

Quest'opera è distribuita con licenza **Creative Commons** «Attribuzione – Non commerciale – Condividi allo stesso modo 4.0 Internazionale».



INDICE

I TEORIA

II ESERCITAZIONI

III APPROFONDIMENTI

1 * L'EQUAZIONE DI HAMILTON-JACOBI E IL LEGAME CON LA MECCANICA QUANTISTICA 11

- 1.1 Meccanica Classica e Teoria di Hamilton-Jacobi 11
 - 1.1.1 Lo spazio delle configurazioni 12
 - 1.1.2 Le equazioni di Eulero-Lagrange 13
 - 1.1.3 Il principio di Hamilton 17
 - 1.1.4 Le equazioni del moto di Hamilton 19
 - 1.1.5 Il formalismo hamiltoniano da un principio variazionale 20
 - 1.1.6 Le Trasformazioni Canoniche 23
 - 1.1.7 L'Equazione di Hamilton-Jacobi 27
 - 1.1.8 La Funzione Principale di Hamilton 29
 - 1.1.9 La separazione delle variabili 30
- 1.2 Meccanica Quantistica 32
 - 1.2.1 Un segreto nell'Equazione di Schrödinger 33
 - 1.2.2 Autofunzioni dell'hamiltoniano 34
 - 1.2.3 Notazione e grandezze fisiche 35
 - 1.2.4 La funzione S 36
 - 1.2.5 Un primo modello generale: moto tra due punti di inversione 37
 - 1.2.6 L'equazione di Riccati ed il metodo generale 39
 - 1.2.7 Primi passi verso la soluzione particolare 41
 - 1.2.8 Funzione caratteristica 43
 - 1.2.9 Tracce di WKB 45
 - 1.2.10 La scelta delle costanti nel modello di partenza 46
- 1.3 Applicazione: L'Oscillatore Armonico 49
 - 1.3.1 Le funzioni classiche 49
 - 1.3.2 La soluzione particolare e le funzioni quantistiche 52
 - 1.3.3 Grafici a confronto: il limite classico 53

IV APPENDICI

※ L'EQUAZIONE DI HAMILTON-JACOBI E IL LEGAME CON LA MECCANICA QUANTISTICA

In questo Capitolo riportiamo alcuni risultati generali della Meccanica Classica, facendo riferimento in particolare a [1] e [2]. Verrà quindi introdotta l'Equazione di Hamilton-Jacobi, che aiuta a studiare i sistemi classici da un punto di vista alternativo a quello delle equazioni del moto di Hamilton. Nella seconda parte, approfondiremo poi lo studio di un'equazione molto simile e che ci viene regalata dalla Meccanica Quantistica, risultando equivalente a quella di Shrödinger. La trattazione della seconda parte fa riferimento ad alcuni Articoli citati nel testo.

1.1 MECCANICA CLASSICA E TEORIA DI HAMILTON-JACOBI

In Meccanica Classica, il formalismo delle equazioni del moto di Hamilton può essere riscritto in una forma alternativa, che consente di trovare le stesse soluzioni, passano per una quantità ausiliaria che, come vedremo, prende il nome di *funzione principale di Hamilton*. Tale funzione è riconducibile all'azione del moto classico, e ne vedremo alcune sue proprietà.

Il formalismo di Hamilton-Jacobi in sè, risulta interessante ed utile nella trattazione di alcuni sistemi meccanici specifici; tuttavia, siamo qui interessati al legame che questo formalismo sembra potenzialmente avere con la Meccanica Quantistica, nella quale ritroviamo un'equazione molto simile a quella di Hamilton-Jacobi per il caso classico.

Apprezzeremo il confronto tra le soluzioni *classiche* e *quantistiche* soltanto alla fine di questo Capitolo. Fino ad allora, ci sarà utile proseguire passo dopo passo, richiamando ove neccessario i concetti di Meccanica Classica appresi in questi anni.

Sappiamo che un legame tra le due Teorie può essere intravisto nel formalismo del *Path Integral* della Meccanica Quantistica; esso fa tuttavia uso del formalismo lagrangiano, che richiameremo sin da subito, ma che abbandoneremo presto per poterci dedicare al linguaggio nel quale abbiamo affrontato la Meccanica Quantistica in queste note, ovvero quello hamiltoniano.

Prima di procedere, dichiariamo un abuso di notazione: benchè ci ricondurremo spesso a sistemi monodimensionali, nella trattazione più generale da cui partiremo sarà frequente l'uso di n -uple del tipo

$$(q_1, \dots, q_n)$$

e che per semplicità di notazione e gusto visivo indicheremo semplicemente con il simbolo q , ignorando la notazione di vettore adottata in queste note.

1.1.1 Lo spazio delle configurazioni

In Meccanica Classica, l'analisi formale dei sistemi meccanici porta a definire uno *spazio delle configurazioni*; esso è l'insieme dei valori possibili delle *coordinate generalizzate*

$$q_i \quad i = 1, \dots, n$$

ovvero dei gradi di libertà indipendenti con i quali possiamo descrivere il sistema in questione; fisicamente, questo insieme astratto di n -uple fissa, per ognuna di esse, lo stato *istantaneo* del sistema fisico. Torneremo sul concetto di tempo fra breve; per il momento, notiamo che la definizione del tempo fisico risulterebbe indipendente da ciò.

Lo spazio delle configurazioni si dimostra godere delle proprietà di uno spazio vettoriale, e la sua dimensione sarà quindi uguale a n .

Notiamo subito che la definizione di questo oggetto risulta piuttosto astratta: ad esempio, nel caso di un sistema meccanico composto di N particelle libere in uno spazio tridimensionale, la dimensione dello spazio delle configurazioni sarà pari al numero di particelle (N), moltiplicato per il numero di parametri spaziali indipendenti che individuano univocamente la posizione di ogni singola particella (3); per cui si avrà in totale $n = 3N$.

Pertanto, lo spazio delle configurazioni non coincide in generale con lo spazio fisico tridimensionale.

Come è noto dall'Algebra Lineare, possiamo restringere la variabilità delle coordinate generalizzate – in modo che queste siano libere di variare in un sottospazio vettoriale – imponendo delle limitazioni al sistema libero, che fisicamente sono giustificabili dalla conoscenza di tutto ciò che interagisce con le particelle considerate – siano queste interazioni di natura interna o esterna – e che possiamo formalizzare matematicamente per mezzo di equazioni, nelle quali le variabili coinvolte sono proprio le coordinate generalizzate. Sappiamo già le equazioni del *moto* e le leggi di conservazione¹ impongono dei vincoli temporali e spaziali all'evoluzione del sistema

$$\begin{aligned} m_i \ddot{q}_i &= f_i(q; \dot{q}; t) \\ q &= (q_1, \dots, q_n) \\ \dot{q} &= (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n) \end{aligned} \tag{1.1}$$

dove le f_i sono funzioni reali, specifiche di ogni coordinata generalizzata i -esima; la loro forma dipende dalle forze che vettorialmente interessano ciascuna particella, dal momento che sono le proiezioni di queste su ciascun asse dello spazio delle configurazioni.

Tuttavia, non è sempre possibile esprimere analiticamente tutte le forze agenti sul sistema meccanico in esame. In tal caso, chiameremo *vincoli* tutte quelle forze che sono più semplici da formalizzare sulla base degli **effetti che queste hanno sul sistema**; spesso si tratta di forze che vincolano il sistema in termini macroscopici, geometrici, per cui risulta più semplice introdurre delle *equazioni del vincolo* ulteriori.

Ad esempio, in linea di principio, potremmo provare a descrivere il moto di

una pallina vincolata a muoversi all'interno di una guida circolare di raggio R , inserendo le interazioni microscopiche tra pallina e parete della guida all'interno delle equazioni del moto di Newton; ci rendiamo presto conto però che l'equazione

$$x^2 + y^2 = R^2$$

include già – con ottima approssimazione – gli effetti di questa interazione ha macroscopicamente sul sistema fisico in esame – ovvero la pallina.

Non solo, questa equazione vincolare ci dice qualcosa in più sulla dimensione dello spazio delle configurazioni: tralasciando i gradi di libertà rotazionali della pallina, dovuti alla sua forma estesa, le due coordinate cartesiane che ne descrivono il moto planare non sono più indipendenti; pertanto, la dimensione dello spazio delle configurazioni si abbassa di 1. In questo caso, risulta conveniente cambiare sistema di coordinate generalizzate, passando a quelle cilindriche

$$(q_1, q_2) = (r, \theta)$$

dove $r = R$ è costante.

Avendo introdotto delle equazioni per il *moto* del sistema, il concetto di *tempo* sembrerebbe richiedere una sua definizione più formale; definiamo con la variabile t l'*istante di tempo*, ovvero un parametro reale che **ordina** gli stati del sistema meccanico che stiamo studiando nel corso della sua evoluzione, secondo quanto richiesto dalle equazioni (1.1).

Lo stato del sistema meccanico è ora un punto in movimento nell'iperspazio delle configurazioni $(n - k)$ -dimensionale – dove k dipende dai vincoli applicati al sistema – al volgere del parametro t .

$$(q_1, \dots, q_n; t)$$

A questo punto, è possibile mostrare che esistono delle equazioni equivalenti a quelle del moto, e che più si adattano alla descrizione del sistema meccanico in termini delle coordinate generalizzate e delle equazioni vincolari menzionate sopra. Si tratta delle equazioni di *Eulero-Lagrange*, alle quali dedicheremo il prossimo paragrafo, sebbene non troppo nel dettaglio, dal momento che nei nostri scopi rientra piuttosto una trattazione approfondita del formalismo *hamiltoniano*, essendo questo più affine al linguaggio con il quale abbiamo sviluppato la Meccanica Quantistica nel presente testo.

1.1.2 Le equazioni di Eulero-Lagrange

Consideriamo un sistema composto da N particelle, che distinguiamo con il simbolo $i = 1, \dots, N$. Il moto di ognuna di queste sarà in generale descritto dall'evoluzione del vettore posizione di coordinate

$$\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$$

Raggruppando tutti questi vettori posizione e tenendo conto di eventuali k equazioni vincolari, il sistema sarà descritto in modo efficace dall'evoluzione temporale di un certo insieme di $(n - k)$ coordinate generalizzate q_j . Chiamiamo \mathbf{q} il vettore che ha come componenti le q_j , in una certa base dello

spazio delle configurazioni.

Si definisce *spostamento virtuale* del sistema, una variazione infinitesima $\delta \mathbf{r}_i$ dei vettori posizione associati a ciascuna particella, che sia compatibile con i vincoli imposti al sistema ad dato istante di tempo. Questo implica anche una variazione $\delta \mathbf{q}$ del vettore di coordinate generalizzate nello spazio delle configurazioni.

Non si tratta di uno spostamento *reale*, che al contrario avviene in un certo intervallo di tempo dt , in virtù della dinamica del sistema. Per gli spostamenti virtuali abbiamo piena libertà in questo senso, potendone fare uso ad un qualsiasi istante di tempo fissato.

Per ciascuna particella, consideriamo la forza complessiva agente su di essa, ponendola uguale a zero, immaginando che ad ogni istante il sistema sia *virtualmente* all'equilibrio

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_i^{(a)} + \mathbf{f}_i = \mathbf{0}$$

distinguendo le forze *attive* – apice (a) – da quelle vincolari.

Per i sistemi meccanici per i quali il **lavoro virtuale complessivo delle forze vincolari è nullo**

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i \cdot \delta \mathbf{r}_i = 0$$

allora si mostra agevolmente che vale il *principio dei lavori virtuali*

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i^{(a)} \cdot \delta \mathbf{r}_i = 0$$

che è quindi condizione necessaria per avere un sistema meccanico in equilibrio.

Ricordiamo ora che per ciascuna particella si ha

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i = \mathbf{0}$$

otteniamo, aggiungend una somma di termini nulli alla somma precedente

$$\sum_{i=1}^N (\mathbf{F}_i^{(a)} - \dot{\mathbf{p}}_i) \cdot \delta \mathbf{r}_i = 0 \quad (1.2)$$

e questa ultima relazione prende il nome di *Principio di D'Alembert*. Questa relazione ha la particolarità di coinvolgere – per i soli sistemi a lavoro complessivo delle forze vincolari nullo – i momenti delle particelle e le forze attive; sembra quindi le forze vincolari siano state rimosse dalla nostra trattazione.

Per ottenere ora le equazioni differenziali che regolano il moto del sistema, potremmo provare a porre uguali a zero i coefficienti degli spostamenti infinitesimi; notiamo però che gli spostamenti infinitesimi $\delta \mathbf{r}_i$ non sono in generale tutti indipendenti, a causa delle equazioni di vincolo; al contrario, sono indipendenti le coordinate generalizzate q_j .

Questo è un punto cruciale: abbiamo rimosso le forze vincolari dalle equazioni, ma l'introduzione delle coordinate generalizzate q_j ci riporterà le informazioni sui vincoli che agiscono sul sistema, dal momento che nel cambio di coordinate

$$\mathbf{r} = \{r_i\}_j \rightarrow q_j$$

è inclusa l'informazione sui vincoli, che abbassano da n a $n - k$ la dimensione dello spazio delle configurazioni. Si consideri nuovamente l'esempio bidimensionale precedente (dove avevamo $k = 1$): l'equazione del vincolo costringe la pallina a muoversi su una circonferenza. L'equazione del vincolo è quindi equivalente al sistema

$$\begin{cases} x = R \cos(\theta) \\ y = R \sin(\theta) \end{cases}$$

– dove ricordiamo che R è una costante – per cui abbiamo

$$\mathbf{r} = (x, y) \rightarrow q_1 = \theta$$

Non abbiamo quindi rimosso effettivamente le forze vincolari dalle nostre equazioni: per ottenere uno stesso numero di equazioni scalari analoghe a quelle del moto, gli *effetti che i vincoli hanno sul sistema meccanico* devono persistere, come è ragionevole aspettarsi.

Siamo pronti ad applicare all'equazione (1.2) il cambio di coordinate tanto discusso. Dalle regole di derivazione *a catena*, otteniamo una forma generale per il cambio di coordinate in questione, avendo come variabili le variazioni

$$\delta \mathbf{r}_i = \sum_{j=1}^{n-k} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_j} \delta q_j$$

e similmente, possiamo ricavare le velocità delle singole particelle dalla loro definizione

$$\mathbf{v}_i \equiv \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \sum_{j=1}^{n-k} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial t}$$

in funzione delle *velocità generalizzate* \dot{q}_j .

Rimandiamo alle fonti citate nell'*abstract* di questo Capitolo per i dettagli algebrici; l'equazione (1.2) si può ora riscrivere nel seguente modo

$$\sum_{j=1}^{n-k} \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_j} - Q_j \right] \delta q_j = 0 \quad (1.3)$$

dove

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i |\mathbf{v}_i|^2$$

è l'**energia cinetica totale** del sistema.

Le quantità Q_j prendono il nome di *forze generalizzate*, per via della relazione che le definisce

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i \cdot \delta \mathbf{r}_i &= \sum_{j=1}^{n-k} Q_j \delta q_j \\ Q_j &\equiv \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_j} \end{aligned}$$

e che le rende di fatto le equivalenti delle forze attive nel sistema di coordinate di partenza.

Notiamo subito che le quantità Q_j e q_j non sono obbligate ad avere necessariamente le dimensioni fisiche delle quantità originarie. Lo abbiamo constatato per le q_j nell'esempio bidimensionale precedente: q_1 ha le dimensioni di un radiante.

