



UNIVERSITÀ
degli STUDI
di CATANIA

Dipartimento
di Fisica
e Astronomia
"Ettore Majorana"



ESERCIZI SVOLTI DI FISICA TEORICA

A cura di P. Salumieri

Anno 2025

Indice

Indice	i
1 Funzioni	1
2 Problemi unidimensionali	13
3 Oscillatore armonico 1D	31

1 Funzioni

Esercizio 1.1 (10/06/2019 n°6)¹

Calcolare lo scarto quadratico medio della posizione per la funzione d'onda

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx - \lambda|k|}$$

Svolgimento

Il testo ci chiede di calcolare lo scarto quadratico medio della posizione, cioè

$$\sigma_x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}$$

Dobbiamo calcolare $\langle \hat{x}^2 \rangle$ e $\langle \hat{x} \rangle^2$. Per farlo abbiamo almeno tre modi diversi:

1. Calcoliamo esplicitamente l'integrale con cui è definita $\psi(x)$. In tal caso \hat{x} sarà un operatore² moltiplicativo tale che $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$, dove $\psi(x)$ sarà una funzione espressa in una forma non integrale;
2. Calcoliamo tali valori direttamente in questa rappresentazione. L'operatore \hat{x} agirà sulla funzione esattamente come nel caso precedente, quindi quando calcoliamo $\langle \hat{x} \rangle$ avremo

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^* \hat{x} \psi$$

e in tale espressione dovremo riportare i due integrali di ψ^* e ψ , fare il cambio di ordine di integrazione e risolvere tutto in maniera integrale;

3. Passiamo allo spazio degli impulsi tramite la trasformata di Fourier: scriviamo (ponendo $k = \frac{p}{\hbar}$)

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\left(\frac{p}{\hbar}\right) e^{i\frac{px}{\hbar} - \lambda|\frac{p}{\hbar}|} = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{i\frac{px}{\hbar} - \lambda|\frac{p}{\hbar}|}$$

¹Non è esattamente quell'esercizio: per semplificare i conti si è ommesso un fattore 4 ad esponente.

²Attenzione che tale operatore è leggermente diverso dall'operatore \hat{x} che agisce sugli stati $|\psi\rangle$ di uno spazio di Hilbert, in quanto questo agisce sugli elementi di uno spazio di funzioni. Formalmente si ha però poi una corrispondenza 1:1.

da cui deduciamo che la funzione d'onda nello spazio degli impulsi sarà

$$\tilde{\psi}(p) = Ne^{-\lambda \frac{|p|}{\hbar}}$$

con N coefficiente di normalizzazione (in cui viene incluso il fattore $1/\hbar$).

Adoperiamo la terza possibilità. L'unico svantaggio di questa strada è che in questa rappresentazione l'operatore \hat{x} è un operatore differenziale anziché un operatore moltiplicativo, cioè se vogliamo lavorare nella rappresentazione degli impulsi avrà forma

$$\hat{x} = i\hbar \frac{d}{dp}$$

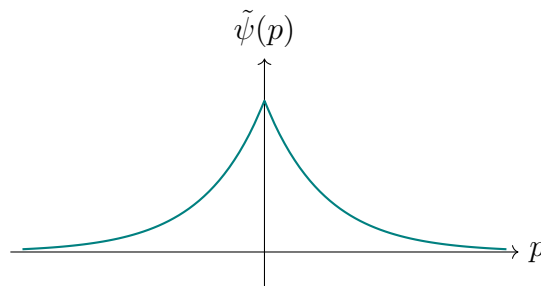
Osserviamo però che la funzione d'onda nello spazio degli impulsi è un esponenziale (a meno del valore assoluto), e sappiamo che gli operatori differenziali agiscono sugli esponenziali come degli operatori moltiplicativi, nel senso che quando deriviamo l'esponenziale otteniamo semplicemente la stessa funzione moltiplicata per il coefficiente ad esponente. Quindi in questo caso lavorare con un operatore differenziale non rappresenta un problema.

Per prima cosa, dato che dobbiamo calcolare delle medie, dobbiamo normalizzare la funzione d'onda. Normalizziamo tale funzione nello spazio degli impulsi. Se la normalizziamo in tale spazio, non dobbiamo porci il problema della conversione, perché la stiamo normalizzando direttamente. Ne segue che non ci sono fattori $2\pi\hbar$ da tenere in considerazione³.

Dobbiamo quindi porre

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp |\tilde{\psi}(p)|^2 = |N|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-2\lambda \frac{|p|}{\hbar}} \\ &= 2|N|^2 \int_0^{+\infty} dp e^{-2\lambda \frac{p}{\hbar}} = 2|N|^2 \frac{\hbar}{2\lambda} = \frac{\hbar|N|^2}{\lambda} \implies N = \sqrt{\frac{\lambda}{\hbar}} \end{aligned}$$

dove il secondo passaggio (in cui abbiamo tolto il valore assoluto) è giustificato dal fatto che la funzione d'onda ha il seguente andamento:



³Tale fattore ci sarebbe stato se avessimo normalizzato $\psi(x)$ e poi avessimo dovuto cercare una normalizzazione di $\tilde{\psi}(p)$, senza fare una nuova ri-normalizzazione. A livello pratico non cambia niente, semplicemente nei due casi troveremo un valore diverso per la costante di normalizzazione.

Capitolo 1. Funzioni

il quale è semplicemente un esponenziale decrescente per $p > 0$ mentre per $p < 0$ è un esponenziale crescente, che nei fatti è la stessa funzione riportata specularmente. Ciò significa le due regioni sono simmetriche, dunque è possibile dividere l'integrale in due parti, una che va da 0 a $+\infty$ e una che va da 0 a $-\infty$, le quali sono identiche e pertanto possiamo considerarne una soltanto e moltiplicare per 2.

Passiamo al calcolo di $\langle \hat{x} \rangle$. Ricordiamo che, avendo scelto di normalizzare a 1 nello spazio degli impulsi, per restare coerenti negli integrali che seguono non dovremo mettere un fattore $2\pi\hbar$ a dividere nella misura di integrazione.

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\psi}^* \hat{x} \tilde{\psi} = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\psi}^* \frac{d\tilde{\psi}}{dp}$$

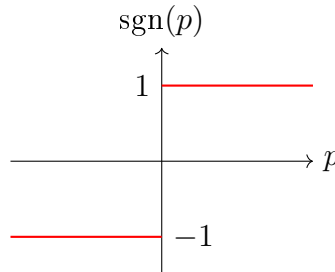
Notiamo che è lecito scrivere tale espressione, in quanto la funzione è continua in $p = 0$ mentre la derivata prima è discontinua, pertanto un'eventuale delta di Dirac figurerebbe soltanto nella derivata seconda. In particolare, la derivata prima è pari a

$$\frac{d\tilde{\psi}}{dp} = \begin{cases} -N \frac{\lambda}{\hbar} e^{-\frac{\lambda p}{\hbar}} & \text{per } p > 0 \\ N \frac{\lambda}{\hbar} e^{\frac{\lambda p}{\hbar}} & \text{per } p < 0 \end{cases}$$

e se adesso moltiplichiamo per la $\tilde{\psi}^*$ abbiamo (ricordiamo che $\tilde{\psi}$ è reale)

$$\tilde{\psi}^* \frac{d\tilde{\psi}}{dp} = \begin{cases} -|N|^2 \frac{\lambda}{\hbar} e^{-2\frac{\lambda p}{\hbar}} & \text{per } p > 0 \\ |N|^2 \frac{\lambda}{\hbar} e^{2\frac{\lambda p}{\hbar}} & \text{per } p < 0 \end{cases}$$

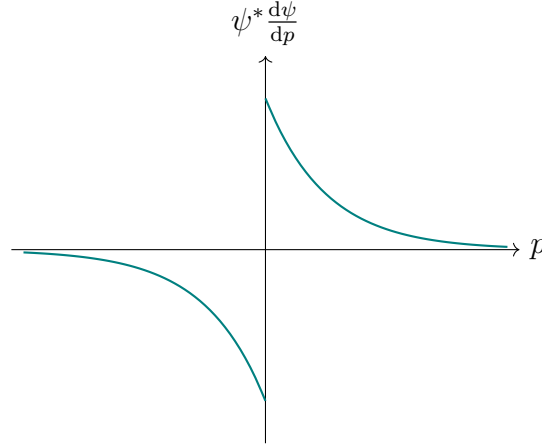
Vediamo se esiste un modo per scrivere con un'unica espressione tale funzione. Per quanto riguarda gli esponenziali è sufficiente utilizzare il modulo di p cioè $|p|$; per il coefficiente (che è uguale in entrambi ma negativo per $p > 0$ e positivo per $p < 0$) possiamo adoperare la funzione segno, che è pari a 1 quando il suo argomento assume valori positivi e pari a -1 quando il suo argomento assume valori negativi, dunque ha il seguente andamento:



In definitiva l'espressione cercata è

$$\tilde{\psi}^* \frac{d\tilde{\psi}}{dp} = -|N|^2 \frac{\lambda}{\hbar} \text{sign}(p) e^{-2\frac{\lambda p}{\hbar}}$$

la quale ha il seguente andamento:



Tale funzione è anti-simmetrica rispetto a $p = 0$: ne segue che quando ne facciamo l'integrale da $-\infty$ a $+\infty$ quest'ultimo sarà pari a zero:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\psi}^* \frac{d\tilde{\psi}}{dp} = 0$$

Avevamo modo di sapere sin dall'inizio che tale integrale si sarebbe annullato?

