, dunque la sua funzione d'onda sarà un'onda piana. Nel particolare riferimento inerziale in cui l'atomo è fermo (sistema di riferimento del centro di massa), possiamo riscrivere l'hamiltoniana del sistema come

$$H = \frac{P_r^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \quad (16.2)$$

dove μ è la massa ridotta del sistema.

16.2 Le autofunzioni

Poiché il potenziale in questione è un potenziale centrale, valgono tutte le osservazioni fatte nel paragrafo §15.3, dunque possiamo considerare l'equazione differenziale che deve soddisfare la funzione χ .

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \chi = E\chi \quad (16.3)$$

16.1	Introduzione al problema . . .	235
16.2	Le autofunzioni	235
16.3	Densità di probabilità e densità di probabilità radiale . . .	239
16.4	Valori medi dell'energia potenziale e cinetica negli autostati dell'atomo idrogenoide . .	241

(1) Per evitare spiacevoli confusioni con l'autovalore dell'operatore L_z indicheremo da qui in avanti la massa dell'elettrone con il simbolo m_e

Facciamo adesso alcune osservazioni e alcune posizioni. Poiché $m \ll M$ si ha che $\mu \simeq m^{(1)}$. Possiamo quindi porre

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{\hbar^2}{e^2 m_e} \simeq 0.529 \cdot 10^{-10} \text{m} \quad \text{raggio di Bohr} \\ \frac{e^2}{a_0} &\simeq 27.2 \text{eV} \quad \text{energia di Hartree} \\ r &= a_0 x \end{aligned}$$

Sfruttando queste posizioni si ha che

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} &= -\frac{e^2 a_0}{2} \frac{1}{a_0^2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} \\ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} &= \frac{\hbar^2 l(l+1)e^2}{2m_e e^2 a_0^2 x^2} = \frac{e^2}{2a_0} \frac{l(l+1)}{x^2} \\ \frac{Ze^2}{r} &= \frac{Ze^2}{a_0 x} \end{aligned}$$

Inoltre poiché stiamo cercando stati legati ($E < 0$) possiamo porre

$$E = -\frac{e^2}{a_0} \varepsilon, \quad \varepsilon > 0$$

Con queste posizioni, l'equazione Eq.(16.3) diventa

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} + \left[\frac{l(l+1)}{2x^2} - \frac{Z}{x} \right] \chi = -\varepsilon \chi$$

o cambiando di segno e moltiplicando per 2 ambo i membri

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} - \left[\frac{l(l+1)}{x^2} - \frac{2Z}{x} \right] \chi = 2\varepsilon \chi \quad (16.4)$$

Andiamo a studiare i comportamenti asintotici della funzione $\chi(x)$. Sappiamo già dal paragrafo §15.3 che in un intorno di $x = 0$ la funzione $\chi(x)$ si comporta come

$$\chi(x) = x^{l+1} + \mathcal{O}(x^{l+2}) \quad (16.5)$$

mentre per $x \rightarrow \infty$ la Eq.(16.4) si scrive come

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} = 2\varepsilon \chi$$

che ammette soluzione

$$\chi(x) = e^{\pm qx}$$

avendo posto $q^2 = 2\varepsilon$. Affinché la funzione d'onda sia normalizzabile a una costante, l'unico comportamento asintotico accettabile è

$$\chi(x) = e^{-qx} \quad \text{per } x \rightarrow \infty$$

Possiamo quindi scrivere in $(0, +\infty)$ la funzione $\chi(x)$ come

$$\chi(x) = \phi(x) e^{-qx} \quad (16.6)$$

dove $\phi(x)$ è una funzione regolare che va a 0 come x^{l+1} . Con questa scelta di χ e ricordando che $2\varepsilon = q^2$ la Eq.(16.4) si può scrivere con semplici calcoli come

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - 2q \frac{\partial \phi}{\partial x} + \left[\frac{2Z}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] \phi = 0 \quad (16.7)$$

o nella forma più utile

$$\phi''(x) - \frac{l(l+1)}{x^2}\phi(x) = 2q\phi'(x) - \frac{2Z}{x}\phi(x) \quad (16.8)$$

Supponendo di poter scrivere la funzione $\phi(x)$ come serie di potenze⁽²⁾

$$\phi(x) = \sum_{n=l+1}^{\infty} c_n x^n \quad (16.9)$$

(2) Osserviamo che affinché la funzione $\phi(x)$ vada a 0 come x^{l+1} , il suo sviluppo in serie di potenze deve necessariamente iniziare dall'indice $n = l + 1$.

la Eq.(16.8) si può riscrivere come

$$\sum_{n=l+1}^{\infty} c_n [n(n-1) - l(l+1)] x^{n-2} = \sum_{n=l+1}^{\infty} c_n [2qn - 2Z] x^{n-1}$$

Cambiando l'indice di sommazione della serie al primo membro $n \rightarrow n+1$ si ottiene

$$\sum_{n=l}^{\infty} c_{n+1} [n(n+1) - l(l+1)] x^{n-1} = \sum_{n=l+1}^{\infty} c_n [2qn - 2Z] x^{n-1}$$

e osservando che il primo termine della serie a primo membro è nullo si ha

$$\sum_{n=l+1}^{\infty} c_{n+1} [n(n+1) - l(l+1)] x^{n-1} = \sum_{n=l+1}^{\infty} c_n [2qn - 2Z] x^{n-1}$$

Affinché questa uguaglianza sia vera $\forall x$ si deve avere che i coefficienti delle potenze di x siano uguali, dunque si ottiene

$$c_{n+1} = \frac{2qn - 2Z}{n(n+1) - l(l+1)} c_n \quad (16.10)$$

Abbiamo quindi trovato una relazione ricorsiva che, fissato il primo coefficiente della serie di potenze, permette di determinare univocamente tutti gli altri. Osserviamo, però, che la soluzione ottenuta non è accettabile in quanto la somma di tale serie di potenze è la funzione $\phi(x) = e^{2qx}$. Infatti se calcoliamo lo sviluppo in serie di tale funzione si ha

$$e^{2qx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2q)^n}{n!} x^n$$

e osservando il comportamento asintotico dei coefficienti di questa serie si ha

$$\frac{c_{n+1}}{c_n} = \frac{(2q)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n!}{(2q)^n} = \frac{2q}{n+1} \sim \frac{2q}{n}$$

e per $n \rightarrow \infty$ dalla Eq.(16.10) si ha

$$\frac{c_{n+1}}{c_n} = \frac{2qn - 2Z}{n(n+1) - l(l+1)} \sim \frac{2q}{n}$$

dunque la serie trovata converge a e^{2qx} . Per evitare questo problema è necessario troncare la serie a un dato \bar{n} , cioè dovrà essere $c_{\bar{n}+1} = 0$. Ciò accade se \bar{n} è tale che $2q\bar{n} - 2Z = 0$ e cioè

$$q_{\bar{n}} = \frac{Z}{\bar{n}}$$

Ricordando che $q^2 = 2\varepsilon$ si ottiene che per l'atomo idrogenoide l'energia è quantizzata e può assumere soltanto i valori

$$\varepsilon = \frac{1}{2}q^2 = \frac{1}{2}\frac{Z^2}{\bar{n}^2} \implies E_n = -\frac{e^2}{2a_0}\frac{Z^2}{\bar{n}^2}$$

Osserviamo che, poiché $\bar{n} \geq l + 1$, fissato il valore di \bar{n} si ha che l può assumere tutti i valori interi tra 0 e $\bar{n} - 1$.

(3) Per comodità si può anche rinominare n l'indice \bar{n} . Determiniamo adesso la parte radiale delle autofunzioni di tale sistema.⁽³⁾

- Per $\bar{n} = 1$ si ha che $c_2 = 0$, cioè $q_1 = Z$. Con queste posizioni si ha che $\phi(x) = c_1x \implies \chi(x) = c_1xe^{-Zx}$ e ricordando che $r = a_0x$ si ottiene

$$R_{1,0}(r) = \frac{\chi(r)}{r} = e^{-Zr/a_0} \quad (16.11)$$

a meno di costanti moltiplicative.

- Per $\bar{n} = 2$ si ha che $c_3 = 0$, cioè $q_2 = Z/2$. Osserviamo che, poiché nella serie Eq.(16.9) l'indice n parte da $l + 1$, si hanno due funzioni differenti in base al valore assunto da l .

Per $l = 0$ si ha che, fissato il coefficiente c_1 , il secondo coefficiente della serie è pari a

$$c_2 = \frac{2q_2 - 2Z}{2 - 0}c_1 = -\frac{Z}{2}c_1$$

e quindi la funzione $\phi(x)$ si può scrivere come

$$\phi(x) = c_1x - \frac{Z}{2}c_1x^2$$

e quindi la funzione $\chi(x)$ si può scrivere come

$$\chi(x) = c_1\left(x - \frac{Z}{2}x^2\right)e^{-Zx/2}$$

e ricordando che $r = a_0x$ si ottiene

$$R_{2,0}(r) = \frac{\chi(r)}{r} = \left(1 - \frac{Z}{2a_0}r\right)e^{-Zr/2a_0} \quad (16.12)$$

a meno di costanti moltiplicative.

Per $l = 1$ si ha che nella serie Eq.(16.9) è presente solamente il coefficiente c_2 , in quanto n parte da $l + 1 = 2$, e la funzione $\phi(x)$ si può scrivere come

$$\phi(x) = c_2x^2$$

e quindi la funzione $\chi(x)$ si può scrivere come

$$\chi(x) = c_2x^2e^{-Zx/2}$$

e ricordando che $r = a_0x$ si ottiene

$$R_{2,1}(r) = \frac{\chi(r)}{r} = re^{-Zr/2a_0} \quad (16.13)$$

Si può provare che in generale fissato l e per $\bar{n} = l + 1$ la funzione d'onda si può scrivere come

$$R_{l+1,l}(r) = r^l e^{-Zr/(l+1)a_0}$$

16.2.1 Normalizzazione della parte radiale

Come abbiamo visto, la parte radiale delle autofunzioni dell'atomo di idrogeno è data da un polinomio, la cui potenza minima è l , moltiplicato per un esponenziale. Tenendo conto delle troncature fatte alla serie di potenze e tralasciando i coefficienti del polinomio, la parte radiale sarà data da

$$R_{n,l}(r) = (r^l + r^{l+1} + \dots + r^{n-1})e^{-\frac{Zr}{na_0}} \quad (16.14)$$

L'ultimo passo nella nostra trattazione su queste autofunzioni è la normalizzazione del termine radiale, visto che, come affrontato nei paragrafi dedicati al momento angolare, le armoniche sferiche sono normalizzate separatamente. Imponiamo la condizione:

$$\int_0^\infty |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

Troviamo il fattore di normalizzazione per alcune autofunzioni particolari. Ad esempio, sia $n = 1$ e $l = 0$, allora

$$\int_0^\infty |R_{1,0}(r)|^2 r^2 dr = N^2 \int_0^\infty r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$$

effettuando il cambio di variabile $x = \frac{2r}{a_0}$, otteniamo

$$N^2 \left(\frac{a_0}{2}\right)^3 \int_0^\infty x^2 e^{-x} dx = N^2 \left(\frac{a_0}{2}\right)^3 2 = N^2 \frac{a_0^3}{4} = 1$$

da cui⁽⁴⁾

$$N = \frac{2}{a_0^{3/2}}$$

(4) Si è utilizzata la relazione $\int_0^\infty x^n e^{-\lambda x} dx = \frac{n!}{\lambda^{n+1}}$

Si utilizza lo stesso procedimento per tutte le altre funzioni d'onda.

16.3 Densità di probabilità e densità di probabilità radiale

Sia $\Psi_{n,l,m}$ un'autofunzione dell'atomo di idrogeno, allora la densità di probabilità, cioè la probabilità di trovare l'elettrone in un intorno del punto di coordinate (r, θ, φ) , è data da

$$|\Psi_{n,l,m}|^2 d^3\vec{r} = |R_{n,l}|^2 |Y_{l,m}|^2 d^3\vec{r} \quad (16.15)$$

Ad esempio, per uno stato S come $n = 1$, $l = 0$ la parte angolare è una costante dunque a meno di fattori si ha

$$|\Psi_{1,0,0}|^2 = e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

quindi la probabilità risulta essere massima nel nucleo.

Invece chiediamoci adesso qual è la probabilità di trovare l'elettrone ad una certa distanza dal nucleo. La densità di probabilità radiale è definita come

Definizione 16.1 (Densità di probabilità radiale). Consideriamo un guscio sferico di spessore dr e raggio r . La **densità di probabilità radiale**, ovvero la probabilità di trovare l'elettrone in tale regione,

è definita come

$$dP = |R(r)|^2 r^2 dr \quad (16.16)$$

oppure

$$\frac{dP}{dr} = |R(r)|^2 r^2 \quad (16.17)$$

dove $R(r)$ è già normalizzata.

Osserviamo che le armoniche sferiche sono assenti in quanto integrando su tutti gli angoli si otterrebbe *uno, in virtù della normalizzazione delle armoniche sferiche*. La probabilità radiale dipende appunto soltanto dalla distanza.

Nell'esempio precedente dello stato S il massimo della probabilità radiale è a_0 , infatti:

$$D \left[e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 \right] = 2r e^{-\frac{2r}{a_0}} - \frac{2r^2}{a_0} e^{-\frac{2r}{a_0}} = 0$$

e questo è vero se e solo se $r = a_0$.

Esempio 16.2 (Cattura K). Cerchiamo adesso per esercizio la probabilità di trovare l'elettrone sul nucleo. Tale calcolo risulta essere essenziale per studiare il processo di **Cattura K**, cioè la cattura di un elettrone da parte di un nucleo:

$$p + e^- \rightarrow n + \nu$$

Poichè si tratta di un processo mediato dall'interazione debole, la quale presenta un range cortissimo, l'elettrone dovrà trovarsi praticamente sopra il protone, dunque risulta fondamentale svolgere questo calcolo di probabilità.

Detto δ il raggio del nucleo, che è dell'ordine di 10^{-15} m, calcoliamo la probabilità di trovare un elettrone allo stato 1s a distanza minore di δ dall'origine. Chiamata Ω la regione del nucleo, andiamo a integrare il modulo quadro della funzione d'onda:

$$\int_{\Omega} |\psi|^2 d^3\vec{r}$$

e una volta normalizzate a uno le armoniche sferiche, l'integrale diventa

$$\int_0^\delta |R|^2 r^2 dr$$

Osserviamo adesso che, poichè $\delta/a_0 \simeq 10^{-5}$, allora

$$e^{-\frac{2r}{a_0}} \simeq 1 + o\left(\frac{\delta}{a_0}\right) \forall r \in [0, \delta]$$

e quindi l'integrale diventa

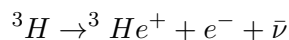
$$N^2 \int_0^\delta r^2 dr = \frac{N^2 \delta^3}{3} = \frac{4\delta^3}{3a_0^3} \simeq 10^{-14}$$

essendo $N = 2/a_0^{3/2}$.

Questo calcolo ci dice che la probabilità di trovare l'elettrone nel nucleo è molto bassa, ma non nulla. Questo è un risultato importante, in quanto ci dice che la cattura K è un processo possibile,

benchè raro. Infatti, facendo un conto molto approssimativo, possedendo un gas di 10^{24} atomi si otterrebbero $10^{24} \cdot 10^{-14} \simeq 10^{10}$ atomi con l'elettrone nel nucleo. Bisogna comunque osservare che soltanto una parte di questi atomi darà luogo ad una cattura K per mezzo dell'interazione debole. Nonostante ciò si ottiene un numero osservabile di catture.

Esempio 16.3 (Decadimento β). Consideriamo il seguente decadimento β :



dove un neutrone si trasforma in un protone con emissione di un elettrone e di un anti neutrino.

Supponiamo che inizialmente l'atomo si trovi nello stato fondamentale e calcoliamo la probabilità di trovarci in uno stato $|n, l, m\rangle$ dell' ${}^3He^+$. Osserviamo che il numero atomico è passato da $Z = 1$ a $Z = 2$, ma l'elettrone attorno al nucleo è soltanto uno. Dunque possiamo trattare gli stati $|n, l, m\rangle$ come stati di un atomo idrogenoide con $Z = 2$.

La probabilità di decadimento in uno stato $|n, l, m\rangle$ è data da

$$P_{n,l,m} = |_{Z=1} \langle 1, 0, 0 | n, l, m \rangle_{Z=2}|^2$$

Affinchè tale probabilità sia non nulla, è necessario imporre che $l = 0$, $m = 0$ in quanto le armoniche sferiche sono ortogonali tra loro ⁽⁵⁾. Dunque si ha:

$$P_{n,0,0} = \int_0^\infty R_{1,0,Z=1}^* R_{n,0,Z=2} r^2 dr$$

Per svolgere calcoli espliciti, scegliamo $n = 1$, cioè consideriamo il passaggio da stato fondamentale a stato fondamentale. La parte radiale sarà:

$$R_{1,0} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

e dunque l'integrale diventa

$$\begin{aligned} P_{1,0,0} &= \frac{4Z^{3/2}}{a_0^3} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{a_0}} e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr = \frac{4Z^{3/2}}{a_0^3} \int_0^\infty e^{-\frac{3r}{a_0}} r^2 dr = \\ &= \frac{4Z^{3/2}}{a_0^3} \left(\frac{a_0^3}{3} \right)^3 \int_0^\infty e^{-x} x^2 dx = 4 \frac{2^{3/2} 2!}{3^3} = \frac{16 \cdot 8 \cdot 4}{3^6} \simeq 0.702 \end{aligned}$$

(5) Il fatto che sia cambiato il numero Z non intacca l'ortogonalità, anzi addirittura l'ortonormalità

16.4 Valori medi dell'energia potenziale e cinetica negli autostati dell'atomo idrogenoide

Considero l'operatore energia potenziale per l'atomo idrogenoide, ovvero $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$. Il valore medio dell'energia potenziale in un autostato

$|\psi_{n,l,m}\rangle$ è dato da

$$\begin{aligned}\langle V \rangle &= \int |\Psi_{n,l,m}|^2 V(r) d^3r = \\ &= \int |R_{n,l}|^2 |Y_{l,m}|^2 V(r) d^3r = \\ &= \int_0^\infty |R_{n,l}|^2 V(r) r^2 dr\end{aligned}\quad (16.18)$$

dove si è sfruttato il fatto che le armoniche sferiche sono normalizzate a uno.

Vogliamo adesso per esercizio calcolare il valor medio in un autostato s come $n = 2$, $l = 0$, la cui funzione d'onda radiale è $R_{2,0}(r) = \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$, a meno del fattore di normalizzazione. Allora il valor medio di $v(r)$ si calcola come

$$\langle V \rangle = -Ze^2 \frac{\int_0^\infty |R_{2,0}|^2 r dr}{\int_0^\infty |R_{2,0}|^2 r^2 dr}$$

da cui sostituendo l'espressione della funzione radiale si ottiene

$$\langle V \rangle = -Ze^2 \frac{\int_0^\infty \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) r dr}{\int_0^\infty \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) r^2 dr}$$

da cui svolgendo i calcoli, mediante la sostituzione $x = \frac{Zr}{a_0}$ si ottiene

$$\langle V \rangle = -Ze^2 \frac{Z}{a_0} \frac{1}{4} = -\left(\frac{Z^2 e^2}{2a_0}\right) \frac{1}{2}$$

Utilizzando l'espressione dei livelli energetici dell'atomo di idrogeno, ovvero $E_n = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{Z^2}{n^2}$ è evidente che per $n = 2$ si ottiene $-\frac{e^2}{2a_0} \frac{Z^2}{2}$, dunque per il valor medio dell'energia potenziale si ha

$$\langle V \rangle = 2E_2$$

Osserviamo inoltre che, avendo scelto degli autostati dell'hamiltoniana, è lecito dire che

$$\langle K \rangle + \langle V \rangle = E_2$$

dove K è l'energia cinetica. Allora si ha che

$$\langle K \rangle = E_2 - \langle V \rangle = -E_2 = -\frac{\langle V \rangle}{2}$$

Tale risultato è noto in meccanica classica come "Teorema del viriale". Se fosse stato possibile assumerne la validità apriori sarebbe possibile calcolare facilmente $\langle V \rangle$ e $\langle K \rangle$, senza ricorrere a calcoli espliciti, risolvendo il sistema

$$\begin{cases} \langle K \rangle + \langle V \rangle = E \\ \langle V \rangle = -2 \langle K \rangle \end{cases}$$

In alternativa, se volessimo eseguire il calcolo esplicito anche per $\langle K \rangle$, preso un qualsiasi stato $|\psi\rangle$ si avrebbe

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \int \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \psi d^3r$$

dove

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta(\theta, \varphi) \right]$$

16.4.1 Teorema del viriale

Enunciamo e dimostriamo adesso il teorema del viriale di cui abbiamo accennato prima.

Teorema 16.4 (Teorema del viriale). Sia data un'energia potenziale $V(\vec{r})$ omogenea di grado α nelle variabili \vec{r} , e sia $|\phi\rangle$ un qualsiasi stato stazionario. Allora si ha che

$$\alpha \langle \phi | V | \phi \rangle = 2 \langle \phi | K | \phi \rangle \quad (16.19)$$

dove K è l'energia cinetica.

Dimostrazione. Sia data una certa osservabile A definita come $A = \vec{R} \cdot \vec{P}$ e sia $H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R})$ l'hamiltoniana del sistema. Allora calcolando il commutatore dei due operatori si ottiene che

$$\begin{aligned} [A, H] &= \left[\vec{R} \cdot \vec{P}, \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R}) \right] = \\ &= \vec{R} \cdot \left[\vec{P}, \frac{P^2}{2m} \right] + \vec{R} \cdot \left[\vec{P}, V(\vec{R}) \right] + \left[\vec{R}, \frac{P^2}{2m} \right] \cdot \vec{P} + \left[\vec{R}, V(\vec{R}) \right] \cdot \vec{P} = \\ &= \vec{R} \cdot \left[\vec{P}, V(\vec{R}) \right] + \left[\vec{R}, \frac{P^2}{2m} \right] \cdot \vec{P} = \\ &= \frac{\hbar}{i} \vec{R} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{R}) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{P}} \left(\frac{P^2}{2m} \right) \cdot \vec{P} = \\ &= \frac{\hbar}{i} \vec{R} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{R}) - \frac{\hbar}{i} \frac{P^2}{m} \end{aligned}$$

dove si sono utilizzate le relazioni $[P_i, V(\vec{R})] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X_i} V(\vec{R})$, che vale per una qualsiasi funzione di \vec{R} , e $[X_i, f(\vec{P})] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial P_i} f(\vec{P})$. Dall'ipotesi di omogeneità del potenziale, ovvero $V(\lambda \vec{r}) = \lambda^\alpha V(\vec{r})$ segue inoltre l'identità di Eulero, ovvero

$$\vec{r} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r}) = \alpha V(\vec{r})$$

e quindi si ha che

$$[A, H] = \frac{\hbar}{i} \alpha V(\vec{R}) - \frac{\hbar}{i} \frac{p^2}{m} = \frac{\hbar}{i} (\alpha V(\vec{r}) - 2K)$$

Calcolandone il valor medio in un qualsiasi stato $|\psi\rangle$ si otterrebbe:

$$\langle \psi | [A, H] | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} (\alpha \langle \psi | V | \psi \rangle - 2 \langle \psi | K | \psi \rangle)$$

risultato che ricorda solo lontanamente il teorema del viriale classico. Se però si sceglie come stato uno stato stazionario $|\phi\rangle$ si ha che

$$\begin{aligned} \langle \phi | [A, H] | \phi \rangle &= \langle \phi | AH | \phi \rangle + \langle \phi | HA | \phi \rangle = \\ &= E \langle \phi | A | \phi \rangle - E \langle \phi | A | \phi \rangle = 0 \end{aligned}$$

da cui si ottiene la tesi. \square

Ad esempio, per un elettrone immerso nel campo elettrostatico gene-

rato da una carica positiva Ze (atomo idrogenoide), l'energia potenziale è omogenea di grado -1 , infatti

$$V(\lambda\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{\lambda r} = \lambda^{-1} \left(-\frac{Ze^2}{r} \right) = \lambda^{-1} V(\vec{r})$$

e quindi si ha che

$$\langle\phi|V|\phi\rangle = -2\langle\phi|K|\phi\rangle$$

Spin

CAPITOLO

17

Introduzione al capitolo

Fino ad ora, abbiamo considerato l'elettrone come una particella puntiforme avente tre gradi di libertà associati con le sue coordinate x , y , e z . Di conseguenza, la teoria quantistica che abbiamo sviluppato è basata sull'ipotesi che uno stato di un elettrone a un dato istante t è descritto da una funzione d'onda $\psi(x, y, z)$ che dipende solamente dalle 3 coordinate spaziali. In questo modo, abbiamo studiato un certo numero di sistemi fisici tra cui l'atomo di idrogeno. I risultati ottenuti nel capitolo Cap.16 descrivono gli spettri di emissione e assorbimento dell'atomo di idrogeno in maniera molto accurata. I livelli energetici sono quelli osservati sperimentalmente e grazie ad essi è possibile spiegare, come vedremo in seguito, le regole di selezione, che indicano quali frequenze possono essere viste nello spettro.

Tuttavia, quando gli spettri atomici sono studiati molto in dettaglio appaiono alcuni fenomeni che non possono essere interpretati nell'ambito della teoria che abbiamo sviluppato fino ad ora. Ciò non è molto sorprendente: è chiaro che la teoria che abbiamo sviluppato deve essere completata da una serie di correzioni relativistiche, tra cui correzioni cinematiche ed effetti magnetici. Queste correzioni, pur essendo piccole, possono essere misurate con grande precisione e sono state verificate sperimentalmente.

L'equazione di Dirac, che non tratteremo in questo corso, permette di descrivere l'elettrone in modo quantistico relativistico. Rispetto all'equazione di Schrödinger, essa implica una profonda modifica nella descrizione quantistica delle proprietà dell'elettrone; oltre alle correzioni relativistiche di cui abbiamo parlato, appare una nuova caratteristica dell'elettrone: lo spin. In un contesto più generale, la struttura del gruppo di Lorentz (il gruppo delle trasformazioni spazio-temporali relativistiche) mostra che lo spin è una proprietà intrinseca delle particelle, così come la loro massa. Storicamente, lo spin elettronico fu scoperto sperimentalmente ben prima dell'introduzione dell'equazione di Dirac. Inoltre, Pauli introdusse una teoria che permette di descrivere lo spin elettronico in modo quantistico, senza usare correzioni relativistiche. Le predizioni teoriche per gli spettri atomici che si ottengono sfruttando la teoria di Pauli dello spin sono in perfetto accordo con i risultati sperimentali.

In questo capitolo introdurremo proprio la teoria di Pauli, molto più semplice di quella di Dirac. Inizieremo descrivendo una

17.1 Evidenze sperimentali dello spin	246
17.2 Teoria di Pauli dello spin	247
17.3 Proprietà dello spin	249
17.4 Descrizione non relativistica di una particella di spin $1/2$	250

serie di risultati sperimentali che rivelarono l'esistenza dello spin (§17.1) per poi formalizzare la teoria di Pauli dello spin (§17.2). Infine, discuteremo alcune proprietà dello spin (§17.3) e vedremo come è possibile considerare contemporaneamente le variabili della posizione e lo spin di una particella (§17.4).

17.1 Evidenze sperimentali dello spin

Le evidenze sperimentali dell'esistenza dello spin sono molteplici e appaiono in vari fenomeni fisici importanti. Per esempio le proprietà magnetiche di molti materiali, e in particolare dei metalli ferromagnetici, possono essere spiegate soltanto prendendo in considerazione lo spin. Qui ci limiteremo a introdurre velocemente una serie di semplici fenomeni fisici osservati sperimentalmente nella fisica atomica: la struttura fine delle linee spettrali, l'effetto Zeeman e il comportamento degli atomi di argento nell'esperimento di Stern e Gerlach. Per una trattazione più completa degli esperimenti qui descritti in breve si rimanda al corso di *Istituzioni di Struttura della Materia*.

17.1.1 Struttura fine delle linee spettrali

Approfondimento

Lo studio sperimentale delle righe spettrali dell'atomo di idrogeno rivela l'esistenza di una struttura fine: ciascuna riga, infatti, è composta da una serie di righe avente frequenze molto vicine fra loro ma che possono essere distinte chiaramente avendo a disposizione strumenti di misura con una buona risoluzione. Questo significa che esistono una serie di livelli atomici molto vicini fra loro ma distinti. Quanto fatto per l'atomo di idrogeno in Cap.16 restituisce soltanto l'energia media dei differenti gruppi di livelli energetici dell'atomo di idrogeno ma non spiega la divisione all'interno di ciascun gruppo.

17.1.2 Effetto Zeeman

Approfondimento

Quando un atomo è inserito all'interno di un campo magnetico uniforme, ciascuna delle sue righe spettrali si divide in un certo numero di righe equidistanti, la cui spaziatura è proporzionale al campo magnetico: questo è l'effetto Zeeman. L'origine dell'effetto Zeeman è dovuta alla presenza che il momento magnetico \vec{M} dell'elettrone è associato al suo momento angolare orbitale \vec{L}

$$\vec{M} = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}$$

dove μ_B è il magnetone di Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

Tuttavia, mentre questa teoria è confermata dalle evidenze sperimentali in certi casi (cosiddetto effetto Zeeman normale), in altri casi è incapace di spiegare quantitativamente il fenomeno osservato (effetto Zeeman anormale). L'anomalia più grande appare per gli atomi con numero atomico Z dispari: i loro livelli si dividono in un numero pari di sub-livelli Zeeman, che, secondo questa teoria, dovrebbero invece essere dispari ed uguali a $2l + 1$ con l intero.

17.1.3 Esperimento di Stern e Gerlach

Approfondimento

Nell'esperimento di Stern e Gerlach il fascio di atomi di argento si divide simmetricamente in due. Questo risultato suggerisce l'esistenza di valori semi-interi per j , che abbiamo visto essere possibili a priori. Questo, però, introduce un serio problema: abbiamo già dimostrato che il momento angolare orbitale di una particella come un elettrone può assumere solamente valori interi e ciò è vero anche per atomi aventi più elettroni. Inoltre, in tali atomi, anche il momento angolare orbitale totale è necessariamente intero. L'esistenza di momenti angolari semi-interi, dunque, non può essere spiegata senza introdurre ipotesi aggiuntive.

17.2 Teoria di Pauli dello spin

Per risolvere le difficoltà descritte nel precedente paragrafo, Uhlenbeck e Goudsmit nel 1925 proposero la seguente ipotesi: ogni elettrone possiede un momento angolare intrinseco che è detto *spin*. Per interpretare i risultati sperimentali introdotti sopra, essi assunsero che il momento magnetico associato al momento angolare di spin \vec{S} è

$$\vec{\mu}_S = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad (17.1)$$

Osserviamo che il rapporto giromagnetico di spin è il doppio rispetto al rapporto giromagnetico orbitale⁽¹⁾.

In seguito Pauli formalizzò questa ipotesi in maniera più precisa e diede una descrizione quantistica dello spin valida anche in ambito non relativistico. Ai postulati della meccanica quantistica introdotti precedentemente, Pauli aggiunse un certo numero di postulati che riguardano lo spin⁽²⁾.

Fino ad ora abbiamo studiato la quantizzazione delle variabili orbitali. Abbiamo associato alla posizione \vec{r} e all'impulso \vec{p} dell'elettrone le osservabili \vec{R} e \vec{P} che agiscono nello spazio degli stati $\mathcal{E}_{\vec{r}}$, che è isomorfo allo spazio delle funzioni d'onda. Tutte le quantità fisiche sono funzioni delle variabili \vec{r} e \vec{p} e le regole di quantizzazione ci permettono di associare loro delle osservabili che agiscono sullo spazio degli stati $\mathcal{E}_{\vec{r}}$. Chiameremo $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ lo spazio degli stati orbitali.

A queste variabili orbitali dobbiamo aggiungere delle variabili di spin che soddisfano i seguenti postulati:

(1) In realtà, considerando l'interazione di un elettrone con un campo elettromagnetico quantizzato, si trova che il coefficiente di proporzionalità tra $\vec{\mu}_S$ e \vec{S} non è proprio quello introdotto. La differenza, che è dell'ordine di 10^{-3} rispetto al valore introdotto, è osservabile sperimentalmente.

(2) Nella trattazione della meccanica quantistica seguita nel corso, non è necessario introdurre tali postulati, in quanto l'esistenza dello spin risulta naturale dall'espressione del momento angolare come generatore delle rotazioni. Tuttavia, per coerenza con quanto fatto storicamente, esporremo i postulati di Pauli.

1. L'operatore di spin \vec{S} è un momento angolare. Questo implica che le sue tre componenti sono osservabili che soddisfano le relazioni di commutazione

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$$

2. Gli operatori di spin agiscono in un nuovo spazio, lo spazio degli stati di spin $\mathcal{E}_{\vec{S}}$, dove \vec{S}^2 e S_z costituiscono un set completo di osservabili che commutano. Lo spazio $\mathcal{E}_{\vec{S}}$ è quindi generato dal set di autostati $|s, m\rangle$ comuni a \vec{S}^2 e S_z .

$$\begin{aligned}\vec{S}^2 |s, m\rangle &= s(s+1)\hbar^2 |s, m\rangle \\ S_z |s, m\rangle &= m\hbar |s, m\rangle\end{aligned}$$

In base alla teoria generale del momento angolare, sappiamo che s può assumere valori interi o semi interi e m assume tutti i valori tra $-s$ e s a salti di uno. Una data particella è caratterizzata da un unico valore di s : diremo che tale particella ha spin s . Lo spazio degli stati di spin ha quindi dimensione finita pari a $2s+1$ e tutti gli stati di spin sono autovettori di \vec{S}^2 con lo stesso autovalore $s(s+1)\hbar^2$.