Tuttavia, è richiesto che il prodotto $Q_j q_j$ abbia le dimensioni di un lavoro, quindi di una energia.

Tutto ciò rende più naturale la definizione di quantità angolari analoghe a quelle presenti nel moto rettilineo, quali il momento angolare – analogo del momento lineare – o l'accelerazione angolare – analogo dell'accelerazione lineare. Non ci sorprende ora che le equazioni che regolano la dinamica dei sistemi in rotazione siano così simili a quelle per i sistemi in moto rettilineo: ad esempio, in un corpo rigido abbiamo per definizione delle equazioni del vincolo, che condizionano l'evoluzione delle coordinate di ogni suo punto. Sappiamo bene che nella descrizione del moto di un corpo rigido attorno ad un asse, studiare il sistema in termini di velocità e momenti angolari risulta decisamente più conveniente.

Torniamo ora a considerare il risultato in equazione (1.3); gli spostamenti virtuali δq_j sono indipendenti, e la loro indipendenza è esattamente testimone della presenza di un certo numero di vincoli nel sistema meccanico. Sfruttiamo questa proprietà, ponendo uguali a zero i coefficienti di questi spostamenti virtuali. Otteniamo le nostre $n - k$ equazioni differenziali

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_j} = Q_j \quad j = 1, \dots, n - k$$

che però vogliamo ora ricondurre a quantità a noi familiari; il termine cinetico T è già stato definito, e sappiamo scriverlo nei vari sistemi di coordinate – si noti la presenza del modulo quadro, che rende la definizione indipendente dal sistema di coordinate generalizzate scelto.

Supponiamo ora che tutte le forze attive possono essere scritte come

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i V$$

dove V è un potenziale scalare, e richiediamo che dipenda soltanto dalle coordinate e dalle velocità generalizzate e dal tempo.

Allora la definizione di *forza generalizzata* ci porta a

$$Q_j = -\sum_{i=1}^N \nabla_i V \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_j} \equiv -\frac{\partial V}{\partial q_j}$$

che è l'espressione analoga alla precedente, ma per le nuove coordinate generalizzate.

Se ora richiediamo anche che il potenziale V non dipenda dalle velocità delle particelle e dal tempo, possiamo riscrivere il tutto come segue

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial (T - V)}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial (T - V)}{\partial q_j} = 0 \quad j = 1, \dots, n - k$$

e definendo la *lagrangiana*

$$L = T - V$$

otteniamo

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0 \quad j = 1, \dots, n-k \quad (1.4)$$

che prendono il nome di **equazioni di Eulero-Lagrange**.

Una nota importante per il seguito: la lagrangiana qui definita non è univocamente associata al sistema meccanico in esame. Le equazioni (1.4) sono anche valide per la funzione

$$\tilde{L} = L + \frac{dF}{dt}$$

dove F è un **qualsiasi** funzione reale che sia almeno C^2 rispetto alle coordinate e rispetto al tempo, e indipendente dalle velocità.

Dalla regola della catena abbiamo infatti che

$$\frac{dF}{dt}(q, t) = \sum_{l=1}^{n-k} \dot{q}_l \frac{\partial F}{\partial q_l}(q, t) + \frac{\partial F}{\partial t}(q, t)$$

e dato che

$$\frac{\partial}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial F}{\partial q_l} = 0 \quad \frac{\partial}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial F}{\partial t} = 0 \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial F}{\partial q_l} = \frac{\partial}{\partial q_l} \frac{dF}{dt}$$

otteniamo

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q_j} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0$$

Questo sarà uno dei punti fondamentali, nel ricavare l'Equazione di Hamilton-Jacobi.

1.1.3 Il principio di Hamilton

Le equazioni di Eulero-Lagrange sono state ricavate dal principio dei lavori virtuali, considerando le equazioni della dinamica di Newton come punto di partenza. Si può mostrare che è possibile ricavare queste stesse equazioni da un principio alternativo, che coinvolge il moto del sistema meccanico nello spazio delle configurazioni tra due istanti di tempo distinti e fissati; nel principio precedentemente discusso invece, abbiamo studiato il sistema in un intorno di un solo istante di tempo arbitrario e fissato.

Prima di tutto, ricordiamo la condizione sulle forze attive generalizzate imposta nel paragrafo precedente (questa condizione non è richiesta per le forze vincolari)

$$Q_j = -\partial_j V(q, \dot{q}, t)$$

dove $\partial_j = \frac{\partial}{\partial q_j}$.

I sistemi meccanici aventi questa proprietà sono detti *monogenici*; se in aggiunta a ciò il potenziale dipende **dalle sole coordinate generalizzate**, allora il sistema monogenico è detto *conservativo*.

Siamo interessati ai sistemi monogenici poichè per questi vale il

[principio di Hamilton] Il moto di un sistema meccanico tra due istanti di tempo fissati è tale che l'integrale di azione

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \quad L = T - V$$

realizzi la condizione di stazionarietà

$$\delta S = 0$$

per tutti i punti della traiettoria del moto nello spazio delle configurazioni.

Abbiamo già visto nel Cap.?? come questo principio possa essere in realtà ricavato come caso particolare di una formulazione della Meccanica Quantistica in termini di integrali sui cammini

$$\langle x|U(t, t_0)|x_0\rangle = \int_{(x_0, t_0)}^{(x, t)} \mathcal{D}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

che permette di raffinare il limite classico *rozzo* $\hbar \rightarrow 0$ grazie ad un confronto numerico tra tutte le azioni accessibili al sistema quantistico ed il *quanto di azione* \hbar

$$\mathcal{O}(S) \gg \hbar$$

In questo limite, se si studia il valore di S attorno a quello della traiettoria classica S_{cl} , definendo la variazione

$$\delta S = |S - S_{cl}|$$

si trova che per tutte le azioni S tali che $\delta S > 0$, i contributi al propagatore delle traiettorie associate a tali valori di S tendono a zero, al crescere di δS . Per ciò, tra tutte le traiettorie quantisticamente accessibili al sistema meccanico, le uniche corrispondenti ad una probabilità di transizione non trascurabile tra due punti nello spazio x_0, x nell'intervallo di tempo $[t_0, t]$, sono quelle previste dal principio di Hamilton.

Non approfondiremo in questa sede il limite classico in termini dell'integrazione sui cammini², ma ci preme far notare la potenza e l'eleganza di quanto appena discusso. La possibilità di individuare un principio più fondamentale dal quale far discendere comunemente la dinamica classica e quantistica, sarà al centro dei nostri interessi in ciò che seguirà. Anticipiamo che, similmente al caso appena discusso, ci ritroveremo a lavorare le azioni, alla ricerca di equazioni e proprietà quantistiche che rimandino a ciò che ci attendiamo valga classicamente in un certo limite.

Prima di fare ciò, vogliamo richiamare alcuni ultimi argomenti di Meccanica Classica.

Nella formulazione della Meccanica Quantistica in termini del Path Integral, la conoscenza della funzione Lagrangiana consente, in linea di principio e con le dovute complessità, di approssicare il problema quantistico in modo completo. Come anticipato, abbiamo dedicato a questo argomento

parte dei capitoli ?? e ??, discutendone alcune applicazioni.

Vogliamo ora provare ad avvicinarci alla Meccanica Quantistica passando per una formulazione della Meccanica Classica equivalente a quella lagrangiana, ovvero quella hamiltoniana, che come abbiamo ben avuto modo di constatare nei capitoli di queste note, risulta intimamente legata al potente linguaggio che ci permette di scrivere le leggi della Meccanica Quantistica in termini di operatori, stati, funzioni d'onda e spazi di Hilbert.

Dedicheremo quindi le prossime sezioni alle celebri equazioni di Hamilton per la Meccanica Classica, discutendo in particolare le proprietà delle trasformazioni canoniche, che ci faranno poi strada verso l'Equazione di Hamilton-Jacobi.

1.1.4 Le equazioni del moto di Hamilton

Come abbiamo visto, le n equazioni di Eulero-Lagrange e le equazioni del moto di Newton restituiscono n equazioni differenziali del secondo ordine nelle coordinate generalizzate, e necessitano pertanto di $2n$ condizioni iniziali o al contorno per essere risolte completamente. Queste parametri costanti possono essere gli n valori delle coordinate q_i e delle velocità \dot{q}_i ad un dato istante di tempo, ma possiamo anche scegliere i valori delle sole coordinate in due istanti di tempo distinti e fissati.

In ogni caso, si tratta di un problema differenziale del secondo ordine, la cui soluzione è graficamente figurabile con il moto di un punto nello spazio delle configurazioni n -dimensionale, al volgere del tempo t .

Tuttavia, è lecito chiedersi se sia possibile formulare il problema in modo equivalente, considerando $2n$ equazioni differenziali del moto del primo ordine, richiedendo quindi uno stesso numero di incognite e costanti di integrazione; la risposta è affermativa, e in linea di principio non siamo obbligati a seguire una specifica scelta per le nuove $2n$ incognite. Risulta tuttavia particolarmente comodo ripartire questa scelta tra le n coordinate generalizzate e gli n momenti coniugati a queste

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad i = 1, \dots, n$$

e ciò conduce alla formulazione Hamiltoniana della Meccanica Classica.

Come conseguenza, si studia il sistema meccanico in un nuovo spazio – avente questa volta dimensione $2n$ – detto *spazio delle fasi*. Ogni punto di tale spazio rappresenta lo stato istantaneo del sistema meccanico, individuato univocamente dalla $2n$ -upla

$$(q_i; p_i) \quad i = 1, \dots, n$$

le cui componenti sono dette *variabili canoniche* del sistema.

Le $2n$ equazioni differenziali del primo ordine coinvolgono ora una nuova funzione scalare, avente le stesse dimensioni della funzione lagrangiana. Si tratta della funzione hamiltoniana

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

definita come la *trasformata di Legendre* della lagrangiana del sistema meccanico. Da questa definizione, si ricavano con pochi passaggi ³ le $2n$ equazioni del moto di Hamilton cercate, per le variabili canoniche incognite

$$\begin{cases} \dot{q}_i(q, p, t) = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i(q, p, t) = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \quad (1.5)$$

insieme all'equazione

$$-\frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

per la dipendenza esplicita di entrambe le funzioni dal tempo.

Specifichiamo, al costo di essere ridondanti, che prima di aver risolto le equazioni (1.5), le $2n$ variabili canoniche sono tra loro indipendenti.

Abbiamo ricavato il formalismo hamiltoniano a partire da quello lagrangiano; tuttavia, sappiamo anche che il formalismo lagrangiano è a sua volta derivabile dal principio di Hamilton. Dedichiamo il prossimo paragrafo al legame tra il formalismo hamiltoniano ed una versione estesa del principio variazionale discusso poc'anzi, in quanto sarà utile per gli argomenti successivi.

1.1.5 Il formalismo hamiltoniano da un principio variazionale

Vorremmo trovare un principio variazionale che conduca direttamente alle equazioni del moto di Hamilton; il principio di Hamilton

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0$$

risulta tuttavia inadeguato, dal momento che è stato formulato in **uno spazio delle configurazioni**, definito dalle n coordinate generalizzate indipendenti q_i e dinamicamente regolato dalle loro relazioni con le n velocità associate. Vogliamo ora provare a formulare un principio analogo, che abbia come *sfondo* lo spazio delle fasi, in modo che le traiettorie e le variazioni ad esse associate siano riferite a questo specifico spazio matematico. Troveremo che questa scelta conduce esattamente alle equazioni di Hamilton del paragrafo precedente.

Il passaggio dallo spazio delle configurazioni a quello delle fasi è presto fatto, visto il legame tra lagrangiana e hamiltoniana per mezzo della trasformata di Legendre

$$\underbrace{L(q, \dot{q}, t)}_{f(q, \dot{q}, p, t)} = \sum_{i=1}^n \dot{q}_i p_i - H(q, p, t)$$

dove abbiamo inserito una dipendenza funzionale della lagrangiana dalle \dot{p} , nell'ottica di dover trattare lo spazio delle fasi $2n$ -dimensionale alla stregua di uno spazio delle configurazioni; questo è possibile, nel momento in cui

consideriamo come indipendenti le coordinate canoniche q_i, p_i nello spazio delle fasi.

La giustificabilità e la potenza di questo approccio risiede nel fatto che il passaggio dal principio variazionale alle equazioni di Eulero-Lagrange non ha necessariamente un legame con il mondo fisico: è anzitutto un Teorema della Matematica!

Infatti, la dipendenza dalle \dot{p}_i da noi inserita forzatamente nel definire la "funzione lagrangiana modificata" f , non è realmente verificata (per i sistemi monogenici in esame) nella Fisica del nostro problema, benchè questa sia matematicamente da non escludere, visto che l'argomento richiederebbe che la funzione lagrangiana modificata sia dipendente dalle coordinate canoniche e dalle velocità associate ad esse.

Sappiamo che in uno spazio delle configurazioni n -dimensionale, il principio di Hamilton

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt = 0$$

implica le equazioni di Eulero-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad i = 1, \dots, n - k$$

Nel nostro spazio delle fasi $2n$ -dimensionale invece, il *principio di Hamilton modificato*

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} f(q, p, \dot{q}, \dot{p}, t) dt = 0 \quad (1.6)$$

deve implicare delle equazioni di Eulero-Lagrange per la funzione f , che non devono poter distinguere tra impulsi e coordinate generalizzate, vista la loro indipendenza

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial f}{\partial q_i} &= 0 \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial \dot{p}_i} \right) - \frac{\partial f}{\partial p_i} &= 0 \end{aligned} \quad (1.7)$$

Veniamo quindi alla Fisica: la funzione f – che è anche numericamente identica alla nostra funzione lagrangiana – non dipende dalle derivate degli impulsi, poichè da queste non dipendono la funzione hamiltoniana e tantomeno le variabili \dot{q}_i e p_i ; inserendo la definizione della funzione f all'interno di entrambe le equazioni di Eulero-Lagrange (1.7), otteniamo esattamente le equazioni di Hamilton

$$\begin{aligned} \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} &= 0 \\ \dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} &= 0 \end{aligned}$$

Abbiamo chiuso il cerchio, e questi ultimi pasaggi sono stati di supporto a quanto stabilito inizialmente: la due descrizioni del sistema meccanico

q_i	q_i, p_i
Equazioni di E.L.	Equazioni di Hamilton
spazio delle configurazioni	spazio delle fasi

sono equivalenti.

Ci preme ora specificare quanto segue: non lo abbiamo mostrato – rimandiamo a [1], Sez. 2.2. per una dimostrazione completa – ma nella dimostrazione delle equazioni di Eulero-Lagrange a partire dal principio di Hamilton, si impone che la variazione delle traiettorie attorno a quella che realizza la stazionarietà dell'azione avvenga ad estremi fissati, vale a dire

$$\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0 \quad \forall i$$

per un moto nello spazio delle configurazioni che avvenga tra due intervalli di tempo t_1 e t_2 .

Per rendere del tutto equivalente a questa la derivazione appena svolta nello spazio delle fasi, ci potremmo chiedere se sia necessario imporre anche le condizioni

$$\delta p_i(t_1) = \delta p_i(t_2) = 0 \quad \forall i$$

che fisicamente implicherebbero delle limitazioni aggiuntive al moto.

In realtà, nel corso della dimostrazione ([1], Sez. 2.2.), l'annullamento delle variazioni delle coordinate agli estremi della traiettoria sono utili all'eliminazione di un termine di bordo, equivalentemente eliminabile se la lagrangiana non dipende dalle velocità associate a tali coordinate.