Un primo modo è quello di notare che la funzione è pari, per cui la sua derivata è dispari e dunque il prodotto è dispari; un secondo modo è quello di notare che c'è un fattore i a moltiplicare l'integrale, ma siccome $\langle \hat{x} \rangle$ non può essere un numero immaginario⁴ ci aspettiamo che, essendo la funzione d'onda reale (e quindi chiaramente anche la sua derivata), l'integrale debba essere pari a zero. Attenzione! In generale non è detto che la funzione integranda sia reale.

Calcoliamo adesso $\langle \hat{x}^2 \rangle$, che possiamo calcolare in due modi. Prima però riscriviamo la derivata prima di $\tilde{\psi}$ nella seguente maniera:

$$\frac{d\tilde{\psi}}{dp} = -N \frac{\lambda}{\hbar} e^{-\frac{\lambda|p|}{\hbar}} [\vartheta(p) - \vartheta(-p)]$$

dove l'espressione tra parentesi quadre non è altro che la funzione $\text{sgn}(p)$ (si può infatti vedere che per $p > 0$ il primo termine è pari a 1 mentre il secondo è pari a 0, viceversa per $p < 0$ il primo è pari a 0 e il secondo a -1). Il motivo per cui ci serve questa riscrittura è che se vogliamo calcolare la derivata seconda sappiamo come si deriva la theta.

Vediamo adesso i due modi per calcolare $\langle \hat{x}^2 \rangle$, che sappiamo essere pari a $\langle \psi | \hat{x}^2 | \psi \rangle$.

⁴Il motivo è che, essendo \hat{x} un'osservabile, è un operatore hermitiano, il quale ha autovalori reali e dunque anche le sue medie, essendo quest'ultime somme di autovalori moltiplicati per le relative probabilità.

Capitolo 1. Funzioni

- Modo 1: scriviamo tale espressione come

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \langle \psi | \hat{x} \hat{x} | \psi \rangle = |\hat{x} | \psi \rangle|^2$$

con cui intendiamo che facciamo agire una \hat{x} su $|\psi\rangle$ e una \hat{x} su $\langle\psi|$. In questo modo ci riconduciamo al calcolo del modulo quadro del vettore ottenuto dall'applicazione di \hat{x} su $|\psi\rangle$. Il vantaggio di questo modo è che così facendo non dovremo calcolare la derivata seconda e quindi non dovremo utilizzare la delta di Dirac.

Calcoliamo la quantità $\hat{x}\psi$. Ricordando che nella rappresentazione degli impulsi \hat{x} è pari a $i\hbar \frac{d}{dp}$ si ha

$$\hat{x}\tilde{\psi} = i\hbar \frac{d\tilde{\psi}}{dp} = -iN\lambda e^{-\frac{\lambda|p|}{\hbar}} [\vartheta(p) - \vartheta(-p)]$$

Questa sarà la nuova funzione d'onda di cui dobbiamo prenderne il modulo quadro. In particolare, per quanto riguarda il quadrato del termine tra parentesi quadre si ha che esso è pari a 1 (ricordiamo che esso non è altro che la funzione segno, la quale elevata al quadrato fa ovviamente 1). Esplicitamente:

$$[\vartheta(p) - \vartheta(-p)]^2 = \vartheta^2(p) + \vartheta^2(-p) - 2\vartheta(p)\vartheta(-p) = \vartheta(p) + \vartheta(-p) + 0 = 1$$

in quanto la funzione theta moltiplicata per se stessa resta uguale, mentre nel doppio prodotto abbiamo il prodotto tra due funzioni tali che una è pari a 1 laddove l'altra è nulla e viceversa, quindi tale termine è pari a zero. Infine i due termini che restano sono banalmente pari alla costante 1 per qualsiasi valore di p .

In definitiva abbiamo che

$$|\hat{x}\tilde{\psi}|^2 = |N|^2 \lambda^2 e^{-2\frac{\lambda|p|}{\hbar}}$$

Mettendo tale quantità sotto integrale avremo

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = |N|^2 \lambda^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-2\frac{\lambda|p|}{\hbar}} = 2|N|^2 \lambda^2 \frac{\hbar}{2\lambda} = 2\frac{\lambda}{\hbar} \lambda^2 \frac{\hbar}{2\lambda} = \lambda^2$$

dove abbiamo adoperato gli stessi passaggi di prima (divisione in due integrali, considerazioni sulla simmetria ecc.)

- Modo 2: facciamo agire \hat{x}^2 su $\tilde{\psi}$ e poi calcoliamo l'integrale di ciò che viene fuori moltiplicato per $\tilde{\psi}^*$. In questo caso sarà necessario adoperare la delta di Dirac. Stavolta avremo

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\psi}^* \hat{x}^2 \tilde{\psi} = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\psi}^* \frac{d^2 \tilde{\psi}}{dp^2}$$

quindi dobbiamo calcolare la derivata seconda. Per farlo riscriviamo meglio la derivata prima, moltiplicando le due theta per l'esponenziale e esplicitando i valori assoluti:

$$\frac{d\tilde{\psi}}{dp} = -N\frac{\lambda}{\hbar} \left[e^{-\frac{\lambda p}{\hbar}} \vartheta(p) - e^{\frac{\lambda p}{\hbar}} \vartheta(-p) \right]$$

La derivata seconda allora sarà

$$\frac{d^2\tilde{\psi}}{dp^2} = -\frac{N\lambda}{\hbar} \left[-\frac{\lambda}{\hbar} e^{-\frac{\lambda p}{\hbar}} \vartheta(p) - \frac{\lambda}{\hbar} e^{\frac{\lambda p}{\hbar}} \vartheta(-p) + e^{-\frac{\lambda p}{\hbar}} \delta(p) + e^{\frac{\lambda p}{\hbar}} \delta(p) \right]$$

dove l'ultimo termine deriva da

$$\frac{d}{dp} \vartheta(-p) = \frac{d(-p)}{dp} \frac{d}{d(-p)} \vartheta(-p) = -\delta(-p) = -\delta(p)$$

Osserviamo inoltre che gli ultimi due addendi sono entrambi pari semplicemente a $\delta(p)$ per la proprietà secondo cui $f(p)\delta(p) = f(0)\delta(p)$, e l'esponenziale calcolato in 0 è pari a 1; possiamo quindi scrivere

$$\frac{d^2\tilde{\psi}}{dp^2} = -\frac{N\lambda}{\hbar} \left[-\frac{\lambda}{\hbar} e^{-\frac{\lambda p}{\hbar}} \vartheta(p) - \frac{\lambda}{\hbar} e^{\frac{\lambda p}{\hbar}} \vartheta(-p) + \delta(p) + \delta(p) \right] = -\frac{N\lambda}{\hbar} \left[-\frac{\lambda}{\hbar} e^{-\frac{\lambda|p|}{\hbar}} + 2\delta(p) \right]$$

dove abbiamo fatto in un certo senso il passaggio inverso a prima, nel senso che abbiamo messo in evidenza l'esponenziale reintroducendo il valore assoluto e poi abbiamo sfruttato il fatto che $\vartheta(p) + \vartheta(-p) = 1$.

A questo punto possiamo calcolare $\langle \hat{x}^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}^2 \rangle &= |N|^2 \lambda \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\frac{\lambda|p|}{\hbar}} \left[-\frac{\lambda}{\hbar} e^{-\frac{\lambda|p|}{\hbar}} + 2\delta(p) \right] \\ &= |N|^2 \lambda \hbar \left\{ -\frac{\lambda}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-2\frac{\lambda|p|}{\hbar}} + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\frac{\lambda|p|}{\hbar}} \delta(p) \right\} \\ &= |N|^2 \lambda \hbar \left\{ -\frac{\lambda}{\hbar} \frac{\hbar}{\lambda} + 2 \right\} = |N|^2 \lambda \hbar = \lambda^2 \end{aligned}$$

dove il primo integrale lo abbiamo già calcolato in precedenza, mentre per il secondo abbiamo sfruttato il fatto che la $\delta(p)$ messa sotto integrale con un'altra funzione restituisce la funzione calcolata in $p = 0$, ma siccome questa in 0 fa 1 l'integrale è semplicemente pari a 1.