3. Lo spazio degli stati \mathcal{E} di una particella è il prodotto tensoriale di $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ e $\mathcal{E}_{\vec{S}}$:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\vec{r}} \otimes \mathcal{E}_{\vec{S}}$$

Di conseguenza, tutte le variabili di spin commutano con tutte le osservabili orbitali. Tranne per il caso $s=0$, non è quindi sufficiente specificare un ket di $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ per caratterizzare lo stato di una particella. Ciò significa che le osservabili X , Y e Z non costituiscono un set completo di osservabili che commutano nello spazio degli stati \mathcal{E} della particella. È anche necessario conoscere lo stato di spin della particella, cioè aggiungere al set completo di osservabili di $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ un set completo di osservabili di $\mathcal{E}_{\vec{S}}$, composto da osservabili di spin come \vec{S}^2 e S_z (o \vec{S}^2 e una qualunque altra componente dello spin). Ciascuno stato di una particella è una combinazione lineare di vettori che sono prodotti tensoriali tra un ket di $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ e un ket di $\mathcal{E}_{\vec{S}}$.

4. L'elettrone è una particella di spin $1/2$ e il suo momento magnetico intrinseco è dato da Eq.(17.1). Per l'elettrone lo spazio degli stati di spin $\mathcal{E}_{\vec{S}}$ è quindi bidimensionale

Osservazione. Anche protone e neutrone sono particelle di spin $1/2$, ma i loro rapporti giromagnetici sono differenti da quello dell'elettrone

Osservazione. Per spiegare l'esistenza dello spin, si è soliti immaginare l'elettrone avente una certa estensione spaziale e non puntiforme. Sarebbe quindi la rotazione dell'elettrone attorno al suo asse a dare origine al momento angolare intrinseco. Tuttavia, è importante notare che, per descrivere una struttura più complessa di un punto materiale, sarebbero necessarie più di tre variabili per descrivere la posizione. Ad esempio, se trattiamo l'elettrone come un corpo rigido, avremmo bisogno di sei variabili: tre per determinare uno dei suoi punti fissato una volta per tutte, come il suo centro di

massa, e tre angoli per specificare la sua orientazione nello spazio. La teoria che stiamo considerando qui, sarebbe quindi radicalmente differente. Continueremo a trattare l'elettrone come una particella puntiforme e il momento di spin come non derivato da nessuna variabile di posizione o impulso (se fosse così, inoltre, esso dovrebbe necessariamente essere intero). *Lo spin non ha analogo classico.*

17.3 Proprietà dello spin

Ci restringiamo adesso al caso di una particella di spin $1/2$, come l'elettrone. Sappiamo già come maneggiare le sue variabili orbitali. Studieremo adesso in dettaglio il suo grado di libertà di spin.

Lo spazio degli stati di spin $\mathcal{E}_{\vec{S}}$ è bidimensionale. Possiamo scegliere come base il sistema ortonormale $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ di autostati comuni a \vec{S}^2 e S_z che soddisfano le equazioni

$$\begin{cases} \vec{S}^2 |\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\pm\rangle \\ S_z |\pm\rangle = \pm \frac{1}{2}\hbar |\pm\rangle \end{cases}$$

$$\begin{cases} \langle + | - \rangle = 0 \\ \langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1 \end{cases}$$

$$|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = \mathbb{1}$$

Il più generale stato di spin è descritto da un vettore arbitrario di $\mathcal{E}_{\vec{S}}$:

$$|\chi\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle$$

dove c_+ e c_- sono numeri complessi. Tutti i ket di $\mathcal{E}_{\vec{S}}$ sono autostati di \vec{S}^2 con autovalore $3\hbar^2/4$; ciò fa sì che \vec{S}^2 sia proporzionale all'identità di $\mathcal{E}_{\vec{S}}$

$$\vec{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbb{1}$$

Poiché \vec{S} è, per definizione, un momento angolare, esso possiede tutte le proprietà descritte nel capitolo Cap.14. L'azione degli operatori

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y$$

sui vettori di base $|+\rangle$ e $|-\rangle$ è data dalle relazioni viste nel capitolo Cap.14 avendo fissato $j = s = 1/2$

$$\begin{cases} S_+ |+\rangle = 0 \\ S_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle \\ S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle \\ S_- |-\rangle = 0 \end{cases}$$

Ciascun operatore agente nello spazio degli stati $\mathcal{E}_{\vec{S}}$ può essere rappresentato nella base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ come una matrice 2×2 . Sfruttando le relazioni introdotte, possiamo scrivere le tre componenti dello spin come

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

dove $\vec{\sigma}$ indica il set delle tre matrici di Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Le matrici di Pauli possiedono le seguenti proprietà che possono essere facilmente dimostrate:

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1} \\ \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i &= 2\delta_{ij} \mathbb{1} \\ [\sigma_i, \sigma_j] &= 2i\varepsilon_{ijk} \sigma_k \\ \sigma_i \sigma_j &= i\varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} \mathbb{1} \end{aligned}$$

Inoltre si ha che

$$\begin{aligned} \text{Tr } \sigma_x &= \text{Tr } \sigma_y = \text{Tr } \sigma_z = 0 \\ \det \sigma_x &= \det \sigma_y = \det \sigma_z = -1 \end{aligned}$$

Infine, ciascuna matrice 2×2 può essere scritta come combinazione lineare delle matrici di Pauli e dell'identità.

L'operatore associato allo spin elettronico ha tutte le proprietà che derivano dalla teoria generale del momento angolare. Inoltre hanno, in aggiunta, alcune proprietà specifiche legate al loro particolare valore di s , che, a parte zero, è il valore minimo possibile. Queste specifiche proprietà derivano direttamente dalle proprietà delle matrici di Pauli:

$$\begin{aligned} S_x^2 &= S_y^2 = S_z^2 = \frac{1}{4} \hbar^2 \mathbb{1} \\ S_i S_j + S_j S_i &= \frac{1}{2} \hbar^2 \delta_{ij} \mathbb{1} \\ [S_i, S_j] &= i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k \\ S_+^2 &= S_-^2 = 0 \end{aligned}$$

17.4 Descrizione non relativistica di una particella di spin 1/2

Adesso sappiamo come descrivere separatamente i gradi di libertà orbitali e di spin dell'elettrone. In questo paragrafo andremo a unire questi due differenti concetti all'interno di un unico formalismo

17.4.1 Osservabili e vettori di stato

Quando tutti i gradi di libertà sono presi in considerazione, lo stato di un elettrone è caratterizzato da un ket che appartiene allo spazio \mathcal{E} che è il prodotto tensoriale di $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ e $\mathcal{E}_{\vec{s}}$. Estendiamo in \mathcal{E} sia gli operatori originariamente definiti in $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ che quelli definiti in $\mathcal{E}_{\vec{s}}$. Otteniamo quindi un set completo di osservabili in \mathcal{E} semplicemente giustapponendo un set completo di osservabili di $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ e uno di $\mathcal{E}_{\vec{s}}$. In $\mathcal{E}_{\vec{s}}$ considereremo le osservabili \vec{S}^2 e S_z , mentre in $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ possiamo scegliere $\{X, Y, Z\}$ o $\{P_x, P_y, P_z\}$ oppure, se H è l'hamiltoniana associata a un potenziale centrale, $\{H, L^2, L_z\}$. Vari esempi di set completi di osservabili in \mathcal{E} sono quindi:

$$\begin{aligned} &\{X, Y, Z, \vec{S}^2, S_z\} \\ &\{P_x, P_y, P_z, \vec{S}^2, S_z\} \\ &\{H, L^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\} \end{aligned}$$

Poiché tutti i ket di \mathcal{E} sono autovettori di \vec{S}^2 con lo stesso autovalore, possiamo omettere \vec{S}^2 dai set di osservabili.

Useremo adesso il primo di questi set di osservabili. Come base di \mathcal{E} scegliamo il set di vettori ottenuto dal prodotto tensoriale dei ket $|\vec{r}\rangle$ di $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ e dei ket $|\varepsilon\rangle$ di $\mathcal{E}_{\vec{S}}$:

$$|\vec{r}, \varepsilon\rangle = |\vec{r}\rangle \otimes |\varepsilon\rangle$$

dove le componenti x, y, z del vettore \vec{r} possono variare da $-\infty$ a $+\infty$ (indici continui) mentre ε è uguale a $+$ o $-$ (indice discreto). Per definizione $|\vec{r}, \varepsilon\rangle$ è un autovettore comune di X, Y, Z, \vec{S}^2 e S_z

$$\begin{cases} X |\vec{r}, \varepsilon\rangle = x |\vec{r}, \varepsilon\rangle \\ Y |\vec{r}, \varepsilon\rangle = y |\vec{r}, \varepsilon\rangle \\ Z |\vec{r}, \varepsilon\rangle = z |\vec{r}, \varepsilon\rangle \\ \vec{S}^2 |\vec{r}, \varepsilon\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\vec{r}, \varepsilon\rangle \\ S_z |\vec{r}, \varepsilon\rangle = \frac{\hbar}{2} \varepsilon |\vec{r}, \varepsilon\rangle \end{cases}$$

Il set di vettori $\{|\vec{r}, \varepsilon\rangle\}$ è ortonormale in quanto i set $\{|\vec{r}\rangle\}$ e $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ sono ciascuno ortonormale in $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ e $\mathcal{E}_{\vec{S}}$ rispettivamente:

$$\langle \vec{r}', \varepsilon' | \vec{r}, \varepsilon \rangle = \delta_{\varepsilon, \varepsilon'} \delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$$

Inoltre essi soddisfano la relazione di completezza

$$\sum_{\varepsilon} \int d^3r |\vec{r}, \varepsilon\rangle \langle \vec{r}, \varepsilon| = \int d^3r |\vec{r}, +\rangle \langle \vec{r}, +| + \int d^3r |\vec{r}, -\rangle \langle \vec{r}, -| = \mathbb{1}$$

Ciascuno stato $|\psi\rangle$ di \mathcal{E} può essere scritto come combinazione lineare dei vettori $|\vec{r}, \varepsilon\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon} \int d^3r |\vec{r}, \varepsilon\rangle \langle \vec{r}, \varepsilon | \psi \rangle \quad (17.2)$$

Lo stato $|\psi\rangle$ può quindi essere rappresentato in termini di una funzione d'onda $\psi_{\varepsilon}(\vec{r})$:

$$\langle \vec{r}, \varepsilon | \psi \rangle = \psi_{\varepsilon}(\vec{r})$$

che dipende da tre indici continui x, y, z e da un indice discreto ε . Per caratterizzare completamente lo stato di un elettrone, è quindi necessario specificare due funzioni d'onda delle variabili spaziali x, y, z :

$$\begin{aligned} \psi_+(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, + | \psi \rangle \\ \psi_-(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, - | \psi \rangle \end{aligned}$$

Queste due funzioni sono spesso scritte nella forma di uno spinore a due componenti che indicheremo con il simbolo $[\psi](r)$:

$$[\psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (17.3)$$

Il bra $\langle \psi |$ associato al ket $|\psi\rangle$ è dato dall'aggiunto di Eq.(17.2):

$$\langle \psi | = \sum_{\varepsilon} \int d^3r \langle \psi | \vec{r}, \varepsilon \rangle \langle \vec{r}, \varepsilon |$$

cioè

$$\langle \psi | = \sum_{\varepsilon} \int d^3 r \psi_{\varepsilon}^*(\vec{r}) \langle \vec{r}, \varepsilon |$$

Il bra $\langle \psi |$ è quindi rappresentato da due funzioni $\psi_+^*(\vec{r})$ e $\psi_-^*(\vec{r})$ che possono essere scritte come l'aggiunto di Eq.(17.3)

$$[\psi]^\dagger(\vec{r}) = (\psi_+^*(\vec{r}) \quad \psi_-^*(\vec{r}))$$

Con questa notazione il prodotto scalare tra due vettori di stato $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle$ è dato da

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int d^3 r [\psi_+^*(\vec{r}) \varphi_+(\vec{r}) + \psi_-^*(\vec{r}) \varphi_-(\vec{r})]$$

e può essere scritto nella forma

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int d^3 r [\psi]^\dagger(\vec{r}) [\varphi](\vec{r})$$

Questa formula è molto simile a quella che permetteva il calcolo dei prodotti scalari di due ket di $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ dalle corrispondenti funzioni d'onda. È importante osservare che il prodotto matriciale tra gli spinori deve precedere l'integrazione spaziale. In particolare la normalizzazione di uno stato $|\psi\rangle$ è espressa da

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3 r [\psi]^\dagger(\vec{r}) [\psi](\vec{r}) = \int d^3 r [| \psi_+(\vec{r}) |^2 + | \psi_-(\vec{r}) |^2] = 1$$

Tra i vettori di \mathcal{E} alcuni sono prodotti tensoriali di un ket di $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ e di un ket di $\mathcal{E}_{\vec{s}}$. Se il vettore di stato in considerazione è della forma

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle$$

con

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \int d^3 r \varphi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle \\ |\chi\rangle &= c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \end{aligned}$$

allora lo spinore associato a esso assume la forma

$$[\psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r}) c_+ \\ \varphi(\vec{r}) c_- \end{pmatrix} = \varphi(\vec{r}) \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

Dalla definizione di prodotto scalare in \mathcal{E} si ottiene

$$\begin{aligned} \psi_+(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, + | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \varphi \rangle \langle + | \chi \rangle = \varphi(\vec{r}) c_+ \\ \psi_-(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, - | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \varphi \rangle \langle - | \chi \rangle = \varphi(\vec{r}) c_- \end{aligned}$$

La norma quadra di $|\psi\rangle$ è data da

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle = (|c_+|^2 + |c_-|^2) \int d^3 \vec{r} |\varphi(\vec{r})|^2$$

Sia $|\psi'\rangle$ il ket ottenuto dall'azione dell'operatore lineare A sul ket $|\psi\rangle$ di \mathcal{E} . In base ai risultati visti finora, $|\psi'\rangle$ e $|\psi\rangle$ possono essere rappresentati da spinori a due componenti $[\psi'](\vec{r})$ e $[\psi](\vec{r})$ rispettivamente. Proveremo

adesso che si può associare all'operatore A una matrice 2×2 $\llbracket A \rrbracket$ tale che

$$[\psi'](\vec{r}) = \llbracket A \rrbracket [\psi](\vec{r})$$

dove gli elementi di matrice rimangono in generale operatori differenziali rispetto alla variabile \vec{r} .

Gli operatori di spin erano inizialmente definiti in $\mathcal{E}_{\vec{S}}$. Di conseguenza, essi agiscono solo sull'indice ε del vettore di base $|\vec{r}, \varepsilon\rangle$ e la loro forma matriciale è una di quelle viste nel precedente paragrafo. Limitiamoci a studiare come agisce l'operatore S_+ su uno stato $|\psi\rangle$; sfruttando la Eq.(17.2) otteniamo

Operatori di spin

$$|\psi'\rangle = \hbar \int d^3r \psi_-(\vec{r}) |\vec{r}, +\rangle$$

in quanto S_+ elimina tutti i ket $|\vec{r}, +\rangle$ e trasforma $|\vec{r}, -\rangle$ in $\hbar |\vec{r}, +\rangle$. Le componenti di ψ' nella base $\{|\vec{r}, \varepsilon\rangle\}$ sono quindi

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}, + | \psi' \rangle &= \psi'_+(\vec{r}) = \hbar \psi_-(\vec{r}) \\ \langle \vec{r}, - | \psi' \rangle &= \psi'_-(\vec{r}) = 0 \end{aligned}$$

Lo spinore che rappresenta $|\psi'\rangle$ è quindi

$$[\psi'](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \hbar \psi_-(\vec{r}) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Questo è ciò che otteniamo se calcoliamo il prodotto tra la matrice dell'operatore

$$\llbracket S_+ \rrbracket = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

per lo spinore $[\psi](\vec{r})$.

Differentemente dagli operatori di spin, gli operatori orbitali lasciano invariato l'indice ε del vettore di base $|\vec{r}, \varepsilon\rangle$. Essi agiscono sulla dipendenza da \vec{r} degli spinori come se agissero su funzioni d'onda ordinarie. Consideriamo, ad esempio, i ket $|\psi'\rangle = X|\psi\rangle$ e $|\psi''\rangle = P_x|\psi\rangle$. Le loro componenti nella base $\{|\vec{r}, \varepsilon\rangle\}$ sono

Operatori orbitali

$$\begin{aligned} \psi'_\varepsilon(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, \varepsilon | X | \psi \rangle = x \psi_\varepsilon(\vec{r}) \\ \psi''_\varepsilon(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, \varepsilon | P_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_\varepsilon(\vec{r}) \end{aligned}$$

Gli spinori $[\psi'](\vec{r})$ e $[\psi''](\vec{r})$ sono ottenuti a partire da $[\psi](\vec{r})$ mediante le matrici 2×2

$$\begin{aligned} \llbracket X \rrbracket &= \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & x \end{pmatrix} \\ \llbracket P_x \rrbracket &= \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Il più generale operatore agente sullo spazio \mathcal{E} è rappresentato, nella notazione matriciale, da una matrice 2×2 i cui elementi sono operatori differenziali rispetto alla variabile \vec{r} . Ad esempio

Operatori misti

$$\llbracket L_z S_z \rrbracket = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}$$

Osservazione. La rappresentazione degli spinori nella base $\{|\vec{r}, \varepsilon\rangle\}$ è analoga alla rappresentazione $\{\vec{r}\}$ di $\mathcal{E}_{\vec{r}}$. L'elemento di matrice $\langle\psi|A|\varphi\rangle$ di un qualunque operatore A agente su \mathcal{E} è dato dalla formula

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle = \int d^3r [\psi]^\dagger(\vec{r}) \llbracket A \rrbracket[\varphi](\vec{r})$$

dove $\llbracket A \rrbracket$ è la matrice 2×2 associata all'operatore A . Questa rappresentazione verrà usata soltanto quando semplifica ragionamenti e calcoli; così come fatto finora, preferiremo continuare a utilizzare vettori e operatori il più possibile.

17.4.2 Calcolo della probabilità per una misura fisica

Usando il formalismo appena descritto, possiamo applicare i postulati della meccanica quantistica per determinare la probabilità di ottenere un certo risultato da una misura fisica effettuata su un elettrone.

Prima di tutto, consideriamo l'interpretazione probabilistica delle componenti $\psi_+(\vec{r})$ e $\psi_-(\vec{r})$ del vettore di stato $|\psi\rangle$, che assumiamo essere normalizzato. Supponiamo di stare misurando simultaneamente posizione e componente z dello spin di un elettrone. Poiché X, Y, Z e S_z costituiscono un set completo di osservabili, esiste un solo vettore di stato che corrisponde a un dato risultato: x, y, z e $\pm\hbar/2$. La probabilità $dP(\vec{r}, +)$ di trovare l'elettrone in un volume infinitesimo $d^3\vec{r}$ attorno a \vec{r} e con spin *up* è uguale a

$$dP(\vec{r}, +) = |\langle\vec{r}, +|\psi\rangle|^2 d^3\vec{r} = |\psi_+(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}$$

Analogamente

$$dP(\vec{r}, -) = |\langle\vec{r}, -|\psi\rangle|^2 d^3\vec{r} = |\psi_-(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}$$

è la probabilità di trovare l'elettrone in un volume infinitesimo $d^3\vec{r}$ attorno a \vec{r} e con spin *down*.

Se invece vogliamo considerare la componente lungo l'asse x dello spin, basta scrivere gli autovettori di S_x come

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle)$$

Gli operatori X, Y, Z e S_x formano un set completo di osservabili: al risultato $\{x, y, z, \pm\hbar/2\}$ della misura corrisponde un solo vettore di stato

$$|\vec{r}, \pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\vec{r}, +\rangle \pm |\vec{r}, -\rangle)$$

La probabilità di trovare l'elettrone nel volume d^3r attorno al punto \vec{r} con il suo spin lungo la direzione positiva dell'asse x è quindi

$$d^3\vec{r} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\vec{r}, +|\psi\rangle + \langle\vec{r}, -|\psi\rangle) \right|^2 = \frac{1}{2} |\psi_+(\vec{r}) + \psi_-(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}$$

Ovviamente si può misurare l'impulso dell'elettrone invece della sua posizione⁽³⁾.

I vari esempi di misura fatti finora si riferiscono a misure di osservabili che costituiscono un set completo di osservabili che commutano. Per misure incomplete, cioè per osservabili che non formano un set completo,

(3) Per una trattazione dell'argomento si veda [CDL77] Vol. II Cap. IX-C

più stati ortogonali corrispondono alla stessa misura e quindi è necessario sommare i moduli quadri delle corrispondenti ampiezze di probabilità. Ad esempio se non siamo interessati a misurare lo spin, la probabilità $dP(\vec{r})$ di trovare l'elettrone in un volume $d^3\vec{r}$ attorno a \vec{r} è data da

$$dP(\vec{r}) = \left[|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2 \right] d^3\vec{r}$$

Questo perché i due stati ortogonali $|\vec{r}, +\rangle$ e $|\vec{r}, -\rangle$ corrispondono alla stessa misura di posizione.

Come ultimo esempio calcoliamo la probabilità di trovare un elettrone con componente dello spin up. Esiste un numero infinito di stati ortogonali, cioè tutti quelli della forma $|\vec{r}, +\rangle$, che corrispondono al risultato della misura richiesto. Bisogna quindi sommare, su tutti i possibili valori di \vec{r} , i moduli quadri delle ampiezze $\langle \vec{r}, + | \psi \rangle$, cioè

$$P_+ = \int d^3\vec{r} |\langle \vec{r}, + | \psi \rangle|^2 = \int d^3\vec{r} |\psi_+(\vec{r})|^2$$

Composizione di momenti angolari

18.1 Momento angolare totale in meccanica classica

Consideriamo un sistema di N particelle classiche. Il momento angolare totale $\vec{\mathcal{L}}$ del sistema rispetto a un polo O è la somma vettoriale dei momenti angolari delle singole particelle rispetto a tale polo

$$\vec{\mathcal{L}} = \sum_{i=1}^N \vec{\mathcal{L}}_i$$

dove $\vec{\mathcal{L}}_i = \vec{r}_i \times \vec{p}_i$ è il momento angolare della particella i rispetto al polo O . La derivata temporale di $\vec{\mathcal{L}}$ è uguale al momento delle forze esterne rispetto al polo O . Di conseguenza, quando le forze esterne sono nulle o sono dirette verso lo stesso punto, il momento angolare totale del sistema (rispetto a un polo qualunque nel primo caso, rispetto al centro delle forze nel secondo) è costante. Questo non è vero per i momenti angolari delle singole particelle se ci sono forze interne al sistema, cioè se le particelle interagiscono.

Consideriamo un sistema di due particelle, (1) e (2), soggette allo stesso campo centrale. Se queste due particelle non interagiscono, i loro momenti angolari rispetto al centro della forza $\vec{\mathcal{L}}_1$ e $\vec{\mathcal{L}}_2$ sono conservati. In ogni caso, se l'interazione tra le due particelle soddisfa il principio di azione e reazione, il momento della forza esercitato da (1) su (2) è uguale e opposto a quello esercitato da (2) su (1): il momento angolare totale $\vec{\mathcal{L}}$ del sistema è conservato.

Quindi in un sistema di particelle interagenti solo il momento angolare totale è una costante del moto.

18.2 L'importanza del momento angolare totale in meccanica quantistica

Trattiamo l'esempio precedente quantisticamente. Nel caso di due particelle non interagenti, l'hamiltoniana del sistema è data dalla somma delle hamiltoniane delle singole particelle

$$H = H_1 + H_2$$

18.1 Momento angolare totale in meccanica classica	257
18.2 L'importanza del momento angolare totale in meccanica quantistica	257
18.3 Composizione di due particelle di spin 1/2	260
18.4 Somma momenti angolari . .	263

dove, nella base $\{|\vec{r}_1, \vec{r}_2\rangle\}$ le hamiltoniane sono operatori differenziali della forma

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\nabla_1^2 + V(r_1)$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_2}\nabla_2^2 + V(r_2)$$

con μ_1 e μ_2 masse delle due particelle, $V(r)$ potenziale centrale a cui sono soggette, e ∇_i^2 laplaciano rispetto alla variabile \vec{r}_i .

Vista la forma dell'hamiltoniana, sappiamo che le tre componenti del momento angolare orbitale \vec{L}_1 e \vec{L}_2 delle due particelle sono conservate, in quanto commutano con l'hamiltoniana corrispondente. Inoltre, tutte le osservabili relative a una particella commutano con quelle relative all'altra particella; in particolare

$$[\vec{L}_1, H_2] = 0$$

Si ha quindi che le tre componenti di \vec{L}_1 e \vec{L}_2 sono costanti del moto. Assumiamo adesso che le due particelle interagiscano e che l'energia potenziale corrispondente a questa interazione dipenda solo dalla distanza tra esse $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. L'hamiltoniana del sistema è data da

$$H = H_1 + H_2 + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

Per i risultati visti prima, il commutatore di \vec{L}_1 con l'hamiltoniana si riduce a

$$[\vec{L}_1, H] = [\vec{L}_1, V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)]$$

Per la componente L_{1z} si ha

$$[L_{1z}, V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)] = \frac{\hbar}{i} \left(x_1 \frac{\partial}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

che in generale è non nulla. Di conseguenza, \vec{L}_1 non è una costante del moto. Tuttavia, se definiamo l'operatore momento angolare totale come

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$$

otteniamo un operatore le cui tre componenti sono costanti del moto. Per esempio troviamo che

$$[L_z, H] = [L_{1z} + L_{2z}, H] =$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left(x_1 \frac{\partial}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

Poiché V dipende solo dalla distanza tra le due particelle si ha che

$$\frac{\partial V}{\partial x_1} = \frac{\partial V}{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \frac{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\partial x_1} = \frac{\partial V}{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \frac{x_1 - x_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$\frac{\partial V}{\partial x_2} = \frac{\partial V}{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \frac{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\partial x_2} = \frac{\partial V}{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \frac{x_2 - x_1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

ed espressioni analoghe per le altre derivate. Sostituendo quanto trovato nell'espressione del commutatore si ha che

$$[L_z, H] = \frac{\hbar}{i} \frac{V'}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} [x_1(y_1 - y_2) - y_1(x_1 - x_2) + x_2(y_2 - y_1) - y_2(x_2 - x_1)] = 0$$

Giungiamo quindi allo stesso risultato della meccanica classica.

Fino ad ora abbiamo assunto che le particelle studiate non avessero spin. Esaminiamo adesso un importante esempio: una singola particella con spin. Assumiamo che la particella sia soggetta al solo potenziale centrale $V(r)$. Sappiamo che le tre componenti del momento angolare orbitale \vec{L} commutano con l'hamiltoniana della particella. Inoltre, poiché gli operatori di spin commutano con le osservabili orbitali, le tre componenti dello spin sono costanti del moto. Esistono, però, particolari casi in cui si osserva nell'hamiltoniana un termine di accoppiamento spin-orbita della forma

$$H_{SO} = \xi(r) \vec{L} \cdot \vec{S}$$

dove $\xi(r)$ è una funzione nota della sola variabile r . Quando questo termine è preso in considerazione, \vec{L} e \vec{S} non commutano più con l'hamiltoniana complessiva. Per esempio

$$[L_z, H_{SO}] = \xi(r)[L_z, L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z] = \xi(r)(i\hbar L_y S_x - i\hbar L_x S_y)$$

e in maniera analoga

$$[S_z, H_{SO}] = \xi(r)[S_z, L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z] = \xi(r)(i\hbar L_x S_y - i\hbar L_y S_x)$$

Tuttavia, se definiamo

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

le tre componenti di \vec{J} sono costanti del moto. Infatti, sommando le due precedenti equazioni si ottiene

$$[J_z, H_{SO}] = [L_z + S_z, H_{SO}] = 0$$

e analogamente per le altre due componenti. L'operatore \vec{J} così definito prende il nome di momento angolare totale della particella con spin.

Nei due casi che abbiamo descritto, abbiamo due particelle aventi momento angolare parziale \vec{J}_1 e \vec{J}_2 , che commutano. Conosciamo già una base formata dagli autovettori comuni a \vec{J}_1^2 , \vec{J}_2^2 , J_{1z} e J_{2z} . Tuttavia \vec{J}_1 e \vec{J}_2 non sono costanti del moto, mentre le componenti del momento angolare totale

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

commuta con l'hamiltoniana del sistema. Possiamo quindi costruire, usando la base già nota, una nuova base formata dagli autovettori di \vec{J}^2 e J_z . Il problema che ci poniamo di risolvere in questo capitolo è, quindi, quello di sommare i momenti angolari di due particelle.

Questa nuova base presenta una notevole importanza. Per determinare gli stati stazionari del sistema, cioè gli autostati di H , è più semplice diagonalizzare la matrice che rappresenta H in questa nuova base; poiché H commuta con \vec{J}^2 e J_z , la matrice a essa associata può essere divisa in tanti blocchi quanti sono gli autospazi associati ai vari set di autovalori di \vec{J}^2 e J_z . La sua struttura è molto più semplice di quella della matrice che rappresenta H nella base formata dagli autostati di \vec{J}_1^2 , \vec{J}_2^2 , J_{1z} e J_{2z} , in quanto generalmente, J_{1z} e J_{2z} commutano con H .

18.3 Composizione di due particelle di spin 1/2

18.3.1 Il problema

Lo spazio degli stati

Consideriamo un sistema di due particelle aventi spin 1/2 e concentriamoci solo su questo grado di libertà. Siano S_1 e S_2 gli operatori di spin delle due particelle. Lo spazio degli stati di un tale sistema è uno spazio 4-dimensionale generato dal prodotto tensoriale degli spazi degli spin delle due particelle. Una base di tale spazio, che indicheremo con $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$ è data da

$$\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\} = \{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\}$$

Questi vettori sono autostati delle quattro osservabili \vec{S}_1^2 , \vec{S}_2^2 , S_{1z} e S_{2z} ,

$$\vec{S}_1^2 |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \vec{S}_2^2 |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$$

$$S_{1z} |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{\hbar}{2} \varepsilon_1 |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$$

$$S_{2z} |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{\hbar}{2} \varepsilon_2 |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$$

(1) In realtà i primi due operatori sono multipli dell'operatore identità e il set resta completo anche se vengono omessi

Dunque \vec{S}_1^2 , \vec{S}_2^2 , S_{1z} e S_{2z} costituiscono un set completo di osservabili che commutano⁽¹⁾.

Spin totale e relazione di commutazione

Definiamo lo spin totale del sistema come

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad (18.1)$$

Noto che \vec{S}_1 e \vec{S}_2 sono momenti angolari, è semplice provare che anche \vec{S} è un momento angolare. Calcoliamo, per esempio, il commutatore tra S_x e S_y :

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= [S_{1x} + S_{2x}, S_{1y} + S_{2y}] = \\ &= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] = \\ &= i\hbar S_{1z} + i\hbar S_{2z} = i\hbar S_z \end{aligned}$$

L'operatore \vec{S}^2 può essere ottenuto come prodotto scalare di Eq.(18.1) con sè stesso

$$\vec{S}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

in quanto \vec{S}_1 e \vec{S}_2 commutano. Il prodotto scalare $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ può essere espresso in funzione degli operatori $S_{1\pm}$, S_{1z} , $S_{2\pm}$ e S_{2z} , e risulta essere

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z} = \frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) + S_{1z}S_{2z}$$

Osserviamo che \vec{S}_1 e \vec{S}_2 (con ciò si intendono le singole componenti) commutano con \vec{S}_1^2 e \vec{S}_2^2 (ciò è vero perché gli operatori riferiti alla particella 1 commutano con quelli riferiti alla particella 2). Allora, $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ commuta con \vec{S}_1^2 e \vec{S}_2^2 .

Quindi, \vec{S}^2 commuta con \vec{S}_1^2 e \vec{S}_2^2 e inoltre S_z commuta con S_{1z} e S_{2z} . Tuttavia \vec{S}^2 non commuta nè con S_{1z} nè con S_{2z} in quanto

$$\begin{aligned} [\vec{S}^2, S_{1z}] &= [\vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, S_{1z}] = \\ &= 2[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, S_{1z}] = \\ &= 2[S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}, S_{1z}] = \\ &= 2i\hbar(-S_{1y}S_{2x} + S_{1x}S_{2y}) \end{aligned}$$

La base che abbiamo precedentemente introdotto è composta da autovettori simultanei del set completo di osservabili formato da $\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, S_{1z}, S_{2z}$. Abbiamo appena dimostrato che le quattro osservabili

$$\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}^2, S_z \quad (18.2)$$

commutano. Vedremo che esse formano un set completo di osservabili che commutano.

Sommare i due spin \vec{S}_1 e \vec{S}_2 equivale a costruire un set ortonormale di autovettori simultanei di Eq.(18.2). Questo set di autostati sarà differente da quello precedentemente introdotto, in quanto \vec{S}^2 non commuta con S_{1z} e S_{2z} . Indicheremo i vettori di questa nuova base con $|S, M\rangle$, lasciando impliciti gli autovalori di \vec{S}_1^2 e \vec{S}_2^2 , che sono fissati a $\frac{3}{4}\hbar^2$.

$$\begin{aligned} \vec{S}_1^2 |S, M\rangle &= \vec{S}_2^2 |S, M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |S, M\rangle \\ \vec{S}^2 |S, M\rangle &= S(S+1)\hbar^2 |S, M\rangle \\ S_z |S, M\rangle &= M\hbar |S, M\rangle \end{aligned}$$

Sappiamo che \vec{S} è un momento angolare; dunque S è un numero positivo intero o semi-intero e M varia a salti di un'unità tra $-S$ e S . Il problema sta nel determinare quali valori possono assumere S e M ed esprimere i vettori $|S, M\rangle$ in funzione dei vettori della base $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$.