Nell'ottica in cui i momenti sono trattati come coordinate indipendenti da quelle generalizzate, questa stessa condizione è equivalentemente applicabile ai soli momenti.

Nello schema hamiltoniano, possiamo quindi imporre l'annullamento agli estremi delle variazioni delle q_i , e non richiedere **necessariamente** anche l'annullamento delle variazioni delle p_i , dal momento che la lagrangiana modificata f **non dipende** dalle \dot{p}_i . Questo, lascia formalmente inalterata la derivazione delle equazioni (1.7) a partire dal principio (1.6), sia per la parte riferita alle coordinate che per quella riferita ai momenti.

Discuteremo meglio la questione più avanti, quando introdurremo le *trasformazioni canoniche* nello spazio delle fasi. Si può dimostrare – rimandiamo a [2], Sez.7.4.3 per una discussione più approfondita – che è possibile conservare la validità del principio variazionale, sommando o sottraendo alla funzione integranda la derivata totale nel tempo di funzione **arbitraria** e derivabile due volte nelle sue variabili.

Nel caso hamiltoniano – principio di Hamilton modificato – possiamo ad esempio sottrarre alla lagrangiana modificata f la quantità – sommando sugli indici ripetuti

$$\frac{dF}{dt}(q, p, t) = \frac{d(q_i p_i)}{dt}$$

ottenendo

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(f - \frac{dF}{dt} \right) dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} (-\dot{p}_i q_i - H(q, p, t)) dt$$

ma anche

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(f - \frac{dF}{dt} \right) dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} f dt - \delta [F(q(t_2), p(t_2)) - F(q(t_1), p(t_1))]$$

che per questa forma della funzione F (e simili) implica, **richiedendo anche l'annullamento dei soli momenti** agli estremi del cammino nello spazio delle fasi

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(f - \frac{dF}{dt} \right) dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} f dt = 0$$

e quindi la nuova funzione integranda

$$f' = -\dot{p}_i q_i - H(q, p, t)$$

deve rispettare le equazioni di Eulero-Lagrange ad essa associate, e si mostra velocemente che conduce alle **stesse equazioni di Hamilton** in (1.5).

Riflettiamo su quanto ricavato. La nuova funzione integranda f' **non è una lagrangiana**, in quanto la funzione F dipende dalle velocità – si veda la fine della sezione 1.1.2 – attraverso i momenti coniugati, secondo la relazione **valida nel formalismo lagrangiano**

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(q, \dot{q}, t)$$

Nonostante ciò, la funzione f' conduce esattamente alle equazioni di Hamilton, se si richiedono

- la validità del principio variazionale per la vecchia lagrangiana f ;
- l'annullamento delle variazioni di coordinate o momenti – o di entrambi – agli estremi del cammino nello spazio delle fasi.

Questo sembra suggerire che il formalismo hamiltoniano sia ottenibile indipendentemente da una formulazione lagrangiana della Meccanica Classica. Ricordiamo poi che la relazione che lega i momenti coniugati alla lagrangiana, va dimenticata nel contesto della formulazione hamiltoniana, dovendo trattare i momenti e le coordinate generalizzate come indipendenti, prima di poterli esplicitare nella risoluzione delle equazioni di Hamilton.

Proseguiremo ora la nostra trattazione senza più curarci del formalismo lagrangiano, alla ricerca di ulteriori sorprese e ricchezze che il formalismo hamiltoniano sembra riservare e bramare.

1.1.6 Le Trasformazioni Canoniche

La possibilità di trattare coordinate e momenti come indipendenti e quasi interscambiabili nel formalismo hamiltoniano della Meccanica Classica, ci ha

portati a definire il concetto più generale di *coordinata canonica* nello spazio delle fasi.

Come per lo spazio delle configurazioni, possiamo chiederci se esistano dei cambi di coordinate leciti e che permettano anche di semplificare la risoluzione dei problemi meccanici.

Con *leciti*, vogliamo indicare tutte quelle trasformazioni nello spazio in esame, che siano in grado di non intaccare l'applicabilità e la forma delle equazioni del moto che regolano l'evoluzione dello stato del sistema. Si tratta di una richiesta che la realtà fisica che vogliamo descrivere impone al più generale formalismo matematico.

Conosciamo già alcuni esempi simili nello spazio reale tridimensionale: le rotazioni, le traslazioni o i passaggi a sistemi di coordinate sferiche o cilindriche ci consentono di semplificare le trattazioni di diversi problemi meccanici, pur senza modificare le leggi fondamentali del moto.

Un discorso analogo vale per le trasformazioni di Lorentz nello spazio-tempo quadridimensionale, dove tra tutte le trasformazioni immaginibili, solo queste ultime possono garantirci la sicurezza di non incorrere in assurdità e incosistenze di carattere fisico.

Con uno schema analogo, in uno spazio delle fasi $2n$ -dimensionale si indica con il nome di *trasformazioni canoniche*, quell'insieme di cambi di coordinate che lasciano invariata la forma delle equazioni del moto di Hamilton, che se vogliamo costituiscono l'analogo delle equazioni del moto di Newton nello spazio delle configurazioni.

Notiamo subito che stiamo estendendo il concetto di *trasformazione puntuale* nello spazio delle configurazioni

$$q_i \rightarrow Q_i = Q_i(q, t)$$

a quello di una più generica trasformazione in grado di mescolare indistintamente impulsi e coordinate generalizzate

$$\begin{aligned} q_i &\rightarrow Q_i = Q_i(q, p, t) \\ p_i &\rightarrow P_i = P_i(q, p, t) \end{aligned}$$

e non vi è alcun abuso nei confronti della fisica nel proporre ciò: tutto nasce dall'aver deciso di descrivere il moto del sistema in uno spazio delle fasi; questo formalismo è equivalente a quello lagrangiano e fornisce gli stessi risultati.

Le equazioni di trasformazione *miste* appena definite, sono la naturale e **necessaria** estensione delle trasformazioni puntuali nello spazio delle configurazioni: entrambe hanno la necessità di mantenere inalterata la forma delle equazioni che regolano la dinamica del sistema e, nel farlo, non si esclude la possibilità di coinvolgere **tutte** le coordinate dello spazio considerato.

Se ci pensiamo nuovamente, questa è proprio una delle caratteristiche cruciali del passaggio dalle trasformazioni di Galileo a quelle di Lorentz. In queste ultime, il tempo si mescola con le coordinate spaziali, essendo chiamato ad assumere il ruolo di coordinata di un evento, che è un punto nel nuovo spazio-tempo.

Proseguiamo ora analizzando alcune conseguenze che la definizione di trasformazione canonica ha sulle equazioni del formalismo.

Prima di tutto, diamo la seguente definizione più formale:

se la trasformazione invertibile

$$q_i, p_i \rightarrow Q_i, P_i$$

è tale che esista una funzione $K(Q, P, t)$ che realizzi

$$\begin{aligned}\dot{Q}_i &= \frac{\partial K}{\partial P_i} \\ \dot{P}_i &= -\frac{\partial K}{\partial Q_i}\end{aligned}$$

allora la trasformazione è detta canonica.

La funzione $K(Q, P, t)$ è l'analogo dell'hamiltoniana H nel sistema di coordinate canoniche di partenza; anche per le nuove coordinate deve quindi valere il *principio di Hamilton modificato* – sommiamo sugli indici ripetuti

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t)) dt = 0$$

Abbiamo visto nel paragrafo precedente che, assumendo l'annullamento delle variazioni di coordinate e/o degli impulsi agli estremi, l'integranda del principio di Hamilton modificato è definita a meno di una derivata totale rispetto al tempo, differenziabile almeno due volte nelle sue variabili; più in generale, dato che il principio variazionale è verificato anche dal sistema nelle coordinate di partenza, possiamo scrivere

$$\lambda (p_i \dot{q}_i - H(q, p, t)) = (P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t)) + \frac{dF}{dt}$$

dove λ è una costante legata ad eventuali *cambiamento di scala*. Nel caso in cui si ha $\lambda \neq 1$, si parla di *trasformazione canonica estesa*; noi ci occuperemo d'ora in avanti del solo caso $\lambda = 1$.

Abbiamo quindi

$$p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) = P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t) + \frac{dF}{dt} \quad (1.8)$$

e notiamo che l'ultimo termine è tale da fornire dei contributi all'integrale di azione soltanto nei punti estremali della traiettoria nello spazio delle fasi; se la funzione F dipende dalle vecchie coordinate canoniche (q, p) , dalle nuove (Q, P) o da una mistura di entrambe, l'annullamento della loro variazione agli estremi della traiettoria implica la validità del principio di Hamilton modificato per entrambi i sistemi di coordinate; infatti si ha

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (p_i \dot{q}_i - H(q, p, t)) dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} (P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t)) dt + \delta F(\dots)|_{t_2} - \delta F(\dots)|_{t_1}$$

Per cui, se vale la condizione

$$\delta F(\dots)|_{t_2} - \delta F(\dots)|_{t_1} = 0$$

ovvero, se i due integrali di azione differiscono per una costante, allora il principio – oltre ad essere valido per entrambi – individua la stessa traiettoria estrema nello spazio delle fasi. In altri termini, abbiamo la conferma che le equazioni del moto di Hamilton risultano invariate.

La libertà ⁴ che la funzione F ha di poter dipendere dalle coordinate di partenza e/o da quelle di arrivo è cruciale per ciò che segue: scegliendo di assegnare metà delle variabili da cui F dipende alle vecchie coordinate canoniche e metà alle nuove, otteniamo un modo rapido per calcolare le nuove coordinate in funzione delle vecchie e viceversa. Possiamo scrivere così una forma per questo particolare tipo di trasformazioni canoniche. ⁵ La funzione F prende il nome di *funzione generatrice della trasformazione*.

Tra le quattro tipologie più comunemente utilizzate ⁶ – si veda la tabella riportata in [1] Sez.9.1 – vogliamo qui analizzarne due:

- le funzioni di tipo $F_1(q, Q, t)$;
- le funzioni di tipo $F_2(q, P, t)$, utili per ricavare l'equazione di Hamilton-Jacobi.

Iniziamo ricavando per esercizio le proprietà per il primo caso.

Consideriamo quindi la relazione definente in Eq. (1.8) per la prima tipologia; esplicitando la derivata totale con la regola della catena otteniamo

$$p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) = P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t) + \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i + \frac{\partial F}{\partial t}$$

che possiamo anche riscrivere come segue

$$\left(p_i - \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \right) \dot{q}_i + \left(-\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} - P_i \right) \dot{Q}_i + \left(K - H - \frac{\partial F}{\partial t} \right) = 0$$

Essendo separatamente indipendenti le vecchie e le nuove coordinate generalizzate, possiamo equivalentemente scrivere

$$\begin{cases} p_i(q, Q, t) = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \\ P_i(q, Q, t) = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \\ K(Q, P, t) = H + \frac{\partial F}{\partial t} \end{cases}$$

dove per la terza equazione occorre esprimere sia la vecchia hamiltoniana H che la funzione generatrice F_1 in funzione delle nuove coordinate canoniche (Q, P) .

Un esempio banale di funzione di tipo F_1 è il seguente

$$F_1 = q_i Q_i \implies Q_i = p_i \quad P_i = -q_i$$

esempio più eclatante dell'interscambiabilità di coordinate ed impulsi nel linguaggio hamiltoniano. Questo è infatti l'unico modo che abbiamo per

scambiare completamente i due sottoinsiemi di variabili indipendenti conservando la forma delle equazioni (1.5). Abbiamo già visto un esempio analogo in Meccanica Quantistica in Sez.??.

Con passaggi analoghi a quelli appena svolti, è possibile mostrare che per le funzioni generatrici di tipo F_2 valgono le seguenti relazioni

$$\begin{cases} p_i(q, Q, t) = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \\ Q_i(q, Q, t) = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \\ K(Q, P, t) = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \end{cases} \quad (1.9)$$

essendo questa ultima tipologia legata alla precedente dalla trasformata di Legendre

$$F_2(q, P, t) = F_1(q, Q, t) + Q_i P_i$$

Anche qui, un esempio banale di F_2 è dato da

$$F_2 = q_i P_i \implies Q_i = q_i \quad P_i = p_i$$

dove F_2 genera quindi la trasformazione identica.

Se invece definiamo una F_2 della forma

$$F_2 = g_i(q, t) P_i$$

dove g_i sono funzioni reali, invertibili e linearmente indipendenti, per $i = 1, \dots, n$ – allora abbiamo

$$Q_i = g_i(q, t)$$

ovvero una *trasformazione puntuale* del tutto **generica**, per via della forma generale delle funzioni g_i . Questo è un modo per dedurre che tutte le trasformazioni puntuali nello spazio delle configurazioni sono anche canoniche.

1.1.7 L'Equazione di Hamilton-Jacobi

Siamo quasi giunti ad un primo traguardo: nelle prossime sezioni termineremo questa prima parte del Capitolo dedicata alla Meccanica Classica.

Consideriamo la trasformazione

$$q(t), p(t) \longrightarrow \begin{cases} Q = q(t=0) = q_0 \\ P = p(t=0) = p_0 \end{cases}$$

che riporta il sistema meccanico all'istante iniziale. Le coordinate di arrivo sono ora delle costanti del moto. Volendo vedere questa evoluzione temporale inversa come una trasformazione canonica, dobbiamo imporre le sue proprietà.

Capiamo presto che affinché le nuove equazioni del moto di Hamilton siano soddisfatte

$$\begin{aligned}\frac{\partial K}{\partial P_i} &= \dot{Q}_i = 0 \\ \frac{\partial K}{\partial Q_i} &= -\dot{P}_i = 0\end{aligned}$$

è sufficiente considerare una hamiltoniana K che sia nulla. Pertanto, l'equazione che lega la vecchia e la nuova hamiltoniana diventa

$$H(q, p, t) + \frac{\partial F}{\partial t} = 0$$

e notiamo che tutto questo vale anche per hamiltoniane che dipendano esplicitamente dal tempo: non abbiamo richiesto altro, se non che le coordinate canoniche finali siano costanti del moto.

Scegliamo ora una funzione generatrice per questa trasformazione; risulta comodo passare per le funzioni di tipo F_2 , che in questo caso avranno la seguente dipendenza dalle vecchie e nuove coordinate

$$F_2(q, p_0, t)$$

Dalle equazioni (1.9) sappiamo che i vecchi impulsi sono ricavabili dalla relazione

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \quad \forall i = 1, \dots, n$$

pertanto l'equazione precedente diventa

$$\frac{\partial F_2}{\partial t} + H\left(q_1, \dots, q_n, \frac{\partial F_2}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial F_2}{\partial q_n}, t\right) = 0$$

e prende il nome di *equazione di Hamilton-Jacobi*

Si tratta di un'equazione differenziale del primo ordine – in genere non lineare, come vedremo — alle derivate parziali nelle coordinate e nel tempo, avente come incognita la funzione generatrice, altrimenti detta *funzione principale di Hamilton*. La indicheremo con il simbolo S e scriveremo in forma compatta l'equazione precedente come segue

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = 0 \quad (1.10)$$

La soluzione di questa equazione sarà della forma

$$S(q, t; \alpha)$$

dove con α indichiamo l'insieme delle $n + 1$ costanti previste dall'integrazione dell'equazione differenziale, essendo il tempo una delle variabili da cui la soluzione dipende, insieme alle coordinate generalizzate. Troviamo subito che una tra queste costanti sarà additiva alla funzione S , dal momento che l'equazione differenziale dipende solo dalle derivate di quest'ultima; pertanto, anche la funzione

$$S' = S + c$$

con c costante – sarà soluzione dell'equazione (1.10).