Osserviamo come il risultato sia lo stesso dell'altro caso, perché appunto i due modi sono equivalenti. Vale però la pena notare il seguente fatto: da un punto di vista specificamente fisico, noi stiamo calcolando la media di \hat{x}^2 , la quale è un numero positivo perché può essere scritta come $|\hat{x}|\psi|^2$, che è certamente positivo. Se avessimo escluso il contributo della delta avremmo trovato un valore negativo per $\langle \hat{x} \rangle^2$, il che è ovviamente assurdo. Ciò dimostra che bisogna tenere conto in maniera corretta delle discontinuità, altrimenti incappiamo in risultati privi di senso fisico.

In definitiva abbiamo

$$\sigma_x = \sqrt{\lambda^2 - 0} = \lambda$$

Esercizio 1.2 (14/09/2020 n°1)

Un elettrone si trova nello stato descritto in coordinate sferiche dalla seguente funzione d'onda:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = e^{-\frac{\lambda r}{2}} \sin^2 \vartheta$$

Determinare i possibili valori di una misura della componente L_z del momento angolare e le rispettive probabilità. Calcolare poi la probabilità di trovare l'elettrone nella regione dello spazio limitata da entrambe le relazioni $0 < r < \frac{1}{\lambda}$ e $0 < \vartheta < \frac{\pi}{2}$.

Svolgimento

Notiamo innanzitutto che il testo ci chiede di calcolare la probabilità, quindi sappiamo già che dovremo normalizzare la funzione d'onda.

La prima richiesta è quella di determinare i possibili valori di una misura L_z , ossia di determinare quali siano i possibili autolavori di \hat{L}_z . Per tale richiesta non è necessario normalizzare la funzione d'onda, dunque lo faremo in un secondo momento.

In linea di principio, per trovare i valori di L_z , dovremmo scrivere la funzione d'onda come una somma di autofunzioni dell'operatore \hat{L}_z , dovremmo cioè scrivere ψ come

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{n, \ell, m} c_{n, \ell, m} \phi_{n, \ell, m}(r, \vartheta, \varphi)$$

dove $\phi_{n, \ell, m}(r, \vartheta, \varphi)$ sono le autofunzioni dell'atomo di idrogeno, che sono autofunzioni anche di \hat{L}_z . Dopo aver scritto tale sommatoria dobbiamo andare a vedere quali sono i coefficienti non nulli, in quanto gli stati ad essi corrispondenti saranno quelli in cui la particella può essere misurata e di conseguenza è possibile fare una misura di momento angolare con $L_z = \hbar m$. In altre parole, i possibili valori di una misura di \hat{L}_z sono tutti quei valori per cui il coefficiente è non nullo.

Ciò vale in generale. In questo caso il problema è molto più semplice perché sappiamo che \hat{L}_z si può esprimere come

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

e siccome la funzione d'onda non dipende da φ ha derivata nulla rispetto a quest'ultima, quindi è già autofunzione di \hat{L}_z e pertanto sappiamo già che c'è un solo possibile valore ottenibile da una misura della proiezione del momento angolare, che è $L_z = 0$. Inoltre la probabilità è chiaramente pari a 1 perché non possiamo trovare nessun altro valore di L_z e quindi misuriamo $L_z = 0$ con probabilità 1.

Che sarebbe successo se invece ce ne fossero stati più di uno? Vediamolo facendo due esempi.

ES.1 Consideriamo la funzione

$$\chi_1 = e^{-\frac{\lambda r}{2}} \sin \vartheta (\cos \varphi + 2 \sin^2 \varphi)$$

Notiamo che la parte $e^{-\frac{\lambda r}{2}} \sin \vartheta$ non dipende da φ , ciò significa che l'informazione su L_z è contenuta nel termine tra parentesi, il quale possiamo riscrivere come

$$\cos \varphi + 2 \sin^2 \varphi = \left[\frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} - \frac{(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})^2}{2} \right] = \frac{1}{2} (2 + e^{i\varphi} + e^{-i\varphi} - e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi})$$

Quello che abbiamo fatto in sostanza è stato prendere la parte angolare della funzione d'onda, che in questo caso è una generica funzione dipendente da φ , ed espanderla in una somma di autofunzioni di \hat{L}_z .

Tale espansione corrisponde ad avere la somma degli stati

$$2|0\rangle + |1\rangle + |-1\rangle - |2\rangle - |-2\rangle$$

A questo punto, visto che la probabilità totale deve essere pari a 1, consideriamo la somma dei moduli quadri dei coefficienti dei termini che figurano in tale espressione: essa è pari a $4 + 1 + 1 + 1 + 1 = 8$, dunque dovremo riscrivere lo stato come

$$\frac{1}{\sqrt{8}} (2|0\rangle + |1\rangle + |-1\rangle - |2\rangle - |-2\rangle)$$

da cui deduciamo che abbiamo probabilità $\mathbb{P}_0 = \frac{4}{8} = \frac{1}{2}$ di misurare $L_z = 0$, mentre per tutti gli altri valori la probabilità è pari a $\frac{1}{8}$.

La funzione d'onda χ_1 però non rappresenta il caso più generico, perché è un caso particolare di funzione d'onda del tipo

$$\psi = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$$

cioè fattorizzabile nel prodotto di funzioni che dipendono da una sola variabile. Vediamo allora un esempio più generale.

ES.2 Consideriamo la funzione d'onda

$$\chi_2 = e^{-\frac{\lambda r}{2}} \sin^2 \vartheta + e^{-\xi r^2} \cos^2 \varphi$$

Si evince subito che essa non è fattorizzabile a differenza di χ_1 . Cosa è possibile dire di L_z ? Innanzitutto riscriviamo la funzione come

$$\chi_2 = e^{-\frac{\lambda r}{2}} \sin^2 \vartheta + \frac{1}{4} e^{-\xi r^2} (e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi} + 2)$$

dove abbiamo espanso $\cos^2 \varphi$ come una somma di autofunzioni di \hat{L}_z . Da tale espressione deduciamo che i possibili valori di L_z sono $0, \pm 2\hbar$ (da notare che il valore $L_z = 0$ si poteva dedurre già dal primo addendo, in cui non c'è dipendenza da φ).

Se adesso volessimo trovare le probabilità, ciò non sarà semplice come nel caso di χ_1 in cui abbiamo semplicemente letto i coefficienti (ribadiamo che in quel caso era sufficiente leggere i coefficienti perché tutta la dipendenza da φ era fattorizzata in una sua funzione (la parentesi)). Quello che invece dobbiamo fare in questo caso è svolgere

Capitolo 1. Funzioni

il calcolo esplicito: dopo aver normalizzato la funzione d'onda, la probabilità $\mathbb{P}(L_z = \hbar m)$ di rivelare la particella descritta da questa funzione d'onda con $L_z = \hbar m$ sarà data dalla somma delle probabilità di trovare la particella con una generica energia (cioè un generico valore di n), con un generico momento angolare totale (cioè un generico valore di ℓ) e quel determinato valore di L_z , dunque di m . In formule:

$$\mathbb{P}(L_z = \hbar m) = \sum_{n,\ell} \mathbb{P}(n, \ell, m) = \sum_{n,\ell} |\langle n, \ell, m | \psi \rangle|^2$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo esplicitato le probabilità come moduli quadri dei prodotti scalari tra lo stato $|\psi\rangle$ e gli autostati $|n, \ell, m\rangle$.

È da notare che, sebbene la sommatoria sia estesa a tutti i valori di n ed ℓ , nei fatti ci saranno delle probabilità nulle a priori, in quanto se ci mettessimo nella rappresentazione delle posizioni tali probabilità sarebbero date da

$$\sum_{n,\ell} \mathbb{P}(n, \ell, m) = \sum_{n,\ell} \left| \int d^3\mathbf{r} R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}^*(\vartheta, \varphi) \psi(r, \vartheta, \varphi) \right|^2$$

e se per esempio volessimo calcolare la probabilità per $m = 24$ (il che significa che ℓ deve valere almeno 24 e quindi n almeno 25), è chiaro che ci saranno dei termini della sommatoria nulli a prescindere. Esclusi tali termini, il passaggio successivo è esplicitare la dipendenza radiale ed angolare della funzione d'onda, in modo da vedere se si possono operare delle semplificazioni.