18.3.2 Gli autovalori di S_z

Ricordiamo che tutti i vettori dello spazio degli stati sono autovettori di \vec{S}_1^2 e \vec{S}_2^2 con autovalore $3\hbar^2/4$. Di conseguenza qualunque ket $|S, M\rangle$ è un autovettore di \vec{S}_1^2 e \vec{S}_2^2 con autovalore $3\hbar^2/4$.

Abbiamo già visto che S_z commuta con le osservabili $\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, S_{1z}, S_{2z}$; ci aspettiamo quindi che i vettori della base $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$ siano autovettori di S_z . Si può provare che

$$S_z |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = (S_{z1} + S_{z2}) |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{\hbar}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$$

cioè che i vettori della base $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$ sono autovettori di S_z con autovalori, a meno della costante moltiplicativa \hbar , pari a

$$M = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$$

Poiché ε_1 e ε_2 possono essere uguali ciascuno a ± 1 , M può assumere solamente i valori 0 e ± 1 . I valori $M = 1$ e $M = -1$ sono non degeneri: solo un autovettore corrisponde a ciascuno di essi ($|+, +\rangle$ per il primo e $|-, -\rangle$ per il secondo). D'altra parte $M = 0$ è doppiamente degenero: due autovettori corrispondono a questo autovalore ($|+, -\rangle$ e $|-, +\rangle$). Ciascuna combinazione lineare di questi due vettori è un autovettore di S_z con autovalore 0.

Nella base $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$ la matrice che rappresenta S_z è

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

18.3.3 Diagonalizzazione di \vec{S}^2

Ciò che rimane da fare è trovare e diagonalizzare la matrice che rappresenta \vec{S}^2 nella base $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$. Sappiamo già che non è diagonale in tale base in quanto \vec{S}^2 non commuta con S_{1z} e S_{2z} .

Calcolo della matrice

Per determinare la matrice applichiamo \vec{S}^2 a ciascuno dei vettori di base, ricordando che

$$\vec{S}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + \vec{S}_{1+}\vec{S}_{2-} + \vec{S}_{1-}\vec{S}_{2+}$$

I quattro vettori della base $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$ sono autovettori di \vec{S}_1^2 , \vec{S}_2^2 , S_{1z} ed S_{2z} mentre l'azione degli operatori S_{\pm} sugli stati può essere ricavata da quanto visto in Cap.14. Troviamo quindi

$$\begin{aligned}\vec{S}^2 |+, +\rangle &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right) |+, +\rangle + \frac{1}{2}\hbar^2 |+, +\rangle = 2\hbar^2 |+, +\rangle \\ \vec{S}^2 |+, -\rangle &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right) |+, -\rangle - \frac{1}{2}\hbar^2 |+, -\rangle + \hbar^2 |-, +\rangle = \\ &= \hbar^2(|+, -\rangle + |-, +\rangle) \\ \vec{S}^2 |-, +\rangle &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right) |-, +\rangle - \frac{1}{2}\hbar^2 |-, +\rangle + \hbar^2 |+, -\rangle = \\ &= \hbar^2(|-, +\rangle + |+, -\rangle) \\ \vec{S}^2 |-, -\rangle &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right) |-, -\rangle + \frac{1}{2}\hbar^2 |-, -\rangle = 2\hbar^2 |-, -\rangle\end{aligned}$$

La matrice che rappresenta \vec{S}^2 nella base $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$ è

$$\vec{S}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Autovalori e autovettori di \vec{S}^2

Questa matrice è una matrice diagonale a blocchi e può essere suddivisa in tre sottomatrici. Due di esse sono unidimensionali: i vettori $|+, +\rangle$ e $|-, -\rangle$ sono autovettori di \vec{S}^2 con autovalore $2\hbar^2$. Dobbiamo diagonalizzare la sottomatrice 2×2

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

che rappresenta \vec{S}^2 all'interno del sottospazio generato da $|+, -\rangle$ e $|-, +\rangle$, cioè l'autospazio di S_z corrispondente all'autovalore $M = 0$. Gli autovalori $\lambda\hbar^2$ della matrice possono essere ottenuti risolvendo l'equazione caratteristica

$$(1 - \lambda)^2 - 1 = 0$$

che ammette soluzioni $\lambda = 0$ e $\lambda = 2$. Abbiamo trovato gli ultimi due autovalori di \vec{S}^2 , che sono 0 e $2\hbar^2$. Mediante calcoli elementari si trovano i corrispondenti autovettori:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle + |-, +\rangle) \quad \text{per l'autovalore } 2\hbar^2 \quad (18.3)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle) \quad \text{per l'autovalore } 0 \quad (18.4)$$

Il coefficiente $1/\sqrt{2}$ è stato introdotto per normalizzare i vettori.

L'operatore \vec{S}^2 possiede quindi due distinti autovalori: 0 e $2\hbar^2$. Il primo è non degenere e corrisponde all'autovettore Eq.(18.4), mentre il secondo è tre volte degenere e corrisponde agli autovettori Eq.(18.3), $|+, +\rangle$ e $|-, -\rangle$, che formano una base ortonormale nel sottospazio associato.

Abbiamo ottenuto autovalori e autovettori di S^2 e S_z . Esprimiamo questi autovettori usando la notazione $|S, M\rangle$. Il numero quantico S può assumere soltanto due valori 0 e 1. Il primo è associato a un solo vettore, Eq.(18.4), che è anche autovettore di S_z con autovalore 0, in quanto è combinazione lineare di $|+, -\rangle$ e $|-, +\rangle$. Indicheremo questo vettore con $|0, 0\rangle$:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle) \quad (18.5)$$

Abbiamo poi tre vettori che differiscono per il valore di M e che sono associati allo stesso valore di $S = 1$:

$$\begin{cases} |1, 1\rangle = |+, +\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle + |-, +\rangle) \\ |1, -1\rangle = |-, -\rangle \end{cases} \quad (18.6)$$

Si può dimostrare che questi 4 vettori formano una base ortonormale. Da questo si può dimostrare che \vec{S}^2 e S_z formano un set di osservabili che commutano.

Dunque quando due spin $1/2$ sono composti, il numero S che caratterizza gli autovalori $S(S+1)\hbar^2$ di \vec{S}^2 può assumere solo i valori 0 e 1. A ognuno di questi valori è associato un set di $2S+1$ vettori ortonormali corrispondenti ai $2S+1$ che può assumere M compatibilmente con S .

Osservazione. Il set di tre vettori Eq.(18.6) costituisce il cosiddetto tripletto; il vettore $|0, 0\rangle$ è detto stato di singoletto

Osservazione. Gli stati di tripletto sono simmetrici rispetto a uno scambio dei due spin, mentre lo stato di singoletto è antisimmetrico. Questo significa che se ogni vettore $|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$ viene sostituito dal vettore $|\varepsilon_2, \varepsilon_1\rangle$, l'espressione Eq.(18.5) cambia di segno, mentre Eq.(18.6) rimane invariata. Vedremo in Cap.19 l'importanza di questa proprietà quando le due particelle di cui sommiamo gli spin sono identiche. Ciò, inoltre, ci permette la giusta combinazione lineare di $|+, -\rangle$ e $|-, +\rangle$ che deve essere associata a $|+, +\rangle$ e $|-, -\rangle$ per ottenere il tripletto. Lo stato di singoletto, invece è una combinazione lineare antisimmetrica di $|+, -\rangle$ e $|-, +\rangle$, ortogonale agli stati di tripletto.

18.4 Somma momenti angolari

18.4.1 Somma di momenti angolari totali $j_1 = 1$ e $j_2 = 3/2$

Siano dati due momenti angolari totali $j_1 = 1$ e $j_2 = 3/2$. Consideriamo la somma dei due operatori momento angolare totale e la sua componente z , ovvero $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ e $J_z = J_{1z} + J_{2z}$. Analogamente a quanto abbiamo visto in precedenza, vi è un set di autostati simultanei di J_1^2 , J_2^2 , J_{1z} e J_{2z} , con autovalori $j_1 = 1$, $j_2 = \frac{3}{2}$ e quindi $m_1 = \pm 1, 0$ e $m_2 = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$.

Tripletto e singoletto

Detto M l'autovalore di J_z , ovvero $M = m_1 + m_2$, si ha che M può assumere i valori $M = \pm\frac{5}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}$; l'obiettivo è trovare gli stati $|m_1, m_2\rangle$ corrispondenti a tale M :

M	$ m_1, m_2\rangle$
$\frac{5}{2}$	$ 1, \frac{3}{2}\rangle$
$\frac{3}{2}$	$ 1, \frac{1}{2}\rangle, 0, \frac{3}{2}\rangle$
$\frac{1}{2}$	$ 1, -\frac{1}{2}\rangle, 0, \frac{1}{2}\rangle, -1, \frac{3}{2}\rangle$
$-\frac{1}{2}$	$ 1, -\frac{3}{2}\rangle, 0, -\frac{1}{2}\rangle, -1, \frac{1}{2}\rangle$
$-\frac{3}{2}$	$ 0, \frac{3}{2}\rangle, -1, -\frac{1}{2}\rangle$
$-\frac{5}{2}$	$ -1, -\frac{3}{2}\rangle$

Cerchiamo adesso di capire cosa accade all'autovalore J di J^2 . In particolare, vogliamo calcolare gli autostati simultanei di J^2 , J_z , J_1^2 e J_2^2 , ovvero $|J, M\rangle$.

- Se si ha un valore massimo di M pari a $\frac{5}{2}$, allora $J = \frac{5}{2}$, da cui gli stati

$$|J, M\rangle = \left| \frac{5}{2}, M \right\rangle$$

con $M = \pm\frac{5}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}$, dunque in tutto sono 6 stati.

- Dopodichè segue $J = \frac{3}{2}$, a cui corrispondono gli stati

$$|J, M\rangle = \left| \frac{3}{2}, M \right\rangle$$

con $M = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}$, dunque in tutto sono 4 stati.

- Infine, si ha $J = \frac{1}{2}$, a cui corrispondono gli stati

$$|J, M\rangle = \left| \frac{1}{2}, M \right\rangle$$

con $M = \pm\frac{1}{2}$, dunque in tutto sono 2 stati.

Risulta inoltre evidente che

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \quad (18.7)$$

Osserviamo che tale risultato è generale e non si riferisce al nostro caso specifico.

18.4.2 Composizione dei momenti angolari orbitale e di spin per uno stato con $l = 1$ e $s = 1/2$

Per uno stato con $l = 1$ e $s = 1/2$ (ad esempio un elettrone in un atomo di idrogeno) si utilizza la stessa procedura di composizione mostrata nei precedenti esempi.

Dunque, dalla relazione (18.7) l'autovalore J può assumere i valori $J = \frac{3}{2}$ e $J = \frac{1}{2}$. Inoltre, osserviamo che gli autostati simultanei di L_z e S_z sono dati da $|m, \pm\rangle$.

Detto ciò, andiamo ancora una volta a determinare l'autovalore M di J_z :

Vediamo a quali valori di J corrispondono questi stati.

M	$ m, \pm\rangle$
$\frac{3}{2}$	$ 1, +\rangle$
$\frac{1}{2}$	$ 0, +\rangle, 1, -\rangle$
$-\frac{1}{2}$	$ 0, -\rangle, -1, +\rangle$
$-\frac{3}{2}$	$ -1, -\rangle$

- A $J = \frac{3}{2}$ corrispondono gli stati $|1, +\rangle, |-1, -\rangle$, combinazioni lineari di $|0, +\rangle$ e $|1, -\rangle$ e combinazioni lineari di $|-1, +\rangle$ e $|0, -\rangle$;
- A $J = \frac{1}{2}$ corrispondono combinazioni lineari di $|0, +\rangle$ e $|1, -\rangle$ e combinazioni lineari di $|-1, +\rangle$ e $|0, -\rangle$, però ortogonali a quelli di $J = \frac{3}{2}$.

Questa rappresentazione è utile quando a conservarsi è \vec{J} e non \vec{L} e \vec{S} separatamente.

Sistemi di particelle identiche

CAPITOLO

19

Introduzione al capitolo

Nel capitolo Cap.8 abbiamo enunciato i postulati della meccanica quantistica e in Cap.17 abbiamo introdotto il concetto di spin. Vedremo adesso, in §19.1, che questi postulati non sono sufficienti a descrivere sistemi contenenti particelle identiche, in quanto, in questo caso, una loro applicazione conduce a delle ambiguità nelle predizioni fisiche. Per eliminare queste ambiguità è necessario introdurre un nuovo postulato, che riguarda la descrizione quantistica di sistemi di particelle identiche. Introduciamo questo postulato in §19.3 e vedremo come esso conduca a delle importanti conseguenze fisiche in §19.4. Prima di fare ciò, si renderà necessario introdurre, in §19.2, definire e studiare gli operatori di permutazione, che facilitano considerevolmente i ragionamenti e i calcoli.

19.1 Il problema	267
19.2 Operatori di permutazione . .	271
19.3 Il postulato di simmetrizzazione	277
19.4 Discussione	280

19.1 Il problema

Definizione 19.1 (Particelle identiche). Due particelle sono dette identiche se tutte le loro proprietà intrinseche (massa, spin, carica, ecc.) sono uguali: nessun esperimento può distinguere una particella dall'altra.

La definizione di particelle identiche implica che tutti gli elettroni nell'universo sono identici, così come tutti i protoni e gli atomi di idrogeno. Tuttavia, un elettrone e un positrone non sono particelle identiche, in quanto, nonostante abbiano stessa massa e spin, differiscono per la carica elettrica. Un'importante conseguenza di questa definizione è che quando un sistema fisico contiene due particelle identiche, non si hanno cambiamenti nelle sue proprietà e nella sua evoluzione se il ruolo delle due particelle è scambiato.

Osservazione. Osserva che questa definizione è indipendente dalle condizioni sperimentali: anche se in un dato esperimento le cariche delle particelle non sono misurate, elettrone e positrone non possono essere trattate come particelle identiche.

19.1.1 Particelle identiche in meccanica classica

Approfondimento

In meccanica classica, la presenza di particelle identiche in un sistema fisico non causa particolari problemi. Questo caso particolare è trattato come un sistema qualunque; ciascuna particella si muove lungo una traiettoria ben definita che ci permette di distinguersela dalle altre e di seguirla durante tutta l'evoluzione temporale del sistema. Per trattare ciò in estremo dettaglio, consideriamo un sistema di due particelle identiche. Al tempo iniziale t_0 , lo stato fisico del sistema è definito specificando posizione e velocità di ciascuna delle due particelle; indicheremo queste condizioni iniziali con \vec{r}_0, \vec{v}_0 e \vec{r}'_0, \vec{v}'_0 . Per descrivere lo stato fisico e determinarne l'evoluzione temporale numeriamo le due particelle: $\vec{r}_1(t)$ e $\vec{v}_1(t)$ sono posizione e velocità della particella (1), mentre $\vec{r}_2(t)$ e $\vec{v}_2(t)$ sono posizione e velocità della particella (2). Questa numerazione non presenta alcun fondamento fisico; segue, quindi, che lo stato fisico iniziale che abbiamo definito può essere, in teoria, descritto da due stati matematici differenti, in quanto possiamo porre sia

$$\vec{r}_1(t_0) = \vec{r}_0 \quad \vec{r}_2(t_0) = \vec{r}'_0 \quad (19.1)$$

$$\vec{v}_1(t_0) = \vec{v}_0 \quad \vec{v}_2(t_0) = \vec{v}'_0 \quad (19.2)$$

sia

$$\vec{r}_1(t_0) = \vec{r}'_0 \quad \vec{r}_2(t_0) = \vec{r}_0 \quad (19.3)$$

$$\vec{v}_1(t_0) = \vec{v}'_0 \quad \vec{v}_2(t_0) = \vec{v}_0 \quad (19.4)$$

Consideriamo, adesso, l'evoluzione del sistema. Supponiamo che la soluzione delle equazioni del moto con le condizioni iniziali definite da Eq.(19.1) possano essere scritte nella forma

$$\vec{r}_1(t) = \vec{r}(t) \quad \vec{r}_2(t) = \vec{r}'(t)$$

Il fatto che le due particelle siano identiche implica che il sistema non cambia se scambiamo il loro ruolo. Di conseguenza, la lagrangiana $L(\vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2, t)$ e l'hamiltoniana classica $\mathcal{H}(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2, t)$ sono invarianti per scambio degli indici. Segue che le soluzioni delle equazioni del moto corrispondenti alle condizioni iniziali definite da Eq.(19.3) sono

$$\vec{r}_1(t) = \vec{r}'(t) \quad \vec{r}_2(t) = \vec{r}(t)$$

dove le funzioni $\vec{r}(t)$ e $\vec{r}'(t)$ sono le stesse funzioni che compaiono nella soluzione delle equazioni del moto con le condizioni iniziali definite da Eq.(19.1).

Le due possibili descrizioni matematiche dello stato fisico in considerazione sono perfettamente equivalenti, in quanto esse portano agli stessi risultati fisici. La particella che parte da \vec{r}_0 con velocità \vec{v}_0 si trova a $\vec{r}(t)$ con velocità $\vec{v}(t)$, al tempo t e l'altra che è partita da \vec{r}'_0 con velocità \vec{v}'_0 si trova a $\vec{r}'(t)$ con velocità $\vec{v}'(t)$. Sotto queste condizioni dobbiamo solo scegliere, al tempo iniziale, uno dei due possibili stati matematici e ignorare completamente

l'esistenza dell'altro. Di conseguenza, possiamo trattare il sistema come se le due particelle siano distinguibili. I numeri (1) e (2) con cui abbiamo indicato le particelle arbitrariamente al tempo t_0 agiscono come una proprietà intrinseca delle particelle che ci permette di distinguerle.

19.1.2 Particelle identiche in meccanica quantistica

Appare immediatamente che la situazione è radicalmente differente in meccanica quantistica, in quanto le particelle non hanno più una traiettoria ben definita. Anche se, al tempo t_0 , i pacchetti d'onda associati alle due particelle sono completamente separati nello spazio, la loro successiva evoluzione potrebbe mescolarli. Perdiamo traccia, quindi, delle due particelle; quando riveliamo una particella in una regione dello spazio in cui entrambe hanno una probabilità non nulla di trovarsi, non possiamo in alcun modo sapere se la particella rivelata è la numero (1) o la numero (2). Tranne in alcuni casi estremamente speciali, la numerazione delle particelle diventa ambigua quando le loro posizioni sono misurate, in quanto, come vedremo, esistono differenti traiettorie che portano il sistema dal suo stato iniziale allo stato rivelato nella misura.

Consideriamo un esempio concreto: una collisione tra due particelle identiche nel riferimento del centro di massa. Prima della collisione, si hanno due pacchetti d'onda completamente separati, diretti uno verso l'altro. Possiamo convenire di indicare con (1) la particella di sinistra e con (2)

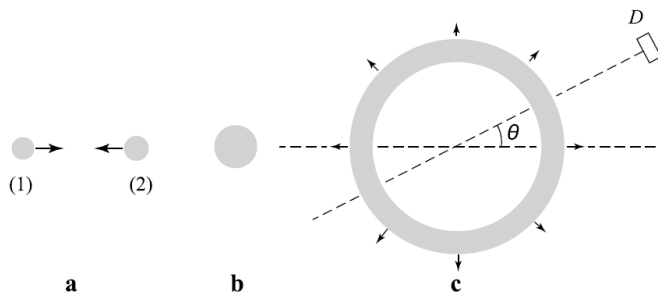


Figura 19.1 : *Collisione tra due particelle identiche.*

la particella di destra. Durante la collisione i due pacchetti d'onda si sovrappongono. Dopo la collisione, la regione dello spazio in cui la densità di probabilità delle due particelle è non nulla assume la forma di un guscio sferico il cui raggio aumenta con il tempo. Supponiamo che un rivelatore posto a un angolo θ rispetto alla direzione della velocità riveli una particella. È quindi certo che l'altra particella si sta muovendo nella direzione opposta. Tuttavia è impossibile sapere se la particella rivelata è quella indicata inizialmente con (1) o con (2). Ci sono quindi almeno due possibili traiettorie che hanno portato il sistema dallo stato iniziale a quello finale trovato nella misura e non è possibile determinare quale è stato seguito dalle particelle. Questo causa anche una grande difficoltà nell'applicazione dei postulati della meccanica quantistica. Per determinare la probabilità di un certo risultato della misura è necessario determinare i ket dello stato finale associati a tale misura. Traiettorie differenti, corrispondono a ket distinti al momento della misura. Tutta-

via essi sono associati con un solo stato fisico, in quanto è impossibile distinguere le due particelle. Sotto queste condizioni, come dovremmo calcolare la probabilità? Metodi differenti porterebbero a risultati differenti. La risposta a questa domanda verrà data in §19.4, dopo aver introdotto il postulato di simmetrizzazione.

Nell'esempio precedente abbiamo studiato il caso di due pacchetti d'onda che, inizialmente, non si sovrappongono; ciò ci ha permesso di distinguerli e indicarli con un numero. Tuttavia, delle ambiguità sono apparse nel momento in cui abbiamo provato a individuare il ket associato a un dato risultato della misura della posizione. La stessa difficoltà sorge nella scelta del ket matematico da usare per descrivere lo stato fisico iniziale. Questo tipo di difficoltà è legata al concetto di *degenerazione di scambio*, che stiamo per introdurre. Per semplificare i ragionamenti, consideriamo un particolare esempio che ci permetta di lavorare su uno spazio finito dimensionale. Il concetto di degenerazione di scambio potrà poi essere generalizzato, mostrando che esso riguarda tutti i sistemi fisici contenuti particelle identiche.

Particelle identiche di spin 1/2

Consideriamo un sistema composto da due particelle identiche di spin 1/2 e restringiamoci a studiare soltanto il grado di libertà di spin. Sembrerebbe naturale supporre che, se facessimo una misura completa di ciascuno dei due spin, saremmo in grado di conoscere lo stato fisico del sistema complessivo. Assumiamo, come esempio, che la componente lungo z di uno di essi sia pari a $\hbar/2$ e quella dell'altro sia pari a $-\hbar/2$. Per descrivere il sistema matematicamente numeriamo le due particelle: \vec{S}_1 e \vec{S}_2 indicheranno le due osservabili di spin e $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$ è la base ortonormale dello spazio degli stati formato dagli autovettori simultanei di S_{1z} e S_{2z} . Così come in meccanica classica, esistono due differenti stati matematici che possono essere associati allo stesso stato fisico: uno dei due ket ortogonali

$$\begin{aligned} |\varepsilon_1 = +, \varepsilon_2 = -\rangle \\ |\varepsilon_1 = -, \varepsilon_2 = +\rangle \end{aligned}$$

può, a priori, descrivere lo stato fisico considerato. Questi due ket generano un sottospazio bidimensionale i cui vettori normalizzati sono della forma

$$\alpha |+, -\rangle + \beta |-, +\rangle$$

con

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

Per il principio di sovrapposizione, tutti i ket matematici di questo tipo possono rappresentare lo stato fisico in considerazione. Questa è detta *degenerazione di scambio*.

La degenerazione di scambio crea difficoltà molto importanti in quanto l'applicazione dei postulati della meccanica quantistica porta a risultati fisici diversi a seconda del ket matematico scelto per descrivere lo stato fisico. Per esempio, determiniamo la probabilità di trovare entrambe le componenti dello spin lungo x pari a $\hbar/2$:

$$\begin{aligned} |+, +\rangle_x &= \frac{1}{2} [|\varepsilon_1 = +\rangle + |\varepsilon_1 = -\rangle] \otimes [|\varepsilon_2 = +\rangle + |\varepsilon_2 = -\rangle] = \\ &= \frac{1}{2} [|+, +\rangle + |+, -\rangle + |-, +\rangle + |-, -\rangle] \end{aligned}$$

Ricordiamo che lo stato di spin up lungo x in funzione degli stati di spin lungo z vale

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

e la probabilità cercata è

$$|\langle +, + |_x [\alpha |+, -\rangle + \beta |-, +\rangle]|^2 = \left| \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \right|^2$$

Osserviamo che questa probabilità dipende dai coefficienti α e β . Non è possibile, quindi, descrivere il sistema fisico utilizzando questo tipo di ket o uno di essi scelto arbitrariamente. È necessario rimuovere completamente questa degenerazione di scambio, cioè bisogna indicare in maniera non ambigua quali dei ket usare.

Le difficoltà che riguardano la degenerazione di scambio sorgono anche nello studio di sistemi contenenti un numero N arbitrario di particelle identiche.

Generalizzazione

Consideriamo come esempio un sistema di tre particelle. A ognuna di esse, prese separatamente, è associato uno spazio degli stati e delle osservabili che agiscono in tale spazio. Possiamo quindi numerare le particelle: \mathcal{E}_1 , \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 indicheranno i tre spazi degli stati delle particelle singole e le corrispondenti osservabili saranno indicate con gli stessi indici. Lo spazio degli stati del sistema di tre particelle è il prodotto tensoriale di questi spazi degli stati:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \mathcal{E}_3$$

Consideriamo adesso un'osservabile B_1 inizialmente definita in \mathcal{E}_1 e assumiamo che essa formi un set completo di osservabili che commutano. Il fatto che le tre particelle sono identiche implica che anche le osservabili B_2 e B_3 , definite in \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 , esistano. Le tre osservabili hanno lo stesso spettro. Usando le basi di autostati delle tre osservabili, possiamo costruire, prendendone il prodotto tensoriale, una base ortonormale dello spazio degli stati del sistema di tre particelle che indicheremo con

$$|1 : b_i; 2 : b_j; 3 : b_k\rangle \quad i, j, k = 1, 2, \dots$$

Questi ket sono autovettori simultanei delle estensioni di B_1 , B_2 e B_3 in \mathcal{E} con rispettivi autovalori b_i , b_j e b_k . Poiché le tre particelle sono identiche, non possiamo misurare B_1 , B_2 e B_3 separatamente, in quanto la numerazione non presenta alcun significato fisico. Tuttavia, possiamo misurare la quantità B per ciascuna delle tre particelle. Supponiamo che una tale misura ci dia tre differenti autovalori b_n , b_p e b_q . La degenerazione di scambio quindi appare, in quanto lo stato del sistema dopo tale misura può, a priori, essere rappresentato da uno qualunque dei ket del sottospazio di \mathcal{E} generato dai sei vettori di base:

$$\begin{array}{lll} |1 : b_n; 2 : b_p; 3 : b_q\rangle & |1 : b_q; 2 : b_n; 3 : b_p\rangle & |1 : b_p; 2 : b_q; 3 : b_n\rangle \\ |1 : b_n; 2 : b_q; 3 : b_p\rangle & |1 : b_p; 2 : b_n; 3 : b_q\rangle & |1 : b_q; 2 : b_p; 3 : b_n\rangle \end{array}$$

Quindi una misura completa su ciascuna delle particelle non permette di determinare un unico ket dello spazio degli stati del sistema.

19.2 Operatori di permutazione

19.2.1 Sistemi di due particelle

Consideriamo un sistema composto da due particelle con lo stesso spin s . Qui non è necessario che le due particelle siano identiche; è sufficiente che

Definizione dell'operatore permutazione

i loro spazi degli stati siano isomorfi. Quindi per evitare i problemi che sorgono quando le particelle sono identiche, assumeremo che non lo siano e indicheremo con (1) e (2) le due particelle; per esempio (1) indicherà un protone e (2) un elettrone.

Scegliamo una base, $\{|u_i\rangle\}$, nello spazio degli stati \mathcal{E}_1 della particella (1). Poiché le due particelle hanno lo stesso spin, \mathcal{E}_2 è isomorfo a \mathcal{E}_1 e possiamo scegliere la stessa base $\{|u_i\rangle\}$ per \mathcal{E}_2 . Considerando il prodotto tensoriale, possiamo costruire, nello spazio degli stati \mathcal{E} del sistema, la base

$$\{|1 : u_i; 2 : u_j\rangle\}$$

Poiché l'ordine dei vettori non ha importanza in un prodotto tensoriale, abbiamo

$$|2 : u_j; 1 : u_i\rangle \equiv |1 : u_i; 2 : u_j\rangle$$

tuttavia

$$|1 : u_j; 2 : u_i\rangle \neq |1 : u_i; 2 : u_j\rangle \quad \forall i \neq j$$

L'operatore di permutazione P_{21} è quindi definito come quell'operatore lineare la cui azione sui vettori di base è

$$P_{21} |1 : u_i; 2 : u_j\rangle = |1 : u_j; 2 : u_i\rangle \quad (19.5)$$

La sua azione su un generico ket di \mathcal{E} può essere ottenuta semplicemente scrivendolo come combinazione lineare dei vettori di base e usando la linearità dell'operatore.

Osservazione. Se scegliamo la base formata dagli autostati simultanei dell'operatore posizione \vec{R} e della componente dello spin lungo z S_z , possiamo esplicitare l'azione dell'operatore di permutazione come

$$P_{21} |1 : \vec{r}, \varepsilon; 2 : \vec{r}', \varepsilon'\rangle = |1 : \vec{r}', \varepsilon'; 2 : \vec{r}, \varepsilon\rangle$$

Ciascun ket $|\psi\rangle$ dello spazio degli stati \mathcal{E} può essere rappresentato da un set di $(2s+1)^2$ funzioni di sei variabili

$$|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon, \varepsilon'} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \psi_{\varepsilon, \varepsilon'}(\vec{r}, \vec{r}') |1 : \vec{r}, \varepsilon; 2 : \vec{r}', \varepsilon'\rangle$$

dove

$$\psi_{\varepsilon, \varepsilon'}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle 1 : \vec{r}, \varepsilon; 2 : \vec{r}', \varepsilon' | \psi \rangle$$

Abbiamo quindi

$$P_{21} |\psi\rangle = \sum_{\varepsilon, \varepsilon'} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \psi_{\varepsilon, \varepsilon'}(\vec{r}, \vec{r}') |1 : \vec{r}', \varepsilon'; 2 : \vec{r}, \varepsilon\rangle$$

Cambiando i nomi delle variabili mute

$$\begin{aligned} \vec{r} &\leftrightarrow \vec{r}' \\ \varepsilon &\leftrightarrow \varepsilon' \end{aligned}$$

possiamo trasformare la precedente relazione in

$$P_{21} |\psi\rangle = \sum_{\varepsilon, \varepsilon'} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \psi'_{\varepsilon', \varepsilon}(\vec{r}', \vec{r}) |1 : \vec{r}, \varepsilon; 2 : \vec{r}', \varepsilon'\rangle$$

Di conseguenza le funzioni

$$\psi'_{\varepsilon, \varepsilon'}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle 1 : \vec{r}, \varepsilon; 2 : \vec{r}', \varepsilon' | P_{21} | \psi \rangle$$

che rappresentano il ket $|\psi'\rangle = P_{21} |\psi\rangle$ possono essere ottenute dalle funzioni che rappresentano il ket $|\psi\rangle$ semplicemente invertendo (\vec{r}, ε) con (\vec{r}', ε') .

$$\psi'_{\varepsilon, \varepsilon'}(\vec{r}, \vec{r}') = \psi_{\varepsilon', \varepsilon}(\vec{r}', \vec{r})$$

Dalla definizione Eq.(19.5) dell'operatore di permutazione P_{21} segue che

$$P_{21}^2 = \mathbb{1}$$

Proviamo che l'operatore di permutazione P_{21} è hermitiano. Gli elementi di matrice di P_{21} in una base $\{|1 : u_i; 2 : u_j\rangle\}$ sono

$$\begin{aligned} \langle 1 : u_{i'}; 2 : u_{j'} | P_{21} | 1 : u_i; 2 : u_j \rangle &= \\ &= \langle 1 : u_{i'}; 2 : u_{j'} | 1 : u_j; 2 : u_i \rangle = \\ &= \delta_{i'j} \delta_{ij'} \end{aligned}$$

Quelli di P_{21}^\dagger sono, per definizione:

$$\begin{aligned} \langle 1 : u_{i'}; 2 : u_{j'} | P_{21}^\dagger | 1 : u_i; 2 : u_j \rangle &= (\langle 1 : u_i; 2 : u_j | P_{21} | 1 : u_{i'}; 2 : u_{j'} \rangle)^* = \\ &= (\langle 1 : u_i; 2 : u_j | 1 : u_{j'}; 2 : u_{i'} \rangle)^* = \delta_{ij'} \delta_{ji'} \end{aligned}$$

Ciascun elemento di matrice di P_{21}^\dagger è uguale al corrispondente elemento di matrice di P_{21} , quindi

$$P_{21}^\dagger = P_{21}$$

Da queste due proprietà dell'operatore di permutazione segue che esso è unitario

$$P_{21}^\dagger P_{21} = P_{21} P_{21}^\dagger = \mathbb{1}$$

Poiché l'operatore di permutazione è hermitiano, i suoi autovalori devono essere reali e tali che i loro quadrati siano 1; ciò implica che gli autovalori possibili sono semplicemente 1 e -1 . Gli autovettori di P_{21} associati all'autovalore 1 sono detti simmetrici, mentre quelli associati all'autovalore -1 sono detti antisimmetrici.

$$\begin{aligned} P_{21} |\psi_S\rangle &= |\psi_S\rangle \implies |\psi_S\rangle \text{ simmetrico} \\ P_{21} |\psi_A\rangle &= -|\psi_A\rangle \implies |\psi_A\rangle \text{ antisimmetrico} \end{aligned}$$

Consideriamo gli operatori

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2}(\mathbb{1} + P_{21}) \\ A &= \frac{1}{2}(\mathbb{1} - P_{21}) \end{aligned}$$

Dalla definizione dell'operatore permutazione

$$\begin{aligned} S^2 &= S \\ A^2 &= A \end{aligned}$$

e sfruttando il fatto che $P_{21}^\dagger = P_{21}$ si ha

$$\begin{aligned} S^\dagger &= S \\ A^\dagger &= A \end{aligned}$$

Questo ci permette di affermare che S e A sono proiettori. Inoltre essi sono proiettori su sottospazi ortogonali, in quanto

$$SA = AS = 0$$

Proprietà dell'operatore P_{21}

Ket simmetrici e antisimmetrici

Infine, essi sono proiettori complementari, in quanto

$$S + A = \mathbb{1}$$

Se $|\psi\rangle$ è un ket arbitrario dello spazio degli stati \mathcal{E} , $S|\psi\rangle$ è un ket simmetrico e $A|\psi\rangle$ è un ket antisimmetrico; infatti

$$\begin{aligned} P_{21}S|\psi\rangle &= S|\psi\rangle \\ P_{21}A|\psi\rangle &= -A|\psi\rangle \end{aligned}$$

Per questo motivo S è detto simmetrizzatore e A è detto antisimmetrizzatore.