Dato che la costante additiva non influisce nemmeno sulla trasformazione canonica, sarà sufficiente trovare una soluzione parametrizzata da n costanti di integrazione. Risulta naturale – per la definizione di F_2 – prendere come costanti del moto proprio i valori iniziali dei momenti

$$\alpha \equiv P = p_0$$

e le prime due equazioni della trasformazione (1.9) diventano

$$\begin{cases} p = \frac{\partial S}{\partial q} \\ q_0 = \frac{\partial S}{\partial p_0} \end{cases}$$

secondo la notazione indicata all'inizio del capitolo.

La risoluzione completa del problema in esame coincide con l'aver risolto anche le equazioni del moto, dal momento che la soluzione dell'equazione differenziale (1.10), consente di esprimere le vecchie coordinate canoniche in funzione delle nuove seguendo il formalismo delle funzioni generatrici, ricavando l'inversa della trasformazione canonica studiata

$$q(t; q_0, p_0) \quad p(t; q_0, p_0)$$

ma queste sono esattamente le soluzioni delle equazioni del moto di Hamilton (1.5).

1.1.8 La Funzione Principale di Hamilton

Il simbolo utilizzato per indicare la soluzione dell'equazione di Hamilton-Jacobi (1.10) non è stato scelto a caso. Possiamo dare un significato fisico alla funzione generatrice della trasformazione canonica appena presentata.

Per la regola della catena, la derivata totale rispetto al tempo della funzione principale di Hamilton si esprime come segue (sommando sugli indici ripetuti)

$$\frac{dS}{dt} = \dot{q}_i \frac{\partial S}{\partial q_i} + \frac{\partial S}{\partial t}$$

e sappiamo che per le funzioni generatrici di tipo F_2 , si ha

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} \equiv p_i \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H$$

per cui infine

$$\frac{dS}{dt} = \dot{q}_i p_i - H \equiv L$$

ovvero

$$S = \int L dt + c$$

dove c è una costante arbitraria e L è la funzione lagrangiana del sistema. Questa relazione non è utile in termini pratici, dal momento che persino

l'integrale indefinito della lagrangiana L nel tempo richiederebbe la forma analitica di coordinate e momenti in funzione del tempo, ovvero la soluzione del problema.

Tuttavia, possiamo attribuire all'azione il ruolo di generatrice dell'evoluzione temporale inversa, a meno di costanti, che sappiamo non influire sulla trasformazione canonica in esame.

Veniamo ora ad un'altra proprietà della funzione principale di Hamilton. Quando l'hamiltoniana del sistema non dipende esplicitamente dal tempo

$$H = E \quad \forall t$$

possiamo integrare nel tempo l'equazione di Hamilton-Jacobi, ottenendo

$$S(q, E, t) = -Et + W(q, E)$$

dove la funzione W – detta *funzione caratteristica di Hamilton* – è una costante di integrazione rispetto alla sola variabile temporale, e pertanto può in generale dipendere dai valori delle coordinate, oltre che da quello dell'hamiltoniana.

Esplicitando la derivata totale rispetto al tempo della funzione caratteristica di Hamilton, troviamo

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\partial W}{\partial q_i} \dot{q}_i \equiv p_i \dot{q}_i$$

dal momento che questa non dipende dal tempo in modo esplicito. Per cui si ha infine l'integrale di linea indefinito

$$W = \int p_i dq_i$$

e quindi

$$S(q, t) = \int^{q_i} p_i dq'_i - Et + c \quad (1.11)$$

dove l'estremo superiore di integrazione fissa la dipendenza di S dalle coordinate generalizzate q , mentre è possibile inglobare l'estremo inferiore nella costante di integrazione c .

1.1.9 La separazione delle variabili

La separazione dell'evoluzione temporale tramite una somma in equazione (1.11), ricorda l'evoluzione temporale degli autostati in Meccanica Quantistica, e vedremo infatti che esiste anche in quel contesto una funzione avente questa stessa proprietà.

Tuttavia, osserviamo che la separazione delle variabili adottata è specifica del caso ad energia costante. L'equazione (1.10) non gode di questa stessa proprietà.

Per mettere a confronto velocemente i due casi, consideriamo l'esempio di una particella libera in un moto unidimensionale. L'equazione più generale che possiamo scrivere è

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 = 0$$

e dato che sappiamo di star trattando un sistema ad energia fissata E , possiamo anche scrivere

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = E = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2$$

che come visto poc'anzi, ha come soluzione

$$S(x, t; p, E) = px - Et + c \quad (1.12)$$

La prima equazione può anche essere integrata con la separazione delle variabili $S(x, t) = S_x(x)S_t(t)$ ed il risultato è

$$S(x, t; x_0, t_0) = \frac{m}{2} \frac{(x - x_0)^2}{(t - t_0)} \quad (1.13)$$

ovvero l'azione classica per la particella libera, ad estremi del moto fissati.

Come mai queste due soluzioni? ⁷

Siamo in Meccanica Classica, pertanto entrambe le soluzioni devono essere associate al moto di una particella di massa m , avente energia, impulso, istante di partenza e posizione iniziale ben definiti.

Entrambe le soluzioni, forniscono il valore dell'azione classica ad un certo istante di tempo t e in una certa posizione x della particella.

Cambia tuttavia il modo in cui questi possibili valori dell'azione sono raggruppati:

- la famiglia di soluzioni (1.12), fornisce tale valore una volta specificati l'energia o l'impulso, che in questo caso sono biunivocamente legati dalla relazione

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

e una volta determinata la costante c , che regola la posizione e l'istante iniziale;

- la famiglia di soluzioni (1.13), individua i valori dell'azione quando si fissa la posizione iniziale x_0 ad un certo istante di tempo t_0 . Essendo in Meccanica Classica, questo individua a posteriori automaticamente anche il valore dell'energia o dell'impulso, conoscendo la velocità nel moto rettilineo uniforme.

La costante libera c del primo caso è cruciale: per fissare il punto e l'istante di partenza in questa famiglia di soluzioni, basta imporre l'uguaglianza

$$px - Et + c = \frac{m}{2} \frac{(x - x_0)^2}{(t - t_0)}$$

ottenendo

$$\begin{cases} t_0 = t + \frac{Et - px - c}{E} \\ x_0 = x + \sqrt{\frac{2}{mE}}(Et - px - c) \end{cases} \quad (\text{per } x > x_0)$$

confermandoci che una volta noti i valori di posizione e istante finali, di energia e impulso, la costante c è sensibile ai valori delle condizioni iniziali (x_0, t_0) .

Ricordiamo che la presente trattazione riguarda il solo moto classico rettilineo uniforme; più avanti, includeremo la presenza di un potenziale $V(x)$ nella trattazione, che già classicamente non permette in generale di trattare l'impulso p come una costante del moto, bensì come una funzione delle coordinate $p(x)$.

Ci aspettiamo quindi che il raggruppamento in famiglie di soluzioni appena mostrato cambi, coinvolgendo anche il valore dell'impulso all'istante iniziale, che verosimilmente sarà sempre legato ad una qualche costante di integrazione.

Troveremo un analogo di questa costante di integrazione anche in Meccanica Quantistica, ma a differenza del caso classico – come è ragionevole attendersi – non sarà immediato darle un ruolo così specifico.

1.2 MECCANICA QUANTISTICA

Le prossime sezioni saranno dedicate allo studio di un'equazione molto simile a quella di Hamilton-Jacobi presentata nel caso classico e che risulta equivalente all'equazione di Schrödinger.

D'ora in avanti, il nostro sistema fisico sarà composto di una sola particella. Questo ci consentirà di semplificare la trattazione, e ci permetterà anche di concentrarci piuttosto sul limite classico della Meccanica Quantistica in questo specifico scenario; anticipiamo che l'argomento in questione presenta alcuni punti di contatto con la nota *approssimazione WKB*, che abbiamo già affrontato in Sez. ???. Pertanto, faremo talvolta uso diretto di alcuni strumenti già visti in precedenza, senza dover dimostrare tutto da capo.

Indicheremo con il pedice C le quantità introdotte fino ad ora per il caso classico. Per una particella di massa m in una dimensione \hat{x} l'equazione di Hamilton-Jacobi diventa quindi

$$-\frac{\partial S_c}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_c}{\partial x} \right)^2 + V(x) \quad (1.14)$$

Nel caso in cui l'hamiltoniana è una costante del moto e coincide con l'energia totale del sistema, la funzione principale di Hamilton si scrive come

$$S_c(x, t) = W_c(x) - Et$$

dove la funzione caratteristica di Hamilton introdotta poc'anzi si riduce a

$$W_c(x) = \int^x p(x') dx' = \int^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx'$$

e possiamo scrivere una versione *time-independent* dell'equazione di Hamilton-Jacobi

$$E = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W_c}{\partial x} \right)^2 + V(x) \quad (1.15)$$

Nel seguito, dedicheremo la nostra attenzione agli autostati dell'hamiltoniano in Meccanica Quantistica. Vedremo che, per sistemi preparati in tali autostati, saremo autorizzati a seguire una trattazione analoga a quella appena esposta, per i sistemi che in Meccanica Classica hanno energia costante, e che conduce in realtà ad una proprietà delle autofunzioni che già conosciamo.

Per il momento, partiremo considerando funzioni d'onda generiche, tenendo d'occhio le due equazioni classiche (1.14) e (1.15) nel passaggio alle autofunzioni dell'hamiltoniano.

1.2.1 Un segreto nell'Equazione di Schrödinger

Per la trattazione quantistica di una particella non-relativistica di massa m , immersa in un potenziale unidimensionale $V(x)$, vale l'Equazione di Schrödinger nella rappresentazione delle coordinate

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$$

dove la funzione d'onda incognita $\psi(x, t)$ non è in generale un'autofunzione dell'hamiltoniano.

Tuttavia, essa è in generale una funzione delle variabili reali x, t ed è a valori complessi. Pertanto, possiamo scriverla nella seguente forma polare

$$\psi(x, t) = A \exp\left(i \frac{S}{\hbar}\right)$$

dove prendiamo A come generica costante complessa di normalizzazione, dunque irrilevante per l'equazione differenziale, mentre S è una funzione a valori complessi, da non confondere ora con la funzione principale di Hamilton S_c .

Nonostante la funzione S all'esponente sia complessa, la forma polare della funzione d'onda è ugualmente generale. La parte immaginaria della fase complessa S tiene infatti conto della dipendenza dalla coordinata x e dal tempo t della densità di probabilità

$$|\psi|^2 = |A|^2 \exp\left(-\frac{2 \operatorname{Im}\{S\}}{\hbar}\right)$$

per cui, il modulo del numero complesso non è una costante.

Inseriamo questa *ansatz* all'interno della sua equazione differenziale, ottenendo

$$-\frac{\partial S}{\partial t}\psi = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] \psi$$

che vale per ogni funzione d'onda e che pertanto si riduce ad un'equazione differenziale per la fase complessa S

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \quad (1.16)$$

che chiameremo equazione *quantistica* di Hamilton-Jacobi (*time-dependent*), per via della sua forma, che ricorda molto quella dell'equazione classica (1.14). Vedremo che questa similitudine non è in realtà del tutto accidentale.

1.2.2 Autofunzioni dell'hamiltoniano

Per autofunzioni dell'operatore hamiltoniano, la trattazione è identica fino all'equazione (1.16). Possiamo però ottenere per questi sistemi fisici la stessa proprietà di separabilità della funzione classica S_c riscontrata nei sistemi classici ad energia fissata.

Sappiamo infatti che per le autofunzioni dell'energia l'equazione di Shrödinger guadagna l'uguaglianza aggiuntiva (!)

$$i\hbar \frac{d\psi_E}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial x^2} + V(x)\psi_E = \underbrace{E\psi_E}_{(!)}$$

e dunque, per hamiltoniani non dipendenti dal tempo, questo consente di esprimere ogni autofunzione nella forma separata

$$\psi_E(x, t) = \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar}$$

qui, indicando con lo stesso simbolo l'autofunzione completa $\psi_E(x, t)$ e la sua parte *time-independent* $\psi_E(x)$ per abuso di notazione.

Per esprimere in una forma polare gerica le autofunzioni $\psi_E(x, t)$, utilizziamo la stessa notazione del caso precedente, dato che ci occuperemo solo e soltanto di autostati d'ora in avanti. Abbiamo dunque

$$A \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right) = \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar}$$

dove ora S dipende anche dall'energia, ovvero dallo specifico autostato scelto.

In generale, anche la funzione $\psi_E(x)$ sarà a valori complessi, ed avrà quindi una sua forma polare con fase complessa, unicamente dipendente dalla coordinata x . Scegliamo questa fase complessa in modo che la costante di normalizzazione sia sempre A anche per la funzione $\psi_E(x)$, otteniamo

$$A \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right) = A \exp\left(i\frac{W}{\hbar}\right) e^{-iEt/\hbar}$$

e quindi infine, a meno di multipli interi con segno di 2π

$$S(x, t) = W(x) - Et$$

che per quanto possa risultare identica alla relazione che lega le funzioni principale e caratteristica di Hamilton, non rappresenta in realtà la stessa equazione. Le quantità S e W sono quantità in generale complesse.

Sostituendo questa particolare forma per S nell'equazione quantistica (1.16), otteniamo infine

$$E = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + V(x) - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} \quad (1.17)$$

per ogni autovalore E dell'hamiltoniano – chiaramente anche W dipende dall'energia.

Questa equazione rappresenta per noi l'analogo dell'equazione (1.15), valida per sistemi classici ad energia costante.

Infatti, similmente, l'equazione appena trovata vale solo e soltanto per autofunzioni dell'hamiltoniano – a differenza dell'equazione (1.16) – che per forza di cose descrivono sistemi che evolvono ad energia fissata, se l'hamiltoniano non dipende dal tempo.

Anche qui, la parte immaginaria della funzione S è legata alla distribuzione di probabilità, che nel caso delle autofunzioni dell'hamiltoniano si conferma essere indipendente dal tempo, dato che qui la dipendenza della funzione S dal tempo è espressa soltanto nella sua parte reale. Questo non sarebbe vero per hamiltoniani *time-dependent* e tantomeno per sistemi quantistici che evolvono come sovrapposizione di autostati, e che sono quindi descritti dall'equazione non separabile (1.16) vista nel paragrafo precedente.

1.2.3 Notazione e grandezze fisiche

Nel seguito, sarà frequente l'uso (inappropriato) di argomenti di logaritmi aventi apparentemente le dimensioni di un'azione o di una quantità di moto. Sarà tuttavia anche frequente l'introduzione di costanti di integrazione, a meno delle quali verranno definite certe soluzioni. Pertanto, l'ambiguità dovrebbe scomparire una volta fissate le costanti di integrazione, ovvero una volta che si è risolto il problema in modo esatto.

Ad esempio, un caso frequente sarà l'integrazione

$$\int_{s_0}^s \frac{1}{s'} ds' = \log\left(\frac{s}{s_0}\right)$$

con s avente determinate dimensioni fisiche.

Secondo il nostro abuso di notazione, l'equazione precedente diventerà

$$\int_{s_0}^s \frac{1}{s'} ds' = \log(s) - \log(s_0) = \log(s) + c$$

quando in realtà il logaritmo andrebbe diviso correttamente come

$$\log\left(\frac{s}{s_0}\right) = \log\left(\frac{s}{1[s]}\right) - \log\left(\frac{s_0}{1[s]}\right)$$

dove $1[s]$ indica l'**unità** fisica fondamentale della grandezza s . Questa caratteristica del logaritmo si adatta naturalmente anche al caso in cui s sia una quantità complessa.