Il problema di questa formula è che se mai si dovesse adoperare nella sua forma più generale, nei fatti dovremmo calcolare un numero potenzialmente infinito di integrali radiali, fatto che potrebbe risultare proibitivo. Per tale ragione, negli esercizi spesso la funzione d'onda ha la forma di una certa funzione $f(r)$ moltiplicata per una somma $g(\vartheta, \varphi)$ di funzioni di ϑ e φ . In tal caso la dipendenza radiale è indifferente, perché c'è una singola funzione a moltiplicare e a noi interessa solo la dipendenza angolare, per cui troveremo che la probabilità di trovare la particella con un certo valore di ℓ ed m (assumendo che $g(\vartheta, \varphi)$ sia normalizzata) sarà data da

$$\mathbb{P}(\ell, m) = \left| \int d\Omega Y_{\ell,m}^* g(\vartheta, \varphi) \right|^2$$

Dimostriamo questo fatto. In generale avremmo

$$\mathbb{P}(\ell, m) = \sum_n \mathbb{P}(n, \ell, m) = \sum_n \left| \int dr r^2 \int d\Omega R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}^* f(r) g(\vartheta, \varphi) \right|^2$$

Grazie all'ortonormalità delle autofunzioni radiali dell'atomo di idrogeno,

$$\int dr r^2 R_{n',\ell}(r) R_{n,\ell}(r) = \delta_{n'n} \quad \forall \ell$$

per ciascun ℓ preso singolarmente, la funzione $f(r)$ (che assumiamo normalizzata in quanto abbiamo assunto che lo siano $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ e $g(\vartheta, \varphi)$) può essere espressa come una somma

$$f(r) = \sum_n f_{n,\ell} R_{n,\ell}(r)$$

dove gli $f_{n,\ell}$ sono coefficienti tali che $\sum_n |f_{n,\ell}|^2 = 1$. Si avrà allora, per ciascun ℓ fissato,

$$\begin{aligned} \int dr r^2 \int d\Omega R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}^* f(r) g(\vartheta, \varphi) &= \left(\int dr r^2 R_{n,\ell}(r) f(r) \right) \left(\int d\Omega Y_{\ell,m}^* g(\vartheta, \varphi) \right) \\ &= f_{n,\ell} \int d\Omega Y_{\ell,m}^* g(\vartheta, \varphi) \end{aligned}$$

Reinserito questo risultato nell'espressione precedente otteniamo

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\ell, m) &= \sum_n \left| f_{n,\ell} \int d\Omega Y_{\ell,m}^* g(\vartheta, \varphi) \right|^2 = \left(\sum_n |f_{n,\ell}|^2 \right) \left| \int d\Omega Y_{\ell,m}^* g(\vartheta, \varphi) \right|^2 = \\ &= \left| \int d\Omega Y_{\ell,m}^* g(\vartheta, \varphi) \right|^2 \end{aligned}$$

come volevasi dimostrare.

Passiamo alla seconda parte dell'esercizio. Per calcolare la probabilità è prima necessario normalizzare la funzione d'onda

$$1 = |N|^2 \int_0^{+\infty} dr r^2 \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-\lambda r} \sin^4 \vartheta$$

Notiamo che non c'è dipendenza da φ , quindi l'integrazione rispetto a tale variabile restituisce un fattore 2π ; inoltre dipendenza da r e da ϑ si può fattorizzare, dunque possiamo riscrivere

$$1 = 2\pi |N|^2 \left(\int_0^{+\infty} dr r^2 e^{-\lambda r} \right) \left(\int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) (1 - \cos^2 \vartheta)^2 \right)$$

dove abbiamo riscritto la funzione integranda relativa a ϑ usando la relazione $\sin^4 \vartheta = (\sin^2 \vartheta)^2 = (1 - \cos^2 \vartheta)^2$.

Concentriamoci sulla parte angolare: per prima cosa osserviamo che la funzione integranda è simmetrica rispetto $\cos \vartheta$, per cui possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) (1 - \cos^2 \vartheta)^2 &= 2 \int_0^1 d(\cos \vartheta) (1 - \cos^2 \vartheta)^2 = \\ &= 2 \int_0^1 d(\cos \vartheta) 1 - 2 \cos^2 \vartheta + \cos^4 \vartheta = 2 \left[\cos \vartheta - \frac{2}{3} \cos^3 \vartheta + \frac{1}{5} \cos^5 \vartheta \right]_0^1 = \frac{16}{15} \end{aligned}$$

Capitolo 1. Funzioni

Passiamo alla parte radiale. Esso è nella forma $r^n e^{-\lambda r}$, i quali sono integrali noti. Si ricava infatti che

$$\int_0^{+\infty} dr r^n e^{-\lambda r} = (-1)^n \frac{d^n}{d\lambda^n} \int_0^{+\infty} dr e^{-\lambda r} = (-1)^n \frac{d^n}{d\lambda^n} \left(\frac{1}{\lambda} \right) = \frac{n!}{\lambda^{n+1}}$$

Nel nostro caso $n = 2$, dunque

$$\int_0^{+\infty} dr r^2 e^{-\lambda r} = \frac{2}{\lambda^3}$$

Mettendo insieme i risultati si ha

$$1 = 2\pi |N|^2 \frac{16}{15} \frac{2}{\lambda^3} = \frac{64\pi}{15} \frac{|N|^2}{\lambda^3} \iff |N|^2 = \frac{15\lambda^3}{64\pi}$$

Arrivati a questo punto possiamo calcolare la probabilità. Notiamo in particolare che la condizione $0 < \vartheta < \frac{\pi}{2}$ corrisponde alla condizione $1 > \cos \vartheta > 0$.⁵ Dunque:

$$\begin{aligned} \mathbb{P} &= |N|^2 \int_0^{\frac{1}{\lambda}} dr r^2 \int_0^1 d(\cos \vartheta) \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-\lambda r} \sin^4 \vartheta = \\ &= 2\pi |N|^2 \left(\int_0^{\frac{1}{\lambda}} dr r^2 e^{-\lambda r} \right) \left(\int_0^1 d(\cos \vartheta) \sin^4 \vartheta \right) = 2\pi |N|^2 \frac{8}{15} \int_0^{\frac{1}{\lambda}} dr r^2 e^{-\lambda r} \end{aligned}$$

dove analogamente al punto precedente l'integrale in $d\varphi$ dà un fattore 2π in quanto la funzione d'onda non dipende da tale variabile e l'integrale radiale e quello angolare possono essere fattorizzati. In particolare quest'ultimo risulta essere identico a quello già calcolato, per cui abbiamo sostituito direttamente il risultato.

Ci resta da calcolare l'integrale radiale, che risulta ostico perché c'è un intervallo di integrazione finito.

Ci sono due modi per risolverlo: un primo metodo è quello di utilizzare il metodo di prima a patto di modificarlo con la derivazione sotto il segno di integrale, in quanto chiaramente se deriviamo tale integrale rispetto a λ dobbiamo derivare, oltre che rispetto all'esponenziale, anche rispetto all'estremo di integrazione. Tale metodo tuttavia risulta complicato. Un secondo metodo, ed è quello che adopereremo, consiste nell'integrazione per parti. Si ha che

$$\begin{aligned} r^2 e^{-\lambda r} &= -\frac{1}{\lambda} r^2 \frac{de^{-\lambda r}}{dr} = -\frac{1}{\lambda} \left[\frac{d}{dr} (r^2 e^{-\lambda r}) - 2r e^{-\lambda r} \right] = \\ &= -\frac{1}{\lambda} \left[\frac{d}{dr} (r^2 e^{-\lambda r}) + \frac{2}{\lambda} r \frac{de^{-\lambda r}}{dr} \right] = -\frac{1}{\lambda} \left[\frac{d}{dr} \left(r^2 e^{-\lambda r} + \frac{2}{\lambda} r e^{-\lambda r} \right) - \frac{2}{\lambda} e^{-\lambda r} \right] = \\ &= -\frac{1}{\lambda} \frac{d}{dr} \left[r^2 e^{-\lambda r} + \frac{2}{\lambda} r e^{-\lambda r} + \frac{2}{\lambda^2} e^{-\lambda r} \right] = -\frac{1}{\lambda} \frac{d}{dr} \left[e^{-\lambda r} \left(r^2 + \frac{2}{\lambda} r + \frac{2}{\lambda^2} \right) \right] \end{aligned}$$

⁵Il coseno è una funzione decrescente per $0 < \vartheta < \frac{\pi}{2}$.