Trasformazione delle
osservabili

Approfondimento

Consideriamo un'osservabile B_1 , inizialmente definita in \mathcal{E}_1 e poi estesa a \mathcal{E} . È sempre possibile costruire in \mathcal{E}_1 una base di autovettori $\{|u_i\rangle\}$ di B_1 . Determiniamo l'azione dell'operatore $P_{21}B_1P_{21}^\dagger$ su uno stato di base di \mathcal{E} :

$$\begin{aligned} P_{21}B_1P_{21}^\dagger |1 : u_i; 2 : u_j\rangle &= P_{21}B_1 |1 : u_j; 2 : u_i\rangle = \\ &= b_j P_{21} |1 : u_j; 2 : u_i\rangle = \\ &= b_j |1 : u_i; 2 : u_j\rangle \end{aligned}$$

Otterremmo lo stesso risultato applicando direttamente l'osservabile B_2 allo stato di partenza. Di conseguenza

$$P_{21}B_1P_{21}^\dagger = B_2$$

Lo stesso ragionamento mostra che

$$P_{21}B_2P_{21}^\dagger = B_1$$

In \mathcal{E} , ci sono anche osservabili, come $B_1 + C_2$ o B_1C_2 , che coinvolgono entrambi gli indici simultaneamente. Abbiamo ovviamente

$$P_{21}(B_1 + C_2)P_{21}^\dagger = B_2 + C_1$$

In maniera analoga, si può provare che

$$P_{21}(B_1C_2)P_{21}^\dagger = P_{21}B_1P_{21}^\dagger P_{21}C_2P_{21}^\dagger = B_2C_1$$

Questi risultati possono essere generalizzati a tutti le osservabili definite in \mathcal{E} che possono essere espresse in termini di osservabili del tipo B_1 e C_2 ; indicheremo questo tipo di osservabili con il simbolo \mathcal{O}_{12} ed esse sono tali che

$$P_{12}\mathcal{O}_{12}P_{12}^\dagger = \mathcal{O}_{21}$$

dove \mathcal{O}_{21} è l'osservabile ottenuta da \mathcal{O}_{12} scambiando gli indici. Un'osservabile $\mathcal{O}_{12}^{(S)}$ è detta simmetrica se

$$\mathcal{O}_{12}^{(S)} = \mathcal{O}_{21}^{(S)}$$

Per quanto visto precedentemente si ha

$$P_{21}\mathcal{O}_{12}^{(S)} = \mathcal{O}_{12}^{(S)}P_{21}$$

cioè

$$[\mathcal{O}_{12}^{(S)}, P_{21}] = 0$$

Le osservabili simmetriche commutano con l'operatore di permutazione.

19.2.2 Sistemi di N particelle

Nello spazio degli stati di un sistema composto da N particelle aventi stesso spin (momentaneamente assunte differenti) possono essere definiti $N!$ operatori di permutazione, uno dei quali è l'operatore identità. Se N è maggiore di 2, le proprietà di questi operatori sono più complesse di quelle dell'operatore P_{21} . Per avere un'idea dei cambiamenti da fare quando $N > 2$, consideriamo un sistema di tre particelle.

Approfondimento

Consideriamo un sistema di tre particelle, non necessariamente identiche, ma con lo stesso spin. Possiamo costruire una base dello spazio degli stati semplicemente sfruttando il prodotto tensoriale delle basi degli spazi degli stati delle singole particelle

$$\{|1 : u_i; 2 : u_j; 3 : u_k\rangle\}$$

In questo caso esistono 6 operatori di permutazione che indicheremo con

$$P_{123}, P_{312}, P_{231}, P_{132}, P_{213}, P_{321} \quad (19.6)$$

Per definizione l'operatore P_{npq} (dove n, p, q è una permutazione arbitraria dei numeri 1, 2, 3) è l'operatore lineare che agisce sugli stati di base come

$$P_{npq} |1 : u_i; 2 : u_j; 3 : u_k\rangle = |n : u_i; p : u_j; q : u_k\rangle$$

Per esempio

$$P_{231} |1 : u_i; 2 : u_j; 3 : u_k\rangle = |1 : u_k; 2 : u_i; 3 : u_j\rangle$$

Di conseguenza P_{123} coincide con l'operatore identità. L'azione di P_{npq} su un qualunque ket dello spazio degli stati \mathcal{E} può essere ottenuta scrivendo il ket come combinazione lineare dei vettori di base e usando la linearità dell'operatore.

Può essere dimostrato facilmente per gli operatori Eq.(19.6) che:

- P_{123} è l'operatore identità;
- Il prodotto di due operatori di permutazione è ancora un operatore di permutazione; possiamo mostrare, per esempio, che

$$P_{312}P_{132} = P_{321}$$

Per fare questo applichiamo il primo membro a uno stato di base arbitrario

$$\begin{aligned} P_{312}P_{132} |1 : u_i; 2 : u_j; 3 : u_k\rangle &= P_{312} |1 : u_i; 2 : u_k; 3 : u_j\rangle = \\ &= |1 : u_k; 2 : u_j; 3 : u_i\rangle = \\ &= P_{321} |1 : u_i; 2 : u_j; 3 : u_k\rangle \end{aligned}$$

Definizione degli operatori permutazione

Proprietà

- Ciascun operatore di permutazione ha un inverso ed è anch'esso un operatore di permutazione; si può provare che

$$\begin{aligned} P_{123}^{-1} &= P_{123} & P_{312}^{-1} &= P_{231} & P_{231}^{-1} &= P_{312} \\ P_{132}^{-1} &= P_{132} & P_{213}^{-1} &= P_{213} & P_{321}^{-1} &= P_{321} \end{aligned}$$

- Gli operatori di permutazione non commutano tra loro;

Una trasposizione è una permutazione che scambia il ruolo di due particelle, senza incidere sulle altre. Degli operatori di permutazione Eq.(19.6), gli ultimi tre sono operatori di trasposizione. Gli operatori di trasposizione sono hermitiani, ciascuno di essi è lo stesso del suo inverso e quindi sono anche unitari. Ciascun operatore di permutazione può essere espresso come prodotto di operatori di trasposizione; questa decomposizione non è, però, unica. Tuttavia, per una data permutazione, si può provare che la parità del numero di trasposizioni in cui si può fattorizzare è sempre lo stesso: indicheremo ciò con *parità della permutazione*. Quindi i primi tre operatori di Eq.(19.6) hanno parità pari, mentre gli ultimi tre hanno parità dispari.

Gli operatori di permutazione, essendo prodotti di operatori di trasposizione che sono unitari, sono unitari. Tuttavia, essi non necessariamente sono hermitiani, in quanto gli operatori di trasposizione non commutano tra loro. Infine, notiamo che l'aggiunto di un dato operatore di permutazione ha la stessa parità dell'operatore stesso, in quanto è uguale al prodotto degli stessi operatori di trasposizione, ma in ordine inverso.

Poiché gli operatori di permutazione non commutano per $N > 2$, non è possibile trovare una base di autostati comuni a tutti gli operatori di permutazione. Tuttavia, si può vedere che esistono certi stati che sono autovettori simultanei di tutti gli operatori di permutazione.

Indicheremo con P_α un arbitrario operatore di permutazione associato a un sistema di N particelle con lo stesso spin; α rappresenta una permutazione arbitraria degli N interi. Uno stato $|\psi_S\rangle$ tale che

$$P_\alpha |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle$$

per una qualunque permutazione P_α è detto completamente antisimmetrico. Analogamente, uno stato completamente antisimmetrico $|\psi_A\rangle$ è tale che, per definizione,

$$P_\alpha |\psi_A\rangle = \varepsilon_\alpha |\psi_A\rangle$$

dove

$$\varepsilon_\alpha = \begin{cases} +1 & \text{se } \alpha \text{ è una permutazione pari} \\ -1 & \text{se } \alpha \text{ è una permutazione dispari} \end{cases}$$

Il set di tutti gli stati completamente simmetrici forma un sottospazio vettoriale \mathcal{E}_S dello spazio degli stati \mathcal{E} , mentre il set di tutti gli stati completamente antisimmetrici forma un sottospazio

Stati completamente
simmetrici o antisimmetrici

vettoriale \mathcal{E}_A di \mathcal{E} .

Consideriamo adesso gli operatori

$$S = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_{\alpha}$$

$$A = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha}$$

dove la somma è fatta su tutte le $N!$ permutazioni dei primi N interi e ε_{α} è la parità della permutazione α . Si può provare che S e A sono i proiettori su \mathcal{E}_S e \mathcal{E}_A , rispettivamente. Per questo motivo essi sono detti simmetrizzatore e antisimmetrizzatore. Essi sono operatori hermitiani e tali che

$$S^2 = S$$

$$A^2 = A$$

Inoltre

$$SA = AS = 0$$

19.3 Il postulato di simmetrizzazione

Postulato 19.2. Lo stato fisico di un sistema contenente particelle identiche può essere descritto solamente da alcuni ket del suo spazio degli stati. I ket fisici sono, in base alla natura delle particelle identiche, completamente simmetrici o completamente antisimmetrici rispetto a una permutazione di tali particelle. Quelle particelle per cui i ket fisici sono simmetrici sono dette bosoni, mentre quelle per cui sono antisimmetrici sono dette fermioni.

Il postulato di simmetrizzazione quindi limita lo spazio degli stati per un sistema di particelle identiche. Questo spazio non è più, come era nel caso di particelle di differente natura, il prodotto tensoriale \mathcal{E} degli spazi degli stati delle singole particelle che formano il sistema, ma solo un suo sottospazio, \mathcal{E}_S o \mathcal{E}_A , in base al tipo di particelle che formano il sistema. Questo postulato divide le particelle che esistono in natura in due categorie. Tutte le particelle note in natura sottostanno alla seguente regola empirica⁽¹⁾: le particelle aventi spin semi-intero sono fermioni, mentre quelle aventi spin intero sono bosoni.

Studiamo adesso come grazie a questo postulato sia possibile rimuovere la degenerazione di scambio e le difficoltà corrispondenti. Sia $|u\rangle$ un ket che descrive un ben definito stato fisico di un sistema che contiene N particelle. Per un qualunque operatore di permutazione P_{α} , $P_{\alpha}|u\rangle$ descrive lo stesso stato fisico di $|u\rangle$. Ciò è vero per ogni ket appartenente al sottospazio \mathcal{E}_u generato da $|u\rangle$ e da tutti i ket ottenuti da $|u\rangle$ applicando gli operatori di permutazione. In base al ket $|u\rangle$ scelto, la dimensione di \mathcal{E}_u varia tra 1 e $N!$. Se essa è maggiore di 1, differenti ket matematici corrispondono allo stesso stato fisico e vi è quindi una degenerazione di scambio. Il postulato di simmetrizzazione restringe considerevolmente la classe dei ket matematici che possono descrivere uno stato fisico: questi

(1) Il teorema spin-statistica, dimostrato in teoria quantistica dei campi, rende possibile considerare questa regola come una conseguenza di ipotesi molto generali. Inoltre, è possibile introdurre il postulato di simmetrizzazione come conseguenza di tale teorema, quindi viene a mancare la sua natura di postulato.

ket devono appartenere a \mathcal{E}_S per i bosoni e a \mathcal{E}_A per i fermioni. Possiamo quindi affermare che la degenerazione di scambio è rimossa se \mathcal{E}_u contiene un solo ket di \mathcal{E}_S o un solo ket di \mathcal{E}_A .

19.3.1 Costruzione dei ket fisici

La discussione fatta finora porta automaticamente alle seguenti regole per la costruzione di un ket unico (il ket fisico) corrispondente a un dato stato fisico di un sistema di N particelle identiche:

1. Si numerano le particelle arbitrariamente e si costruisce il ket $|u\rangle$ corrispondente allo stato fisico considerato e alla numerazione assegnata alle particelle;
2. Si applica S o A al ket $|u\rangle$, a seconda che le particelle siano bosoni o fermioni;
3. Si normalizza il ket ottenuto.

Applicazione al sistema di due
particelle identiche

Consideriamo un sistema di due particelle identiche. Supponiamo che una di essa si trovi nello stato caratterizzato dal ket normalizzato $|\varphi\rangle$ e l'altra nello stato caratterizzato dal ket normalizzato $|\chi\rangle$. Supponiamo che i due ket siano distinti. La regola precedentemente enunciata viene applicata nel seguente modo:

1. Indichiamo con il numero 1 la particella nello stato $|\varphi\rangle$ e con il numero 2 la particella nello stato $|\chi\rangle$. Il ket $|u\rangle$ è quindi

$$|u\rangle = |1 : \varphi; 2 : \chi\rangle$$

2. Simmetrizziamo $|u\rangle$ se le particelle sono bosoni ottenendo:

$$S|u\rangle = \frac{1}{2}(|1 : \varphi; 2 : \chi\rangle + |1 : \chi; 2 : \varphi\rangle)$$

Se le particelle sono fermioni, antisimmetrizziamo $|u\rangle$ ottenendo:

$$A|u\rangle = \frac{1}{2}(|1 : \varphi; 2 : \chi\rangle - |1 : \chi; 2 : \varphi\rangle)$$

3. I due ket ottenuti, in generale, non sono normalizzati. Se assumiamo che $|\varphi\rangle$ e $|\chi\rangle$ siano ortogonali, la costante di normalizzazione molto semplice da calcolare. Tutto quello che dobbiamo fare è sostituire il fattore $1/2$ con il fattore $1/\sqrt{2}$. Il ket fisico normalizzato può quindi essere scritto come:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 : \varphi; 2 : \chi\rangle + \varepsilon |1 : \chi; 2 : \varphi\rangle)$$

con

$$\varepsilon = \begin{cases} +1 & \text{se le particelle sono bosoni} \\ -1 & \text{se le particelle sono fermioni} \end{cases}$$

Assumiamo adesso che i due stati $|\varphi\rangle$ e $|\chi\rangle$ siano identici, cioè $|\varphi\rangle = |\chi\rangle$. Il ket $|u\rangle$ è quindi

$$|u\rangle = |1 : \varphi; 2 : \varphi\rangle$$

Esso è già simmetrico. Se le due particelle sono bosoni, esso è il ket fisico associato con lo stato in cui i due bosoni si trovano individualmente nello stesso stato $|\varphi\rangle$. Se le due particelle sono fermioni, il ket fisico è

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 : \varphi; 2 : \varphi\rangle - |1 : \varphi; 2 : \varphi\rangle) = 0$$

Di conseguenza, non esiste nessun ket di \mathcal{E}_A in grado di descrivere lo stato fisico in cui due fermioni sono individualmente nello stesso stato $|\varphi\rangle$. Abbiamo quindi trovato, in un caso particolare, il *principio di esclusione di Pauli*: due fermioni identici non possono trovarsi individualmente nello stesso stato. Questo principio ha importanti conseguenze che vedremo in seguito.

19.3.2 Applicazione degli altri postulati

L'hamiltoniana di un sistema di particelle identiche deve essere un'osservabile fisica. Scriviamo, per esempio, l'hamiltoniana che descrive il moto dei due elettroni dell'atomo di elio attorno al nucleo, assumendo che esso sia fermo.

Postulato di evoluzione temporale

$$H = \frac{\vec{P}_1^2}{2m_e} + \frac{\vec{P}_2^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{R_1} - \frac{2e^2}{R_2} + \frac{e^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|}$$

I primi due termini rappresentano l'energia cinetica del sistema; essi sono simmetrici in quanto le due masse sono uguali. I due termini successivi sono dovuti all'attrazione del nucleo a cui sono soggetti i due elettroni. L'ultimo termine, infine, descrive la mutua interazione tra i due elettroni. Essi sono simmetrici in quanto nessuno dei due elettroni possiede una posizione privilegiata. È immediato generalizzare ciò a un qualunque sistema di particelle identiche. Di conseguenza tutti gli operatori di permutazione commutano con l'hamiltoniana di un sistema di particelle identiche.

$$[H, P_\alpha] = 0$$

Sotto queste condizioni se $|\psi(t_0)\rangle$ descrive lo stato del sistema a un tempo fissato t_0 , allora $|\psi(t)\rangle$ ottenuto risolvendo l'equazione di Schrödinger deve descrivere lo stato del sistema a un tempo t qualsiasi. Infatti, per l'equazione di Schrödinger si ha

$$|\psi(t_0 + dt)\rangle = \left(1 + \frac{dt}{i\hbar}H\right) |\psi(t_0)\rangle$$

Applicando un qualunque operatore di permutazione e sfruttando il fatto che esso commuta con l'hamiltoniana

$$P_\alpha |\psi(t_0 + dt)\rangle = \left(1 + \frac{dt}{i\hbar}H\right) P_\alpha |\psi(t_0)\rangle$$

Quindi se $|\psi(t_0)\rangle$ è un autostato di P_α , $|\psi(t_0 + dt)\rangle$ è anche un autostato di P_α con lo stesso autovalore. Siccome $|\psi(t_0)\rangle$ è per ipotesi un ket completamente simmetrico o completamente antisimmetrico, questa proprietà è conservata nel tempo. L'equazione di Schrödinger non rimuove, quindi, il ket $|\psi(t)\rangle$ dal sottospazio \mathcal{E}_S o \mathcal{E}_A .

19.4 Discussione

Studiamo adesso le conseguenze del postulato di simmetrizzazione sulle proprietà fisiche di sistemi di particelle identiche. Prima di tutto mostreremo le differenze fondamentali introdotte dal principio di esclusione di Pauli tra sistemi di fermioni identici e sistemi di bosoni identici.

Nell'affermazione del postulato di simmetrizzazione, la differenza tra bosoni e fermioni potrebbe apparire insignificante. In realtà quella semplice differenza di segno nella simmetria del ket fisico ha importanti conseguenze. Come abbiamo visto nel precedente paragrafo il postulato di simmetrizzazione non restringe gli stati individualmente permessi per i bosoni di un sistema di bosoni identici. Tuttavia esso richiede che i fermioni obbediscano al principio di esclusione di Pauli: due fermioni identici non possono occupare lo stesso stato quantomeccanico. Il principio di esclusione di Pauli venne formulato inizialmente per spiegare le proprietà degli atomi polielettronici. Si è visto che esso è più di un principio applicabile soltanto agli elettroni: esso è una conseguenza del postulato di simmetrizzazione ed è valido per tutti i sistemi di fermioni identici. Le previsioni basate su questo principio sono state sempre verificate sperimentalmente.

Trasformazioni di gauge

CAPITOLO

20

Introduzione al capitolo

Dopo aver fatto una breve introduzione sulla gauge invarianza del campo elettromagnetico, vedremo cosa essa implica nella meccanica classica e nella meccanica quantistica. In particolare, vedremo come la gauge invarianza implichi l'effetto Aharonov-Bohm.

20.1 Gauge invarianza del campo elettromagnetico	281
20.2 Gauge invarianza in meccanica classica	282
20.3 Invarianza di gauge in meccanica quantistica	283
20.4 Effetto Aharonov-Bohm . . .	287
20.5 Osservazioni conclusive . . .	289
20.6 Moto in un campo magnetico omogeneo: livelli di Landau	290

20.1 Gauge invarianza del campo elettromagnetico

Consideriamo un campo elettromagnetico caratterizzato dai vettori \vec{E} e \vec{B} , rispettivamente il campo elettrico e il campo magnetico. Questi campi non sono indipendenti in quanto soddisfano le equazioni di Maxwell. Invece di considerare i campi \vec{E} e \vec{B} , possiamo introdurre un potenziale vettore $\vec{A}(\vec{r}, t)$ e un potenziale scalare $\phi(\vec{r}, t)$ tali che:

$$\begin{aligned}\vec{E} &= -\nabla\phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \\ \vec{B} &= \nabla \times \vec{A}\end{aligned}\tag{20.1}$$

Si può dimostrare, a partire dalle equazioni di Maxwell, che esistono sempre delle funzioni \vec{A} e ϕ tali che i campi possano essere espressi nella forma Eq.(20.1). Tuttavia, dati \vec{E} e \vec{B} , i potenziali \vec{A} e ϕ non sono univocamente determinati; si può dimostrare che se \vec{A} e ϕ sono i potenziali vettori associati al campo elettromagnetico descritto da \vec{E} e \vec{B} , anche i potenziali

$$\begin{aligned}\phi' &= \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial\Lambda}{\partial t} \\ \vec{A}' &= \vec{A} - \nabla\Lambda\end{aligned}\tag{20.2}$$

dove $\Lambda(\vec{r}, t)$ è una funzione arbitraria avente una buona regolarità, descrivono lo stesso campo elettromagnetico. Questo può essere visto sostituendo rispettivamente ϕ e \vec{A} con ϕ' e \vec{A}' nelle equazioni Eq.(20.1). Quando un particolare set di potenziali è stato scelto per descrivere un campo elettromagnetico diremo che è stata fatta una scelta di gauge. Quando si cambia da una gauge a un'altra, diremo che è stata fatta una trasformazione di gauge. Spesso accade che l'equazioni del moto non coinvolgano direttamente \vec{E} e \vec{B} , ma i potenziali \vec{A} e ϕ . Risulta, quindi, spontaneo chiedersi se i risultati fisici previsti dalla teoria dipendano dalla particolare gauge usata per scrivere le equazioni o soltanto dai campi

\vec{E} e \vec{B} . Nel primo caso, affinché la teoria risulta sensata, sarebbe ovviamente necessario specificare in quale gauge le equazioni risultano essere valide. L'obiettivo di questo capitolo è di rispondere a questa domanda. Vedremo che i risultati fisici non vengono modificati a seguito di una trasformazione di gauge né in meccanica classica né in meccanica quantistica. Parleremo di questo risultato dicendo che il campo elettromagnetico è gauge invariante sia nella teoria classica sia nella teoria quantistica.

20.2 Gauge invarianza in meccanica classica

Il moto di una particella di massa m e carica q in un campo elettromagnetico può essere determinato a partire dalla forza \vec{F} agente su di essa che è proprio la forza di Lorentz

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

dove \vec{v} è la velocità della particella. Sfruttando questo approccio, lavoriamo usando solamente i campi \vec{E} e \vec{B} , quindi il problema della gauge invarianza non emerge. Possiamo però passare al formalismo lagrangiano e a quello hamiltoniano, dove i potenziali \vec{A} e ϕ compaiono direttamente. Il moto di una particella nel campo elettromagnetico è descritto dalla lagrangiana

$$L = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 - q\left(\phi - \frac{1}{c}\vec{v} \cdot \vec{A}\right)$$

Questa espressione permette il calcolo dell'impulso \vec{p} che è dato da

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + \frac{e}{c}\vec{A}$$

Possiamo quindi introdurre l'hamiltoniana classica che è data da

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right]^2 + e\phi$$

L'impulso \vec{p} non va confuso con l'impulso cinetico $\vec{\pi}$ definito da

$$\vec{\pi} = m\vec{v}$$

In particolare essi sono legati dalla relazione

$$\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \quad (20.3)$$

Questa relazione ci permette di determinare l'impulso cinetico, noti i valori di \vec{p} e \vec{r} . L'evoluzione del sistema è governata dalle equazioni di Hamilton

$$\begin{aligned} \dot{\vec{r}} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}} \\ \dot{\vec{p}} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}} \end{aligned}$$

Queste equazioni possono essere scritte soltanto fissando una gauge, cioè una coppia di potenziali \vec{A} e ϕ che descrivono il campo elettromagnetico. Cosa accade se cambiamo gauge, cioè se scegliamo un'altra coppia di potenziali \vec{A}' e ϕ' descrivente lo stesso campo elettromagnetico? Poiché,

come si nota nelle equazioni di Newton, posizione e velocità assumono a ogni istante valori indipendenti dalla gauge scelta, allora deve essere

$$\begin{aligned}\vec{r}' &= \vec{r} \\ \vec{\pi}' &= \vec{\pi}\end{aligned}$$

Sfruttando la definizione di momento cinetico Eq.(20.3) si ottiene

$$\begin{aligned}\vec{\pi} &= \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \\ \vec{\pi}' &= \vec{p}' - \frac{e}{c} \vec{A}'\end{aligned}$$

e quindi i valori \vec{p} e \vec{p}' degli impulsi nelle due gauge sono diversi ma legati dalla relazione

$$\vec{p}' - \frac{e}{c} \vec{A}' = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

Facendo riferimento alla Eq.(20.2), si ha che le variabili fisiche \vec{r} e \vec{p} in una trasformazione di gauge si trasformano come

$$\begin{aligned}\vec{r}' &= \vec{r} \\ \vec{p}' &= \vec{p} - \frac{e}{c} \nabla \Lambda\end{aligned}\tag{20.4}$$

Nel formalismo hamiltoniano, il valore delle variabili dinamiche che descrivono il moto di una particella in un campo elettromagnetico dipendono dalla gauge scelta. Esistono, quindi, due tipi di quantità associate a una particella: quelle, come \vec{r} o $\vec{\pi}$, che in una trasformazione di gauge non variano e quelle, come \vec{p} , il cui valore cambia da una gauge all'altra. Siamo quindi portati alla seguente definizione generale:

Definizione 20.1. Una *vera quantità fisica* associata al sistema considerato è una quantità il cui valore a ogni istante non dipende dalla gauge utilizzata per descrivere il campo elettromagnetico. Una *quantità non fisica* è una quantità il cui valore viene trasformato da una trasformazione di gauge.

20.3 Invarianza di gauge in meccanica quantistica

Abbiamo introdotto i postulati della meccanica quantistica a partire dalla formulazione hamiltoniana della meccanica classica. Ci chiediamo adesso se il problema della gauge invarianza, risolto con enorme semplicità in meccanica classica a causa della presenza della legge di Newton, presenti in meccanica quantistica delle ulteriori difficoltà e se i postulati che abbiamo introdotto valgano per una qualunque gauge o solo per una particolare gauge.

Ci aspettiamo che l'operatore associato a una particolare quantità possa essere differente nelle due gauge e per questo motivo indicheremo ogni operatore con il pedice \mathcal{I} per indicare la gauge scelta. Indipendentemente dalla gauge scelta, le regole di commutazione tra \vec{R} e \vec{P} e la loro rappresentazione nella base della posizione $\{|\vec{r}\rangle\}$ sono uguali, quindi possiamo scrivere⁽¹⁾

$$\begin{aligned}\vec{R}_{\mathcal{I}} &= \vec{R}_{\mathcal{I}'} \\ \vec{P}_{\mathcal{I}} &= \vec{P}_{\mathcal{I}'}\end{aligned}\tag{20.5}$$

⁽¹⁾ Questa osservazione non viene motivata dal [CDL77]. Eventualmente chiedere

Possiamo quindi omettere il pedice \mathcal{I} e scrivere semplicemente \vec{R} e \vec{P} . Consideriamo adesso il momento cinetico. Nella gauge \mathcal{I} esso è dato da

$$\vec{\Pi}_{\mathcal{I}} = \vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

Cambiando la gauge, esso diventa

$$\vec{\Pi}_{\mathcal{I}'} = \vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A}'$$

la cui azione su uno stato è differente da quella di $\vec{\Pi}_{\mathcal{I}}$; infatti

$$\vec{\Pi}_{\mathcal{I}'} = \vec{\Pi}_{\mathcal{I}} + \frac{e}{c} \nabla \Lambda \quad (20.6)$$

Considerando adesso le hamiltoniane, esse saranno differenti nelle due gauge e pari a

$$\begin{aligned} H_{\mathcal{I}} &= \frac{1}{2m} \left[\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 + e\phi \\ H_{\mathcal{I}'} &= \frac{1}{2m} \left[\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A}' \right]^2 + e\phi' \end{aligned}$$

Nella meccanica classica abbiamo indicato con $\{\vec{r}, \vec{p}\}$ e $\{\vec{r}', \vec{p}'\}$ le variabili dinamiche che descrivono il sistema in due gauge distinte. Nella meccanica quantistica indicheremo con $|\psi(t)\rangle$ e $|\psi'(t)\rangle$ i vettori di stato relativi a queste due gauge. Le relazioni analoghe alle Eq.(20.4) sono date da

$$\begin{aligned} \langle \psi'(t) | \vec{R}_{\mathcal{I}'} | \psi'(t) \rangle &= \langle \psi(t) | \vec{R}_{\mathcal{I}} | \psi(t) \rangle \\ \langle \psi'(t) | \vec{P}_{\mathcal{I}'} | \psi'(t) \rangle &= \langle \psi(t) | \vec{P}_{\mathcal{I}} - \frac{e}{c} \nabla \Lambda | \psi(t) \rangle \end{aligned} \quad (20.7)$$

Sfruttando le relazioni Eq.(20.5), si può notare che le due condizioni precedenti si possono avere solo se $|\psi(t)\rangle$ e $|\psi'(t)\rangle$ sono due ket differenti. Cerchiamo quindi una trasformazione unitaria U_{Λ} che ci permetta di passare da uno stato all'altro:

$$\begin{aligned} |\psi'(t)\rangle &= U_{\Lambda} |\psi(t)\rangle \\ U_{\Lambda}^{\dagger} U_{\Lambda} &= U_{\Lambda} U_{\Lambda}^{\dagger} = \mathbb{1} \end{aligned}$$

Sfruttando le relazioni Eq.(20.5), si ha che le relazioni Eq.(20.7) sono soddisfatte solo se valgono le relazioni

$$\begin{aligned} U_{\Lambda}^{\dagger} \vec{R} U_{\Lambda} &= \vec{R} \\ U_{\Lambda}^{\dagger} \vec{P} U_{\Lambda} &= \vec{P} - \frac{e}{c} \nabla \Lambda \end{aligned} \quad (20.8)$$

Moltiplicando a sinistra la prima relazione del set per U_{Λ} si ottiene

$$\vec{R} U_{\Lambda} = U_{\Lambda} \vec{R}$$

cioè l'operatore \vec{R} commuta con U_{Λ} . Questo ci permette di scrivere l'operatore U_{Λ} come

$$U_{\Lambda} = \exp \left\{ i F(\vec{R}, t) \right\}$$

essendo $F(\vec{R}, t)$ un operatore hermitiano. Ricordando la Eq.(8.18)⁽²⁾ si ha che

$$[\vec{P}, U_{\Lambda}] = \hbar \nabla F U_{\Lambda}$$

(2)

$$[P_i, f(\vec{R})] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(\vec{R})}{\partial X_i} = -i\hbar \frac{\partial f(\vec{R})}{\partial X_i} \quad (8.18)$$

Moltiplicando a sinistra per U_Λ^\dagger la relazione precedente si ha

$$U_\Lambda^\dagger \vec{P} U_\Lambda = \vec{P} + \hbar U_\Lambda^\dagger (\nabla F) U_\Lambda = \vec{P} + \hbar \nabla F$$

Confrontando il risultato ottenuto con la seconda delle Eq.(20.8) si ha che

$$\hbar \nabla F = -\frac{e}{c} \nabla \Lambda$$

da cui integrando

$$F = F_0 - \frac{e}{\hbar c} \Lambda$$

Omettendo il fattore F_0 , che corrisponde, per il vettore di stato $|\psi(t)\rangle$, a una fase globale non avente alcuna conseguenza fisica, otteniamo l'operatore U_Λ come

$$U_\Lambda = \exp\left\{-i \frac{e}{\hbar c} \Lambda\right\}$$

Nella rappresentazione delle coordinate, le funzioni d'onda sono legate dalla relazione

$$\psi'(\vec{r}, t) = \exp\left\{-i \frac{e}{\hbar c} \Lambda(\vec{r}, t)\right\} \psi(\vec{r}, t) \quad (20.9)$$

Per le funzioni d'onda, una trasformazione di gauge corrisponde a un cambiamento di fase che varia da un punto a un altro e che non è quindi un fattore di fase globale. L'invarianza di gauge delle previsioni fisiche ottenuta mediante le funzioni d'onda non è quindi ovvia a priori.