Pertanto, in situazioni ambigue nelle quali le costanti di integrazioni non saranno ben definite, immagineremo di star calcolando il logaritmo del valore numerico della grandezza in argomento.

1.2.4 La funzione S

Per una particella classica ad energia costante in un potenziale $V(x)$, l'impulso è legato alla funzione caratteristica dalla relazione

$$p_c(x) = \frac{\partial W_c}{\partial x} = \sqrt{2m(E - V(x))}$$

che sappiamo essere reale nei punti in cui $E > V(x)$, dette zone accessibili classicamente al moto, mentre è puramente immaginaria nelle zone non accessibili.

Se proviamo ora a calcolare la derivata rispetto alla coordinata della funzione quantistica W , otteniamo

$$p_f(x) = \frac{\partial W}{\partial x} = \frac{-i\hbar \frac{\partial \psi_E(x)}{\partial x}}{\psi_E(x)} \quad (1.18)$$

e battezziamo questa quantità con il nome di *funzione momento quantistica*.

Torniamo per un attimo all'equazione quantistica (1.17). Notiamo già ora che la costante \hbar compare soltanto nel termine

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 W}{\partial x^2}$$

ovvero quel pezzo che rende algebricamente differente questa equazione da quella classica di Hamilton-Jacobi.

Abbiamo già trattato con il metodo WKB questo problema nel Cap.??.

L'idea era quella di assumere che la funzione W fosse esprimibile come serie di funzioni, aventi a moltiplicare potenze crescenti di \hbar . In questo modo, era possibile determinare iterativamente i termini dello sviluppo in serie, risolvendo il problema con grado di approssimazione arbitrario.

È tuttavia noto – e discuteremo di ciò brevemente più avanti – che questo sviluppo semiclassico, presenta alcuni problemi nei punti che classicamente individuano l'inversione del moto, tuttavia risolvibili con vari metodi aggiuntivi.

È chiaro che solo una risoluzione esatta dell'equazione quantistica (1.17) consentirebbe di risolvere il problema quantistico senza incosistenze, dal momento che questa equazione è del tutto equivalente a quella di Shrödinger per le autofunzioni dell'energia.

Questo sarà il nostro principale intento da ora in avanti; dedichiamo le prossime sezioni ad una introduzione al metodo.

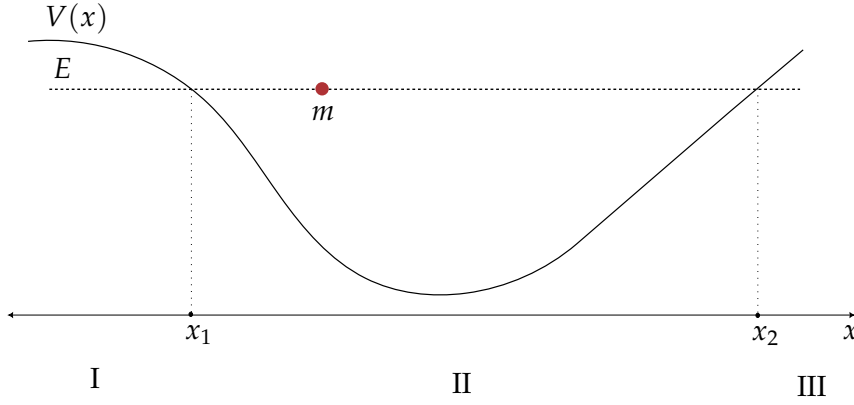


Figura 1.1: Illustrazione del sistema fisico in esame: particella di massa m , immersa in un potenziale $V(x)$ tale da presentare due punti di inversione x_1 e x_2 per un certo valore dell'energia E . Quantisticamente, immaginiamo di aver preparato il nostro sistema in un certo autostato dell'hamiltoniano, corrispondente all'autovalore E e descritto da tre autofunzioni *time-independent* della forma $\psi_E(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}W(x)}$ nelle regioni indicate, ed opportunamente raccordate.

1.2.5 Un primo modello generale: moto tra due punti di inversione

In questa sezione fissiamo il problema generale che andremo ad analizzare fra breve. Per semplicità, consideremo una particella di massa m e di energia E ⁸, tale che il potenziale unidimensionale $V(x)$ nel quale è immersa fornisca – per quella data energia – soltanto due punti di inversione classici x_1 e x_2 (Fig. 1.1). Pertanto, il sistema sarà descritto da stati legati, tra i due punti di inversione.

Per cui abbiamo

- $E > V(x)$ per $x_1 < x < x_2$: regione che classicamente è accessibile al moto (II)
- $E < V(x)$ per $x > x_2$ e per $x < x_1$: regioni classicamente inaccessibili al moto (I,III).
- allora i punti di inversione sono definiti dalla relazione classica

$$p_c(x_1) = p_c(x_2) = 0$$

Nel metodo WKB, si cerca di risolvere l'equazione (1.17) in modo approssimato, sviluppando in potenze di \hbar la funzione caratteristica W . Qui mostreremo come è possibile risolvere il problema in modo esatto, evitando andamenti *patologici* nei punti di inversione.

Il metodo WKB all'ordine zero

$$W(x) \approx W_0(x) + \mathcal{O}(\hbar)$$

implica che

$$W_0(x) = \int^x p_c(x') dx'$$

Questo sviluppo fallisce in un intorno dei punti di inversione, poichè la lunghezza d'onda di DeBroglie

$$\lambda(x) = \frac{h}{p_c(x)}$$

associata alla funzione momento classica

$$p_c(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$

diverge per definizione in tali punti.

Il problema è che ciò risulta in contraddizione con la condizione di validità dell'ordine zero, ovvero quella di avere una lunghezza d'onda di DeBroglie molto minore della scala tipica sulla quale varia il potenziale $V(x)$ – si veda Sez.?? – i.e.

$$\left| \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right| \ll \left| \frac{p^2(x)}{m} \frac{p(x)}{\hbar} \right| \sim \mathcal{O} \left(\frac{|E - V|}{\lambda} \right)$$

Per cui, mano a mano che ci si avvicina ai punti di inversione, l'approssimazione all'ordine zero perde di consistenza; pur aggiungendo termini successivi allo sviluppo della funzione caratteristica, si trova che l'ordine sviluppo stesso continua a non essere sufficiente, avvicinandosi ai punti di inversione. Ad esempio, all'ordine successivo si ha

$$\begin{cases} W(x) \approx W_0(x) + \hbar W_1(x) \\ \frac{\partial W_1}{\partial x} = \frac{i}{2} \frac{p_c(x)'}{p_c(x)} \end{cases}$$

e quindi le autofunzioni dell'energia

$$\psi_E^{WKB}(x) = \frac{C_1^\pm}{\sqrt{p_c}} \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int^x p_c(x') dx' \right) \quad (1.19)$$

sono divergenti nei punti di inversione.

Esistono diversi studi e tecniche dediti alla risoluzione di tale problema, tra cui il metodo delle funzioni di Airy, che non approfondiremo qui.

Il nostro scopo sarà quello di trovare delle soluzioni esatte dell'equazione di Hamilton-Jacobi *quantistica*, che riconducano a funzioni d'onda prive di comportamenti anomali in corrispondenza dei due punti di inversione scelti. Dopo ciò, ci occuperemo di studiare il limite classico della Teoria.

Nella presente trattazione, riporteremo un metodo analizzato da M.F.Girard ed altri citati in un suo recente Articolo; il metodo in questione permette di trovare delle soluzioni analitiche ed esatte dell'*equazione quantistica di Hamilton-Jacobi* (1.17).

L'equazione in questione fornirà una famiglia di soluzioni per la funzione W e quindi anche per la funzione p_f , parametrizzate da certi coefficienti complessi.

Dalla definizione di autofunzione in forma polare, otterremo così le soluzioni nelle varie regioni; il raccordo in corrispondenza dei punti di inversione sarà discusso nel seguito.

Prima di procedere, riscriviamo l'equazione differenziale (1.17) in termini della funzione momento quantistica; dalla definizione (1.18) otteniamo immediatamente

$$\frac{dp_f}{dx} = \frac{1}{i\hbar} p_f^2 - \frac{2m}{i\hbar} (E - V(x)) \quad (1.20)$$

Notiamo che questa equazione può anche essere riscritta come segue, ricordando la definizione di funzione momento classica

$$p_c^2 = p_f^2 - i\hbar \frac{dp_f}{dx}$$

e ciò sembrerebbe già fornire un primo indizio a favore del limite classico

$$p_f(x) \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} p_c(x)$$

Tuttavia, quando studieremo meglio la forma della funzione $p_f(x)$ per un caso specifico, ci renderemo presto conto che un limite inteso in questo senso non è realmente possibile.

Sia l'ultima equazione, sia la precedente, non sono di risoluzione immediata in questa forma. La difficoltà principale risiede nella dipendenza dal quadrato della funzione incognita.

Tuttavia, risulta utile notare che l'equazione quantistica di Hamilton-Jacobi diventa così un'equazione di Riccati per la funzione momento quantistica. Dedichiamo brevemente la prossima sezione a questa particolare equazione differenziale, discutendone una proprietà utile per il seguito.

1.2.6 L'equazione di Riccati ed il metodo generale

Un'equazione differenziale del primo ordine della forma

$$y'(x) = q_0(x) + q_1(x)y(x) + q_2(x)y^2(x) \quad (1.21)$$

è detta *equazione di Riccati*.

Tra le proprietà che la riguardando, siamo interessati alla seguente: data una soluzione particolare $y_1(x)$ dell'equazione, allora è possibile mostrare che soluzione più generale è della forma

$$y(x) = y_1(x) + \frac{1}{v(x)}$$

dove la funzione $v(x)$ si trova integrando l'equazione differenziale

$$v'(x) + [q_1(x) + 2y_1(x)q_2(x)] \cdot v(x) = -q_2(x) \quad (1.22)$$

come è facile verificare inserendo la forma appena scelta per $y(x)$ nell'equazione differenziale (1.21).

Pertanto, se una soluzione particolare dell'equazione (1.21) è nota o ricavabile senza risolvere direttamente il problema originale, per trovare una soluzione generale è sufficiente risolvere il problema (1.22), anch'esso del primo ordine, ma più semplice da integrare. Infatti, se denominiamo la funzione che moltiplica $v(x)$ come

$$A(x) = q_1(x) + 2y_1(x)q_2(x)$$

otteniamo

$$v'(x) + A(x)v(x) = -q_2(x)$$

che può essere rapidamente integrata moltiplicando ambo i membri per l'esponenziale

$$\exp\left(\int^x A(x')dx'\right)$$

dove l'estremo inferiore di integrazione sarebbe un punto fisso lungo l'asse \hat{x} , che non specifichiamo. Esso permette di calcolare la costante additiva che si otterrebbe dall'integrale indefinito di $A(x')$, quando valutato nella variabile x . Questa costante non è tuttavia rilevante: se avessimo moltiplicato tutto per

$$\exp\left(\int^x A(x')dx' + c\right)$$

avremmo potuto semplificare immediatamente il fattore comune e^c da ambo i membri, anche dopo aver portato avanti il calcolo

$$\frac{d}{dx} \left[v(x) \exp\left(\int^x A(x')dx'\right) e^c \right] = - \exp\left(\int^x A(x')dx'\right) e^c q_2(x)$$

essendo c costante in x .

La costante di integrazione all'esponente è quindi superflua, e l'integrale di $A(x')$ può essere inteso come indefinito.

Abbiamo allora

$$\frac{d}{dx} \left[v(x) \exp\left(\int^x A(x')dx'\right) \right] = - \exp\left(\int^x A(x')dx'\right) q_2(x)$$

Ora invece, integrando, specifichiamo la costante (complessa) di integrazione, dato che abbiamo rimaneggiato la derivata di $v(x)$, lavorando quindi sul problema differenziale originale, che è del primo ordine. Per cui si ha

$$v(x) = \frac{- \int^x \left[q_2(x') \exp\left(\int^{x'} A(x'')dx''\right) \right] dx' + C_0}{\exp\left(\int^x A(x')dx'\right)}$$

Abbiamo quindi infine

$$y(x) = y_1(x) + \frac{\exp\left(\int^x A(x')dx'\right)}{- \int^x \left[q_2(x') \exp\left(\int^{x'} A(x'')dx''\right) \right] dx' + C_0} \quad (1.23)$$

dove C_0 è un coefficiente complesso da fissare.

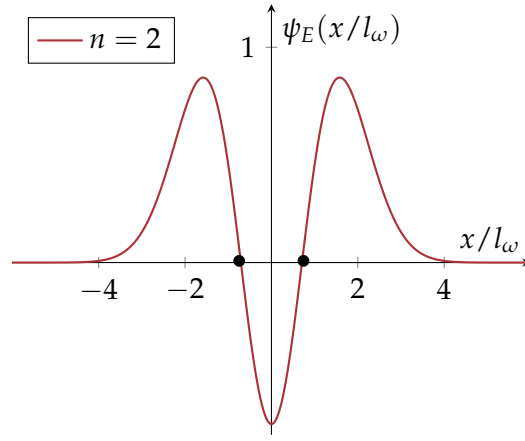


Figura 1.2: Autofunzione *time-independent* per l'oscillatore armonico 1D, $n = 2$; evidenziati i punti nodali.

Nel nostro caso, l'equazione di Riccati (1.20) nella funzione incognita $p_f(x)$ è del tipo

$$q_0(x) = -\frac{2m}{i\hbar}(E - V(x)) \quad q_1(x) = 0 \quad q_2(x) = \frac{1}{i\hbar}$$

e quindi abbiamo

$$A(x) = -\frac{2i}{\hbar} \tilde{p}_f(x)$$

data una certa soluzione particolare $\tilde{p}_f(x)$.

Allora, la più generale funzione momento quantistica che risolve il problema deve essere della forma

$$p_f(x) = \tilde{p}_f(x) + \frac{\exp\left(-\frac{2i}{\hbar} \int^x \tilde{p}_f(x') dx'\right)}{\frac{i}{\hbar} \int^x \left[\exp\left(-\frac{2i}{\hbar} \int^{x'} \tilde{p}_f(x'') dx''\right)\right] dx' + C_0} \quad (1.24)$$

Fatto ciò, ci basterà integrare la funzione momento completa $p_f(x)$ per ottenere la funzione caratteristica $W(x)$

$$W(x) = \int^x p_f(x') dx'$$

e quindi l'autofunzione per una data energia, nella zona di interesse.

Questa è in sintesi la procedura generale, che però merita la discussione di alcuni dettagli ulteriori; nelle prossime sezioni approfondiremo la ricerca della soluzione particolare per il problema fisico in equazione (1.24), il calcolo della funzione caratteristica $W(x)$ e la scelta delle costanti di integrazione.

1.2.7 Primi passi verso la soluzione particolare

La risoluzione dell'equazione (1.24), oltre a essere a vista non banale, richiede di conoscere una soluzione particolare $\tilde{p}_f(x)$ del problema di partenza.

In questa sezione introduciamo le fondamenta di un metodo possibile, che in realtà non richiede la risoluzione diretta dell'equazione quantistica (1.20).

Torniamo alla definizione di funzione momento quantistica

$$p_f(x) = \frac{\partial W}{\partial x} = \frac{-i\hbar \frac{\partial \psi_E(x)}{\partial x}}{\psi_E(x)}$$

una funzione a valori complessi, i cui poli in un piano complesso che abbia come asse reale l'asse \hat{x} , coincidono con gli zeri dell'autofunzione dell'energia, per ogni valore di E .