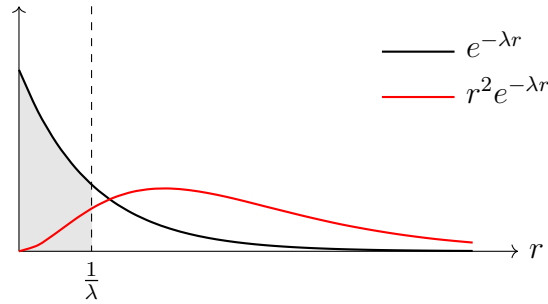
In definitiva

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{1}{\lambda}} dr r^2 e^{-\lambda r} &= -\frac{1}{\lambda} \left[e^{-\lambda r} \left(r^2 + \frac{2}{\lambda} r + \frac{2}{\lambda^2} \right) \right]_0^{\frac{1}{\lambda}} = -\frac{1}{\lambda} \left[\left(\frac{1}{\lambda^2} + \frac{2}{\lambda^2} + \frac{2}{\lambda^2} \right) e^{-1} - \frac{2}{\lambda^2} \right] = \\ &= -\frac{1}{\lambda^3} \left(\frac{5}{e} - 2 \right) = \frac{2 - \frac{5}{e}}{\lambda^3} \end{aligned}$$

Riportando tale risultato nel calcolo della probabilità abbiamo

$$\mathbb{P} = 2\pi |N|^2 \frac{8}{15} \frac{2 - \frac{5}{e}}{\lambda^3} = 2\pi \frac{15\lambda^3}{64\pi} \frac{8}{15} \frac{2 - \frac{5}{e}}{\lambda^3} = \frac{2 - \frac{5}{e}}{4} \approx 0.04 = 4\%$$

Tale risultato non deve spaventare, in quanto ingenuamente si potrebbe pensare che, essendo la funzione d'onda un esponenziale, dato il suo andamento la probabilità di trovare la particella ad una distanza compresa tra 0 e $\frac{1}{\lambda}$ debba essere elevata. Tale ragionamento però è sbagliato in quanto si trascura il fattore r^2 contenuto nella misura di integrazione, il quale moltiplicato con un esponenziale dà il seguente grafico, da cui si deduce che in realtà la densità di probabilità radiale è parecchio bassa:



2 Problemi unidimensionali

Esercizio 2.1 (07/10/2020 n°4)

Una particella è vincolata a muoversi all'interno del segmento $0 < x < L$ (il potenziale è nullo all'interno del segmento e infinito all'esterno). Calcolare l'energia media sapendo che lo stato della particella è descritto con buona approssimazione dalla funzione d'onda

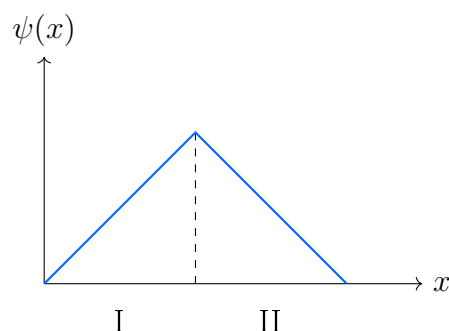
$$\psi(x) = \begin{cases} x & \text{per } 0 < x < \frac{L}{2} \\ L - x & \text{per } \frac{L}{2} < x < L \end{cases}$$

Svolgimento

Analizziamo meglio il problema. Il potenziale che agisce sulla particella ha forma

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x \in [0, L] \\ +\infty & \text{per } x \notin [0, L] \end{cases}$$

per cui possiamo ignorare cosa succede fuori da $[0, L]$, in quanto la funzione d'onda è ivi identicamente nulla. All'interno di tale segmento invece ha il seguente andamento:



Nella regione I cresce come x , mentre nella regione II decresce come $L - x$, in maniera tale che per $x = \frac{L}{2}$ le due funzioni si raccordano.

Il testo ci chiede di calcolare $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle$. Ricordiamo che l'hamiltoniana in generale è definita

come

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

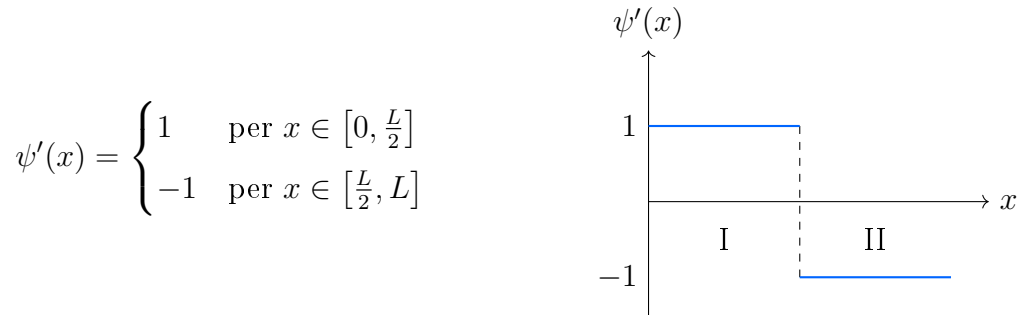
ma siccome il potenziale all'interno della regione $[0, L]$ è nullo, l'hamiltoniana diventa semplicemente

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

che nella rappresentazione delle coordinate si esprime come

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

Sorge tuttavia un problema, in quanto abbiamo una discontinuità nella derivata della funzione: si ha infatti



e si evince che c'è una discontinuità in $x = \frac{L}{2}$. Cosa comporta questa discontinuità? Quando calcoliamo la derivata prima non ci sono problemi, perché troviamo semplicemente una funzione discontinua, ma quando calcoliamo la derivata seconda la discontinuità nella derivata prima produce qualcosa che dobbiamo sapere come trattare. Il problema sta quindi nel calcolare la derivata seconda in $x = \frac{L}{2}$, che costituisce appunto la discontinuità.

L'idea alla base è quella di adoperare una delta di Dirac. Per fare ciò, poiché la funzione è definita in maniera diversa in regioni diverse, è necessario "incollare" le due funzioni riscrivendo la funzione d'onda come

$$\psi(x) = N \left\{ x \vartheta\left(\frac{L}{2} - x\right) + (L - x) \vartheta\left(x - \frac{L}{2}\right) \right\}$$

dove ϑ è la funzione di Heaviside, che è pari a 1 quando il suo argomento è positivo e 0 quando è negativo. In particolare abbiamo

$$\vartheta\left(\frac{L}{2} - x\right) = \begin{cases} 1 & \text{per } \frac{L}{2} - x > 0 \iff x < \frac{L}{2} \\ 0 & \text{per } \frac{L}{2} - x < 0 \iff x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

$$\vartheta\left(x - \frac{L}{2}\right) = \begin{cases} 1 & \text{per } x - \frac{L}{2} > 0 \iff x > \frac{L}{2} \\ 0 & \text{per } x - \frac{L}{2} < 0 \iff x < \frac{L}{2} \end{cases}$$

Capitolo 2. Problemi unidimensionali

Notiamo che le due funzioni sono praticamente opposte. Il motivo è che così il primo addendo ci definisce la funzione nella regione I (in cui si comporta come x) e il secondo nella regione II (in cui si comporta come $L - x$).

Tale scrittura è utile perché sappiamo quanto valgono le derivate delle theta. In particolare, la derivata della theta di Heaviside calcolata in un qualsiasi punto x_0 è uguale alla delta di Dirac calcolata nello stesso punto:

$$\frac{d}{dx}\vartheta(x - x_0) = \delta(x - x_0)$$

Ovviamente, se anziché avere $\vartheta(x - x_0)$ abbiamo $\vartheta(x_0 - x)$, questa segue le solite regole della derivazione e quindi avremo:

$$\frac{d}{dx}\vartheta(x_0 - x) = \frac{d(x_0 - x)}{dx} \frac{d}{d(x_0 - x)}\vartheta(x_0 - x) = \delta(x_0 - x) = -\delta(x - x_0)$$

Calcoliamo ora la $\psi'(x)$: derivando prima la parte regolare (cioè quelle non della theta) e poi l'altra avremo

$$\psi'(x) = N \left\{ \vartheta\left(\frac{L}{2} - x\right) - \vartheta\left(x - \frac{L}{2}\right) - x\delta\left(x - \frac{L}{2}\right) + (L - x)\delta\left(x - \frac{L}{2}\right) \right\}$$

dove il segno meno del terzo addendo deriva dalla proprietà enunciata poc'anzi nel caso in cui abbiamo l'argomento della theta invertito.