Proviamo adesso che se il ket $|\psi(t)\rangle$ soddisfa l'equazione di Schrödinger nella gauge \mathcal{I} ,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H_{\mathcal{I}} |\psi(t)\rangle$$

allora il ket $|\psi'(t)\rangle$ soddisfa l'equazione di Schrödinger nella gauge \mathcal{I}' ,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle = H_{\mathcal{I}'} |\psi'(t)\rangle$$

Per provare ciò esplicitiamo la derivata a primo membro ricordando che $|\psi'(t)\rangle = U_\Lambda |\psi(t)\rangle$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_\Lambda |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial U_\Lambda}{\partial t} |\psi(t)\rangle + U_\Lambda i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle$$

Sfruttando la forma funzionale dell'operatore U_Λ e il fatto che $|\psi(t)\rangle$ soddisfa l'equazione di Schrödinger nella gauge \mathcal{I} si ottiene

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial |\psi'(t)\rangle}{\partial t} &= \frac{e}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} U_\Lambda |\psi(t)\rangle + U_\Lambda H_{\mathcal{I}} |\psi(t)\rangle = \\ &= +\frac{e}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} U_\Lambda |\psi(t)\rangle + U_\Lambda H_{\mathcal{I}} U_\Lambda^\dagger U_\Lambda |\psi(t)\rangle = \\ &= \left(\tilde{H}_{\mathcal{I}} + \frac{e}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) U_\Lambda |\psi(t)\rangle = \\ &= \left(\tilde{H}_{\mathcal{I}} + \frac{e}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) |\psi'(t)\rangle \end{aligned}$$

Questa equazione ha la stessa forma dell'equazione di Schrödinger nella gauge \mathcal{I}' se

$$H_{\mathcal{I}'} = \tilde{H}_{\mathcal{I}} + \frac{e}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (20.10)$$

Sfruttiamo il fatto che U_Λ commuta con ∇F in quanto entrambi funzione dell'operatore posizione

Ora l'operatore $\tilde{H}_{\mathcal{I}}$ è dato da

$$\tilde{H}_{\mathcal{I}} = \frac{1}{2m} \left[\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2 + e\phi(\vec{r}, t)$$

dove $\vec{\tilde{R}}$ e $\vec{\tilde{P}}$ sono i trasformati di \vec{R} e \vec{P} mediante l'operatore U_{Λ} . Sfruttando le relazioni Eq.(20.8) si ha che

$$\begin{aligned} \vec{\tilde{R}} &= U_{\Lambda} \vec{R} U_{\Lambda}^{\dagger} = \vec{R} \\ \vec{\tilde{P}} &= U_{\Lambda} \vec{P} U_{\Lambda}^{\dagger} = \vec{P} + \frac{e}{c} \nabla \Lambda \end{aligned} \quad (20.11)$$

Introducendo queste relazioni nell'espressione dell'hamiltoniana $\tilde{H}_{\mathcal{I}}$ si ottiene

$$\tilde{H}_{\mathcal{I}} = \frac{1}{2m} \left[\vec{P} + \frac{e}{c} \nabla \Lambda - \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 + e\phi$$

Usando le Eq.(20.2) per sostituire i potenziali relativi alla gauge \mathcal{I} con quelli relativi alla gauge \mathcal{I}'

$$\tilde{H}_{\mathcal{I}} = \frac{1}{2m} \left[\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A}' \right]^2 + e\phi' - \frac{e}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$$

Sostituendo questa espressione nella Eq.(20.10) si trova che $H_{\mathcal{I}'}$ ha la forma che avevamo previsto.

Studiamo adesso come si trasformano le osservabili sotto l'effetto di una trasformazione di gauge. Ogni osservabile K si trasforma mediante una trasformazione di gauge nell'osservabile \tilde{K} data da

$$\tilde{K} = U_{\Lambda} K U_{\Lambda}^{\dagger}$$

Abbiamo già visto che mentre $\vec{\tilde{R}}$ è semplicemente uguale a \vec{R} , $\vec{\tilde{P}}$ non è uguale a \vec{P} . In maniera simile, $\vec{\tilde{\Pi}}_{\mathcal{I}}$ è diverso da $\vec{\Pi}_{\mathcal{I}}$ in quanto

$$\begin{aligned} \vec{\tilde{\Pi}}_{\mathcal{I}} &= \vec{\tilde{P}} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) = \\ &= \vec{P} + \frac{e}{c} \nabla \Lambda - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) = \\ &= \vec{\Pi}_{\mathcal{I}} + \frac{e}{c} \nabla \Lambda \end{aligned} \quad (20.12)$$

Ricordando le Eq.(20.5) e la Eq.(20.6), si ha che le relazioni Eq.(20.11) e Eq.(20.12) implicano che le osservabili \vec{r} e $\vec{\Pi}_{\mathcal{I}}$, associate a quantità fisiche reali, soddisfano la relazione

$$\begin{aligned} \vec{\tilde{R}}_{\mathcal{I}} &= \vec{R}_{\mathcal{I}'} \\ \vec{\tilde{\Pi}}_{\mathcal{I}} &= \vec{\Pi}_{\mathcal{I}'} \end{aligned}$$

L'impulso \vec{P} , invece, essendo una quantità non fisica, non soddisfa una relazione analoga, infatti

$$\vec{\tilde{P}}_{\mathcal{I}} \neq \vec{P}_{\mathcal{I}'}$$

Possiamo generalizzare dicendo che

Teorema 20.2. In meccanica quantistica, per ogni vera quantità

fisica, esiste un operatore $\mathcal{G}_{\mathcal{I}}(t)$ che soddisfa la relazione

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\mathcal{I}}(t) = \mathcal{G}_{\mathcal{I}'}(t)$$

Questo teorema mostra che, eccetto per il caso estremamente speciale di \vec{R} o di una funzione del solo operatore \vec{R} , l'operatore che corrisponde a una vera quantità fisica dipende dalla particolare gauge scelta.

20.4 Effetto Aharonov-Bohm

Sebbene la meccanica quantistica sia simile alla meccanica classica in quanto è insensibile alle trasformazioni di gauge dei potenziali, è diversa nello status che assegna ai potenziali. Questo è illustrato in maniera drammatica nell'effetto Aharonov-Bohm⁽³⁾. Esso consiste in un esperimento di doppia fenditura con una piccola differenza: vi è una piccola regione schermata in cui è presente un campo magnetico non nullo e uscente dal piano della pagina. Possiamo immaginarlo dovuto a un solenoide ortogonale al foglio e abbastanza lungo da rendere il campo magnetico al suo interno uniforme. Ci chiediamo se la presenza del campo magnetico influenzi la figura d'interferenza, dato che sia nella lagrangiana sia nell'hamiltoniana non sono presenti i campi ma i potenziali. Sia $K(R, S)$ il propagatore che descrive la probabilità di andare da S a R . Questo si potrà sempre scrivere come

$$K(R, S) = K(R, 2)K(2, S) + K(R, 1)K(1, S)$$

dove 1 e 2 sono le due fenditure. Sfruttando la formulazione *path integral* della meccanica quantistica, possiamo scrivere

$$K(1, S) = \int \mathcal{D}[\vec{r}(t)] \exp\left(i \frac{\mathcal{S}[\vec{r}(t)]}{\hbar}\right)$$

dove $\mathcal{S}[\vec{r}(t)]$ è l'azione della particella. In presenza di campo magnetico l'azione della particella potrà scriversi come

$$\mathcal{S}[\vec{r}(t)] = \mathcal{S}_0[\vec{r}(t)] - \frac{e}{c} \int A_\mu dx^\mu$$

dove $\mathcal{S}_0[\vec{r}(t)]$ è l'azione in assenza di campo magnetico. Ponendoci nella gauge di Coulomb in cui $A^\mu = (0, \vec{A})$ si ha che l'azione di interazione è data da

$$\mathcal{S}_{\text{int}} = \frac{e}{c} \int \vec{A} \cdot d\vec{r}$$

Notiamo che su una curva chiusa \mathcal{C}

$$\frac{e}{c} \oint_{\mathcal{C}} \vec{A} \cdot d\vec{r} = \frac{e}{c} \int \nabla \times \vec{A} \cdot d\vec{\Sigma} = \frac{e}{c} \phi(\vec{B})$$

Consideriamo allora due traiettorie diverse che vanno da 1 a R ; l'unione della prima con la seconda percorsa in senso opposto forma una curva chiusa che non circonda il solenoide (che si suppone impenetrabile), per cui $\phi(\vec{B}) = 0$. Segue allora che \mathcal{S}_{int} è indipendente dal particolare cammino scelto che va da 1 a R .

(3) Quello che vedremo in seguito è un esperimento mentale. Per maggiori informazioni su come venne realizzato realmente questo esperimento consultare *R. G. Chambers, Phys. Rev. Lett. 5, 3 (1960)*

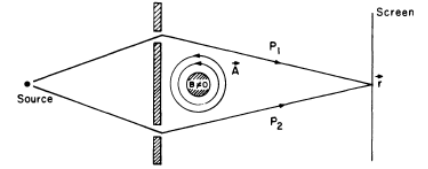


Figura 20.1: Schema dell'esperimento di Aharonov-Bohm

Possiamo quindi riscrivere il propagatore da 1 a R in presenza di campo magnetico come

(4) Posso uscire a fattore il termine $\exp(i\mathcal{S}_{\text{int}}/\hbar)$ in quanto non dipende dalla traiettoria di integrazione

$$K_A(R, 1) = \int \mathcal{D}[\vec{r}(t)] \exp\left(i\frac{\mathcal{S}_0[\vec{r}(t)]}{\hbar}\right) \exp\left(i\frac{\mathcal{S}_{\text{int}}}{\hbar}\right) =$$

$$\exp\left(i\frac{\mathcal{S}_{\text{int}}}{\hbar}\right) \int \mathcal{D}[\vec{r}(t)] \exp\left(i\frac{\mathcal{S}_0[\vec{r}(t)]}{\hbar}\right) = \exp\left(i\frac{\mathcal{S}_{\text{int}}}{\hbar}\right) K(R, 1)$$

Possiamo riscrivere quindi il propagatore come

$$K_A(R, S) = K(R, 1)K(1, S) \exp\left(i\frac{\mathcal{S}_{\text{int}}^{(1)}}{\hbar}\right) + K(R, 2)K(2, S) \exp\left(i\frac{\mathcal{S}_{\text{int}}^{(2)}}{\hbar}\right)$$

dove con $\mathcal{S}_{\text{int}}^{(1)}$ e $\mathcal{S}_{\text{int}}^{(2)}$ si sono indicati i contributi dell'azione di interazione lungo le traiettorie di tipo 1 (cioè quelle che vanno da 1 a R) e di tipo 2 (cioè quelle che vanno da 2 a R). Riscriviamo il propagatore nella forma

$$K_A(R, S) = \exp\left(i\frac{\mathcal{S}_{\text{int}}^{(1)}}{\hbar}\right) \{K(R, 1)K(1, S) +$$

$$\exp\left[i\frac{\mathcal{S}_{\text{int}}^{(2)} - \mathcal{S}_{\text{int}}^{(1)}}{\hbar}\right] K(R, 2)K(2, S)\}$$

Andiamo a studiare il fattore di fase

$$\exp\left[i\frac{\mathcal{S}_{\text{int}}^{(2)} - \mathcal{S}_{\text{int}}^{(1)}}{\hbar}\right]$$

Possiamo riscrivere la differenza tra le azioni come

$$\mathcal{S}_{\text{int}}^{(2)} - \mathcal{S}_{\text{int}}^{(1)} = \frac{e}{c} \int_{(2)} \vec{A} \cdot d\vec{r} - \frac{e}{c} \int_{(1)} \vec{A} \cdot d\vec{r} =$$

$$= \frac{e}{c} \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} = \frac{e}{c} \phi(\vec{B})$$

Possiamo estendere le traiettorie di tipo (1) e di tipo (2) fino alla sorgente S in quanto in tale regione il potenziale vettore è nullo

Adesso abbiamo un'integrale lungo un cammino chiuso, unione di uno che va da S a R passando per la fenditura 2 e di uno che va R a S passando per la fenditura 1, che circonda il solenoide, e quindi $\phi(\vec{B}) \neq 0$. La figura di interferenza viene quindi modificata dalla presenza del campo magnetico.

Tuttavia se il flusso del campo magnetico è tale che

$$\frac{e}{c\hbar} \phi(\vec{B}) = 2\pi n \implies \phi(\vec{B}) = \frac{2\pi c\hbar}{e} n$$

con n intero, allora il fattore di fase si riduce a 1 e la figura di interferenza non viene modificata. Chiameremo *quanto di flusso* la quantità

$$\phi_0 = \frac{2\pi c\hbar}{e}$$

Cerchiamo di capire come la particella veda la presenza del campo magnetico nonostante i percorsi siano scelti in regioni in cui il campo è nullo. Supponiamo di osservare la figura Fig.20.1 e di non sapere della presenza del campo magnetico. Possiamo comunque sapere che il flusso uscente dal foglio è non nullo? Sì, perché la presenza di linee di campo

di \vec{A} chiuse sono tali che $\phi(\vec{B}) = \int \vec{B} \cdot d\vec{\Sigma} = \oint \nabla \times \vec{A} \cdot d\vec{r} \neq 0$. La particella classica, tuttavia, si muove lungo uno dei due percorsi (1) o (2) e non può conoscere il valore di $\oint \nabla \times \vec{A} \cdot d\vec{r}$. Il meglio che possa fare è misurare $\nabla \times \vec{A}$ punto per punto lungo il percorso ed esso sarà sempre nullo. La particella quantistica, invece, percorre entrambi i cammini (nel senso del *path integral*) e mettendo assieme ciò che accade sui due cammini (cioè confrontando la fase relativa dei contributi dei due cammini) può dedurre non solo la presenza di \vec{B} , ma anche il flusso totale. Si noti che, nonostante la particella sia legata ad \vec{A} e non direttamente a \vec{B} , il risultato è invariante per trasformazioni di gauge.

20.5 Osservazioni conclusive

Possiamo costruire la forma corretta delle lagrangiane basandoci solamente sulle simmetrie interne del sistema, che in questo contesto sono spesso chiamate simmetrie di gauge. Partendo dalla simmetria $U(1)$ locale si può ricavare la lagrangiana

$$L = -m\psi^*\psi + i\psi^*\gamma_\mu\partial^\mu\psi + A_\mu\psi^*\gamma^\mu\psi + \frac{1}{2}(\partial^\mu A^\nu\partial_\mu A_\nu - \partial^\mu A^\nu\partial_\nu A_\mu)$$

che è la lagrangiana dell'elettrodinamica quantistica. Questa lagrangiana descrive l'interazione tra un campo carico massivo di spin 1/2 (il campo di un elettrone) e un campo non massivo di spin 1 (il campo dei fotoni, cioè il campo elettromagnetico). La lagrangiana presenta una simmetria $U(1)$ locale. Ciò significa che moltiplichiamo il campo in ogni punto per un fattore differente $\exp(i\alpha(x))$. Il parametro di trasformazione è una funzione x e quindi assume un valore differente per ogni punto dello spazio-tempo. Sfruttando il teorema di Noether, si può trovare una quantità conservata a partire dalla simmetria $U(1)$ del campo elettromagnetico, che comunemente viene interpretata come la carica elettrica.

Andiamo a vedere cosa accade in una simmetria $SU(2)$ locale. Per fare ciò dobbiamo introdurre il cosiddetto *doppietto*

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

Un siffatto doppietto contiene due campi di spin 1/2, come i campi dell'elettrone e del neutrino elettronico, che sono ruotati l'uno nell'altro da una trasformazione di tipo $SU(2)$. Usando la notazione del doppietto, possiamo scrivere una lagrangiana invariante $SU(2)$ locale:

$$L = i\psi^*\gamma_\mu(\partial^\mu - ig\mathcal{W}^\mu)\psi - \frac{1}{4}\text{Tr}(\mathcal{W}_{\mu\nu}\mathcal{W}^{\mu\nu})$$

che contiene tra campi di spin 1, cioè $\mathcal{W}^\mu = (\mathcal{W}^\mu)_i \frac{\sigma_i}{2}$ con $i = 1, 2, 3$. Abbiamo quindi bisogno di tre campi per rendere la lagrangiana invariante $SU(2)$ locale, perché il gruppo $SU(2)$ ha tre generatori $J_i = \frac{\sigma_i}{2}$. Si può provare che questa simmetria $SU(2)$ locale può essere ottenuta solamente mediante termini massivi. Questa volta, quindi, non solo i campi di spin 1 (\mathcal{W}^μ)₁ ma anche i campi di spin 1/2 devono essere non massivi. Sono, però, ammesse masse uguali per i due campi di spin 1/2, ma dagli esperimenti sappiamo che non è questo il caso: infatti la massa dell'elettrone è molto più grande della massa del neutrino elettronico. Infine, dagli esperimenti sappiamo che i tre campi di spin 1 non sono

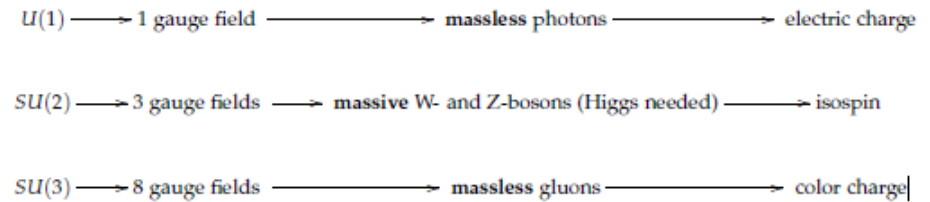
Il presente paragrafo è da considerarsi quasi un approfondimento sulle simmetrie di gauge. Spiegare in profondità cos'è una simmetria di gauge e cosa influenzi nella meccanica quantistica non è l'obiettivo principale del testo. Per chi è interessato all'argomento si consiglia il [Sch18]

privi di massa. Interpretiamo ciò dicendo che la simmetria $SU(2)$ è rotta. Questa idea è il punto di partenza per il formalismo di Higgs, che ci permette di ottenere una lagrangiana invariante localmente $SU(2)$ e contenente termini massivi. Questo funziona introducendo l'interazione con un campo di spin nullo, chiamato campo di Higgs. La lagrangiana invariante localmente $SU(2) \times U(1)$ descrive la cosiddetta interazione elettrodebole. Essa contiene sia l'interazione elettromagnetica sia una nuova interazione, detta interazione debole. Mediante il formalismo di Higgs, la simmetria $SU(2) \times U(1)$ viene rotta, rimanendo solamente una simmetria $U(1)$. L'interazione debole è mediata da tre campi massivi di spin 1, i bosoni W^\pm e Z , mentre la simmetria $U(1)$ è mediata da un campo non massivo di spin 1, il fotone. Usando il teorema di Noether si può provare che la simmetria $SU(2)$ implica la conservazione di una nuova quantità, l'isospin, che è la carica delle interazioni deboli, analoga alla carica elettrica per le interazioni elettromagnetiche. In conclusione, possiamo considerare la simmetria locale $SU(3)$, che porta a una lagrangiana descrivente una nuova interazione, detta interazione forte. Per fare ciò bisogna introdurre i cosiddetti tripletti

$$Q = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix}$$

che sono trasformati da trasformazioni di $SU(3)$ e che contengono campi di spin 1/2. Questi tre campi di spin 1/2 sono interpretati come i *quark* che trasportano differenti colori, che è l'analogo nell'interazione forte della carica elettrica nell'interazione elettromagnetica o dell'isospin nell'interazione debole. Nuovamente, i termini massivi sono proibiti, ma questa volta questo coincide con il fatto sperimentale che i corrispettivi 8 bosoni⁽⁵⁾, chiamati gluoni, sono privi di massa.

Possiamo sintetizzare quanto detto finora con questo schema esplicativo



20.6 Moto in un campo magnetico omogeneo: livelli di Landau

Determiniamo i livelli energetici di una particella in moto in un campo magnetico omogeneo costante \vec{B} diretto lungo l'asse z del riferimento scelto. Per studiare questo problema facciamo la seguente scelta di Gauge:

$$\begin{cases} A_x = -By \\ A_y = 0 \\ A_z = 0 \\ \phi = 0 \end{cases} \quad (20.13)$$

Tale scelta andrà chiaramente a influenzare la forma della funzione d'onda, lasciandone invariato il modulo quadro, infatti ricordiamo che dalla

⁽⁵⁾ 8 perché il gruppo $SU(3)$ presenta 8 generatori

Scelta della Gauge di Landau

trasformazione $A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu \Lambda$ si ha che $\psi' = \exp\{i \frac{e}{mc} \Lambda\} \psi$. Un'osservazione significativa riguardo la forma di tale potenziale vettore è che non è simmetrico per rotazioni attorno all'asse z , ovvero l'asse del campo. Le funzioni d'onda chiaramente risentiranno di tale scelta come a breve vedremo. Se per comodità si considera come particella un elettrone, l'hamiltoniano del sistema è dato da:⁽⁶⁾

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B}$$

dove l'ultimo termine riguarda l'interazione dovuta allo spin della particella. Sostituendo il potenziale vettore scelto si ha:⁽⁷⁾

$$H = \frac{1}{2m} \left(P_x + \frac{eB}{c} Y \right)^2 + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{P_z^2}{2m} + \frac{e}{mc} S_z B \quad (20.14)$$

Possiamo subito notare che l'operatore S_z commuta con l'hamiltoniano, dunque lo spin si conserva e, detto $\sigma = \pm \frac{\hbar}{2}$ il suo autovalore, quando consideriamo l'hamiltoniano applicato a uno stato nell'equazione di Schrödinger possiamo formalmente sostituire S_z con σ . La dipendenza dallo spin della funzione d'onda diventa cioè inessenziale. Scriviamo l'equazione di Schrödinger per la funzione d'onda ψ :⁽⁸⁾

$$\frac{1}{2m} \left[\left(P_x + \frac{eB}{c} Y \right)^2 + P_y^2 + P_z^2 \right] \psi = \left(E - \frac{e}{mc} \sigma B \right) \psi \quad (20.15)$$

Inoltre gli operatori P_x e P_z commutano con l'hamiltoniano in quanto quest'ultimo non contiene termini che coinvolgono X e Z . L'impulso si conserva allora lungo gli assi x e z , dove le funzioni d'onda assumono la forma rispettivamente $\exp\{i \frac{p_x x}{\hbar}\}$ e $\exp\{i \frac{p_z z}{\hbar}\}$, essendo p_x e p_z autovalori dei corrispettivi operatori che prendono valore sull'asse reale.⁽⁹⁾ Non si può dire altrettanto della componente y dell'impulso, per cui la funzione d'onda ψ si può scrivere nella forma

$$\psi(x, y, z) = \exp\left(i \frac{p_x x + p_z z}{\hbar}\right) \phi(y) \quad (20.16)$$

A questo punto sostituiamo questa forma della funzione d'onda nell'equazione di Schrödinger. Per fare ciò analizziamo ogni singolo addendo della (20.15):

- $P_z^2 \psi$:

Considerando l'operatore in forma differenziale e tenendo conto della (20.16) si ha:

$$P_z^2 \psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = p_z^2 \psi$$

- $P_y^2 \psi$:

Analogamente si ha:

$$\begin{aligned} P_y^2 \psi &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\hbar^2 \exp\left\{i \frac{p_x x + p_z z}{\hbar}\right\} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \\ &= \exp\left\{i \frac{p_x x + p_z z}{\hbar}\right\} P_y^2 \phi(y) \end{aligned}$$

(6) Si fa presente che \vec{P} è il momento coniugato dell'operatore posizione e non coincide con l'impulso cinetico $\vec{\pi}$.

(7) Si noti che stiamo utilizzando le lettere maiuscole per gli operatori, mentre gli autovalori saranno indicati in minuscolo.

(8) Poichè stiamo considerando la funzione d'onda e non lo stato, è necessario intendere gli operatori nella loro forma differenziale.

(9) Ci stiamo in sostanza mettendo negli autostati simultanei dell'hamiltoniana e di queste grandezze conservate.

$$\bullet \left(P_x + \frac{eB}{c}Y\right)^2 \psi:$$

$$\begin{aligned} \left(P_x + \frac{eB}{c}Y\right)^2 \psi &= P_x^2 \psi + \left(\frac{eB}{c}\right)^2 Y^2 \psi + 2\frac{eB}{c} P_x Y \psi = \\ &= p_x^2 \psi + \left(\frac{eB}{c}\right)^2 y^2 \psi + 2\frac{eB}{c} p_x y \psi \end{aligned}$$

Per quanto mostrato è possibile elidere gli esponenziali nella Eq.(20.15), ottenendo:

$$\frac{P_y^2}{2m} \phi(y) + \frac{\left(p_x + \frac{eB}{c}y\right)^2}{2m} \phi(y) = \left(E - \frac{e}{mc} \sigma B - \frac{p_z^2}{2m}\right) \phi(y) \quad (20.17)$$

A questo punto vediamo come rendere più chiaro il problema rinominando alcuni termini. Siano $\varepsilon = E - \frac{e}{mc} \sigma B - \frac{p_z^2}{2m}$, $\omega = \frac{eB}{mc}$ e $y_0 = -\frac{cp_x}{eB} = -\frac{p_x}{m\omega}$. La Eq.(20.17) diventa:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 \phi(y) + \frac{1}{2} m \omega^2 (y - y_0)^2 \phi(y) = \varepsilon \phi(y) \quad (20.18)$$

che è l'equazione agli autovalori dell'hamiltoniano

$$H' = \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (y - y_0)^2$$

(10) Si osservi che y_0 ed ε dipendono dagli stati considerati in quanto funzioni di p_x , σ e p_z . ω invece è una proprietà tipica del sistema.

ovvero un oscillatore armonico lungo l'asse y , centrato in y_0 .⁽¹⁰⁾ La soluzione del problema agli autovalori per tale sistema è ben nota e si ha:

$$\varepsilon = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

da cui, nota la definizione di ε , si ottengono i livelli energetici della particella in moto nel campo magnetico uniforme, detti anche *livelli di Landau*:

Livelli di Landau

$$E = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{e}{mc} \sigma B \quad (20.19)$$

mentre come sappiamo le autofunzioni sono date da

$$\phi(y) = \frac{1}{\pi^{1/4} b^{1/2} \sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{2b^2}\right) H_n\left(\frac{(y - y_0)}{b}\right)$$

dove $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ e H_n sono i polinomi di Hermite. Le autofunzioni negli stati considerati saranno:

$$\psi_{n,p_x,p_z}(x,y,z) = \exp\left(i \frac{p_x x + p_z z}{\hbar}\right) \phi(y) \quad (20.20)$$

Si noti come p_z compaia solo all'esponenziale mentre p_x compaia sia nell'esponenziale che nei polinomi di Hermite. Nella fisica classica se la particella ha velocità sul piano perpendicolare al campo, non si osserva alcun effetto lungo l'asse del campo, oppure se la particella ha anche una componente di velocità parallela al campo si ha una componente rettilinea uniforme lungo tale asse (in questo caso la traiettoria diventa un'elica cilindrica). Non a caso la componente z della funzione d'onda Eq.(20.20) è la funzione d'onda per una particella libera.

Ragioniamo adesso sui livelli energetici e sulle eventuali degenerazioni. Dalla Eq.(20.19) si vede infatti che l'energia non dipende da p_x , il quale dunque può variare con continuità sull'asse reale una volta fissati i parametri da cui dipende l'energia senza che quest'ultima cambi (p_x è un autovalore libero). In queste condizioni allora si ha una degenerazione infinita dei livelli energetici.

Osserviamo inoltre che, una volta fissato p_x (quantità conservata), ciò non implica che la particella si muova con velocità costante lungo l'asse x . Come dicevamo in precedenza, infatti, impulso coniugato e impulso cinetico non coincidono:

$$\pi_x = P_x - \frac{e}{c}A_x = P_x + \frac{eB}{c}Y$$

Notiamo che, come ci aspettavamo, l'impulso cinetico lungo x non è conservato in quanto, a differenza di P_x , Y non è una quantità conservata. In base alle definizioni date in precedenza, possiamo scrivere:

$$\pi_x = P_x + m\omega Y = m\omega \left(Y + \frac{P_x}{m\omega} \right) = m\omega(Y - Y_0)$$

ed essendo $\pi_x = mV_x$ si potrà scrivere $V_x = \omega(Y - Y_0)$. Mostriamo adesso che $\dot{X} = V_x$. Ricordiamo infatti che ⁽¹¹⁾

(11) Stiamo qui utilizzando la rappresentazione di Heisenberg.

$$\dot{X} = \frac{1}{i\hbar}[X, H]$$

per cui dalla definizione dell'hamiltoniano Eq.(20.14) si ottiene

$$\dot{X} = \frac{1}{i\hbar} \left[X, \frac{(P_x + \frac{eB}{c}Y)^2}{2m} \right] = \frac{1}{i\hbar} \left[X, \frac{1}{2}m\omega^2 \left(Y + \frac{P_x}{m\omega} \right)^2 \right]$$

Si può mostrare che il risultato ottenuto è proprio V_x . Passando ai valori medi si ottiene che $\langle \dot{X} \rangle = \omega(y - y_0)$.

Consideriamo adesso il moto lungo l'asse y direttamente nel caso classico.

$$\dot{y} = \{y, \mathcal{H}\} = \left\{ y, \frac{p_y^2}{2m} \right\} = \frac{p_y}{m}$$

cioè l'impulso cinetico coincide con l'impulso coniugato lungo l'asse y , infatti $A_y = 0$. Cerchiamo l'equazione del moto:

$$\begin{aligned} \dot{p}_y = \{p_y, \mathcal{H}\} &= \left\{ p_y, \frac{1}{2}m\omega^2 \left(y + \frac{p_x}{m\omega} \right)^2 \right\} = -m\omega^2 \left(y + \frac{p_x}{m\omega} \right) = \\ &= -m\omega^2(y - y_0) = m\ddot{y} \end{aligned}$$

Abbiamo quindi ricavato, nel caso classico, le due equazioni:

Caso classico

$$\begin{cases} \dot{x} = \omega(y - y_0) \\ \ddot{y} = -\omega^2(y - y_0) \end{cases}$$

Dalla seconda equazione si ottiene come soluzione $y - y_0 = A \cos(\omega t)$, che sostituita nella prima ci restituisce $x = A \sin(\omega t) + x_0$. In definitiva abbiamo ricavato il risultato già noto per cui il moto di una particella immersa in un campo magnetico uniforme diretto lungo l'asse z ha come

componente sul piano xy una traiettoria circolare di centro immobile (x_0, y_0) :

$$\begin{cases} x - x_0 = A \sin(\omega t) \\ y - y_0 = A \cos(\omega t) \end{cases}$$

con $x_0 = x + \frac{\dot{y}}{\omega} = x + \frac{p_y}{m\omega}$.

Caso quantistico

Tornando alla meccanica quantistica, possiamo subito affermare che la quantità y_0 che abbiamo visto conservarsi corrisponde alla coordinata y del centro della circonferenza classica. Le equazioni del caso classico appena ricavate possono essere in maniera naturale estese al caso quantistico passando a variabili operatoriali. In particolare consideriamo adesso l'operatore

$$X_0 = X + \frac{P_y}{m\omega}$$

Si vede facilmente che X_0 commuta con l'hamiltoniano, dunque è una quantità conservata, che classicamente corrisponde al centro della traiettoria circolare. Infatti:

$$\begin{aligned} [X_0, H] &= \left[X + \frac{P_y}{m\omega}, \frac{P_y^2}{2m} + \frac{(P_x + \frac{eB}{c}Y)^2}{2m} \right] = \\ &= \left[X, \frac{(P_x + \frac{eB}{c}Y)^2}{2m} \right] + \left[\frac{P_y}{m\omega}, \frac{(P_x + \frac{eB}{c}Y)^2}{2m} \right] = \\ &= \frac{i\hbar}{m} \left(P_x + \frac{eB}{c}Y \right) + \frac{1}{m\omega} \frac{1}{m} \left(P_x + \frac{eB}{c}Y \right) \left(\frac{eB}{c} \right) = \\ &= \frac{i\hbar}{m} \left[\left(P_x + \frac{eB}{c}Y \right) - \left(P_x + \frac{eB}{c}Y \right) \frac{eB}{mc\omega} \right] = 0 \end{aligned}$$

A questo punto però compare un aspetto che differenzia profondamente il caso quantistico da quello classico. Infatti è banale mostrare che $[X_0, Y_0] \neq 0$, dunque le coordinate della traiettoria circolare sul piano xy non possono essere determinate simultaneamente. ⁽¹²⁾ Dunque nella descrizione che stiamo facendo, cioè negli autostati simultanei di H, P_x, P_z, S_z , questo implica che sarà nota la coordinata y_0 del centro della circonferenza, ma altrettanto non si può dire della coordinata x . In particolare y_0 dipende, dalla sua definizione, da p_x , il quale varia, come abbiamo visto, sull'asse reale causando una degenerazione infinita ⁽¹³⁾. A breve vedremo come quantizzare l'impulso p_x , rendendo la degenerazione finita, seppur molto grande. Per quanto riguarda le funzioni d'onda, questo discorso si traduce nel dire che lungo l'asse y si ha una funzione d'onda centrata in y_0 , mentre lungo l'asse x la funzione d'onda avrà un valore indeterminato di x_0 . Ciò rende la funzione d'onda Eq.(20.20) asimmetrica rispetto alle coordinate x e y . Quest'ultimo aspetto non è banale e vale la pena approfondire le motivazioni di tale asimmetria. Nella fisica classica il problema presenta chiaramente simmetria cilindrica rispetto all'asse z , ma in meccanica quantistica adoperando una trasformazione di Gauge viene trasformata anche la funzione d'onda, come visto in Eq.(20.9). Poiché abbiamo scelto un potenziale vettore che non presenta simmetria rotazionale attorno a tale asse, è lecito aspettarsi che la funzione d'onda possa risentire della scelta della Gauge, ed effettivamente è quello che si verifica. Evidenziamo infine che la scelta di Gauge non è l'unica motivazione che influenza l'asimmetria della funzione d'onda: è fondamentale anche la scelta degli autostati (in

(12) Si noti infatti che l'operatore $Y_0 = -\frac{P_x}{m\omega}$ commuta con l'hamiltoniano come P_x e negli autostati considerati è sempre determinato p_x .

(13) Quindi anche y_0 può essere scelto su tutto \mathbb{R} .

Asimmetria della funzione d'onda

questo caso sono autostati di Y_0 ma non di X_0).