Per sistemi legati unidimensionali come quello in esame, valgono le seguenti proprietà

- lo spettro è discreto, ed ogni valore dell'energia E_n è in corrispondenza con un solo indice naturale n ;
- le autofunzioni dell'energia possono essere sempre scritte a valori reali. Ciò è conseguenza diretta del fatto che l'equazione alle autofunzioni per ψ_n non cambia sotto coniugazione. Pertanto, anche ψ_n^* è soluzione per la stessa energia, e quindi lo è anche una loro combinazione lineare;
- l'autofunzione $\psi_n(x)$ ha n zeri (*nodì*)

$$x_0^{(j)} \quad j = 1, \dots, n$$

tra i due punti di inversione classici x_1 e x_2 , le cui posizioni dipendono dalla funzione specifica, dunque dall'energia – per una dimostrazione rimandiamo a [3], Sez. 7.4. Si veda ad esempio la Figura 1.2;

- nei poli della funzione $\psi_n(x)$ non può annullarsi anche la sua derivata prima $\psi'_n(x)$.

Allora notiamo che se sviluppiamo l'autofunzione in un intorno di un suo nodo x_0 lungo l'asse reale

$$\psi_n(x) \approx (x - x_0)\psi'_n(x_0) + \mathcal{O}[(x - x_0)^2]$$

e la inseriamo nella definizione di funzione momento quantistica, approssimata in un intorno di x_0

$$p_f(x) \approx -i\hbar \frac{\psi'_n(x_0)}{(x - x_0)\psi'_n(x_0)} = -\frac{i\hbar}{x - x_0}$$

si vede che questi sono poli di ordine 1, grazie alla quarta tra le proprietà elencate sopra. Il residuo vale $-i\hbar$, indipendentemente dal livello energetico.

I poli in questione sono detti *mobili*, in quanto dipendono in posizione (e anche in numero) dal valore dell'energia.

Si può inoltre mostrare, studiando l'equazione (1.20) nel piano complesso, che anche uno specifico potenziale legante $V(x)$ avente singolarità, induce

dei poli nella funzione momento. Tali poli, essendo fissati dal problema specifico ed essendo indipendenti dall'energia, sono detti *poli fissi*.

Se il potenziale $V(x)$ è tale da non introdurre poli ulteriori a quelli mobili lungo l'asse reale \hat{x} , allora per ogni autovalore dell'energia, dunque per ogni autofunzione, si hanno n poli di ordine 1 per la funzione momento, tra i due punti di inversione.

Pertanto, per un opportuno cammino C percorso in senso orario nel piano complesso, che racchiuda i soli nodi dell'autofunzione, si ha

$$\oint_C p_f(x; E_n) dx = 2\pi i \sum_{j=1}^n \text{Res} \left\{ p_f(z; E_n), x_0^{(j)} \right\}$$

dove con $z = x + iy$ indichiamo la variabile complessa che estende l'asse reale.

Infine, essendo i residui tutti uguali tra loro, otteniamo

$$\oint_C p_f(x; E_n) dx = 2n\pi\hbar \quad (1.25)$$

per ogni livello energetico.

Questo risultato fu sviluppato da R.A. Leacock e M.J. Padgett in due studi del 1983⁹, che avevano come scopo centrale la ricerca di un legame tra la Teoria HJ classica delle variabili azione-angolo e la Meccanica Quantistica.

Da qui, parte il metodo di ricerca della soluzione particolare. Gli autori hanno dimostrato che la soluzione $\tilde{p}_f(x)$, che si promette di *bypassare* la risoluzione diretta dell'equazione (1.20), è ricavabile direttamente dalla condizione (1.25).

Il metodo in questione richiede di essere trattato caso per caso, attraverso studi qualitativi condotti nel piano complesso.

Riprenderemo più avanti l'argomento, quando analizzeremo il caso specifico dell'oscillatore armonico.

1.2.8 Funzione caratteristica

Torniamo alla funzione caratteristica quantistica, che consente di ottenere (a meno di multipli interi e con segno di 2π) la parte *time-independent* dell'autofunzione dell'energia, secondo la relazione

$$\psi_E(x) = A e^{\frac{i}{\hbar} W(x)}$$

Si tratta di una funzione a valori complessi, che pertanto può essere scritta nella forma

$$W(x) = X(x) + iY(x)$$

dove $X(x)$ e $Y(x)$ sono due funzioni a valori reali della coordinata x .

Inserendo questa espressione di W nell'equazione quantistica di Hamilton-Jacobi (1.17) e separando parte reale ed immaginaria, otteniamo

$$\begin{cases} [X'(x)]^2 - [Y'(x)]^2 + \hbar Y''(x) = 2m(E - V(x)) \\ X'(x)Y'(x) = \frac{\hbar}{2} X''(x) \end{cases} \quad (1.26)$$

dove l'apice indica ancora l'ordine della derivata rispetto alla coordinata x . La seconda equazione ci permette di ridurre la libertà sulla scelta delle due funzioni X e Y ; integrandola si ottiene velocemente

$$Y(x) = \hbar \log \left(\sqrt{|X'(x)|} \right)$$

dove il logaritmo è naturale, ed il valore assoluto è necessario, essendo $Y(x)$ a valori reali.

Per cui abbiamo da determinare soltanto $X(x)$, per trovare $W(x)$

$$W(x) = X(x) + i\hbar \log \left(\sqrt{|X'(x)|} \right) \quad (1.27)$$

risolvendo l'equazione ottenuta sostituendo $Y(x)$ nella prima equazione del sistema (1.26)

$$\frac{4[X'(x)]^4 - 3\hbar^2[X''(x)]^2 + 2\hbar^2 X'(x)X'''(x)}{4[X'(x)]^2} = 2m(E - V(x))$$

ovvero, un'equazione non lineare del **terzo ordine** in $X(x)$.

Per fortuna, non integreremo direttamente questa equazione, la cui risoluzione numerica è stata trattata da M.F. Girard in un articolo precedente ¹⁰.

Abbiamo svolto il calcolo con l'intento di esprimere la funzione $W(x)$ in termini della più fondamentale funzione reale $X(x)$ (eq.(1.27)), che come conferemo fra breve necessita di tre costanti reali per essere definita completamente.

Facciamo ora uso del risultato in equazione (1.24) ricavato poc'anzi, lasciando ancora implicita la forma della soluzione particolare $\tilde{p}_f(x)$.

A questa soluzione particolare, associamo comunque una funzione caratteristica, indicata come

$$\tilde{W}(x) = \int^x \tilde{p}_f(x') dx'$$

che per linearità e per definizione, è una soluzione particolare del problema originario, che ha come incognita la funzione $W(x)$ (eq.(1.17).

La più generale funzione caratteristica si ottiene allora integrando l'equazione (1.24), ricordandoci di introdurre una costante complessa di integrazione (C_1), dal momento che stiamo maneggiando le derivate e gli integrali delle funzioni incognite: il problema differenziale del secondo ordine di $W(x)$ deve sempre essere in corrispondenza con il problema al primo ordine per la funzione momento $p_f(x)$, che come già sappiamo ha come parametro libero il solo numero complesso C_0 .

Abbiamo quindi

$$W(x) = \tilde{W}(x) + \int^x \left[\frac{\exp(-\frac{2i}{\hbar} \tilde{W}(x'))}{\frac{i}{\hbar} \int^{x'} \exp(-\frac{2i}{\hbar} \tilde{W}(x'')) dx'' + C_0} \right] dx' + C_1$$

e notando che al numeratore dell'integrando vi è la derivata del denominatore, possiamo riscrivere il tutto come un integrale della derivata del logaritmo, ossia infine

$$W(x) = \tilde{W}(x) + \frac{\hbar}{i} \log \left(\frac{i}{\hbar} \int^x \exp \left(-\frac{2i}{\hbar} \tilde{W}(x') \right) dx' + C_0 \right) + C_1$$

Siamo interessati alla parte reale di questa funzione; data una certa quantità complessa Z (per noi, l'argomento del logaritmo), scrivibile nella forma polare

$$Z = R e^{i \arg(Z)}$$

si ha

$$\operatorname{Re} \left\{ \frac{\hbar}{i} \log(Z) \right\} = \operatorname{Re} \left\{ \frac{\hbar}{i} \log(R) + \hbar \arg(Z) \right\} = \hbar \arg(Z)$$

dove ricordiamo che la funzione $\arg(Z)$ è definita a meno di multipli interi di 2π secondo la definizione

$$\arg(Z) = \{ \operatorname{Arg}(Z) + 2\pi n \mid n \in \mathbb{Z} \}$$

Potendo riassorbire le varie costanti additive nella parte reale della costante C_1 , scriviamo infine la parte reale della funzione $W(x)$

$$X(x) = \operatorname{Re} \{ \tilde{W}(x) \} + \hbar \operatorname{Arg} \left(\frac{i}{\hbar} \int^x \exp \left(-\frac{2i}{\hbar} \tilde{W}(x') \right) dx' + C_0 \right) + \operatorname{Re} \{ C_1 \}$$

Come promesso, la funzione reale $X(x)$ è determinata a meno di 3 costanti reali: $\operatorname{Re} \{ C_1 \}$ e i due numeri reali che individuano il numero complesso C_0 . Ricordiamo sempre che $\tilde{W}(x)$ è definita come integrale della funzione momento quantistica particolare $\tilde{p}_f(x)$, che se nota, risolve il problema per intero a meno delle 3 costanti reali.

1.2.9 Tracce di WKB

Una volta nota $X(x)$, otteniamo $W(x)$ dall'equazione (1.27). Per cui le autofunzioni *time-independent* dell'energia saranno in generale della forma

$$\psi_E(x) = \frac{A}{\sqrt{|X'(x)|}} e^{i X(x)} \quad (1.28)$$

che è sorprendentemente simile alla forma approssimata in equazione (1.19), ottenuta all'ordine 1 in \hbar con il metodo WKB.

L'autofunzione (1.28) è scritta nella sua forma polare, con una fase ed un raggio entrambi reali e dipendenti dalla coordinata x , e lo stesso vale per il suo

limite semiclassico (1.19) al primo ordine. Questo sembrerebbe suggerire che nel limite classico, debba verificarsi

$$\begin{cases} \operatorname{Re}\{W(x)\} = X(x) \rightarrow W_c(x) \\ \operatorname{Im}\{W(x)\} = Y(x) \rightarrow 0 \\ X'(x) \rightarrow p_c(x) \end{cases}$$

consistentemente con la scrittura di $W(x)$ in equazione (1.27). Tuttavia, avremo modo di constatare che non è esattamente così.

1.2.10 La scelta delle costanti nel modello di partenza

La forma per le autofunzioni (1.28) è generalmente valida nelle tre regioni presentate in Figura 1.1; sarà pertanto necessario tornare a tale schema fisico, per iniziare a fissare opportunamente le costanti libere, valutando concretamente il raccordo e le condizioni al contorno. Noteremo che alcune tra queste costanti (similmente al caso classico) sono libere per davvero, e la scelta di esse sarà strettamente riconducibile alle condizioni al bordo del moto nel limite classico.

Ritorniamo ora al modello in Figura 1.1, applicando quanto sviluppato sino ad ora.

Partiamo considerando le regioni classicamente non accessibili al moto (I e III). In queste regioni, sappiamo già che la forma delle soluzioni è data da esponenziali decrescenti, per $|x| \rightarrow \infty$.

Pertanto, in queste regioni deve necessariamente valere, già nel problema quantistico

$$\begin{cases} X_{I,III}(x) = 0 \\ W_{I,III}(x) = iY_{I,III}(x) \end{cases}$$

per ogni livello energetico.

Abbiamo qui fatto uso del risultato già noto dalle soluzioni dell'Equazione di Schrödinger nelle regioni classicamente inaccessibili, in quanto siamo interessati a studiare con più attenzione la regione II, che risulterà più interessante per il limite classico.

Per le zone I e III abbiamo quindi – indicando l'energia nell'argomento delle funzioni per ragioni di notazione

$$\psi_{I,III}(x; E) = A_{I,III} \exp\left(-\frac{Y_{I,III}(x; E)}{\hbar}\right) \quad (1.29)$$

con $A_{I,III}$ costante reale, da fissare opportunamente grazie al raccordo con la soluzione della regione II.

La forma esatta di $Y_{I,III}(x)$ richiede di essere valutata caso per caso; tuttavia, per la maggiorparte dei problemi, è possibile mostrare che

$$Y_{I,III}(x) = \int^x \tilde{p}_f(x') dx'$$

dove $\tilde{p}_f(x)$ è una soluzione particolare, ottenuta studiando l'equazione di Riccati (1.20) nel piano complesso, nelle rispettive zone. Ciò corrisponde ad

avere una funzione impulso puramente immaginaria, come nel caso classico.

Per la zona II, è possibile mostrare che la soluzione particolare $\tilde{p}_f(x)$ non è sufficiente, in quanto presenta dei problemi nel raccordo, e non riproduce correttamente il limite semiclassico atteso.

Per questo motivo, si preferisce far uso della forma più generale (1.28) ricavata nel paragrafo 1.2.8, che somma alla soluzione particolare ricavata con i metodi delle zone I e III, un termine più complicato, per il quale è ugualmente necessario conoscere la stessa soluzione particolare $\tilde{p}_f(x)$.

La soluzione (1.28) per la regione II, è usualmente riscritta in una forma diversa; la costante complessa A può essere scelta della forma

$$A = A_{II} e^{i\frac{\pi}{4}}$$

dove $A_{II} \in \mathbb{R}$. Ciò è possibile, ricordando che la costante di normalizzazione A , può avere anche un solo parametro reale libero, dato che la fase φ nell'espressione

$$A = A_{II} e^{i\varphi}$$

equivale ad una costante additiva per la funzione W ¹¹, irrilevante per l'equazione quantistica di Hamilton-Jacobi (1.17).

Ciò conferma l'equivalenza con il problema quantistico già noto, nel quale le costanti di normalizzazione sono sempre prese reali – come per A_I e A_{III} .

Combinando la soluzione in esame con la sua complessa coniugata, otteniamo equivalentemente

$$\psi_{II}(x; E) = \frac{A_{II}}{\sqrt{|X'(x)|}} \sin\left(\frac{X(x)}{\hbar} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (1.30)$$

che essendo reale, è più adatta al raccordo con le soluzioni nelle zone I e III.

Dal problema quantistico solito, sappiamo fissare le costanti con raccordi – nel nostro caso, per potenziali privi di singolarità, imponiamo la continuità dell'autofunzione e della sua derivata prima – e condizioni di normalizzazione.

Tuttavia, i coefficienti C_1 e C_0 aggiunti dalle integrazioni del paragrafo 1.2.8, non sono fissabili con queste tecniche.