Sfruttando la proprietà della delta per cui $f(x)\delta(x - x_0) = f(x_0)\delta(x - x_0)$, possiamo riscrivere la parte della derivata in cui figura la delta come¹

$$-x\delta\left(x - \frac{L}{2}\right) + (L - x)\delta\left(x - \frac{L}{2}\right) = -\frac{L}{2}\delta\left(x - \frac{L}{2}\right) + \left(L - \frac{L}{2}\right)\delta\left(x - \frac{L}{2}\right) = 0$$

in quanto mettendo in evidenza la delta notiamo che essa è moltiplicata per 0, e una delta moltiplicata per zero fa zero.

La derivata prima sarà allora

$$\psi'(x) = N \left\{ \vartheta\left(\frac{L}{2} - x\right) - \vartheta\left(x - \frac{L}{2}\right) \right\}$$

Ribadiamo che tale scrittura significa solo che $\psi'(x)$ vale 1 per $x < \frac{L}{2}$ e -1 per $x > \frac{L}{2}$. Abbiamo quindi scoperto che nella derivata prima non ci sono delta, che era ovvio perché la avevamo già potuta calcolare prima senza problemi. Calcoliamo adesso la derivata seconda:

$$\psi''(x) = N \left\{ -\delta\left(x - \frac{L}{2}\right) - \delta\left(x - \frac{L}{2}\right) \right\} = -2N\delta\left(x - \frac{L}{2}\right)$$

Notiamo che siccome avevamo una discontinuità nella derivata prima allora nella derivata seconda avremo una delta, cosa che non avremmo potuto sapere se avessimo

¹Attenzione! Quando facciamo questo passaggio dobbiamo comunque tenere la delta, in quanto potremmo poi dover moltiplicare $\psi'(x)$ per un'altra funzione e quella funzione dovrà essere calcolata a sua volta in $\frac{L}{2}$. L'unico modo per eliminare la delta è metterla sotto il segno di integrale.

calcolato la derivata di $\psi'(x)$ definendo questa a tratti, in quanto avremmo ignorato la discontinuità, la quale fornisce la delta.

Avendo calcolato la derivata seconda, possiamo calcolare quanto vale $\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle$: proiettandoci nella base delle posizioni abbiamo

$$\langle x|\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-2N\delta\left(x - \frac{L}{2}\right) \right] = \frac{\hbar^2 N}{m} \delta\left(x - \frac{L}{2}\right)$$

A questo punto non ci resta che calcolare la media $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle$: mettendoci di nuovo nella rappresentazione delle coordinate si ha

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \langle \psi|\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = \int_0^L dx \psi^*(x) \hat{\mathcal{H}}\psi(x) = \frac{\hbar^2 N}{m} \int_0^L dx \psi^*(x) \delta\left(x - \frac{L}{2}\right)$$

Notiamo innanzitutto che l'integrale è esteso da 0 a L anziché da $-\infty$ a $+\infty$ perché al di fuori del segmento la funzione è nulla; inoltre la $\psi(x)$ è definita in un certo modo per $x < \frac{L}{2}$ e in un altro per $x > \frac{L}{2}$, mentre la delta è definita esattamente in mezzo; tuttavia, siccome la funzione è continua nel punto centrale (e non è un caso che lo sia), assumerà lo stesso valore sia da destra che da sinistra, quindi non abbiamo problemi. Quindi, anziché di dividere la $\psi(x)$ nei due pezzi, sfruttiamo la proprietà della delta per cui quando la mettiamo sotto il segno di integrale con un'altra funzione restituisce la funzione valutata in quel punto e otteniamo

$$\frac{\hbar^2 N}{m} \int_0^L dx \psi^*(x) \delta\left(x - \frac{L}{2}\right) = \psi^*\left(\frac{L}{2}\right) \frac{\hbar^2 N}{m} = \frac{\hbar^2 |N|^2 L}{m} \frac{1}{2}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo sostituito il valore della funzione per $x = \frac{L}{2}$. Ci resta solo da calcolare $|N|^2$: imponendo che la funzione sia normalizzata abbiamo

$$1 = \int_0^L dx |\psi(x)|^2 = |N|^2 \left\{ \int_0^{\frac{L}{2}} dx x^2 + \int_{\frac{L}{2}}^L dx (L-x)^2 \right\}$$

dove abbiamo spezzato l'integrale in due integrali estesi agli insiemi in cui la funzione è definita in un certo modo. In particolare è possibile ricondurre il secondo integrale al primo operando il cambiamento di variabili $y = L-x$: così facendo avremo $dy = -dx$ mentre gli estremi inferiore e superiore di integrazione diventeranno rispettivamente $\frac{L}{2}$ e 0; se a questo punto invertiamo questi possiamo scrivere

$$1 = 2|N|^2 \int_0^{\frac{L}{2}} dx x^2 = 2|N|^2 \left. \frac{x^3}{3} \right|_0^{\frac{L}{2}} = 2|N|^2 \frac{L^3}{24} = \frac{|N|^2 L^3}{12} \implies |N|^2 = \frac{12}{L^3}$$

In definitiva

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \frac{\hbar^2}{m} \frac{L}{2} \frac{12}{L^3} = \frac{6\hbar^2}{mL^2}$$

Ulteriori considerazioni sull'esercizio

Capitolo 2. Problemi unidimensionali

Nel problema appena svolto abbiamo visto che c'era una discontinuità che abbiamo trasformato in una delta. Ma perché è necessaria quella delta? In altre parole, se abbiamo una funzione definita come quella dell'esercizio, avente derivata pari a 1 per $x \in [0, \frac{L}{2}]$ e -1 per $x \in [\frac{L}{2}, L]$, perché non possiamo semplicemente scrivere che la derivata seconda è uguale a 0 ma invece dobbiamo usare la delta?

Ricordiamo che abbiamo definito l'energia media come

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L dx \psi^*(x) \psi''(x)$$

e in tale espressione abbiamo due funzioni: una che è ben definita (ψ) e una (ψ'') che diciamo che non è ben definita perché non sappiamo che cosa ci dobbiamo mettere. Possiamo fare una cosa molto semplice: integriamo per parti, ottenendo

$$\int_0^L dx \psi^* \psi'' = \int_0^L dx \left\{ \frac{d}{dx} [\psi^* \psi'] - (\psi')^* \psi' \right\} = [\psi^* \psi']_0^L - \int_0^L dx (\psi')^* \psi'$$

Il termine $[\psi^* \psi']$ dà contributo nullo perché ψ^* è pari a 0 sia in $x = 0$ che in $x = L$. Ci resta dunque solo l'integrale in cui abbiamo due funzioni che invece sono ben definite². Non solo: se svolgiamo il calcolo troviamo un risultato diverso da zero, il che significa che l'integrale da cui siamo partiti deve essere diverso da zero anch'esso. Questo è il motivo per cui non possiamo porre semplicemente la ψ'' pari a 0, perché troveremmo un risultato in disaccordo a quello ottenuto passando all'integrale.

Tutto questo discorso serve per dire che quando mettiamo qualcosa sotto il segno di integrale dove ci possono essere discorsi di questo tipo (integrazione per parti, ecc.), dobbiamo trattare le funzioni come se fossero delle distribuzioni e quindi fare discorsi ad hoc, come ad esempio in questo caso in cui abbiamo dovuto trattare la derivata di una discontinuità come una delta di Dirac.

Potevamo anche notare che il valore medio dell'energia in questo caso non può essere nullo. Infatti, se avessimo $\hat{\mathcal{H}}\psi = 0$ ciò significherebbe che la derivata seconda della funzione è nulla; se però $\psi'' = 0$ allora ψ deve essere del tipo $Ax + b$, ma una funzione di questo tipo non può essere nulla agli estremi, in quanto è una funzione strettamente crescente o decrescente. Quindi l'energia non può essere nulla ma per un discorso di condizioni al contorno, perché se proviamo a prendere una funzione avente energia nulla e soddisfacente le condizioni al contorno, l'unica possibilità è $\psi(x) = 0$.

²Sebbene la derivata prima presenti una discontinuità, ciò non rappresenta un problema in quanto possiamo spezzare l'integrale in due parti: uno che va da 0 a $\frac{L}{2}$ e uno che va da $\frac{L}{2}$ a L , che sappiamo come trattare.

Esercizio 2.2 (07/10/2020 n°3)

Una particella unidimensionale, soggetta al potenziale $V(x)$, si trova nello stato fondamentale di cui è nota la funzione d'onda

$$\psi(x) = Ne^{-\lambda x^4}$$

Determinare il potenziale $V(x)$ e l'energia E_0 dello stato, misurata rispetto al valore che il potenziale assume nel punto $x = 0$. Discutere le principali differenze tra la dinamica classica e quella quantistica in $V(x)$, a parità di energia $E = E_0$.