Vediamo adesso come quantizzare l'impulso p_x . Per fare ciò confiniamo il sistema in un dominio finito lungo l'asse x , di lunghezza L_x , e imponiamo alla funzione d'onda le condizioni periodiche a contorno:

$$\psi(0, y, z) = \psi(L_x, y, z)$$

da cui, detto $p_x = \hbar k_x$, si ottiene la relazione

$$1 = \exp(ik_x L_x)$$

che è verificata se e solo se $k_x L_x = 2\pi j$, con $j \in \mathbb{Z}$. Ciò significa che p_x è quantizzato in multipli interi di

$$\Delta p_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x} \quad (20.21)$$

Fissato l'indice n dell'energia, vogliamo contare quanti diversi valori di p_x sono possibili, per determinare il numero di sottolivelli. Risulta conveniente confinare il sistema anche lungo la direzione y , quindi consideriamo un dominio di area $S = L_x L_y$. Osserviamo infatti che, essendo $y_0 = -\frac{p_x}{m\omega}$, quantizzando la componente x dell'impulso la coordinata y del centro della circonferenza non potrà più assumere tutti i valori dell'asse reale. In particolare essa sarà quantizzata a salti di

$$\Delta y = -\frac{\Delta p_x}{m\omega}$$

Risulta inoltre naturale imporre che $0 < y_0 < L_y$, in quanto l'aver confinato il sistema implica l'appartenenza al dominio S del centro della traiettoria circolare. Tale imposizione limiterà allora il numero di valori possibili di p_x , e, detto $N = \frac{L_y}{\Delta y}$ il numero di possibili y_0 , dalla Eq.(20.21) si ottiene che

$$\Delta y = -\frac{2\pi\hbar}{m\omega L_x} = \frac{L_y}{N}$$

da cui si ricava che

$$N = \frac{L_x L_y m\omega}{2\pi\hbar} = \frac{eSB}{2\pi\hbar c}$$

che chiaramente è anche il numero di possibili p_x nel dominio considerato, e quindi anche il numero di sottolivelli una volta fissato n .

Definendo infine $\frac{\hbar c}{e} = \phi_0(B)$ come *quanto di flusso*, e ricordando che SB è il flusso del campo magnetico (diretto lungo l'asse z) attraverso il dominio considerato, si può scrivere il numero di sottolivelli come

$$N = \frac{\phi(B)}{\phi_0(B)} \quad (20.22)$$

Osserviamo che a questo punto la degenerazione è stata resa finita, seppur molto grande, vista la differenza di ordine di grandezza tra flusso e quanto di flusso.

Degenerazione finita in caso di confinazione spaziale del problema

PARTE V
Metodi di approssimazione

Teoria perturbativa indipendente dal tempo

CAPITOLO

21

Introduzione

Lo studio dei sistemi fisici conservativi in meccanica quantistica è basato, come visto nei precedenti capitoli, sullo studio dell'equazione agli autovalori dell'hamiltoniana. Abbiamo già studiato due esempi di sistemi fisici molto importanti (l'oscillatore armonico e l'atomo idrogenoide) le cui hamiltoniane sono abbastanza semplici da rendere le loro equazioni agli autovalori risolubili in maniera esatta. Tuttavia, ciò accade solamente per un piccolo numero di problemi. In generale, l'equazione è così complicata da essere impossibile trovare soluzioni in maniera analitica. Ad esempio, non sappiamo ancora come trattare in maniera esatta gli atomi polielettronici, come l'atomo di elio. Inoltre, la stessa teoria sull'atomo di idrogeno esposta nel capitolo Cap.16 tiene in considerazione solamente le interazioni elettrostatiche tra protone ed elettrone; quando aggiungiamo le correzioni relativistiche a questa interazione fondamentale, l'equazione ottenuta per l'atomo di idrogeno non può più essere risolta in maniera esatta. Questi problemi vanno, quindi, risolti in maniera numerica, spesso con un computer. Tuttavia, esistono dei metodi di approssimazione che ci permettono, in certi casi, di ottenere in maniera analitica delle soluzioni approssimate dell'equazione agli autovalori. Studieremo in questo capitolo uno di questi metodi, la teoria perturbativa indipendente dal tempo. Essa è ampiamente usata in meccanica quantistica e corrisponde all'approccio tipico che un fisico ha nei confronti di un qualunque problema. Nello studiare un fenomeno o un sistema fisico, si parte isolando gli effetti principali, responsabili delle caratteristiche più evidenti del fenomeno o del sistema. Una volta che questi sono stati compresi, si prova a spiegare alcuni dettagli prendendo in considerazione degli effetti secondari che erano stati trascurati in prima approssimazione. Questi effetti secondari vengono trattati usando la teoria perturbativa.

21.1	Descrizione del metodo . . .	299
21.2	Perturbazione di un livello non degenerare	302
21.3	Perturbazione di un livello degenerare	304
21.4	Oscillatore armonico 1D perturbato	307
21.5	Oscillatore armonico 2D accoppiato	310
21.6	Effetto Stark	311

21.1 Descrizione del metodo

La teoria perturbativa si può applicare quando l'hamiltoniana H del sistema fisico può essere scritta nella forma

$$H = H_0 + W$$

dove autovalori e autovettori di H_0 sono noti e W è molto piccolo rispetto a H_0 . L'operatore H_0 , che non dipende dal tempo, è chiamato *hamiltoniana non perturbata*, mentre W è la *perturbazione*. Se W non dipende dal tempo diremo che è una *perturbazione stazionaria*; questo è il caso che considereremo in questo capitolo. Il problema è, quindi, determinare le alterazioni prodotte nei livelli energetici del sistema e nei suoi stati stazionari dalla presenza della perturbazione W . Quando diciamo che W è piccolo rispetto a H_0 intendiamo che gli elementi di matrice di W sono molto più piccoli degli elementi di matrice di H_0 ⁽¹⁾. Per rendere questo concetto più esplicito, possiamo assumere che W sia proporzionale a un parametro reale λ che sia adimensionale e molto più piccolo di 1.

(1) Più precisamente il punto importante è che gli elementi di matrice di W siano molto più piccoli della differenza tra gli autovalori di H_0 , come vedremo in seguito.

$$W = \lambda V$$

$$\lambda \ll 1$$

dove V è un operatore i cui elementi di matrice sono dello stesso ordine di grandezza di quelli di H_0 . La teoria perturbativa consiste nell'espandere in serie di potenze di λ gli autovalori e gli autostati di H , prendendo in considerazione solamente un numero finito di termini (spesso solo uno o al più due) di questa espansione.

Assumeremo che gli autostati e gli autovalori della hamiltoniana non perturbata H_0 siano noti. Inoltre, assumeremo che l'hamiltoniana non perturbata abbia uno spettro discreto e indicheremo i suoi autovalori con il simbolo E_p^0 . I corrispondenti autostati saranno indicati dal simbolo $|\varphi_p^i\rangle$, dove l'indice aggiuntivo i ci permette, nel caso di un autovalore degenero E_p^0 , di distinguere tra i vari vettori di una base ortonormale del sottospazio associato. Si ha quindi:

$$H_0 |\varphi_p^i\rangle = E_p^0 |\varphi_p^i\rangle$$

dove il set di vettori $\{|\varphi_p^i\rangle\}$ forma una base ortonormale dello spazio degli stati.

$$\begin{aligned} \langle \varphi_p^i | \varphi_{p'}^{i'} \rangle &= \delta_{pp'} \delta_{ii'} \\ \sum_p \sum_i |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i| &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

Con le posizioni fatte, possiamo considerare l'hamiltoniana del sistema come dipendente in maniera continua dal parametro λ che caratterizza l'intensità della perturbazione

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V$$

Quando $\lambda = 0$ l'hamiltoniana $H(\lambda)$ è quella non perturbata H_0 . Gli autovalori $E(\lambda)$ di $H(\lambda)$ sono in generale funzioni di λ . $H(\lambda)$ può in generale avere uno o più autovalori degeneri. È inoltre possibile che più autovalori distinti $E(\lambda)$ tendano alla stessa energia non perturbata E_p^0 per $\lambda \rightarrow 0$. Diremo che l'effetto della perturbazione è quella di rimuovere la degenerazione del corrispondente autovalore di H_0 .

Stiamo cercando autostati $|\psi(\lambda)\rangle$ e autovalori $E(\lambda)$ dell'operatore hermitiano $H(\lambda)$, che soddisfino l'equazione agli autovalori

$$H(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle$$

Assumeremo che⁽²⁾ $E(\lambda)$ e $|\psi(\lambda)\rangle$ possano essere espansi in serie di potenze di λ :

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1 + \lambda^2 \varepsilon_2 + \dots \\ |\psi(\lambda)\rangle &= |0\rangle + \lambda |1\rangle + \lambda^2 |2\rangle + \dots \end{aligned}$$

Sostituendo queste espansioni e la definizione di $H(\lambda)$ nella sua equazione agli autovalori troviamo:

$$(H_0 + \lambda V) \left[\sum_{q=0}^{+\infty} \lambda^q |q\rangle \right] = \left[\sum_{q'=0}^{+\infty} \lambda^{q'} \varepsilon_{q'} \right] \left[\sum_{q=0}^{+\infty} \lambda^q |q\rangle \right]$$

Richiediamo che questa equazione sia soddisfatta per λ piccolo ma arbitrario; dobbiamo quindi eguagliare i coefficienti delle potenze uguali di λ su entrambi i membri. Otteniamo dunque

- per i termini di ordine 0 in λ :

$$H_0 |0\rangle = \varepsilon_0 |0\rangle \quad (21.1)$$

- per i termini di ordine 1 in λ :

$$H_0 |1\rangle + V |0\rangle = \varepsilon_0 |1\rangle + \varepsilon_1 |0\rangle \quad (21.2)$$

- per i termini di ordine 2 in λ :

$$H_0 |2\rangle + V |1\rangle = \varepsilon_0 |2\rangle + \varepsilon_1 |1\rangle + \varepsilon_2 |0\rangle \quad (21.3)$$

- per i termini di ordine q in λ :

$$(H_0 - \varepsilon_0) |q\rangle + (V - \varepsilon_1) |q-1\rangle - \varepsilon_2 |q-2\rangle - \dots - \varepsilon_q |0\rangle = 0$$

Ci limiteremo allo studio delle prime tre equazioni, cioè supporremo di poter trascurare nell'espansione in serie termini di ordine maggiore di 2 in λ .

Sappiamo che l'equazione agli autovalori di $H(\lambda)$ definisce $|\psi(\lambda)\rangle$ solo a meno di un fattore costante. Possiamo quindi scegliere la norma di $|\psi(\lambda)\rangle$ e la sua fase: richiederemo che $|\psi(\lambda)\rangle$ sia normalizzato e sceglieremo la sua fase in modo che il prodotto scalare $\langle 0|\psi(\lambda)\rangle$ sia reale. All'ordine 0 questo implica che lo stato $|0\rangle$ sia normalizzato

$$\langle 0|0\rangle = 1 \quad (21.4)$$

La sua fase, tuttavia, rimane arbitraria. Vedremo in seguito come potrà essere fissata in alcuni casi particolari. Al primo ordine la norma quadra di $|\psi(\lambda)\rangle$ è

$$\begin{aligned} \langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle &= [\langle 0| + \lambda \langle 1|] [\langle 0| + \lambda |1\rangle] + \mathcal{O}(\lambda^2) = \\ &= \langle 0|0\rangle + \lambda [\langle 0|1\rangle + \langle 1|0\rangle] + \mathcal{O}(\lambda^2) \end{aligned}$$

Usando il risultato precedente, si vede che questa espressione è uguale a 1 al primo ordine se il termine in λ è nullo. Il dover imporre che il prodotto scalare $\langle 0|\psi(\lambda)\rangle$ sia reale implica che il prodotto scalare $\langle 0|1\rangle$ sia reale, poiché λ è un parametro reale. Otteniamo quindi

$$\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0 \quad (21.5)$$

⁽²⁾ Questa assunzione non è ovvia da un punto di vista matematico; il problema principale è la convergenza della serie.

Sfruttando un ragionamento analogo per il secondo ordine in λ si trova

$$\langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle \quad (21.6)$$

e per il q -esimo ordine si trova

$$\langle 0|q\rangle = \langle q|0\rangle = -\frac{1}{2}[\langle q-1|1\rangle + \langle q-2|2\rangle + \dots + \langle 1|q-1\rangle]$$

Limitandoci al secondo ordine in λ , le equazioni della perturbazione sono Eq.(21.1), Eq.(21.2) e Eq.(21.3) con le condizioni al contorno imposte da Eq.(21.4), Eq.(21.5) e Eq.(21.6).

L'equazione Eq.(21.1) esprime il fatto che $|0\rangle$ è un autostato di H_0 con autovalore ε_0 , dunque ε_0 appartiene allo spettro di H_0 . Questo era un risultato atteso in quanto ciascun autovalore di $H(\lambda)$ tende a una delle energie non perturbate quando $\lambda \rightarrow 0$. Possiamo quindi fissare $\varepsilon_0 = E_n^0$ essendo E_n^0 uno degli autovalori di H_0 .

Per studiare l'influenza della perturbazione W dobbiamo considerare separatamente il caso di livelli non degeneri e di livelli degeneri di H_0 .

21.2 Perturbazione di un livello non degeneri

Sia E_n^0 un autovalore non degeneri di H_0 e sia $|\varphi_n\rangle$ l'autovettore a esso associato, che è unico a meno di un fattore costante. Si vogliono determinare le variazioni in questa energia non perturbata e nel corrispondente stato stazionario prodotte dalla presenza della perturbazione W nella hamiltoniana. Per fare questo dobbiamo usare le equazioni della perturbazione al primo e al secondo ordine con le corrispondenti condizioni al contorno. Riprendendo quanto trovato nel paragrafo precedente, poiché $\varepsilon_0 = E_n^0$, sfruttando la relazione Eq.(21.1), si ha che $|0\rangle$ è proporzionale a $|\varphi_n\rangle$. Poiché i due stati sono entrambi normalizzati possiamo porre

$$|0\rangle = |\varphi_n\rangle \quad (21.7)$$

Correzioni al primo ordine:
energia

quindi, quando $\lambda \rightarrow 0$, troviamo nuovamente lo stato non perturbato $|\varphi_n\rangle$ con la stessa fase. Indicheremo con $E_n(\lambda)$ l'autovalore di $H(\lambda)$ che, per $\lambda \rightarrow 0$, tende all'autovalore E_n^0 di H_0 . Possiamo adesso calcolare i primi termini dell'espansione in serie di potenze di λ di $E_n(\lambda)$ e $|\psi(\lambda)\rangle$. Iniziamo determinando ε_1 e $|1\rangle$ dall'equazione Eq.(21.2) con la condizione al contorno Eq.(21.5). Proiettando la Eq.(21.2) sullo stato $|\varphi_n\rangle$ si ottiene

$$\langle \varphi_n | H_0 | 1 \rangle + \langle \varphi_n | V | 0 \rangle = \varepsilon_0 \langle \varphi_n | 1 \rangle + \varepsilon_1 \langle \varphi_n | 0 \rangle \quad (21.8)$$

Poiché $|0\rangle = |\varphi_n\rangle$, il termine $\langle \varphi_n | H_0 | 1 \rangle$ si può scrivere come, applicando H_0 a sinistra,

$$E_n^0 = \varepsilon_0 \quad \langle \varphi_n | H_0 | 1 \rangle = E_n^0 \langle \varphi_n | 1 \rangle = \varepsilon_0 \langle \varphi_n | 1 \rangle$$

Sfruttando la Eq.(21.7), la Eq.(21.8) si può scrivere come

$$\varepsilon_1 = \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle \quad (21.9)$$

Nel caso di uno stato non degeneri E_n^0 , l'autovalore $E_n(\lambda)$ di $H(\lambda)$ che corrisponde a E_n^0 si può scrivere al primo ordine nella perturbazione $W = \lambda V$ come

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle \quad (21.10)$$

La correzione al primo ordine su un livello non degenero di energia E_n^0 è semplicemente uguale al valor medio della perturbazione W nello stato non perturbato $|\varphi_n\rangle$.

La proiezione Eq.(21.8) ovviamente non esaurisce tutte le informazioni contenute nell'equazione della perturbazione Eq.(21.2). Dobbiamo adesso proiettare questa equazione su tutti i vettori della base $\{|\varphi_p^i\rangle\}$. Usando Eq.(21.7) e $\varepsilon_0 = E_n^0$ si ottiene

$$\langle \varphi_p^i | H_0 | 1 \rangle + \langle \varphi_p^i | V | \varphi_n \rangle = E_n^0 \langle \varphi_p^i | 1 \rangle + \varepsilon_1 \langle \varphi_p^i | \varphi_n \rangle \quad \forall p \neq n$$

Poiché gli autovettori H_0 associati a diversi autovalori sono ortogonali l'ultimo termine, $\varepsilon_1 \langle \varphi_p^i | \varphi_n \rangle$, è nullo. Inoltre, nel primo termine, possiamo applicare H_0 a sinistra ottenendo infine

$$E_p^0 \langle \varphi_p^i | 1 \rangle + \langle \varphi_p^i | V | \varphi_n \rangle = E_n^0 \langle \varphi_p^i | 1 \rangle \quad (21.11)$$

che ci restituisce i coefficienti dell'espansione del vettore $|1\rangle$ sulla base di stati non perturbati, tranne $|\varphi_n\rangle$ ⁽³⁾

$$\langle \varphi_p^i | 1 \rangle = \frac{\langle \varphi_p^i | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} \quad (21.12)$$

Possiamo quindi scrivere il vettore $|1\rangle$ come

$$|1\rangle = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle \quad (21.13)$$

Dunque, al primo ordine nella perturbazione $W = \lambda V$, l'autostato $|\psi_n(\lambda)\rangle$ di $H(\lambda)$ corrispondente allo stato non perturbato $|\varphi_n\rangle$ è

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (21.14)$$

La correzione al primo ordine del vettore di stato è una combinazione lineare di tutti gli stati non perturbati tranne $|\varphi_n\rangle$: diremo che la perturbazione W produce una combinazione dello stato non perturbato $|\varphi_n\rangle$ con tutti gli altri autostati di H_0 . Il contributo di uno stato $|\varphi_p^i\rangle$ è nullo se la perturbazione W presenta un elemento di matrice nullo tra $|\varphi_p^i\rangle$ e $|\varphi_n\rangle$. In generale più è grande l'elemento di matrice $\langle \varphi_p^i | V | \varphi_n \rangle$ e più il livello E_p^0 è vicino al livello E_n^0 , allora più grande è il contributo di $|\varphi_p^i\rangle$ al vettore di stato perturbato $|\psi_n(\lambda)\rangle$. Come anticipato l'ipotesi che gli elementi di matrice di W siano molto più piccoli degli elementi di matrice di H_0 non è sufficiente: la correzione al primo ordine del vettore di stato è piccola solo se gli elementi di matrice di W che non stanno sulla diagonale sono molto più piccoli delle corrispondenti differenze tra le energie non perturbate.

Vi sono dei particolari casi in cui è necessario calcolare le correzioni sull'energia al secondo ordine; ciò accade quando la correzione all'energia al primo ordine è nulla o quando essa non è piccola quanto ci si aspettava. Per calcolare ε_2 proiettiamo l'equazione Eq.(21.3) sullo stato $|\varphi_n\rangle$ e sfruttiamo la Eq.(21.7) e il fatto che $\varepsilon_0 = E_n^0$:

$$\langle \varphi_n | H_0 | 2 \rangle + \langle \varphi_n | V | 1 \rangle = E_n^0 \langle \varphi_n | 2 \rangle + \varepsilon_1 \langle \varphi_n | 1 \rangle + \varepsilon_2 \langle \varphi_n | 0 \rangle \quad (21.15)$$

Correzioni al primo ordine: stato

(3) Questo può essere spiegato in due modi differenti. Il primo è quello visto precedentemente, per cui $\langle 0 | 1 \rangle = \langle \varphi_n | 1 \rangle = 0$. Si può anche procedere come segue: lo stato $|1\rangle$ può essere decomposto come $|1\rangle = |1\rangle_{\parallel} + |1\rangle_{\perp}$, dove $|1\rangle_{\parallel}$ è parallelo a $|0\rangle$ e $|1\rangle_{\perp}$ è ortogonale a $|0\rangle$ e poiché ogni stato è definito a meno di una costante moltiplicativa, possiamo scegliere $|1\rangle = |1\rangle_{\perp}$ e inglobare la componente parallela di $|1\rangle$ in $|\varphi_n\rangle$.

Correzioni al secondo ordine: energia

Sfruttando le stesse considerazioni fatte in precedenza si ha:

$$\langle \varphi_n | H_0 | 2 \rangle = E_n^0 \langle \varphi_n | 2 \rangle \quad (21.16)$$

Inoltre, poiché $|1\rangle$ è una combinazione lineare di tutti gli stati non perturbati tranne $|\varphi_n\rangle$, il termine $\varepsilon_1 \langle \varphi_n | 1 \rangle$ è nullo. Troviamo quindi

$$\varepsilon_2 = \langle \varphi_n | V | 1 \rangle \quad (21.17)$$

e sostituendo l'espressione trovata per $|1\rangle$ si ottiene

$$\varepsilon_2 = \langle \varphi_n | V | 1 \rangle = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | V | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} \quad (21.18)$$

Questo risultato ci permette di scrivere l'energia $E_n(\lambda)$ al secondo ordine nella perturbazione $W = \lambda V$ come

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | V | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (21.19)$$

Osserviamo che la correzione al secondo ordine dell'energia per lo stato $|\varphi_n\rangle$ dovuta allo stato $|\varphi_p^i\rangle$ ha lo stesso segno di $E_n^0 - E_p^0$. Possiamo quindi dire che più lo stato $|\varphi_p^i\rangle$ è vicino allo stato $|\varphi_n\rangle$, e più è grande l'elemento di matrice $|\langle \varphi_p^i | V | \varphi_n \rangle|$, maggiormente questi due livelli si respingeranno l'uno dall'altro. Inoltre la correzione al secondo ordine dell'energia per lo stato fondamentale è sempre negativa.

21.3 Perturbazione di un livello degenere

Supponiamo adesso che il livello E_n^0 di cui vogliamo studiare la perturbazione sia degenere con degenerazione g_n . Indicheremo con \mathcal{E}_n^0 il corrispondente sottospazio di H_0 . In questo caso la scelta

$$\varepsilon_0 = E_n^0 \quad (21.20)$$

non permette di determinare il vettore $|0\rangle$, in quanto l'equazione Eq.(21.1) può essere soddisfatta da ogni combinazione lineare dei g_n vettori $|\varphi_n^i\rangle$ con $i = 1, \dots, g_n$. Sappiamo solamente che $|0\rangle$ appartiene al sottospazio \mathcal{E}_n^0 da essi generato. Proveremo che sotto l'azione della perturbazione W il livello E_n^0 dà origine a dei sottolivelli distinti. Il loro numero, f_n , è compreso tra 1 e g_n . Se $f_n < g_n$, alcuni di questi sottolivelli sono degeneri dato che il numero totale di autovettori di H ortogonali associati con gli f_n sottolivelli è sempre uguale a g_n . Per calcolare autovalori e autostati dell'hamiltoniana $H(\lambda)$ ci limiteremo al primo ordine in λ per le energie e all'ordine zero per gli autostati. Per determinare ε_1 e $|0\rangle$ dobbiamo proiettare l'equazione Eq.(21.2) sulla base formata dai g_n vettori $|\varphi_n^i\rangle$. Poiché essi sono autovettori di H_0 con autovalore $E_n^0 = \varepsilon_0$, otteniamo le g_n relazioni

$$\langle \varphi_n^i | V | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle \quad (21.21)$$

Inseriamo adesso tra V e $|0\rangle$ l'identità $\mathbb{1} = \sum_p \sum_i |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i|$

$$\sum_p \sum_{i'} \langle \varphi_n^i | V | \varphi_p^{i'} \rangle \langle \varphi_p^{i'} | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle \quad (21.22)$$

Il vettore $|0\rangle$, che appartiene al sottospazio associato ad E_n^0 , è ortogonale a tutti i vettori di base $|\varphi_p^{i'}\rangle$ con $p \neq n$. Dunque nel primo membro della precedente equazione la somma sull'indice p si riduce a un solo termine, quello con $p = n$. Otteniamo quindi

$$\sum_{i'}^{g_n} \langle \varphi_n^i | V | \varphi_n^{i'} \rangle \langle \varphi_n^{i'} | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle \quad (21.23)$$

Possiamo riarrangiare i g_n^2 numeri $\langle \varphi_n^i | V | \varphi_n^{i'} \rangle$, dove n è fissato e $i, i' = 1, \dots, g_n$, in una matrice $g_n \times g_n$ avente indice di riga i e indice di colonna i' . Denoteremo questa matrice quadrata con $V^{(n)}$ ed altro non è che la restrizione di V al sottospazio \mathcal{E}_n^0 . All'interno del sottospazio \mathcal{E}_n^0 la precedente relazione può essere trasformata in un'equazione vettoriale; basta ricordare che $V^{(n)}$ è proprio la restrizione di V al sottospazio $\mathcal{E}_n^{0(4)}$. Otterremo quindi:

$$V^{(n)} |0\rangle = \varepsilon_1 |0\rangle$$

Dunque, per calcolare gli autovalori al primo ordine e gli autostati all'ordine zero dell'hamiltoniana corrispondenti a un livello degenere non perturbato E_n^0 , dobbiamo diagonalizzare la matrice $W^{(n)} = \lambda V^{(n)}$, che rappresenta la perturbazione W , all'interno del sottospazio \mathcal{E}_n^0 associato all'autovalore E_n^0 . Studiamo in maniera più dettagliata gli effetti della perturbazione W su un livello degenere E_n^0 . Siano ε_1^j con $j = 1, \dots, f_n^{(1)}$ le radici distinte del polinomio caratteristico associato a $V^{(n)}$. Poiché tale operatore è hermitiano, i suoi autovalori sono tutti reali e la somma delle loro degenerazioni è uguale a g_n , con $g_n \geq f_n^{(1)}$. Ciascun autovalore introduce una differente correzione sull'energia. Dunque, sotto l'influenza della perturbazione $W = \lambda V$, il livello degenere E_n^0 si divide, al primo ordine, in $f_n^{(1)}$ sottolivelli distinti le cui energie sono

$$E_{n,j}(\lambda) = E_n^0 + \lambda \varepsilon_1^j \quad j = 1, \dots, f_n^{(1)} \leq g_n$$

Se $f_n^{(1)} = g_n$, diremo che, al primo ordine, la perturbazione W rimuove completamente la degenerazione del livello E_n^0 . Se $f_n^{(1)} < g_n$, il livello degenere E_n^0 rimane parzialmente degenere.

Quando si usa il metodo perturbativo per tutte le energie dello spettro di H_0 , bisogna diagonalizzare la perturbazione W in ciascun sottospazio \mathcal{E}_n^0 associato ai livelli degeneri. Ciò è molto più semplice rispetto a diagonalizzare l'intera hamiltoniana in tutto lo spazio degli stati. La teoria perturbativa, infatti, ci permette di ignorare gli elementi di matrice di W tra gli autostati di H_0 che appartengono a sottospazi diversi. Dunque, invece di dover diagonalizzare una matrice generalmente infinita, dobbiamo diagonalizzare, per ognuna delle energie E_n^0 in considerazione, una matrice di dimensione generalmente finita. La matrice $V^{(n)}$ dipende chiaramente dalla base $\{|\varphi_n^i\rangle\}$ inizialmente scelta nel sottospazio \mathcal{E}_n^0 . Dunque, prima di iniziare il calcolo delle correzioni al primo ordine, è vantaggioso trovare una base che semplifica il più possibile la forma di $V^{(n)}$ in tale sottospazio, e dunque la ricerca dei suoi autovalori e autovettori. Per trovare una tale base, si sfruttano spesso delle osservabili che commutano sia con H_0 sia con V : sia A un'osservabile che commuta con H_0 e V . È possibile scegliere una base di autostati $|\varphi_n^i\rangle$ comune ad H_0 ed A . Inoltre, poiché V commuta con A , i suoi elementi di matrice tra autovettori di A associati ad autovalori distinti sono nulli. La matrice

(4) Se P_n è il proiettore sul sottospazio \mathcal{E}_n^0 , $V^{(n)}$ può essere scritto come $V^{(n)} = P_n V P_n$

$V^{(n)}$, dunque, contiene molti zeri, che facilitano la sua diagonalizzazione. Il metodo qui descritto per i livelli degeneri può anche essere usato per livelli non degeneri le cui energie sono, però, molto prossime.

Esempio 21.1. Consideriamo un rotatore rigido $2D$ sottoposto a un potenziale della forma

$$V = V_0 \cos(2\varphi)$$

dove φ è l'angolo polare. Se $V_0 \ll 1$, possiamo trattare tale potenziale come una perturbazione. L'hamiltoniana del sistema non perturbato è

$$H_0 = \frac{L^2}{2I}$$

che ammette autostati

$$\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

con energie non perturbate pari a

$$E_m^0 = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$$

Tranne lo stato con $m = 0$, i restanti sono a due a due degeneri. Determiniamo le correzioni al primo ordine prodotte da tale perturbazione sugli stati. Iniziamo considerando lo stato $|m = 0\rangle$. La correzione al primo ordine dell'energia è

$$\varepsilon_1 = \langle m = 0 | V | m = 0 \rangle = 0$$

dunque lo stato $|m = 0\rangle$ non subisce correzioni al primo ordine. Per gli stati con $m \neq 0$, poiché siamo in presenza di degenerazione, bisogna calcolare gli elementi di matrice della perturbazione nel sottospazio generato dagli stati che presentano la stessa energia, cioè $|m\rangle$ e $|-m\rangle$. Fissato m si ha

$$\begin{aligned} \langle m | V | m \rangle &= V_0 \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} \cos(2\varphi) e^{im\varphi} d\varphi = 0 = \langle -m | V | -m \rangle \\ \langle m | V | -m \rangle &= V_0 \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} \cos(2\varphi) e^{-im\varphi} d\varphi = \\ &= \frac{V_0}{2} \int_0^{2\pi} e^{-2im\varphi} (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}) d\varphi = \\ &= \frac{V_0}{2} (\langle 2m | 2 \rangle + \langle 2m | -2 \rangle) = \frac{V_0}{2} (\delta_{2m,2} + \delta_{2m,-2}) \end{aligned}$$

Gli unici elementi di matrice non nulli sono quindi quelli in cui $2m = 2$ o $2m = -2$. Dunque si hanno correzioni sull'energia al primo ordine solamente sugli stati con $m = \pm 1$. Per tali stati la correzione in energia è pari a

$$\varepsilon_1 = \frac{V_0}{2}$$

Determinando gli autovettori di V nel sottospazio generato da $|1\rangle$ e $|-1\rangle$ si trova che gli stati perturbati sono

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle \pm |-1\rangle)$$

Sfruttiamo l'ortonormalità degli stati

21.4 Oscillatore armonico 1D perturbato

Per illustrare quanto detto finora con un semplice esempio, useremo la teoria perturbativa indipendente dal tempo per studiare l'effetto di una perturbazione lineare e di una quadratica sui livelli energetici dell'oscillatore armonico unidimensionale. Tali casi sono particolarmente interessante in quanto l'oscillatore armonico è un sistema risolubile in maniera esatta e quindi siamo in grado di verificare che l'espansione perturbativa coincide con l'espansione della soluzione esatta rispetto al parametro che caratterizza la perturbazione.

21.4.1 Perturbazione lineare

L'hamiltoniana dell'oscillatore armonico unidimensionale è data da

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

e la perturbazione W presa in esame ha la forma⁽⁵⁾

$$W = \lambda \frac{\hbar\omega}{b} X$$

dove λ è una variabile reale adimensionale molto più piccola di 1. L'hamiltoniana perturbata è quindi

$$H(\lambda) = H_0 + W = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \lambda \frac{\hbar\omega}{b} X$$

In questo caso l'effetto della perturbazione è quello di spostare i livelli energetici dell'oscillatore armonico. Adoperando il metodo del completamento del quadrato, infatti, possiamo riscrivere l'hamiltoniana come

$$H(\lambda) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(X + \frac{\lambda\hbar}{bm\omega} \right)^2 - \frac{\lambda^2\hbar^2}{2b^2m}$$

Posto

$$X' = X + \frac{\lambda\hbar}{bm\omega}$$

e ricordando che

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \implies \omega = \frac{\hbar}{mb^2}$$

si ottiene l'hamiltoniana dell'oscillatore armonico

$$H(\lambda) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X'^2 - \frac{\lambda^2\hbar\omega}{2}$$

i cui livelli energetici sono traslati di

$$\Delta E = -\frac{\lambda^2\hbar\omega}{2}$$

e le cui autofunzioni sono centrate in $x = x_0$ con

$$x_0 = -\frac{\lambda\hbar}{bm\omega}$$

Studiamo cosa accade perturbativamente. Scriviamo X in funzione degli operatori creazione e annichilazione ottenendo

$$W = \lambda \frac{\hbar\omega}{b} X = \lambda \frac{\hbar\omega}{b} \frac{b}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a)$$

(5) La perturbazione inserita dal prof. nell'esercizio era $W = \alpha X$ ma per semplicità di calcoli ho preferito inserire la perturbazione seguente

Gli unici elementi non nulli della perturbazione sono quindi

$$\begin{aligned}\langle \varphi_{n+1} | W | \varphi_n \rangle &= \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \sqrt{n+1} \hbar \omega \\ \langle \varphi_{n-1} | W | \varphi_n \rangle &= \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \sqrt{n} \hbar \omega\end{aligned}$$

Questo ci permette di concludere che le correzioni al primo ordine su tutti gli stati sono nulle. La Eq.(21.19) ci restituisce quindi

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle \varphi_{n'} | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0}$$

e sfruttando il risultato trovato in precedenza si ottiene

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega + \frac{\lambda^2 \hbar \omega}{2} [n - (n+1)] = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega - \frac{\lambda^2 \hbar \omega}{2}$$

che è lo stesso risultato determinato analiticamente. Determiniamo adesso la correzione sugli stati. Nonostante la correzione al primo ordine sull'energia è nulla, lo stesso non vale per la correzione al primo ordine per gli stati

$$\begin{aligned}|\psi_n\rangle &= |\varphi_n\rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{\langle \varphi_{n'} | W | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_{n'}^0} |\varphi_{n'}\rangle \\ &= |\varphi_n\rangle - \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle + \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle\end{aligned}\tag{21.24}$$

Proviamo che, per lo stato fondamentale, l'autofunzione ottenuta perturbativamente coincide con quella ottenuta analiticamente espansa al primo ordine.