Riportiamo per comodità le espressioni generali per $W(x)$ e per la sua parte reale

$$\begin{aligned} W(x) &= \tilde{W}(x) + \frac{\hbar}{i} \log\left(\frac{i}{\hbar} \int^x \exp\left(-\frac{2i}{\hbar} \tilde{W}(x')\right) dx' + C_0\right) + C_1 \\ X(x) &= \underbrace{\text{Re}\{\tilde{W}(x)\} + \hbar \text{Arg}\left(\frac{i}{\hbar} \int^x \exp\left(-\frac{2i}{\hbar} \tilde{W}(x')\right) dx' + C_0\right)}_{X_+(x)} + \text{Re}\{C_1\} \end{aligned}$$

La costante C_1 è additiva per la funzione $W(x)$, pertanto non è rilevante per l'equazione (1.17). Essa deve contenere però il valore della funzione

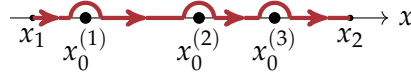


Figura 1.3: Esempio di percorso di integrazione lungo l'asse reale nel piano complesso. I poli della funzione momento sono indicati con $x_0^{(j)}$, con $j = 1, 2, 3$. Ogni semicirconferenza ha raggio ϵ , tendente a 0: in questo modo, per il Teorema del *mezzo residuo* – valido solo per poli di ordine 1 – si ottiene l'integrazione da x_1 a x_2 desiderata. Lo stesso vale per il percorso inverso, che completa il percorso diretto bypassando i poli con semicirconferenze inferiori, fornendo un buon cammino chiuso C per la condizione (1.25).

$W(x)$ in un punto specifico \tilde{x} nella regione II, che è dove stiamo studiando la soluzione. Infatti ricordiamo che questa costante sarebbe richiesta dall'integrazione

$$W(x) = \int_{\tilde{x}}^x p_f(x') dx' \equiv \int^x p_f(x') dx' + C_1$$

pertanto abbiamo

$$C_1 = W(\tilde{x})$$

Questa libertà è decisamente curiosa, e ricorda esattamente la costante di integrazione c discussa per il moto libero classico trattato in Sez.1.1.9.

Per quanto riguarda la costante C_0 , non abbiamo questa stessa libertà. Ricordiamo che per ogni livello energetico, vale la condizione di quantizzazione (1.25)

$$\oint_C \tilde{p}_f(x; E_n) dx = 2n\pi\hbar$$

la quale individua tra i due punti di inversione x_1 e x_2 , n poli per la funzione particolare¹² $\tilde{p}_f(x)$ lungo l'asse reale, per ogni livello energetico n -esimo.

Come cammino da x_1 a x_2 lungo l'asse reale – e similmente per quello inverso – scegliamo quello riportato in Figura 1.3.

Integrando la funzione momento particolare da x_1 a x_2 , applichiamo il teorema del *mezzo residuo*, valido nel limite in cui i raggi delle semicorconferenze in Figura 1.3 tendono a zero, ottenendo

$$\tilde{W}(x_2) - \tilde{W}(x_1) = n\pi\hbar$$

e quindi anche la parte reale $\text{Re}\{\tilde{W}(x)\}$ ha un incremento della stessa quantità tra i due punti di inversione.

Si ha quindi

$$X(x_2) - X(x_1) = n\pi\hbar + X_+(x_2) - X_+(x_1)$$

Ora, notiamo che nel percorso inverso la variazione $\Delta\tilde{W}$ deve essere la stessa a meno di un segno, in modo che sia soddisfatta la condizione (1.25) sul cammino chiuso.

Inoltre, dopo un giro completo nel percorso C , la funzione complessiva $X(x)$ in argomento al seno in equazione (1.30), può cambiare al massimo di un segno "±" l'autofunzione¹³. Si può mostrare che la scelta corretta è ottenuta

facendo guadagnare alla soluzione un segno "−" ad ogni giro; per cui si impone globalmente

$$\operatorname{Re}\left\{\oint_C p_f(x)dx\right\} = (2n+1)\pi\hbar \implies \int_{x_1}^{x_2} \operatorname{Re}\{p_f(x)\}dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi\hbar$$

e quindi infine

$$X_+(x_2) - X_+(x_1) = \frac{\pi}{2}\hbar \quad (1.31)$$

che fissa il valore di C_0 contenuto nella funzione $X_+(x)$, in modo da rispettare la monodromia della densità di probabilità associata all'autofunzione (1.30).

Nelle prossime sezioni ci occuperemo finalmente di un caso più specifico, e ciò ci darà la possibilità di investigare più concretamente le proprietà delle soluzioni ed il limite classico.

1.3 APPLICAZIONE: L'OSCILLATORE ARMONICO

Proviamo ora ad applicare quanto visto nelle sezioni precedenti al caso di un oscillatore armonico monodimensionale.

L'equazione quantistica di Hamilton-Jacobi (1.17) per i livelli energetici dell'hamiltoniano diventa

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{dW_n^{h.o.}}{dx} \right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2 W_n^{h.o.}}{dx^2} \quad \forall n \quad (1.32)$$

e l'equazione di Riccati (1.20) associata è pertanto

$$\frac{dp_{f;n}^{h.o.}}{dx} = \frac{1}{i\hbar} \left(p_{f;n}^{h.o.} \right)^2 - \frac{2m}{i\hbar} \left(E_n - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \quad \forall n \quad (1.33)$$

dove ricordiamo che $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

L'obiettivo delle prossime sezioni sarà quello di riportare le soluzioni di questa equazione e di mostrare alcuni risultati grafici associati, con lo scopo di confrontare infine il tutto con quanto atteso classicamente.

1.3.1 Le funzioni classiche

Per un dato livello energetico, è possibile costruire un grafico come quello in Figura 1.4, con un potenziale parabolico centrato nell'origine e caratterizzato dai punti classici di inversione

$$x_{1,2} = \mp l_\omega \sqrt{2n+1}$$

La funzione momento classica può essere invece riscritta come

$$p_{c,n}(x) = p_\omega \sqrt{2n+1} \sqrt{1 - \frac{1}{2n+1} \left(\frac{x}{l_\omega} \right)^2}$$

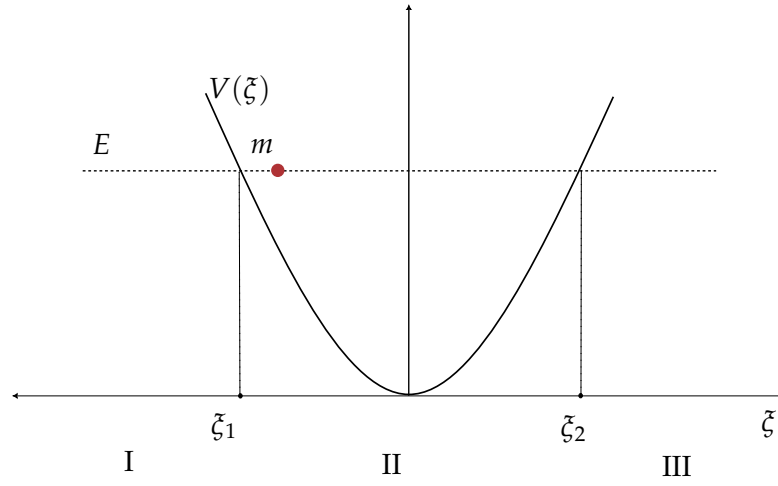


Figura 1.4: Potenziale parabolico per l'oscillatore armonico e punti di inversione classici individuati dall'intersezione con il valore di energia E . Come in Figura 1.1, ciò individua una zona classicamente accessibile al moto (II) e due non accessibili (I e III). Asse reale riscalato, utilizzando la variabile $\xi = x/l_\omega$.

dove $p_\omega = \hbar/l_\omega$ è la scala di impulso caratteristica del sistema quantistico, mentre ricordiamo che $l_\omega = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ è la lunghezza caratteristica. Ci risulta comodo riscalare la coordinata spaziale definendo la variabile $\xi = x/l_\omega$; pertanto abbiamo

$$p_{c,n}(\xi) = p_\omega \sqrt{2n+1} \sqrt{1 - \frac{\xi^2}{2n+1}} \quad (1.34)$$

Abbiamo richiesto a priori la quantizzazione dei livelli energetici anche in ambito classico: ricordiamo che ciò è lecito, in quanto ci aspettiamo che nel **limite di grandi numeri quantici**, la scala di energia quantizzata risulterà continua. Tale limite può essere anche visto nel seguente modo

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega \quad \forall n$$

e quindi la spaziatura tra i livelli tende a zero se

$$\hbar \ll \frac{\mathcal{O}(E_n)}{\omega}$$

ovvero, "se $\hbar \rightarrow 0$ ".

Questa è l'unica nozione di limite classico che abbiamo potuto formalizzare fino a questo momento. Essa nasce dal collegamento naturale tra il dominio delle energie discreto tipico di questo sistema quantistico ed il dominio continuo atteso nel caso classico. Ricordiamo che questo limite è utilizzato anche in Meccanica Statistica, quando ad esempio si cercano di investigare le proprietà quantistiche dei gas biatomici a basse temperature.

Vedremo che sarà proprio questo il regime nel quale il confronto con il caso classico sarà più evidente.

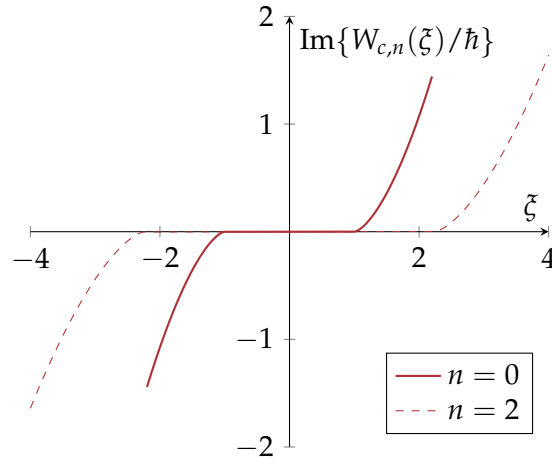


Figura 1.5: Parte immaginaria della funzione caratteristica classica in equazione (1.35) per due specifici valori dell'energia, in unità di \hbar . Come atteso, la zona II individuata dai punti di inversione $\xi_{1,2} = \mp\sqrt{2n+1}$ si allarga al crescere dell'energia, essendo questa la zona nella quale la parte immaginaria è nulla.

Veniamo ora alla funzione caratteristica classica; integrando l'equazione (1.34), otteniamo, a meno della costante additiva

$$W_{c,n}(\xi) = \frac{\hbar}{2} \left[\xi \sqrt{2n+1} \sqrt{1 - \frac{\xi^2}{2n+1}} - i(2n+1) \log \left(\sqrt{1 - \frac{\xi^2}{2n+1}} + i \frac{\xi}{\sqrt{2n+1}} \right) \right]$$

che possiamo anche riscrivere in funzione dell'integranda come

$$W_{c,n}(\xi) = \frac{\hbar}{2} \frac{p_{c,n}(\xi)}{p_\omega} \xi - i \frac{\hbar}{2} (2n+1) \log \left(\frac{p_{c,n}(\xi)}{p_\omega \sqrt{2n+1}} + i \frac{\xi}{\sqrt{2n+1}} \right) + W_{c,n}(\xi_1)$$

dove la costante additiva è stata arbitrariamente specificata nel punto di inversione ξ_1 .

D'ora in avanti imporreemo per comodità

$$W_{c,n}(\xi_1) = 0$$

e quindi la nostra funzione caratteristica classica per l'oscillatore armonico sarà

$$W_{c,n}(\xi) = \frac{\hbar}{2} \left[\rho_{c,n}(\xi) \xi - i(2n+1) \log \left(\frac{\rho_{c,n}(\xi) + i\xi}{\sqrt{2n+1}} \right) \right] \quad (1.35)$$

che con il riscaldamento dell'impulso $\rho_{c,n} = p_{c,n}/p_\omega$ assume una forma decisamente elegante.

Le unità immaginarie non devono incutere timore: mostreremo più avanti per via grafica che tale quantità (e quindi anche la funzione momento classica) coincide con la sua parte reale nella zona II.

Per il momento, si prenda come esempio la Figura 1.5.

1.3.2 La soluzione particolare e le funzioni quantistiche

R.S. Bhalla, A.K. Kapoor e P.K. Panigrahi ¹⁴ hanno mostrato che una soluzione particolare per la funzione momento nel caso dell'oscillatore armonico, può essere ricavata studiando qualitativamente l'equazione differenziale (1.33) nel piano complesso, sviluppando la funzione ricercata in serie di Taylor-Laurent e determinando opportunamente i coefficienti.

Riportiamo il risultato

$$\tilde{p}_{f,n}^{h.o.}(\xi) = ip_\omega \left(\xi - \frac{2nH_{n-1}(\xi)}{H_n(\xi)} \right)$$

dove $H_n(\xi)$ è il polinomio di hermite fisico n -esimo

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

il quale rispetta anche la proprietà

$$H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi)$$

e che pertanto consente di riscrivere soluzione particolare come segue

$$\tilde{p}_{f,n}^{h.o.}(\xi) = ip_\omega \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \log(H_n(\xi)) \right) \quad (1.36)$$

Integrando questa funzione, si ottiene la funzione caratteristica particolare valida nelle regioni I e III

$$W_{I,III}^{h.o.}(\xi; E_n) = iY_{I,III}^{h.o.;E_n}(\xi) = i\hbar \left(\frac{\xi^2}{2} - \log(H_n(\xi)) \right) \quad (1.37)$$

che se inserita nella formula (1.29), fornisce

$$\psi_{I,III}(\xi; E) = A_{I,III} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \quad (1.38)$$

ovvero il risultato atteso.

Per la regione II invece, si segue la procedura esposta in Sez. 1.2.8, sommando alla soluzione particolare (1.36) un pezzo più complicato, che dipende dalla soluzione particolare stessa.

Sostituendo otteniamo

$$p_{f,n}^{h.o.}(\xi) = \tilde{p}_{f,n}^{h.o.}(\xi) + \frac{\exp(\xi^2)}{H_n^2(\xi) \left[\frac{i}{p_\omega} \int_{\xi_1}^{\xi} \frac{\exp(s^2)}{H_n^2(s)} ds + C_{0,n}^{h.o.} \right]} \quad (1.39)$$

che può essere calcolata e figurata numericamente per ogni valore di n .

La costante $C_{0,n}^{h.o.}$ può essere determinata dalla relazione (1.31)- Si ottengono

$$C_{0,n}^{h.o.} = \frac{1}{p_\omega} \int_{\xi_1}^{\xi_2} \frac{\exp(s^2)}{H_n^2(s)} ds$$

e notiamo che queste costanti sono le uniche a fornire un contributo di parte reale alla funzione momento quantistica generale $p_{f,n}$, essendo la soluzione particolare $\tilde{p}_{f,n}$ puramente immaginaria.

Veniamo ora alla funzione caratteristica nella regione II, ottenibile integrando la funzione momento completa a meno di una costante additiva $C_{1,n}^{h.o.}$.

Anche qui riportiamo direttamente il risultato

$$W_{II}^{h.o.}(\xi; E_n) = \tilde{W}_{II}^{h.o.}(\xi; E_n) - i\hbar \log \left(\frac{i}{p_\omega} \int^\xi \frac{\exp(s^2)}{H_n^2(s)} ds + C_{0,n}^{h.o.} \right) + C_{1,n}^{h.o.} \quad (1.40)$$

la cui parte reale – a noi più utile, per la forma della soluzione cercata in equazione (1.30) – è la seguente

$$X_{II}^{h.o.}(\xi) = \hbar \text{Arg} [H_n(\xi)] + \hbar \text{Arg} \left[\frac{i}{p_\omega} \int^\xi \frac{\exp(s^2)}{H_n^2(s)} ds + C_{0,n}^{h.o.} \right] + \text{Re} \{ C_{1,n}^{h.o.} \} \quad (1.41)$$

Una volta determina la costante $C_{0,n}^{h.o.}$ con la relazione di cui sopra, la scelta della costante $C_{1,n}^{h.o.}$ è effettivamente libera; se ci facciamo caso, lo stesso accadeva per la funzione caratteristica in Meccanica Classica (caso libero, Sez. 1.1.9).