Svolgimento

Il problema chiede di determinare il potenziale $V(x)$ e l'energia E_0 . Siccome però sia il potenziale che l'energia sono definiti a meno di una costante additiva e in questo problema non conosciamo il potenziale quindi non possiamo conoscere tale costante, di fatto il problema chiede di trovare E_0 a meno del valore che V assume in $x = 0$. Quindi alla fine E_0 sarà data dalla somma di $V(x = 0)$ più qualcosa che dobbiamo trovare. La costante additiva sarà fissata in base al valore del potenziale in $x = 0$. Per risolvere il problema sfruttiamo l'informazione che ψ è lo stato fondamentale, quindi in particolare è un autostato dell'hamiltoniana, il che significa che vale

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(x) = E_0\psi(x)$$

Inoltre conosciamo la forma di $\hat{\mathcal{H}}$, per cui possiamo riscrivere tale equazione nella forma

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right] \psi(x) = E_0\psi(x)$$

e a partire da tale relazione possiamo scrivere

$$V(x)\psi(x) = \left(E_0 - \frac{\hat{p}^2}{2m} \right) \psi(x)$$

In generale sarà possibile trovare $V(x)$ a patto che $\psi(x)$ sia diversa da zero, e in questo caso la funzione d'onda è diversa da zero per qualsiasi valore di x , quindi possiamo scrivere

$$V(x) = \frac{\left(E_0 - \frac{\hat{p}^2}{2m} \right) \psi(x)}{\psi(x)}$$

Attenzione! Quando scriviamo quest'ultima espressione non possiamo semplificare $\psi(x)$, in quanto \hat{p}^2 è un operatore differenziale.

Capitolo 2. Problemi unidimensionali

Calcoliamo $-\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x)$:

$$\begin{aligned}-\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x) &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2}{2m} N \frac{\partial}{\partial x} [-4\lambda x^3 e^{-\lambda x^4}] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} N (-12\lambda x^2 + 16\lambda^2 x^6) e^{-\lambda x^4} \\ &= \frac{8\hbar^2 \lambda^2}{m} \left(x^6 - \frac{3}{4\lambda} x^2 \right) \psi(x)\end{aligned}$$

Notiamo una cosa: siccome il potenziale è proporzionale ad un operatore applicato alla ψ diviso la ψ stessa, la costante di normalizzazione N si semplifica, quindi non è nemmeno necessario il suo calcolo.

Inserendo tale risultato nell'espressione di prima troviamo

$$V(x) = E_0 + \frac{8\hbar^2 \lambda^2}{m} \left(x^6 - \frac{3}{4\lambda} x^2 \right)$$

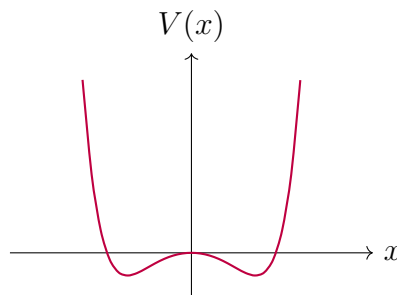
dove abbiamo semplificato la ψ (stavolta lo abbiamo potuto fare perché spuntava fuori a fattore dopo la derivazione).

Se adesso calcoliamo $V(0)$ troviamo che essa è pari a E_0 . In realtà il discorso è un po' al contrario, perché chiaramente il potenziale non potrà dipendere da E_0 : scriviamo il potenziale come

$$V(x) = V(0) + \frac{8\hbar^2 \lambda^2}{m} \left(x^6 - \frac{3}{4\lambda} x^2 \right)$$

e da ciò deduciamo che $E_0 = V(0)$, perché l'esercizio chiedeva specificamente di esprimere l'energia dello stato fondamentale E_0 in termini del valore della funzione del potenziale al punto $x = 0$.

Questo potenziale avrà un andamento di questo tipo:



in quanto per valori grandi di x va come x^6 , mentre per valori piccoli di x si comporta come $-x^2$. Notiamo che nel grafico abbiamo assunto arbitrariamente $V(0) = 0$.

A questo punto facciamo il confronto col caso classico. Calcoliamo la derivata prima

e vediamo dove si annulla³:

$$V'(x) = k \left(6x^5 - \frac{3}{2\lambda} x \right) = 6kx \left(x^4 - \frac{1}{4\lambda} \right)$$

$$\implies V'(x) = 0 \iff x = 0, x = \pm \left(\frac{1}{4\lambda} \right)^{\frac{1}{4}} \equiv \pm x_0$$

con k un certo coefficiente.

Per $x = 0$ abbiamo il massimo, gli altri due valori corrispondono ai due minimi.

Quello che succede ad una particella classica in un potenziale di questo tipo è che quando ha l'energia più bassa sta in un minimo o nell'altro. Infatti, siccome l'energia anche in ambito classico vale $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V$, lo stato di più bassa energia sarà quello avente p e V minimi, che rispettivamente corrispondono ad una particella ferma e che sta ferma in un minimo del potenziale. Quindi le soluzioni di minima energia si hanno per $x = \pm x_0$, dove la particella ha energia pari a $E = V(\pm x_0)$.

Se ciò in meccanica classica ha senso, in meccanica quantistica non può esserci una particella ferma in un minimo del potenziale: il minimo sarà una certa ampiezza.

³In realtà la funzione avrebbe altri due zeri, che però sono complessi quindi non li consideriamo in quanto in tale problema non hanno senso fisico.

Esercizio 2.3 (08/07/2019 n°2)

Una particella unidimensionale è soggetta al potenziale

$$V(x) = -W\delta(x)$$

e si trova in uno stato legato.

Dire se è soddisfatto il Teorema del Viriale. Verificare la risposta con un calcolo esplicito dei valori medi di energia cinetica e potenziale.

Svolgimento

Facciamo una precisazione sulla formulazione del problema: piuttosto che dire che la particella si trova in uno stato legato, sarebbe meglio dire che si trova in un autostato legato. In che senso? Nel senso che se una particella si trova in uno stato legato, questo può essere qualunque: la particella può essere descritta da una funzione d'onda arbitraria fintanto che questa sia normalizzabile, e ciò indipendentemente dall'hamiltoniana. Se poi la funzione d'onda è un'autofunzione allora sarà autostato dell'hamiltoniana, ma se non lo è lo stato va comunque benissimo così com'è. Se ad esempio ci troviamo in un oscillatore armonico e la particella è in uno stato descritto da una gaussiana ma che ha ad esempio la media spostata dal centro o lo scarto quadratico medio più largo di quello che ci si aspetta da un'autofunzione gaussiana, questa non sarà un autostato, ma comunque sarà una funzione d'onda che descrive la particella in maniera ottima.

In poche parole, se il problema dice che la particella si trova in uno stato legato, questo può essere qualunque. Ogni dubbio viene però fugato dalla richiesta successiva, che chiede di dire se è soddisfatto il teorema del Virale: questo infatti in meccanica quantistica è valido solo negli autostati.

In definitiva la prima richiesta del problema è trovare un autostato legato di questa hamiltoniana. Cosa significa legato? Significa che la funzione d'onda è tale che all'infinito vada a zero e quindi si può interpretare come localizzata in una certa regione dello spazio almeno approssimativamente, fatto che garantisce ad essa la qualifica di stato legato.

Attenzione! Stato legato non significa che l'energia è negativa, perché se ad esempio abbiamo una particella di energia -27 eV e ridefiniamo l'energia come $E' = E + 30$ eV, la particella adesso avrà energia E' pari a 3 eV, ma se prima si trovava in uno stato legato rimarrà comunque in tale stato perché non è cambiata la funzione d'onda, quindi è la stessa particella. Dunque in generale per trovarsi in uno stato legato non è necessario che l'energia sia minore di 0, solo che molto spesso noi abbiamo a che fare con potenziali che sono positivi (o che possono essere positivi) come nel caso dell'oscillatore armonico, in cui il potenziale è positivo, l'energia è positiva ma l'oscillatore è evidentemente in uno stato legato perché si trova in uno stato localizzato nello spazio (per quanto possa essere localizzata nello spazio una funzione d'onda quantistica, perché chiaramente ha delle code, però comunque la probabilità di trovare la particella è

molto maggiore in una certa regione della buca dell'oscillatore armonico).
 Studiamo il problema agli autovalori

$$\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

dove

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

Facciamo una prima considerazione: sebbene sia vero che quando abbiamo una delta di Dirac non ha senso dire che essa è una funzione che è nulla ovunque e infinita in un punto, è anche vero che è sicuro che se escludiamo dall'intervallo di integrazione la regione in cui la delta è non nulla, nel resto dello spazio è nulla. Ne segue che se abbiamo un problema in cui il potenziale è una delta in $x = 0$, escludendo la regione in cui la delta può essere non nulla sotto il segno di integrazione (ossia prendiamo solo le regioni per $x > 0$ e per $x < 0$), l'equazione agli autovalori si traduce in

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

e quindi la delta rimane nulla in questo senso. Più tecnicamente significa che se anziché considerare l'integrale esteso da $-\infty$ a $+\infty$ lo estendiamo ad un intervallo che non comprende il punto in cui la delta è definita, allora quell'integrale sarà nullo.