La soluzione analitica del problema è data da

$$\psi_0(x, x_0) = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2b^2}}$$

Sviluppando in serie di Taylor attorno a $x_0 = 0$ (si osservi che la dipendenza da λ è contenuta in x_0) si ottiene

$$\begin{aligned}\psi_0(x, x_0) &= \psi_0(x, x_0) \Big|_{x_0=0} + \frac{\partial \psi_0(x, x_0)}{\partial x_0} \Big|_{x_0=0} x_0 + \mathcal{O}(x_0^2) \\ &= \varphi_0(x) + \frac{x - x_0}{b^2} \varphi_0(x) x_0 + \mathcal{O}(x_0^2) \\ &= \varphi_0(x) + \frac{x}{b^2} \varphi_0(x) x_0 + \mathcal{O}(x_0^2) \\ &\simeq \varphi_0(x) \left[1 + \frac{x_0 x}{b^2} \right] \\ &= \varphi_0(x) \left[1 - \frac{\lambda \hbar}{b^3 m \omega} x \right] = \\ &= \varphi_0(x) \left[1 - \frac{\lambda x}{b} \right]\end{aligned}$$

Ricordiamo che $b^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$

dove $\varphi_0(x)$ è la funzione d'onda dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico non perturbato. Perturbativamente, invece, per lo stato fondamentale la Eq.(21.24) diventa

$$|\psi_0\rangle = |\varphi_0\rangle - \frac{\lambda}{\sqrt{2}} |\varphi_1\rangle$$

e passando alle autofunzioni si ha

$$\begin{aligned}\psi_0(x) &= \varphi_0(x) - \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\varphi_1(x) \\ &= \varphi_0(x) - \frac{\lambda}{\sqrt{2}}\sqrt{2}\frac{x}{b}\varphi_0(x) = \\ &= \varphi_0(x)\left[1 - \frac{\lambda x}{b}\right]\end{aligned}$$

che coincide con il risultato analitico.

21.4.2 Perturbazione quadratica

L'hamiltoniana dell'oscillatore armonico unidimensionale è data da

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (21.25)$$

e la perturbazione W presa in esame ha la forma

$$W = \frac{1}{2}\lambda m\omega^2 X^2 \quad (21.26)$$

dove λ è una variabile reale adimensionale molto più piccola di 1. L'hamiltoniana perturbata è quindi

$$H(\lambda) = H_0 + W = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(1 + \lambda)X^2 \quad (21.27)$$

In questo caso l'effetto della perturbazione è semplicemente quello di cambiare la frequenza dell'oscillatore armonico. Posto

$$\omega' = \omega\sqrt{1 + \lambda}$$

si vede che l'hamiltoniana perturbata è quella di un oscillatore armonico con frequenza ω' , le cui energie sono date da

$$E_n(\lambda) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega' = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\sqrt{1 + \lambda}$$

e, mediante un espansione in serie di potenze di λ si ottiene

$$E_n(\lambda) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left(1 + \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2}{8} + \dots\right)$$

Cerchiamo questo risultato sfruttando la teoria perturbativa indipendente dal tempo. La perturbazione può essere scritta, in funzione degli operatori creazione e annichilazione, come

$$\begin{aligned}W &= \frac{1}{4}\lambda\hbar\omega\left(a^\dagger + a\right)^2 = \frac{1}{4}\lambda\hbar\omega\left(a^{\dagger 2} + a^\dagger a + aa^\dagger + a^2\right) = \\ &= \frac{1}{4}\lambda\hbar\omega\left(a^{\dagger 2} + 2a^\dagger a + 1 + a^2\right)\end{aligned}$$

Da questa espressione della perturbazione si vede che gli unici elementi di matrice non nulli di W associati allo stato $|\varphi_n\rangle$ sono

$$\begin{aligned}\langle\varphi_n|W|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{2}\lambda\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \\ \langle\varphi_{n+2}|W|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{4}\lambda\hbar\omega\sqrt{n+1}\sqrt{n+2} \\ \langle\varphi_{n-2}|W|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{4}\lambda\hbar\omega\sqrt{n}\sqrt{n-1}\end{aligned}$$

Sfruttando questo risultato per calcolare l'espansione perturbativa dell'energia Eq.(21.19) troviamo

$$\begin{aligned}
 E_n &= E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | V | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} + \mathcal{O}(\lambda^3) = \\
 &= E_n^0 + \frac{1}{2} \lambda \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\lambda^2}{16} (n+1)(n+2) \frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\lambda^2}{16} n(n-1) \frac{\hbar \omega}{2} + \mathcal{O}(\lambda^3) = \\
 &= E_n^0 + \frac{\lambda}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\lambda^2}{8} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \mathcal{O}(\lambda^3) = \\
 &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \left(1 + \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2}{8} + \dots \right)
 \end{aligned}$$

che coincide con l'espansione esatta.

21.5 Oscillatore armonico 2D accoppiato

Consideriamo un sistema descritto dall'hamiltoniana

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega X^2 + \frac{1}{2} m \omega Y^2 + \gamma m \omega^2 XY \quad (21.28)$$

dove γ è un parametro reale adimensionale molto più piccolo di 1. L'hamiltoniana può essere scritta come

$$H = H_0 + \gamma V \quad (21.29)$$

essendo H_0 l'hamiltoniana dell'oscillatore armonico bidimensionale non perturbato e $V = m \omega^2 XY$ il termine di accoppiamento che possiamo trattare come una vera e propria perturbazione. Anche in questo caso, il problema in esame è risolubile in maniera esatta. Il potenziale, infatti, può essere disaccoppiato mediante una rotazione delle coordinate. Ponendo

$$\begin{aligned}
 X &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + \hat{Y}) \\
 Y &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - \hat{Y})
 \end{aligned}$$

l'hamiltoniana si scrive come

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2 (1 + \gamma) + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{Y}^2 (1 - \gamma) \quad (21.30)$$

e si vede che l'hamiltoniana è quella di due oscillatori armonici unidimensionali con frequenze $\omega \sqrt{1 + \gamma}$ e $\omega \sqrt{1 - \gamma}$. Le energie sono quindi

$$E_{n_x, n_y}(\gamma) = \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \sqrt{1 + \gamma} + \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \sqrt{1 - \gamma} \quad (21.31)$$

e sviluppando in serie di potenze di γ si ottiene

$$\begin{aligned}
 E_{n_x, n_y}(\gamma) &= \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \left(1 + \frac{\gamma}{2} - \frac{\gamma^2}{8} + \dots \right) + \\
 &+ \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \left(1 - \frac{\gamma}{2} + \frac{\gamma^2}{8} + \dots \right) = \\
 &= \hbar \omega \left[(n_x + n_y + 1) + \frac{\gamma}{2} (n_x - n_y) + \dots \right]
 \end{aligned} \quad (21.32)$$

Cerchiamo questo risultato sfruttando la teoria perturbativa indipendente dal tempo. Notiamo che, poiché l'oscillatore armonico 2D presenta per ogni fissato $n = n_x + n_y$ una degenerazione $n+1$, non possiamo adoperare il metodo sfruttato nel paragrafo precedente, ma dobbiamo diagonalizzare la perturbazione all'interno di ogni sottospazio \mathcal{E}_n^0 associato all'energia E_n^0 . Fissiamo la nostra attenzione al caso $n = n_x + n_y = 1$; gli autostati permessi in tale condizione sono $|1, 0\rangle$ e $|0, 1\rangle$. Determiniamo la matrice associata alla perturbazione in questo sottospazio. Detta $V^{(1)}$ la restrizione della perturbazione al sottospazio con $n = 1$, si prova immediatamente che per simmetria gli elementi $\langle 1, 0|V^{(1)}|1, 0\rangle$ e $\langle 0, 1|V^{(1)}|0, 1\rangle$ sono nulli. Inoltre poiché la perturbazione è un operatore hermitiano i restanti due termini devono essere uno il complesso coniugato dell'altro. Calcoliamo, dunque, esplicitamente il termine $\langle 1, 0|V^{(1)}|0, 1\rangle$

$$\langle 1, 0|V^{(1)}|0, 1\rangle = m\omega^2 \langle 1, 0|XY|0, 1\rangle = m\omega^2 \langle 1|X|0\rangle \langle 0|Y|1\rangle$$

Sfruttando gli operatori creazione e distruzione e ricordando che sia X che Y sono operatori hermitiani e quindi $\langle 1|X|0\rangle = (\langle 0|Y|1\rangle)^*$ si ha

$$\langle 1|X|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle 1|a + a^\dagger|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

e quindi

$$\langle 1, 0|V^{(1)}|0, 1\rangle = m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Gli elementi di matrice della perturbazione $V^{(1)}$ sono quindi

$V^{(1)}$	$ 1, 0\rangle$	$ 0, 1\rangle$
$\langle 1, 0 $	0	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
$\langle 0, 1 $	$\frac{1}{2}\hbar\omega$	0

lori di $V^{(1)}$ sono le radici del polinomio caratteristico

$$\lambda^2 - \left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right)^2 = 0$$

e cioè

$$\lambda = \pm \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Sfruttando il risultato trovato per calcolare l'espansione perturbativa dell'energia nel caso $n = 1$ si ottiene

$$E_1(\gamma) = E_1^0 + \gamma\lambda = 2\hbar\omega \pm \frac{\gamma}{2}\hbar\omega = \hbar\omega(2 \pm \frac{\gamma}{2})$$

mentre dallo sviluppo in serie del risultato esatto nel caso $n = n_x + n_y = 1$, poiché $n_x - n_y = \pm 1$, si ha

$$E_1(\gamma) = \hbar\omega(2 \pm \frac{\gamma}{2})$$

21.6 Effetto Stark

Consideriamo un atomo di idrogeno immerso in un campo elettrico uniforme $\vec{\mathcal{E}}$. Introducendo un sistema di riferimento inerziale non centrato sul nucleo dell'atomo, l'hamiltoniana del sistema si scrive come

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - e\vec{r}_p \cdot \vec{\mathcal{E}} + e\vec{r}_e \cdot \vec{\mathcal{E}}$$

dove \vec{r}_p e \vec{r}_e sono rispettivamente gli operatori posizione del protone e dell'elettrone. Introducendo la posizione relativa dell'elettrone rispetto al protone si può riscrivere

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - e\vec{r} \cdot \vec{\mathcal{E}}$$

dove $\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p$. Supponendo che il campo elettrico sia diretto lungo z l'hamiltoniana diventa

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - ez\mathcal{E}$$

La presenza di questo termine lineare in z rappresenta l'effetto Stark, ovvero lo spostamento dei livelli energetici dell'atomo di idrogeno dovuto alla presenza di un campo elettrico esterno. Inoltre, la presenza di questo termine rompe la simmetria rotazionale del problema; il sistema ottenuto è invariante solo per rotazioni attorno all'asse z . Sperimentalmente si può osservare anche per i campi elettrici più intensi che possono essere prodotti in laboratorio, la perturbazione $W_S = -ez\mathcal{E}$ è molto piccola rispetto all'hamiltoniana non perturbata dell'atomo di idrogeno. Possiamo quindi trattare l'effetto Stark come una perturbazione. Determiniamo le correzioni al primo ordine sugli stati con $n = 1$ e con $n = 2$. L'unico stato con $n = 1$ è $|1, 0, 0\rangle$ che è uno stato pari; dunque la correzione energetica

$$-e\mathcal{E} \langle 1, 0, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle = 0$$

in quanto z è un operatore dispari. Dunque al primo ordine la correzione sull'energia dello stato $|1, 0, 0\rangle$ è nulla.

Fissato $n = 2$, gli stati possibili sono 4 ($|2, 0, 0\rangle$, $|2, 1, 0\rangle$, $|2, 1, \pm 1\rangle$) tutti degeneri. È necessario, dunque, determinare gli elementi di matrice della perturbazione $W_S = -ez\mathcal{E}$ nel sottospazio formato da questi 4 stati. Lo stato $|2, 0, 0\rangle$ è pari; i tre stati $|2, 1, m\rangle$ sono dispari. Poiché la perturbazione W_S è dispari, l'elemento di matrice $\langle 2, 0, 0 | W_S | 2, 0, 0 \rangle$ e i nove elementi di matrice $\langle 2, 1, m | W_S | 2, 1, m' \rangle$ sono nulli⁽⁶⁾. Poiché gli stati $|2, 0, 0\rangle$ e $|2, 1, m\rangle$ presentano una differente parità, gli unici elementi di matrice che possono essere non nulli sono $\langle 2, 1, m | W_S | 2, 0, 0 \rangle$. Proviamo che l'unico elemento di matrice non nullo è $\langle 2, 1, 0 | W_S | 2, 0, 0 \rangle$. La perturbazione W_S è proporzionale a $z = r \cos \vartheta$ e quindi a $Y_{1,0}(\vartheta)$; la parte angolare presente nell'elemento di matrice $\langle 2, 1, m | W_S | 2, 0, 0 \rangle$ è

$$\int Y_{1,m}^* Y_{1,0} Y_{0,0} d\Omega$$

e poiché $Y_{0,0}$ è costante l'integrale è proporzionale al prodotto scalare di $Y_{1,0}$ e $Y_{1,m}$ che è diverso da zero solo se $m = 0$. Inoltre, poiché $Y_{1,0}$, $R_{2,0}$ e $R_{2,1}$ sono funzioni reali, il corrispondente elemento di matrice è reale.

(6) In quanto complessivamente la funzione d'onda sarà dispari

Andiamo quindi a determinare tale elemento di matrice

$$\begin{aligned}
\langle 2, 1, 0 | W_S | 2, 0, 0 \rangle &= -e\mathcal{E} \langle 2, 1, 0 | z | 2, 0, 0 \rangle = -e\mathcal{E} \langle 2, 1, 0 | r \cos \vartheta | 2, 0, 0 \rangle = \\
&= -e\mathcal{E} \int_0^{+\infty} r^2 dr \int_{-1}^1 d \cos \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi r R_{2,1}(r) R_{2,0}(r) Y_{1,0}^*(\vartheta, \varphi) \cos \vartheta Y_{0,0}(\vartheta, \varphi) = \\
&= -e\mathcal{E} \int_0^{+\infty} r^3 R_{2,1}(r) R_{2,0}(r) dr \int_{-1}^1 d \cos \vartheta \cos \vartheta \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_0^{2\pi} d\varphi = \\
&= -e\mathcal{E} \frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^{+\infty} r^3 R_{2,1}(r) R_{2,0}(r) dr = \\
&= -e\mathcal{E} \frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^{+\infty} r^3 \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{1}{\sqrt{8a_0^3}} \frac{r}{a_0} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{a_0}} dr = \quad (7) \quad x = \frac{r}{a_0} \\
&= -e\mathcal{E} \frac{a_0}{24} \int_0^{+\infty} x^4 (2 - x) e^{-x} dx = \\
&= -e\mathcal{E} \frac{a_0}{24} \left[2 \int_0^{+\infty} x^4 e^{-x} dx - \int_0^{+\infty} x^5 e^{-x} dx \right] = \quad (8) \quad \int_0^{+\infty} x^n e^{-\lambda x} dx = \frac{n!}{\lambda^{n+1}} \\
&= -e\mathcal{E} \frac{a_0}{24} [2 \cdot 4! - 5!] = \\
&= 3a_0 e\mathcal{E}
\end{aligned}$$

La matrice della perturbazione in tale sottospazio ha quindi la forma

W_S	$ 2, 0, 0\rangle$	$ 2, 1, 0\rangle$	$ 2, 1, 1\rangle$	$ 2, 1, -1\rangle$
$\langle 2, 0, 0 $	0	$3a_0 e\mathcal{E}$	0	0
$\langle 2, 1, 0 $	$3a_0 e\mathcal{E}$	0	0	0
$\langle 2, 1, 1 $	0	0	0	0
$\langle 2, 1, -1 $	0	0	0	0

Possiamo quindi individuare immediatamente le correzioni sull'energia al primo ordine e sugli stati all'ordine zero semplicemente calcolando autovalori e autovettori di tale matrice. Otterremo

Autostati	Correzioni
$ 2, 1, 1\rangle$	\leftrightarrow 0
$ 2, 1, -1\rangle$	\leftrightarrow 0
$\frac{1}{\sqrt{2}}(2, 1, 0\rangle + 2, 0, 0\rangle)$	\leftrightarrow $3a_0 e\mathcal{E}$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(2, 1, 0\rangle - 2, 0, 0\rangle)$	\leftrightarrow $-3a_0 e\mathcal{E}$

Osserviamo che la degenerazione sul livello con $n = 2$ è rimossa parzialmente e che gli *shift* in energia sono lineari nel campo elettrico \mathcal{E} . Questo effetto si può osservare solamente nell'atomo di idrogeno a causa della degenerazione in l dei livelli energetici con $n \neq 1$.

Il metodo variazionale

CAPITOLO

22

Introduzione al capitolo

Il metodo che abbiamo visto in Cap.21 non permette di risolvere qualunque tipo di problema; bisogna infatti assicurarsi che la perturbazione introdotta nell'hamiltoniana sia piccola rispetto all'hamiltoniana non perturbata e ciò, in gran parte dei problemi fisici, non è vero. Si rende, quindi, necessario introdurre un nuovo metodo che ci permetta di risolvere questa tipologia di problemi. Questo metodo è il metodo variazionale. Presenteremo in questo capitolo il metodo variazionale e vedremo alcune sue applicazioni immediate all'atomo di elio

22.1 Descrizione del metodo . . .	315
22.2 L'atomo di elio	317

22.1 Descrizione del metodo

Consideriamo un sistema fisico arbitrario la cui hamiltoniana H non dipenda dal tempo. Assumiamo che lo spettro di H sia discreto e non degenerare, cioè

$$H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$

con $E_n \neq E_m$ per $n \neq m$. Spesso accade che sia difficile determinare analiticamente autovalori e autostati di H . Il metodo variazionale è un metodo approssimato che ci permette di stimare gli autovalori di H nell'ipotesi in cui non si sappia diagonalizzare in maniera esatta l'hamiltoniana.

Consideriamo un ket arbitrario $|\psi\rangle$ dello spazio degli stati del sistema. Proviamo che il valore medio dell'hamiltoniana H nello stato $|\psi\rangle$ è tale che

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$$

essendo E_0 l'autovalore più basso di H e l'uguaglianza si ottiene se e solo se $|\psi\rangle$ è un autostato di H con autovalore E_0 . Per provare questa relazione possiamo scrivere lo stato $|\psi\rangle$ come combinazione lineare degli autostati di H :

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

con $c_n \in \mathbb{C}$. Calcoliamo il valore medio di H nello stato $|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m E_m \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \\ &= \sum_n c_n^* c_n E_n \geq E_0 \sum_n c_n^* c_n \end{aligned}$$

dove abbiamo assunto che gli autostati di H siano ortonormali. Ovviamente

$$\sum_n c_n^* c_n = \langle \psi | \psi \rangle$$

quindi la disuguaglianza è provata. Questa proprietà è il punto di partenza del metodo variazionale che ci permette di determinare in maniera numerica E_0 . Si sceglie (in teoria in maniera arbitraria, ma in realtà usando dei criteri fisici) una famiglia di ket $|\psi_\alpha\rangle$ che dipendono da un certo numero di parametri che indicheremo genericamente con α . Si calcola il valore medio di H nello stato $|\psi_\alpha\rangle$ e si minimizza rispetto a α il valore medio di H . Il valore minimo ottenuto costituisce un'approssimazione dello stato fondamentale E_0 del sistema. I ket $|\psi_\alpha\rangle$ sono detti ket di prova.

Possiamo anche considerare un ket di prova che appartenga a un sottospazio \mathcal{F} dello spazio degli stati. In questo caso il metodo variazionale si riduce alla risoluzione dell'equazione agli autovalori di H all'interno di tale sottospazio. Infatti se $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\alpha_n\rangle \in \mathcal{F}$, cercando un minimo di

$$\langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} \langle \alpha_n | H | \alpha_{n'} \rangle - \lambda \sum_n c_n^* c_n$$

si ottiene

$$\frac{\partial}{\partial c_{\bar{n}}^*} \left[\sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} \langle \alpha_n | H | \alpha_{n'} \rangle - \lambda \sum_n c_n^* c_n \right] = \sum_{n'} c_{n'} \langle \alpha_{\bar{n}} | H | \alpha_{n'} \rangle - \lambda c_{\bar{n}} = 0$$

da cui si ottiene l'equazione agli autovalori

$$H_{\bar{n},n'} c_{n'} = \lambda c_{\bar{n}}$$

dove $H_{\bar{n},n'} = \langle \alpha_{\bar{n}} | H | \alpha_{n'} \rangle$.

Esempio 22.1. Si determini in maniera variazionale l'energia dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno considerando come funzione d'onda di test la funzione

$$\psi_\alpha(x) = \exp\left(-\frac{\alpha r}{a_0}\right)$$

Notiamo immediatamente che la funzione di test coincide con la funzione d'onda dello stato fondamentale di un atomo idrogenoide con $Z = \alpha$. Quindi, ci aspettiamo che il metodo variazionale dia come risultato l'energia minima proprio per $\alpha = 1$.

In linea di principio, dovremmo calcolare

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi_\alpha | K | \psi_\alpha \rangle + \langle \psi_\alpha | V | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle}$$

dove nel nostro caso $V = -\frac{e^2}{r}$. Però, osserviamo che $|\psi_\alpha\rangle$ è autostato dell'hamiltoniana di un atomo idrogenoide in cui il potenziale è pari a $W = -\frac{\alpha e^2}{a_0} = \alpha V$.

Allora, possiamo usare il teorema del viriale per evitare di svolgere esplicitamente gli integrali che compaiono nel calcolo dei valori medi (proprio per questo, di solito, si scelgono funzioni d'onda di prova

che sono autostati di hamiltoniane note):

$$\langle \psi_\alpha | V | \psi_\alpha \rangle = \frac{1}{\alpha} \langle \psi_\alpha | W | \psi_\alpha \rangle = -\frac{1}{\alpha} \frac{e^2 \alpha^2}{a_0} = -\frac{e^2 \alpha}{a_0}$$

Procedendo, sempre grazie al teorema del viriale, otteniamo

$$\langle \psi_\alpha | K | \psi_\alpha \rangle = -\frac{1}{2} \langle \psi_\alpha | W | \psi_\alpha \rangle = \frac{e^2 \alpha^2}{2a_0}$$

Dunque, l'energia totale sarà

$$E(\alpha) = \frac{e^2}{2a_0} \alpha^2 - \frac{e^2}{a_0} \alpha$$

Minimizzando rispetto ad α si trova

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = -\frac{e^2}{a_0} + \frac{e^2}{a_0} \alpha = 0 \implies \alpha = 1$$

che è il risultato atteso.

22.2 L'atomo di elio

Nel mondo atomico, l'equazione di Schrödinger può essere risolta in maniera analitica solamente per l'atomo di idrogeno e per gli atomi idrogenoidi. Negli atomi multielettronici, la presenza del termine di accoppiamento tra gli elettroni rende impossibile risolvere analiticamente l'equazione di Schrödinger e, quindi, si rende necessario procedere con metodi approssimati, come il metodo variazionale. Vediamo come si può studiare l'atomo di elio con il metodo variazionale. L'hamiltoniana dell'atomo di elio è data da

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

dove r_1 e r_2 sono le distanze degli elettroni dal nucleo e r_{12} è la distanza tra i due elettroni.

Trascurando il termine di accoppiamento, possiamo scrivere l'hamiltoniana come

$$H = H_1 + H_2$$

con H_1 e H_2 hamiltoniane di atomi idrogenoidi con $Z = 2$. Questo sistema è risolubile in maniera analitica e nello stato fondamentale la sua funzione d'onda è del tipo

$$\psi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_0(\vec{r}_1) \phi_0(\vec{r}_2)$$

con $\phi_0(\vec{r})$ funzione d'onda dello stato fondamentale di un atomo idrogenoide con $Z = 2$. Utilizziamo come funzione di test la funzione

$$\phi_Z(\vec{r}) = \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) Y_{0,0}(\vartheta, \varphi)$$

e determiniamo il minimo dell'energia in maniera variazionale. Considerato uno solo dei due atomi idrogenoidi, l'energia sarà

$$E(Z) = \frac{e^2}{2a_0} Z^2 - 2 \frac{e^2}{a_0} Z$$

che presenta un minimo per $Z = 2$. In corrispondenza di tale valore di Z l'energia del sistema formato dai due atomi idrogenoidi assume il valore

$$E(2) = 2 \frac{e^2}{2a_0} (4 - 8) = -8 \frac{e^2}{2a_0}$$

mentre sperimentalmente sappiamo che l'energia dello stato fondamentale dell'atomo di elio è

$$E_0 = -5.78 \frac{e^2}{2a_0}$$

Quindi, è necessario, prima di calcolare il minimo di E , includere il contributo della repulsione nello stato di prova $\phi_Z(\vec{r})$. Determiniamo questo contributo. Per fare ciò è necessario determinare

$$\int \frac{e^2}{r_{12}} |\phi_Z(\vec{r}_1)|^2 |\phi_Z(\vec{r}_2)|^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

Tramite il metodo delle trasformate di Fourier, che sfrutta il teorema della convoluzione, adesso dimostreremo che

$$\int \frac{e^2}{r_{12}} |\phi_Z(\vec{r}_1)|^2 |\phi_Z(\vec{r}_2)|^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 = \frac{5}{4} \frac{Ze^2}{2a_0}$$

Per prima cosa osserviamo che, poichè stiamo considerando stati S, le funzioni d'onda diventano una parte radiale per una angolare, di cui quest'ultima è triviale. In particolare la parte radiale è:

$$R(r) = N \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$$

dove $N = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}$ è la normalizzazione. L'integrale allora diventa:

$$\begin{aligned} & \frac{e^2}{(4\pi)^2} \int \frac{|R(r_1)|^2 |R(r_2)|^2}{r_{12}} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 = \\ & = \frac{e^2}{(4\pi)^2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{2Z}{a_0} \right)^3 \right]^2 \int \frac{\exp\left(-2\frac{Zr_1}{a_0}\right) \exp\left(-2\frac{Zr_2}{a_0}\right)}{r_{12}} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \end{aligned}$$

Ponendo $\vec{x} = \frac{2Z}{a_0} \vec{r}$, l'integrale diventa

$$\begin{aligned} & \frac{e^2}{(4\pi)^2} \frac{1}{4} \frac{2Z}{a_0} \int \exp(-|\vec{x}_1|) \exp(-|\vec{x}_2|) \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 = \\ & = \frac{e^2}{2a_0} \frac{Z}{(4\pi)^2} \int \exp(-|\vec{x}_1|) \exp(-|\vec{x}_2|) \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 \end{aligned}$$

Calcoliamo quest'ultimo integrale utilizzando le trasformate di Fourier e utilizzando le seguenti posizioni: siano $g(\vec{x}) = \exp(-|\vec{x}|)$ e $h(\vec{x}) = \frac{1}{|\vec{x}|}$. Allora, a meno delle costanti moltiplicative, l'integrale diventa

$$\int g(\vec{x}_1) g(\vec{x}_2) h(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2$$

A questo punto si passa alle trasformate di Fourier delle funzioni introdotte, ovvero:

$$g(\vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \tilde{g}(\vec{k})$$

e analogamente per $h(\vec{x})$. Inserendo queste relazioni nell'integrale, si ottiene

$$\int \frac{1}{(2\pi)^9} \tilde{g}(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}_1) \tilde{g}(\vec{q}) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{x}_2) \tilde{h}(\vec{p}) \exp(i\vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)) \\ d^3\vec{k} d^3\vec{q} d^3\vec{p} d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2$$

Integriamo prima su \vec{x}_1 e \vec{x}_2 . Poiché la dipendenza da \vec{x}_1 e \vec{x}_2 si trova solo agli esponenziali, allora integreremo prima soltanto

$$\int \exp(i\vec{x}_1 \cdot (\vec{k} + \vec{p})) \exp(i\vec{x}_2 \cdot (\vec{q} - \vec{p})) d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 = (2\pi)^6 \delta^3(\vec{k} + \vec{p}) \delta^3(\vec{q} - \vec{p})$$

Dunque, inserendo tale risultato nell'integrale complessivo, si ottiene

$$\int \tilde{g}(-\vec{p}) \tilde{g}(\vec{p}) \tilde{h}(\vec{p}) \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3}$$

Inoltre, osservando che g e h sono funzioni solo del modulo di un vettore, e che la stessa proprietà dovranno averle le loro trasformate, possiamo scrivere

$$\int \tilde{g}(\vec{p})^2 \tilde{h}(\vec{p}) \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{2\pi^2} \int \tilde{g}(p)^2 \tilde{h}(p) p^2 dp$$

Calcoliamo adesso esplicitamente le trasformate di Fourier di g e h . Detto θ l'angolo tra i vettori \vec{k} e \vec{x} , si ha:

$$\begin{aligned} \tilde{g}(\vec{k}) &= \int \exp(-|\vec{x}|) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} d^3\vec{x} = 2\pi \int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^\infty \exp(-x) e^{-ikx \cos\theta} x^2 dx = \\ &= 2\pi \int_0^\infty x^2 dx \exp\{-x\} \frac{e^{-ikx} - e^{ikx}}{-ikx} = \frac{2\pi i}{k} \int_0^\infty x dx (e^{-ikx} - e^{ikx}) = \\ &= \frac{2\pi i}{k} \left[\int_0^\infty x dx \exp\{-(1+ik)x\} - \int_0^\infty x dx \exp\{-(1-ik)x\} \right] = \\ &= \frac{2\pi i}{k} \left[\frac{1}{(1+ik)^2} - \frac{1}{(1-ik)^2} \right] = \frac{8\pi}{(1+k^2)^2} \end{aligned}$$

Cioè abbiamo ottenuto che $\tilde{g}(\vec{k}) = \frac{8\pi}{(1+k^2)^2}$. Analogamente si può calcolare $\tilde{h}(\vec{k})$ e si ottiene che $\tilde{h}(\vec{k}) = \frac{4\pi}{k^2}$. Inserendo questi risultati nell'integrale, si ottiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty (8\pi)^2 4\pi \frac{p^2}{(1+p^2)^4 p^2} dp &= 128\pi \int_0^\infty \frac{1}{(1+p^2)^4} dp = \\ &= 64\pi \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{(1+p^2)^4} dp \end{aligned}$$

Questo integrale è calcolabile con il metodo dei residui e si ottiene $5 \cdot 4\pi^2$. Inserendo tale risultato nell'integrale di partenza si ottiene

$$\frac{e^2}{2a_0} \frac{Z}{(4\pi)^2} 5 \cdot 4\pi^2 = \frac{5}{4} \frac{e^2}{2a_0} Z$$

che è il risultato cercato.

Introducendo questo termine l'energia totale del sistema diventa

$$E(Z) = -\frac{e^2}{2a_0} (8Z - 2Z^2 - \frac{5}{4}Z)$$

che presenta un minimo in

$$Z = \frac{27}{16} \quad (22.1)$$

In corrispondenza di tale valore di Z l'energia è pari a

$$E_0 = -5.6953 \frac{e^2}{2a_0}$$

Si poteva anche risolvere questo problema considerando la repulsione come una perturbazione. In tal caso, fissato $Z = 2$ nella funzione d'onda, bisognava calcolare il valore medio della repulsione in tale stato ottenendo

$$\left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle = \frac{5}{2} \frac{e^2}{2a_0}$$

e un'energia complessiva pari a

$$E = -\frac{e^2}{2a_0} \left(8 \cdot 2 - 8 - \frac{5}{2} \right) = -5.5 \frac{e^2}{2a_0}$$

maggiore rispetto a quella ottenuta sperimentalmente.

Esempio 22.2 (Calcolo dell'integrale della repulsione con una analogia elettrostatica). Si osservi che è possibile interpretare l'integrale della repulsione come l'energia potenziale di una distribuzione di carica:

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} \int \frac{(e\rho(\vec{r}_1))(e\rho(\vec{r}_2))}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

dove $\rho(\vec{r}) = \sqrt{2}|\phi(\vec{r})|^2$. A questo punto applichiamo il teorema di Gauss dopo aver osservato che la distribuzione ha simmetria sferica, in base alla definizione di ϕ . Considerando una sfera di raggio R che contenga la distribuzione, si ottiene

$$\varphi(r) = \frac{\int_{(R)} e\rho(r) d^3r}{R} = \frac{4\pi e \int_0^R \rho(r) r^2 dr}{R}$$

da cui l'energia

$$E = \int \rho(r) d^3\vec{r} \varphi(r) = 4\pi e \int_0^\infty \rho(r) r^2 dr$$

Risolvendo questo integrale si è risolto l'esercizio.

Teoria perturbativa dipendente dal tempo

CAPITOLO

23

Introduzione al capitolo

Fino ad ora abbiamo considerato sistemi le cui hamiltoniane non dipendono dal tempo. Se un tale sistema si trova in un suo stato stazionario, allora esso permarrà in tale stato anche dopo un tempo indefinito. Questa trattazione, quindi, non ci permette di spiegare come siano possibili le transizioni di un sistema da un suo stato a un altro. Si rende, quindi, necessario introdurre la teoria perturbativa dipendente dal tempo: l'introduzione di una perturbazione dipendente dal tempo, infatti, modifica lo stato del sistema e permette di descrivere le transizioni tra stati stazionari.