In quel caso, la costante additiva era utile per specificare il punto e l'istante di partenza della particella libera, una volta noti l'energia (dunque l'impulso) e la posizione finale ad un certo istante di tempo.

Allora, non avevamo escluso la possibilità che, nei casi in cui il momento non fosse stato una costante del moto, tale costante avrebbe fissato il suo valore in corrispondenza della posizione iniziale. Questo è proprio il caso dei sistemi immersi in un potenziale generico $V(x)$ che conservano l'energia.

Tuttavia, il discorso in sé non ha alcuna rilevanza specifica in Meccanica Quantistica: il sistema evolve in un autostato dell'hamiltoniano e la distribuzione di probabilità associata è stazionaria, e non ha senso parlare di posizione, impulso o istante iniziali.

Ma allora, a cosa serve la costante additiva nel caso quantistico? Potrebbe essere comunque portatrice di informazioni aggiuntive sul sistema?

La risposta a questo dilemma risiede nel limite classico della teoria: è possibile fissare questa costante additiva in modo che le funzioni $W_c(x)$ e $W(x)$ riproducano lo stesso andamento, con lo stesso ordine di grandezza numerico, nel limite di grandi numeri quantici. Vedremo nella prossima sezione in quale senso sia possibile parlare di limite classico in questo scenario.

1.3.3 Grafici a confronto: il limite classico

In questa sezione riportiamo alcuni grafici relativi alla funzione momento e alla funzione caratteristica per l'oscillatore armonico, con l'intento di confrontare il caso classico con quello quantistico nella zona II.

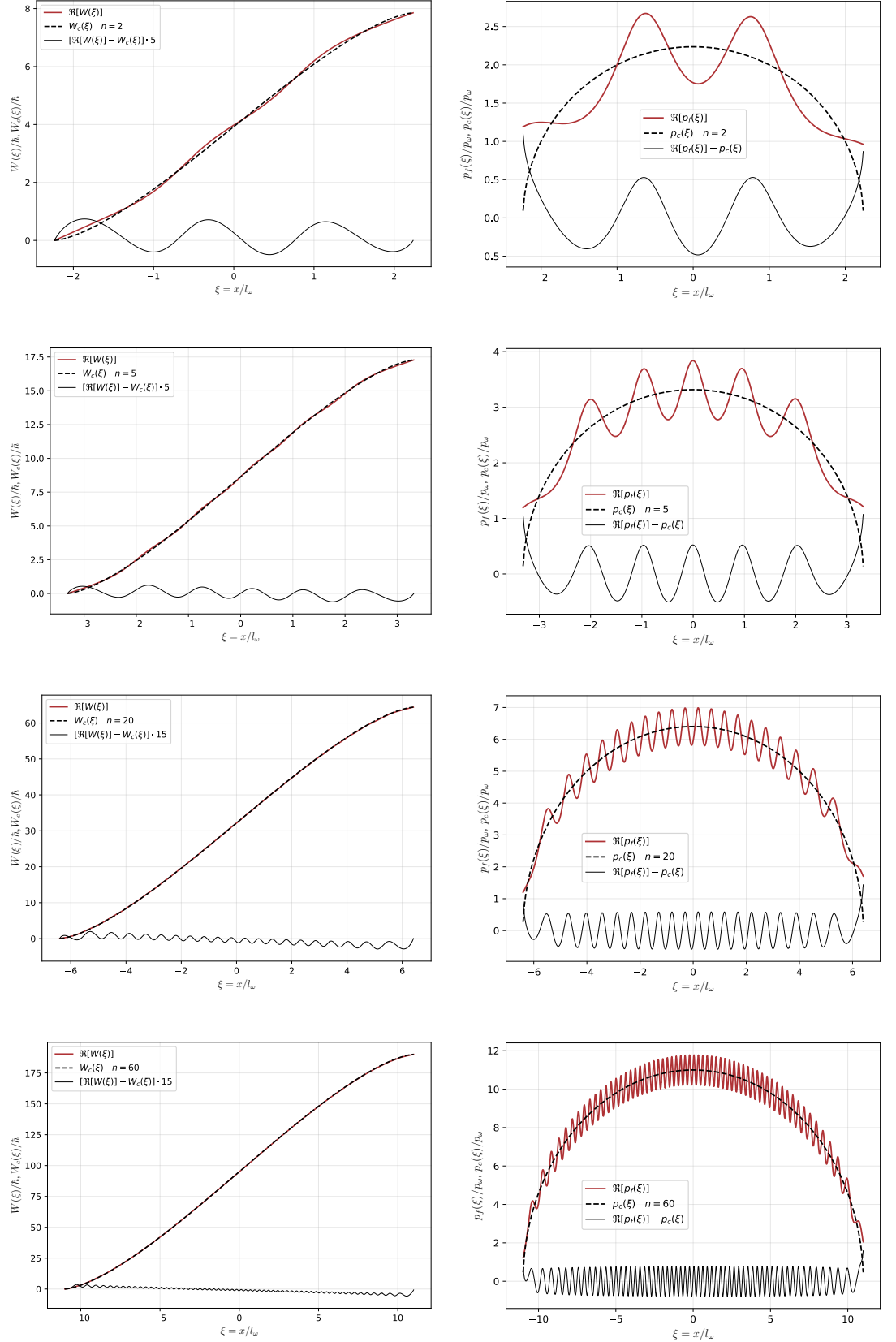


Figura 1.6: Riportiamo i risultati grafici per le parti reali delle funzioni quantistiche ($X(\xi) = \text{Re}[W(\xi)]$, $\text{Re}[p_f(\xi)]$) e per le funzioni classiche associate ($W_c(\xi)$, $p_c(\xi)$) nella zona II, classicamente accessibile al moto. Per ragioni di visibilità, scegliamo di moltiplicare per un opportuno coefficiente la differenza tra le due funzioni messe a confronto, come indicato in legenda.

Più specificamente, confronteremo tra loro le soluzioni (1.40) e (1.35), (1.39) e (1.34). Nel confronto tra le funzioni caratteristiche, fisseremo la costante additiva a 0 per il caso quantistico, come già fatto per il caso classico; essa può essere presa come il valore della funzione in un punto qualsiasi della zona II. Avendo scelto il punto di inversione ξ_1 nel caso classico, faremo lo stesso per il caso quantistico. Apprezzeremo le conseguenze di questa scelta fra breve.

Per ottenere gli esiti grafici desiderati, il metodo analitico risulta poco conveniente. Risulta altresì comodo considerare il metodo (equivalente) esposto all'inizio della Sez. 1.2.8, dove era stata ricavata un'equazione differenziale del terzo ordine per la parte reale della funzione caratteristica quantistica. Tale equazione può essere integrata abbastanza agevolmente per via numerica, consentendo di ottenere quindi sia la funzione W completa (ricordiamo l'equazione (1.27)) sia la funzione momento p_f , attraverso una derivata (numerica) rispetto alla coordinata spaziale.

Essendo il metodo equivalente, risolviamo così il problema quantistico per via numerica, potendo apprezzare maggiormente il confronto tra le espressioni delle funzioni studiate nei paragrafi precedenti.

In Sez. 1.3.1, abbiamo provato a collegare l'oscillatore quantistico a quello classico nel limite di grandi numeri quantici, in quanto in tale limite lo spettro può essere visto come *continuo rispetto alla gap tra i livelli successivi*, che resta costante e nell'ordine di $\hbar\omega$, a differenza dell'energia.

Vedremo tra poco come questo stesso limite conduca a considerazioni analoghe per ciò che concerne le funzioni classiche e quantistiche studiate sin ora, rendendone più evidente il collegamento e consentendoci anche di visualizzare meglio il limite classico della Meccanica Quantistica in questo specifico formalismo.

Consideriamo quindi i grafici in Figura 1.6, ottenuti come esito grafico di un codice Python; sovrapponendo il caso classico con quello quantistico, scegliamo di riportare i grafici delle funzioni caratteristiche (sinistra) e delle funzioni momento (destra) per quattro valori distinti di n . In entrambi i grafici, riportiamo poi la differenza tra le due funzioni.

In entrambi i casi, la funzione quantistica oscilla attorno a quella classica, raggiungendo presto un andamento del tutto identico tra i due casi per la funzione caratteristica. Ciò sembrerebbe apparentemente non verificarsi per le funzioni momento.

In generale, al crescere di n , sembrano verificarsi in entrambi i casi

- un infittimento delle oscillazioni delle funzioni quantistiche attorno a quelle classiche;
- una riduzione dell'ampiezza di tali oscillazioni.

Tuttavia ci rendiamo presto conto che al crescere di n , crescono anche gli ordini dei valori delle azioni/momenti accessibili al sistema (in unità di \hbar e di p_ω , così come cresce anche (in valore assoluto) l'ordine dei valori della

coordinata x accessibili al sistema (in unità di l_ω) nella zona II.

Ci si può convincere facilmente che l'ordine dell'ampiezza delle oscillazioni tende ad essere costante nel limite in cui n cresce indefinitamente, mentre ciò non avviene per la densità delle oscillazioni della funzione quantistica attorno a quella classica.

Pertanto, analogamente a quanto stabilito in termini dello spettro energetico, con il modello dell'oscillatore armonico quantistico possiamo parlare di *limite classico* della Teoria nel senso nel senso seguente:

la Meccanica Classica, in questo specifico formalismo, approssima la Meccanica Quantistica nel limite di grandi numeri quantici, attraverso delle soluzioni che non sono numericamente sensibili alle quantità fondamentali \hbar , p_ω e l_ω , e che al contrario risultano numericamente rilevanti nel caso quantistico. ¹⁵

In questo senso, la Meccanica Quantistica, e la sua natura ondulatoria ¹⁶, sembrerebbero offrire una descrizione più generale della Natura che ci circonda.

L'idea che la Meccanica Classica fornisca delle descrizioni *approssimate* dei fenomeni nei dovuti limiti, non deve sconvolgerci: per ragioni intuibili, legate al progresso della tecnologia e del pensiero umano, la Meccanica Classica è stata sviluppata senza dover tenere conto della natura quantistica (all'ora ignota) della materia. Essa è stata infatti sviluppata a partire dall'**osservazione** dei fenomeni fisici su *grande scala*, e che in quanto tali non ci consentono (ad esempio) di distinguere due valori di Azione che differiscano per qualche unità di \hbar .

NOTE

1. Non ci occuperemo di estendere al caso relativistico l'argomento di questo capitolo; pertanto, se non altrimenti specificato, tutto ciò che seguirà avrà alla base una trattazione newtoniana dei sistemi fisici.
2. Per approfondire l'argomento rimandiamo al Cap.??, nel quale sono stati analizzati alcuni strumenti utili e più specifici.
3. Si possono ricavare le equazioni cercate prendendo il differenziale di entrambi i membri della definizione

$$dH = \sum_{i=1}^n p_i d\dot{q}_i + \sum_{i=1}^n q_i dp_i - dL$$

sviluppando con la regola della catena e ricordando che

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

per cui si elimina il termine $p_i d\dot{q}_i$ e quindi anche la dipendenza della funzione H dalle velocità generalizzate, sostituendola con una dipendenza dai momenti coniugati p_i .

4. Ricordiamo che la funzione F , salvo la richiesta che sia almeno C^2 nelle sue variabili, può essere una funzione **qualsiasi** di coordinate e/o impulsi.
5. Non si tratta dell'unica tipologia di trasformazioni canoniche possibili; molte di queste non sono in realtà scrivibili in termini di funzioni F che realizzino le particolari condizioni appena richieste.

6. Si noti che, una volta stabilito da quali variabili la funzione dipenda, si individua soltanto una **famiglia** di funzioni. La forma specifica non è univocamente fissata da questa scelta; per il primo caso di cui sotto, ad esempio, una forma banale potrebbe essere

$$F_1(q, Q, t) = q_i Q_i$$

sommando sugli indici ripetuti.

7. Per maggiori approfondimenti si consulti anche [2].
8. Quantisticamente, assumiamo quindi di aver preparato tale sistema in uno specifico autostato dell'energia.
9. R. A. Leacock, M. J. Padgett. **Hamilton–Jacobi theory and the quantum action variable.** *Physical Review Letters* 1983. - <https://journals.aps.org/prl/pdf/10.1103/PhysRevLett.50.3>
 R. A. Leacock, M. J. Padgett. **Hamilton–Jacobi/action-angle quantum mechanics.** *Physical Review D* 1983. - <https://journals.aps.org/prd/pdf/10.1103/PhysRevD.28.2491>
10. M.F. Girard. **Numerical Solutions of the Quantum Hamilton-Jacobi Equation and Exact WKB-Like Representation of One-Dimensional Wave Functions** - <https://arxiv.org/pdf/1403.0825>
11. Il valore $\varphi = \pi/4$ è voluto dall'analogia con la fase scelta nel metodo WKB.
12. Ricordiamo che questa regola di quantizzazione è il punto di partenza per la ricerca della soluzione particolare \tilde{p}_f , la cui analisi richiede una trattazione caso per caso.
13. Si ricordi che la funzione $X(x)$ è la parte reale di una funzione $W(x)$, il cui dominio è estendibile al piano complesso per mezzo della variabile $z = x + iy$. Pertanto, vista la definizione della funzione $W(z)$ a meno di costanti additive, questa deve essere intesa come funzione *palindroma* in tale dominio. Lo specifico cammino di integrazione in Figura, deve essere ottenuto come limite di un cammino nel piano complesso, che in generale potrebbe richiedere di essere sostituito da una foliazione di piani complessi, la cui topologia potrebbe richiedere uno studio specifico. Si pensi ad esempio alla funzione \sqrt{z} in Analisi Complessa. L'ampiezza dell'autofunzione non è invece affetta da ciò, dato che la costante additiva scompare con la derivata $X'(x)$.
14. R. S. Bhalla, A. K. Kapoor, P. K. Panigrahi. **Quantum Hamilton–Jacobi formalism and the bound state spectra.** *American Journal of Physics* 1997. - <https://arxiv.org/pdf/quant-ph/9512018v2>
15. Negli articoli sopracitati, viene anche trattato il caso (più complicato) dell'atomo di Idrogeno).
16. Si ricordi che la parte reale della funzione caratteristica influenza anche l'andamento delle autofunzioni in equazione 1.28.

Parte IV

APPENDICI

BIBLIOGRAFIA

- [1] C. Poole H. Goldstein e J. Safko. *Meccanica Classica*. Zanichelli, 2005.
- [2] M. D'Elia. *Lezioni di Meccanica Classica*. Pisa University Press, 2020.
- [3] L.E. Picasso. *Lezioni di Meccanica Quantistica*. Edizioni ETS, 2015.
- [4] L.E. Ballentine. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. World Scientific, 1998.
- [5] L.D. Landau e E.M. Lifšic. *Fisica Teorica 3 - Meccanica Quantistica - Teoria non relativistica*. Editori Riuniti, 2010.
- [6] K. Konishi e G. Paffuti. *Quantum Mechanics - A New Introduction*. Oxford University Press, 2009.
- [7] N. Zettili. *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*. Wiley, 2009.
- [8] H. Georgi. *Lie Algebras in Particle Physics. From Isospin to Unified Theories*. Vol. 54. 1982.
- [9] P. Fazekas. *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. World Scientific, 1999.
- [10] G. Grosso e G.P. Parravicini. *Solid State Physics*. Elsevier Science, 2000.