23.1	Descrizione del metodo . . .	321
23.2	Soluzione approssimata dell'equazione di Schrödinger . . .	322
23.3	Perturbazione costante . . .	325
23.4	Relazione di indeterminazione energia-tempo . .	326
23.5	Perturbazione periodica . . .	328
23.6	L'interazione di un atomo con un'onda elettromagnetica . . .	329

23.1 Descrizione del metodo

Consideriamo un sistema fisico descritto dall'hamiltoniana H_0 , avente autovalori E_n ed autovettori $|\varphi_n\rangle$.

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$

Supponiamo, per semplicità, che H_0 abbia uno spettro discreto e sia non degenere. Assumiamo che H_0 non dipenda esplicitamente dal tempo e, quindi, i suoi autostati sono stati stazionari.

Al tempo $t = 0$ viene applicata una perturbazione al sistema, la cui hamiltoniana, quindi, diventa

$$H = H_0 + W(t)$$

dove

$$W(t) = \lambda V(t)$$

con λ un parametro adimensionale molto più piccolo di 1 e $V(t)$ una osservabile che è dello stesso ordine di grandezza di H_0 .

Assumiamo che inizialmente il sistema si trovi nello stato stazionario $|\varphi_i\rangle$, autostato di H_0 con autovalore E_i ; dall'istante $t = 0$ in cui la perturbazione viene applicata, il sistema evolve nel tempo: lo stato $|\varphi_i\rangle$ non è più un autostato dell'hamiltoniana perturbata. Vogliamo determinare la probabilità $P_{i \rightarrow f}(t)$ di trovare il sistema in un altro autostato $|\varphi_f\rangle$ di H_0 al tempo t ; vogliamo, cioè, studiare le transizioni tra gli stati stazionari del sistema non perturbato che possono essere indotte dalla perturbazione $W(t)$.

Ricordiamo che il sistema evolve secondo l'equazione di Schrödinger ; dunque, supposto che il sistema si trovi nello stato $|\psi\rangle$, si ha

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (23.1)$$

La soluzione di tale equazione differenziale, con la condizione al contorno

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_i\rangle$$

è unica. La probabilità cercata può, quindi, essere scritta come

$$P_{i \rightarrow f}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2$$

Il problema sta proprio nella risoluzione dell'equazione di Schrödinger con l'hamiltoniana perturbata; essa, infatti, non è risolubile in maniera analitica e ciò porta ad introdurre dei metodi approssimati.

23.2 Soluzione approssimata dell'equazione di Schrödinger

Sia $\{|\varphi_n\rangle\}$ la base formata dagli autostati dell'operatore hamiltoniana. Dette $c_n(t)$ le componenti del ket $|\psi(t)\rangle$ in tale base, possiamo scrivere

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle$$

Indicheremo con $V_{nk}(t)$ l'elemento di matrice della perturbazione in tale base:

$$V_{nk}(t) = \langle \varphi_n | V(t) | \varphi_k \rangle$$

Ricordiamo che in tale base l'hamiltoniana non perturbata è diagonale

$$\langle \varphi_n | H_0 | \varphi_k \rangle = E_n \delta_{nk}$$

Tutte queste posizioni ci permettono di scrivere l'equazione Eq.(23.1) come

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_k c_k(t) |\varphi_k\rangle = (H_0 + \lambda V(t)) \sum_k c_k(t) |\varphi_k\rangle$$

Proiettando sullo stato $|\varphi_n\rangle$ e sfruttando l'ortonormalità degli stati otteniamo

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) + \lambda \sum_k V_{nk}(t) c_k(t) \quad (23.2)$$

Il set di equazioni differenziali ottenuto costituisce un sistema di equazioni differenziali del primo ordine in t accoppiate; almeno in teoria, questo sistema è risolubile permettendoci di determinare $c_n(t)$ e, quindi, $|\psi(t)\rangle$. L'accoppiamento tra le equazioni nasce dall'esistenza della perturbazione $\lambda V(t)$, che, mediante i suoi elementi non diagonali $V_{nk}(t)$, mette in relazione l'evoluzione di $c_n(t)$ con quella di tutti gli altri coefficienti $c_k(t)$. Cerchiamo di riscrivere questo set di equazioni in una maniera più funzionale ai nostri scopi. In assenza di perturbazione, le equazioni differenziali ottenute non sono più accoppiate e la loro soluzione è molto semplice; essa può essere scritta come

$$c_n(t) = b_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

essendo b_n una costante dipendente dalle condizioni iniziali. Introdotta adesso la perturbazione, se essa è molto piccola rispetto ad H_0 , possiamo assumere che le soluzioni $c_n(t)$ delle Eq.(23.2) siano prossime a quelle trovate in assenza di perturbazione. In altre parole, possiamo scrivere

$$c_n(t) = b_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

essendo $b_n(t)$ una funzione lentamente variabile nel tempo. Se sostituiamo questa espressione di $c_n(t)$ in Eq.(23.2), otteniamo

$$\begin{aligned} i\hbar \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \frac{db_n(t)}{dt} + E_n b_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) = \\ = E_n b_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) + \lambda \sum_k V_{nk}(t) b_k(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_k t\right) \end{aligned}$$

Dividendo per $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$ e introducendo la frequenza

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}$$

otteniamo

$$i\hbar \frac{db_n(t)}{dt} = \lambda \sum_k V_{nk}(t) b_k(t) \exp(i\omega_{nk}t) \quad (23.3)$$

Questo set di equazioni può essere facilmente integrato ottenendo

$$b_n(t) = b_n(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \lambda \sum_k V_{nk}(t') b_k(t') \exp(i\omega_{nk}t') \quad (23.4)$$

che è un set di equazioni integrali. Ovviamente anche questo non può essere risolto in maniera analitica, ma solamente mediante un metodo numerico iterativo, che si basa sul porre $b_n(t) = b_n(0)$ in prima approssimazione e poi di volta in volta sostituire il risultato ottenuto per $b_n(t)$ nella parte destra dell'equazione.

Sfruttiamo un altro metodo per risolvere questo set di equazioni differenziali accoppiate. Sfruttiamo il fatto che $\lambda \ll 1$ per provare a determinare la soluzione come una serie di potenze di λ , che speriamo essere rapidamente convergente se λ è abbastanza piccolo.

$$b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots \quad (23.5)$$

Sostituendo questa espressione in Eq.(23.3) e ponendo uguali i coefficienti di λ^r su entrambi i membri, troviamo

- per $r = 0$

$$i\hbar \frac{db_n^{(0)}(t)}{dt} = 0 \quad (23.6)$$

Questa relazione esprime il fatto che $b_n^{(0)}(t)$ non dipende dal tempo. Dunque, se $\lambda = 0$, cioè non c'è perturbazione, allora $b_n(t)$ si riduce a una costante.

- per $r \neq 0$

$$i\hbar \frac{db_n^{(r)}(t)}{dt} = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} V_{nk}(t) b_k^{(r-1)}(t) \quad (23.7)$$

Quindi con la soluzione all'ordine zero fissata da Eq.(23.6) con le corrispettive condizioni iniziali, la relazione Eq.(23.7) ci permette di determinare la soluzione al primo ordine. Determinata la soluzione al primo ordine, possiamo determinare quella al secondo ordine e così via.

Determiniamo adesso qual è lo stato del sistema al tempo t . Abbiamo già assunto che per $t < 0$ lo stato del sistema sia $|\varphi_i\rangle$; di tutti i coefficienti $b_n(t)$, solo $b_i(t)$ è diverso da zero per $t < 0$. Inoltre, poiché per $t < 0$ non c'è perturbazione, $b_i(t)$ è costante per $t < 0$ e in particolare deve essere uguale a 1. Al tempo $t = 0$ la perturbazione viene applicata; poiché $\lambda V(t)$ è finita, la soluzione dell'equazione di Schrödinger deve essere continua al tempo $t = 0$. Dunque

$$b_n(t=0) = \delta_{ni}$$

Di conseguenza, inserendo tale espressione nello sviluppo in serie Eq.(23.5) troviamo

$$b_n^{(0)}(t=0) = \delta_{ni} \quad (23.8)$$

$$b_n^{(r)}(t=0) = 0 \quad \text{per } r \neq 0 \quad (23.9)$$

Inserendo questo risultato nell'equazione Eq.(23.6) troviamo, per tutti i valori di t positivi

$$b_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}$$

che determina completamente la soluzione all'ordine zero. Questo risultato ci permette di riscrivere la Eq.(23.7) per $r = 1$ nella forma

$$i\hbar \frac{db_n^{(1)}(t)}{dt} = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} V_{nk}(t) \delta_{ki} = e^{i\omega_{ni}t} V_{ni}(t)$$

che può essere integrata senza difficoltà alcuna. Introducendo la condizione iniziale Eq.(23.9) per $r = 1$, otteniamo

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} V_{ni}(t') \quad (23.10)$$

Questo risultato ci permette di ottenere lo stato del sistema $|\psi(t)\rangle$ al tempo t calcolato al primo ordine in λ .

La probabilità di transizione dallo stato iniziale allo stato finale è data da

$$P_{i \rightarrow f}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \sum_n c_n(t) \langle \varphi_f | \varphi_n \rangle \right|^2 = |c_f(t)|^2 = |b_f(t)|^2$$

Assumiamo per semplicità che gli stati $|\varphi_i\rangle$ e $|\varphi_f\rangle$ siano differenti. Siamo interessati, dunque, solamente alle transizioni indotte dalla perturbazione $\lambda V(t)$ tra due stati stazionari distinti dell'hamiltoniana H_0 . Di conseguenza abbiamo $b_f^{(0)}(t) = 0$ e quindi

$$P_{i \rightarrow f} = \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2$$

Utilizzando il risultato dato da Eq.(23.10) e sostituendo $W_{fi}(t) = \lambda V_{fi}(t)$, otteniamo

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t') \right|^2 \quad (23.11)$$

Non abbiamo discusso della validità dell'approssimazione al primo ordine in λ . Essa è valida solamente se il tempo t in cui vogliamo calcolare la probabilità $P_{i \rightarrow f}(t)$ è tale che $b_k(t)$ vari poco rispetto a $b_k(0)$. Supponiamo adesso di voler calcolare la probabilità di restare nello stato $|\varphi_i\rangle$. In questo caso la delta δ_{if} è diversa da zero e quindi si avrà

$$P_{i \rightarrow i}(t) = |b_i(t)|^2 = \left| 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ii}t'} W_{ii}(t') \right|^2$$

Chiaramente però la permanenza nello stesso livello energetico fa sì che $\omega_{ii} = 0$ e dunque la probabilità diventa

$$P_{i \rightarrow i}(t) = \left| 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' W_{ii}(t') \right|^2$$

Si osservi a questo punto che W_{ii} è reale, in quanto elemento diagonale di una matrice autoaggiunta, dunque il modulo quadro diventa

$$P_{i \rightarrow i}(t) = 1 + \left| \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' W_{ii}(t') \right|^2 > 1$$

Tale risultato è in contraddizione con la definizione stessa di probabilità, per cui è evidente che tale approssimazione al primo ordine non può essere utilizzata per calcolare la probabilità di restare nello stesso stato. Per fare ciò sarebbe necessario considerare anche i termini del secondo ordine. Una maniera più semplice per calcolare la probabilità di restare nello stesso stato è considerare la probabilità complementare, cioè la probabilità di transizione in uno stato diverso da quello iniziale:

$$P_{i \rightarrow i}(t) = 1 - \sum_{k \neq i} P_{i \rightarrow k}(t)$$

cioè

$$|b_i(t)|^2 = 1 - \sum_{k \neq i} |b_k(t)|^2$$

23.3 Perturbazione costante

Consideriamo un sistema perturbato da una perturbazione della forma

$$W(t) = \begin{cases} W & \text{se } 0 \leq t \leq T \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

e determiniamo la probabilità di transizione $P_{i \rightarrow f}(t)$ al primo ordine in λ , scegliendo un tempo $t > T$. Sfruttando la Eq.(23.10), otteniamo

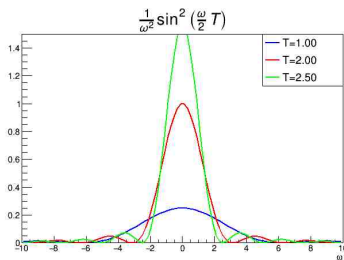
$$\begin{aligned} b_f^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^T dt e^{i\omega_{fi}t} W_{fi} = \frac{W_{fi}}{i\hbar} \frac{e^{i\omega_{fi}T} - 1}{i\omega_{fi}} = \\ &= \frac{2W_{fi}}{i\hbar\omega_{fi}} \exp\left(\frac{i\omega_{fi}T}{2}\right) \sin\left(\frac{\omega_{fi}T}{2}\right) \end{aligned}$$

da cui, ricordando che $P_{i \rightarrow f} = |b_f^{(1)}(t)|^2$, otteniamo

$$P_{i \rightarrow f}(t > T) = \frac{4|W_{fi}|^2}{\hbar^2\omega_{fi}^2} \sin^2\left(\frac{\omega_{fi}T}{2}\right) \quad (23.12)$$

Consideriamo più in dettaglio la funzione

$$\frac{1}{\omega^2} \sin^2 \left(\frac{\omega T}{2} \right)$$



Osserviamo che al tendere di ω a 0, la funzione tende a $T^2/4$ e si annulla quando $\omega = \frac{2\pi}{T}$. Inoltre l'area sottesa dal grafico della funzione nell'intervallo $[-\frac{2\pi}{T}, \frac{2\pi}{T}]$ è dell'ordine di T . Questa funzione può quindi essere una rappresentazione della funzione δ di Dirac. Per fare ciò osserviamo che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2} \sin^2 \left(\alpha \frac{x}{2} \right) dx = \frac{\pi \alpha}{2}$$

quindi affinché la funzione in esame rappresenti una delta di Dirac, bisogna scriverla come

$$\frac{2}{\pi} \frac{1}{\omega^2 T} \sin^2 \left(\frac{\omega T}{2} \right)$$

Possiamo quindi riscrivere la Eq.(23.12) come

$$P_{i \rightarrow f}(T) = \frac{4|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \frac{\pi}{2} T \frac{2}{\pi T \omega_{fi}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi} T}{2} \right) \quad (23.13)$$

che nel limite in cui T sia molto grande può essere riscritta come

$$P_{i \rightarrow f}(T) = \frac{2\pi|W_{fi}|^2}{\hbar^2} T \delta(\omega_{fi}) \quad (23.14)$$

Nella transizione tra due stati stazionari, in generale non si conserva l'energia. La probabilità di transizione tra due stati stazionari è massima quando si conserva l'energia, cioè quando $E_f = E_i$; tuttavia si possono avere transizioni anche quando $E_f \neq E_i$, ma con una probabilità minore. In generale la probabilità di transizione tra due stati stazionari va a zero quando

$$\omega_{fi} \sim \frac{2\pi}{T}$$

cioè, ricordando la definizione di ω_{fi} , quando

$$\Delta E_{fi} \sim \frac{\hbar}{T}$$

Ciò ci permette di introdurre una relazione di indeterminazione energia-tempo. Se il processo dura un tempo T , lo stato finale può avere un'energia differente da quella iniziale di una quantità dell'ordine di \hbar/T . Dunque più è grande l'intervallo di tempo, minore sarà la differenza in energia tra lo stato iniziale e lo stato finale. Per $T \rightarrow \infty$, la probabilità di transizione tra due stati stazionari sarà non nulla solamente tra due stati con la stessa energia, cioè se si ha la conservazione dell'energia. La relazione Eq.(23.14) viene spesso indicata come golden rule di Fermi.

23.4 Relazione di indeterminazione energia-tempo

Riprendiamo l'espressione del generico coefficiente di probabilità di transizione tra due stati $|\varphi_i\rangle$ e $|\varphi_f\rangle$:

$$|b_f(t)|^2 = \frac{2\pi|V_{fi}|^2}{\hbar^2} T \delta(\omega_{fi})$$

Osserviamo che la probabilità di transizione è legata in prima istanza all'elemento di matrice V_{fi} ; esso determina quelle che vengono chiamate regole di transizione. Se per una qualche simmetria esso è nullo, allora la transizione è proibita.

Riprendiamo l'espressione generica per il coefficiente $b_f(t)$

$$b_f(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{fi}(t') \exp(i\omega_{fi}t') dt'$$

Supponiamo che la perturbazione sia presente $\forall t$, ma si annulli per $t \rightarrow \pm\infty$. Questo equivale ad affermare che per tempi abbastanza piccoli e abbastanza grandi il sistema non è perturbato. Possiamo quindi riscrivere il generico coefficiente come

$$b_f(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{fi}(t') \exp(i\omega_{fi}t') dt'$$

L'integrale presente in tale espressione non è altro che la trasformata di Fourier $\tilde{V}_{fi}(\omega_{fi})$ dell'elemento di matrice $V_{fi}(t)$. Dunque la probabilità di transizione è tale che

$$P_{i \rightarrow f} \propto |\tilde{V}_{fi}(\omega_{fi})|^2$$

Se la funzione $V_{fi}(t)$ ha una larghezza Δt , allora la sua trasformata di Fourier $\tilde{V}_{fi}(\omega)$ avrà una larghezza $\Delta\omega$ tale che

$$\Delta\omega \sim \frac{1}{\Delta t}$$

Questo implica che stato iniziale e stato finale possano avere energia differente di una quantità ΔE tale che

$$\Delta E \sim \frac{\hbar}{\Delta t}$$

Maggiore è la durata della perturbazione, minore sarà l'indeterminazione sull'energia, cioè minore sarà la differenza in energia tra stato iniziale e stato finale. Questo è il motivo per cui in spettroscopia nasce la larghezza naturale di riga. Il decadimento spontaneo di un atomo da uno stato eccitato allo stato fondamentale è un processo che avviene in un tempo finito e quindi la larghezza di riga è finita.

Abbiamo detto fino ad ora che la probabilità di transizione deve essere piccola. Come interpretiamo, quindi, la δ di Dirac presente nella probabilità di transizione? La perturbazione esterna agisce su un sistema che, in linea di principio, può avere anche molti livelli poco distanti in energia, dunque un continuo. Ciò ci permette di introdurre una densità di livelli $\rho(E)$, in modo tale che il numero di stati aventi energia compresa in un intervallo di ampiezza dE sia dato da

$$dN = \rho(E) dE$$

Dunque, il numero di particelle aventi energia compresa tra $-\infty$ e l'energia di Fermi E_f è dato da

$$N_f = \int_{-\infty}^{E_f} \rho(E) dE$$

Con questa nuova interpretazione, il coefficiente $b_f(t)$ non è più la probabilità di trovare il sistema nello stato finale, ma diventa una densità di probabilità. La probabilità di transizione quindi si scrive come ⁽¹⁾

(1) Per la dimostrazione di questo risultato si veda il [CDL77]

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{1}{\hbar^2} \int dE \rho(E) |V_{fi}|^2 T \delta\left(\frac{E - E_i}{\hbar}\right)$$

23.5 Perturbazione periodica

Consideriamo un sistema che subisce una perturbazione della forma

$$V(t) = V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t}$$

L'espressione del coefficiente $b_f(t)$ al primo ordine è data da

$$\begin{aligned} b_f(t) = & \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{fi} \exp\{i\omega_{fi}t'\} \exp\{i\omega t'\} dt' + \\ & + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{if}^* \exp\{-i\omega t'\} \exp\{i\omega_{fi}t'\} dt' \end{aligned}$$

Ripetendo i passaggi fatti nel caso della perturbazione costante, troviamo che ciascuno di questi termini produce una δ di Dirac. In linea di principio, quindi, dovremmo avere una delta di Dirac per ciascun termine. Tuttavia le due delta di Dirac non possono essere contemporaneamente non nulle. Infatti, essendo ω la frequenza della perturbazione e ricordando che

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$$

la δ ha supporto solamente quando $\omega_{fi} = \pm\omega$. Quindi certamente se una delta è non nulla, l'altra deve necessariamente essere nulla. Possiamo interpretare le due transizioni in base al segno di ω_{fi} :

- se $\omega_{fi} > 0$, allora il secondo addendo può andare in risonanza e si può avere $\omega_{fi} \simeq \omega$; dunque $E_f > E_i$;
- se $\omega_{fi} < 0$, allora il primo addendo può andare in risonanza e si può avere $\omega_{fi} \simeq -\omega$; dunque $E_f < E_i$.

Nel primo caso abbiamo il fenomeno di assorbimento: il sistema assorbe energia e passa da uno stato di energia inferiore ad uno di energia superiore. Nel secondo caso abbiamo il fenomeno di emissione: il sistema emette energia e passa da uno stato di energia superiore ad uno di energia inferiore.

Notiamo, però, che si ha risonanza solamente quando

$$E_f - E_i = \pm\hbar\omega$$

Rispetto al caso della perturbazione costante, per un tempo sufficientemente grande l'energia del sistema può variare di una quantità pari a $\hbar\omega$.

Questo risultato è in accordo con quanto previsto dall'elettrodinamica quantistica: un campo elettromagnetico oscillante con frequenza ω è trasmesso da fotoni di energia $\hbar\omega$ e se questi interagiscono con un sistema possono produrre un salto energetico proprio pari all'energia che trasportano. In termini semiclassici, interpretando il campo elettromagnetico

come una perturbazione periodica, troviamo che l'energia del sistema non si conserva ma può variare di una quantità proprio pari ad $\hbar\omega$. La probabilità di transizione quindi può essere scritta come

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2\pi |V_{fi}^2|}{\hbar^2} t \delta(\omega_{fi} \pm \omega)$$

dove in realtà quella delta non è propriamente una funzione δ di Dirac, ma una distribuzione molto stretta attorno al valore $\pm\omega$.

Consideriamo la probabilità di transizione per unità di tempo e definiamo la vita media come

$$\frac{P_{i \rightarrow f}}{t} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\tau}$$

Cerchiamo di capire perché τ è proprio la vita media. Consideriamo un processo di decadimento in cui N atomi possono assorbire o emettere energia. Il numero di particelle che decadono dN diviso il numero di particelle totali N è proprio la probabilità di transizione nell'intervallo di tempo dt ; possiamo quindi scrivere

$$\frac{dN}{N} = -\frac{1}{\tau} dt$$

Integrando otteniamo

$$N(t) = N_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

dove N_0 è il numero di particelle iniziali. Abbiamo ottenuto la legge dei decadimenti radioattivi. Si ottiene quindi

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{fi}|^2 \delta(\omega_{fi} \pm \omega)$$

Valgono le stesse considerazioni fatte nel caso precedente:

- se lo stato finale appartiene a un continuo dobbiamo sommare su tutti i possibili stati finali
- se l'onda incidente non è monocromatica bisogna considerare i contributi di ciascuna onda monocromatica contenuta nel pacchetto d'onda incidente e poi sommare su tutte le onde presenti nel pacchetto.

23.6 L'interazione di un atomo con un'onda elettromagnetica

Consideriamo un atomo di idrogeno immerso in un campo elettromagnetico. La trattazione che faremo è semiclassica in quanto considereremo l'atomo di idrogeno come un sistema quantistico avente un set di livelli discreti e il campo elettromagnetico come un campo classico, descritto da un'onda piana monocromatica. Per studiare il problema, poniamoci nella gauge di radiazione pura in cui

$$\begin{aligned} \phi &= 0 \\ \nabla \cdot \vec{A} &= 0 \end{aligned}$$

e consideriamo un'onda piana monocromatica avente vettore d'onda \vec{k} e frequenza $\omega = ck$. Scriviamo il potenziale vettore come

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}_0 \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (23.15)$$

dove \vec{A}_0 è il vettore di ampiezza dell'onda. Il campo elettrico e il campo magnetico sono dati da

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \vec{A}_0 \frac{\omega}{c} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{k} \times \vec{A}_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)\end{aligned}$$

Avendo posto

$$\begin{aligned}\vec{E}_0 &= \vec{A}_0 \frac{\omega}{c} \\ \vec{B}_0 &= \vec{k} \times \vec{A}_0\end{aligned}\tag{23.16}$$

Possiamo scrivere il campo elettrico e il campo magnetico come

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= \vec{E}_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \vec{B}_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)\end{aligned}$$

Ricordando che vale la relazione di dispersione $\omega = ck$, si ha che

$$|\vec{E}_0| = |\vec{B}_0|$$

Tale onda interagisce con un elettrone atomico di massa m e carica $-e$, posto a una distanza r dall'origine e sottoposto a un potenziale centrale $V(r)$ generato da un nucleo che assumiamo essere fermo in O . L'hamiltoniana di tale elettrone può essere scritta come

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(r)$$

dove \vec{P} è l'operatore impulso e \vec{A} è l'operatore ottenuto a partire da Eq.(23.15) sostituendo le coordinate classiche con le componenti dell'operatore posizione. Espandendo il quadrato e trascurando il termine quadratico in $\vec{A}^{(2)}$ otteniamo

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r) - \frac{e}{2mc} (\vec{P} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P})$$

(2) Questa approssimazione è valida nel limite di campi deboli

(3)

Osserviamo che per la relazione Eq.(8.18) ⁽³⁾ si ha che

$$[P_i, f(\vec{R})] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(\vec{R})}{\partial X_i} = -i\hbar \frac{\partial f(\vec{R})}{\partial X_i} \tag{8.18}$$

$$[\vec{P}, \vec{A}] = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

per la gauge scelta. Possiamo quindi riscrivere l'hamiltoniana come

$$H = H_0 - \frac{e}{mc} \vec{P} \cdot \vec{A}$$

dove H_0 è l'hamiltoniana dell'atomo di idrogeno non perturbata. La perturbazione $V(t)$ è data da

$$\begin{aligned}V(t) &= -\frac{e}{mc} \vec{P} \cdot \vec{A} = -\frac{e}{mc} \vec{P} \cdot \vec{A}_0 \sin(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega t) = \\ &= -\frac{e}{mc} \frac{\vec{P} \cdot \vec{A}_0}{2i} \left[\exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) \exp(-i\omega t) - \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}) \exp(i\omega t) \right]\end{aligned}$$

Da questo punto in avanti considereremo solamente il primo addendo di tale espressione della perturbazione. Per il secondo, i ragionamenti da

fare sono analoghi a quelli che faremo. Per determinare la probabilità di transizione, dobbiamo calcolare l'elemento di matrice V_{fi} tra uno stato iniziale $|i\rangle$ e uno stato finale $|f\rangle$. Per fare ciò sviluppiamo in serie di potenze di $\vec{k} \cdot \vec{R}$ l'esponenziale presente nella perturbazione. Otteniamo

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) = 1 + i\vec{k} \cdot \vec{R} - \frac{1}{2}(\vec{k} \cdot \vec{R})^2 + \dots$$

Poiché \vec{R} è dell'ordine delle dimensioni atomiche e supponendo che l'onda elettromagnetica ricada nello spettro del visibile si ha che

$$\vec{k} \cdot \vec{R} \simeq ka_0 = \frac{2\pi a_0}{\lambda} \sim 10^{-3}$$

dove a_0 è il raggio di Bohr. Possiamo quindi trascurare i termini di ordine superiore e uguale al primo e scrivere

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) \simeq 1$$

Possiamo quindi riscrivere la perturbazione come

$$V(t) = -\frac{e}{mc} \frac{\vec{P} \cdot \vec{A}_0}{2i} \exp(-i\omega t)$$

Tale perturbazione è detta di dipolo elettrico. L'elemento di matrice V_{fi} è dato da

$$V_{fi} = -\exp(-i\omega t) \frac{e}{2imc} \langle \varphi_f | \vec{P} | \varphi_i \rangle \cdot \vec{A}_0$$

Per calcolarlo ricordiamo che dall'equazione di Heisenberg si può scrivere

$$\vec{P} = \frac{m}{i\hbar} [\vec{R}, H_0]$$

e quindi si ha

$$\begin{aligned} \langle \varphi_f | \vec{P} | \varphi_i \rangle &= \frac{m}{i\hbar} \left[\langle \varphi_f | \vec{R} H_0 | \varphi_i \rangle - \langle \varphi_f | H_0 \vec{R} | \varphi_i \rangle \right] = \\ &= \frac{m}{i\hbar} (E_i - E_f) \langle \varphi_f | \vec{R} | \varphi_i \rangle \end{aligned}$$

Sostituendo tale espressione in V_{fi} otteniamo

$$\begin{aligned} V_{fi} &= -\exp(-i\omega t) \frac{e}{2imc} \frac{m}{i\hbar} (E_i - E_f) \vec{A}_0 \cdot \langle \varphi_f | \vec{R} | \varphi_i \rangle = \\ &= \frac{e}{2c} \omega \exp(-i\omega t) \vec{A}_0 \cdot \langle \varphi_f | \vec{R} | \varphi_i \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \exp(-i\omega t) \vec{E}_0 \cdot \langle \varphi_f | \vec{d} | \varphi_i \rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo usato il fatto che in condizioni di risonanza $\hbar\omega = E_i - E_f$, la Eq.(23.16) e abbiamo indicato con \vec{d} il momento di dipolo. Questo ci permette di introdurre le regole di transizione: essendo \vec{d} un operatore dispari, se lo stato iniziale e lo stato finale hanno la stessa parità allora l'elemento di matrice è nullo. Si può provare che l'elemento di matrice è non nullo se stato iniziale e stato finale sono tali che

$$\begin{cases} \Delta l = \pm 1 \\ \Delta m = 0, \pm 1 \end{cases}$$

Ovviamente le transizione che non sottostano a tali regole non sono del tutto proibite, ma sono molto meno probabili.

Esempio 23.1. Si consideri un atomo di idrogeno nello stato $|2, 1, m\rangle$ e si calcoli la probabilità di transizione verso lo stato $|1, 0, 0\rangle$ in presenza di un campo elettromagnetico monocromatico avente frequenza ω .

Per calcolare tale probabilità osserviamo che possiamo scrivere l'operatore posizione come

$$\vec{R} = r \left[\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(Y_{1,-1} - Y_{1,1}); i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(Y_{1,-1} + Y_{1,1}); \sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0} \right]$$

Determiniamo quindi gli elementi di matrice sfruttando l'ortogonalità tra le armoniche sferiche

$$\begin{aligned} \langle 2, 1, 1 | \vec{R} | 1, 0, 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}[-1; i; 0] \int_0^{+\infty} r^3 R_{2,1}(r)^* R_{1,0}(r) dr \\ \langle 2, 1, 0 | \vec{R} | 1, 0, 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}[0; 0; \sqrt{2}] \int_0^{+\infty} r^3 R_{2,1}(r)^* R_{1,0}(r) dr \\ \langle 2, 1, -1 | \vec{R} | 1, 0, 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}[1; i; 0] \int_0^{+\infty} r^3 R_{2,1}(r)^* R_{1,0}(r) dr \end{aligned}$$

Posto

$$a = \int_0^{+\infty} r^3 R_{2,1}(r)^* R_{1,0}(r) dr$$

si ha che

$$\begin{aligned} \langle 2, 1, 1 | V(t) | 1, 0, 0 \rangle &= \frac{ae}{2\sqrt{6}}(-E_{0,x} + iE_{0,y}) \exp(-i\omega t) \\ \langle 2, 1, 0 | V(t) | 1, 0, 0 \rangle &= \frac{ae}{2\sqrt{6}}\sqrt{2}E_{0,z} \exp(-i\omega t) \\ \langle 2, 1, -1 | V(t) | 1, 0, 0 \rangle &= \frac{ae}{2\sqrt{6}}(E_{0,x} + iE_{0,y}) \exp(-i\omega t) \end{aligned}$$

Notiamo che le righe spettrali sono associate a differenti polarizzazioni del campo. In particolare la transizione $|2, 1, 0\rangle \rightarrow |1, 0, 0\rangle$ è associata a un'onda polarizzata lungo l'asse z , mentre le transizioni $|2, 1, \pm 1\rangle \rightarrow |1, 0, 0\rangle$ sono associate a onde polarizzate circolarmente sul piano $x - y$. Il fotone viene emesso, oltre che con un'energia $\hbar\omega$, anche con un momento angolare dipendente dalla variazione di m : se $\Delta m = 0$ il fotone è emesso con momento angolare nullo sulla direzione z , mentre se $\Delta m = \pm 1$ il fotone è emesso con momento angolare $\pm \hbar$ sulla direzione z .

Bibliografia

Libri di testo

- [SNF14] J.J. Sakurai, J. Napolitano e S. Forte. *Meccanica quantistica moderna*. Zanichelli, 2014.
- [LL10] Lev D. Landau e Evgenij M. Lifšits. *Fisica teorica*. Vol. 2: *Teoria dei campi*. Roma: Editori Riuniti University Press, 2010.
- [Sha80] Ramamurti Shankar. *Principles of quantum mechanics*. Inglese. New York, NY: Plenum, 1980. URL: <https://cds.cern.ch/record/102017>.
- [CDL77] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu e Franck Laloë. *Quantum mechanics*. eng;fre. New York: Wiley, 1977. ISBN: 0471164321.
- [Sch18] Jakob. Schwichtenberg. *Physics from symmetry*. eng. Second edition. Undergraduate lecture notes in physics. Cham: Springer, 2018. ISBN: 9783319666303.

Altri riferimenti

- [Ver22] Frank Verheest. «On the linearity of the generalized Lorentz transformation». In: *American Journal of physics* 90.6 (2022), pp. 425–429. URL: <https://biblio.ugent.be/publication/8761064>.
- [PT15] Andrea Pelissetto and Massimo Testa. «Getting the Lorentz transformations without requiring an invariant speed». In: *American Journal of Physics* 83.4 (2015), pp. 338–340. arXiv: 1504.02423 [gr-qc].