In definitiva per $x > 0$ e per $x < 0$ possiamo risolvere questa equazione, che possiamo riscrivere come

$$\psi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = k^2\psi \quad \text{dove} \quad k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

In particolare se E è positivo k sarà immaginario, mentre se E è negativo k sarà reale. La soluzione più generale di tale equazione è

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

Attenzione! Ancora non abbiamo stabilito che è un generico autostato, perché non abbiamo utilizzato il fatto che c'è una delta di Dirac per $x = 0$.

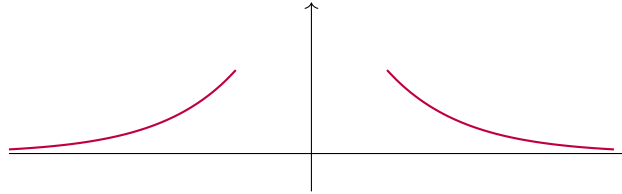
Ricordiamo che noi vogliamo cercare stati legati, i quali, proprio per il concetto di stato legato, non possono avere una corrente di probabilità diversa da zero all'infinito. Se infatti lo stato ha una corrente di probabilità che va verso $\pm\infty$, ciò significa che tale stato ha a tutti gli effetti la probabilità che sta andando verso l'infinito e quindi non può essere un stato legato.

Quindi per cercare stati legati potremmo ad esempio calcolare la corrente di probabilità associata a questo stato e imporre che essa sia nulla agli estremi. Quello che troveremmo, come ci possiamo aspettare, è che la funzione d'onda deve essere reale⁴. Essere una funzione d'onda reale nel nostro caso significa che per $x > 0$ e per $x < 0$ la funzione deve andare a zero, in quanto si deve annullare la probabilità di trovare la

⁴Se la funzione d'onda è reale, non c'è nessuna corrente di probabilità.

Capitolo 2. Problemi unidimensionali

particella. Per annullarsi k deve essere reale, perché se k fosse immaginario rimarrebbe un'oscillazione per $\pm\infty$ che darebbe appunto una corrente. In sostanza agli estremi ci aspettiamo un comportamento del genere:



In definitiva di tutte queste possibili soluzioni, l'unica che rientra nel concetto di stato legato è

$$\psi(x) = \begin{cases} A_+ e^{-kx} & \text{per } x > 0 \\ A_- e^{kx} & \text{per } x < 0 \end{cases}$$

dove k è un numero reale e positivo. Notiamo che con tale definizione la funzione d'onda si annulla per $\pm\infty$.

Potevamo giungere a tale conclusione anche attraverso la seguente considerazione: noi sappiamo che l'energia E è reale, quindi $\sqrt{-E}$ potrà essere soltanto reale o immaginaria. Ne segue che la soluzione generale dell'equazione di Schrödinger del problema in esame (per $x > 0$ e per $x < 0$) sarà costituita da una somma o di esponenziali reali o di esponenziali oscillanti. Quest'ultime hanno correnti non nulle all'infinito e ivi non si annullano, quindi quelle non possono essere stati legati e dunque necessariamente k deve essere reale e l'energia dovrà essere negativa.

Arrivati a questo punto dobbiamo fare due cose: la prima è determinare A e ciò è semplice perché la funzione deve essere continua; in particolare dovrà esserlo per $x = 0$, da cui otteniamo che $A_+ = A_-$.

È da notare che se nel potenziale fosse stata presente la derivata della delta di Dirac, cioè $\delta'(x)$, la funzione d'onda non sarebbe stata continua. Più in generale possiamo dire che

- Se il potenziale non ha singolarità del tipo delta di Dirac o sue derivate, deve essere continua la funzione e la sua derivata prima;
- Se nel potenziale c'è una delta di Dirac la derivata prima non deve essere necessariamente continua, ma deve essere comunque continua la funzione d'onda;
- Se nel potenziale ci sono derivate prime della delta di Dirac, allora si può perdere pure il requisito di continuità.

Tornando al problema, abbiamo visto che la funzione è continua, dunque il coefficiente deve essere lo stesso a destra e a sinistra; in altre parole, possiamo scrivere $\psi(x)$ come

$$\psi(x) = N e^{-k|x|} \quad \text{dove} \quad k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}, E < 0$$

con N coefficiente di normalizzazione.

Vediamo adesso che cosa comporta la presenza della delta di Dirac. Vogliamo imporre che l'equazione di Schrödinger sia soddisfatta pure in $x = 0$, per cui dobbiamo calcolare la derivata seconda di $\psi(x)$. Vedremo in particolare che non possiamo prendere un valore di E qualsiasi, ma essa sarà legata a W .

Innanzitutto riscriviamo la funzione d'onda come

$$\psi(x) = N[e^{-kx}\vartheta(x) + e^{kx}\vartheta(-x)]$$

La derivata prima allora sarà

$$\begin{aligned}\psi'(x) &= N[-ke^{-kx}\vartheta(x) + ke^{kx}\vartheta(-x) + e^{-kx}\delta(x) - e^{kx}\delta(x)] = \\ &= N[-ke^{-kx}\vartheta(x) + ke^{kx}\vartheta(-x) + \delta(x) - \delta(x)] = N[-ke^{-kx}\vartheta(x) + ke^{kx}\vartheta(-x)]\end{aligned}$$

dove nel secondo passaggio abbiamo usato le proprietà della delta per cui $f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x)$ e $\delta(-x) = -\delta(x)$.

Facciamo un inciso: in questo caso abbiamo ottenuto due termini contenenti la delta uguali e opposti che quindi si semplificano, ma se avessimo avuto due termini di questo tipo tali da non annullarsi, cioè tali che la loro differenza fosse pari a $\lambda\delta(x)$, nel momento in cui avessimo considerato la derivata seconda avremmo trovato un termine $\lambda\delta'(x)$. La derivata seconda (ce lo dice l'equazione di Schrödinger) è proporzionale al potenziale, pertanto se $\psi'(x)$ ha una delta di Dirac allora $\psi''(x)$ ha una derivata della delta di Dirac che dovrà essere nel potenziale, perché sicuramente questa non potrà essere dovuta a \hat{p}^2 , il quale è un operatore differenziale e ci dà semplicemente la derivata seconda.

È in questo senso che se abbiamo un potenziale che va come $\delta'(x)$ allora possiamo avere una discontinuità nella funzione stessa, perché se abbiamo una $\delta'(x)$ nel potenziale allora $\psi''(x)$ avrà una $\delta'(x)$, quindi $\psi'(x)$ avrà una $\delta(x)$ e quindi integrando ancora una volta ci sarà un gradino nella $\psi(x)$, il che significa che c'è una discontinuità nella funzione. Quindi in questo senso se abbiamo una $\delta'(x)$ allora possiamo avere una discontinuità nella funzione, perché se non abbiamo una discontinuità nella funzione non spunterà mai una $\delta'(x)$.

Calcoliamo la derivata seconda:

$$\begin{aligned}\psi''(x) &= N[k^2e^{-kx}\vartheta(x) + k^2e^{kx}\vartheta(-x) - ke^{-kx}\delta(x) - ke^{kx}\delta(x)] = \\ &= N[k^2e^{-kx}\vartheta(x) + k^2e^{kx}\vartheta(-x) - k\delta(x) - k\delta(x)] = \\ &= k^2 \underbrace{N[e^{-kx}\vartheta(x) + e^{kx}\vartheta(-x)]}_{\psi(x)} - N[k\delta(x) + k\delta(x)] = k^2\psi - 2Nk\delta(x)\end{aligned}$$

Avendo usato le stesse proprietà adoperate nel calcolo precedente. Notiamo che questa volta i termini con la delta non si sommano a zero, e ciò proprio perché c'è una discontinuità nella derivata prima.

Se adesso esplicitiamo k^2 l'equazione diventa

$$\psi''(x) = N\left[-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi - 2Nk\delta(x)\right]$$

Capitolo 2. Problemi unidimensionali

Moltiplicando ambo i membri per $-\frac{\hbar^2}{2m}$ otteniamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E\psi + \frac{\hbar^2 N k}{m} \delta(x)$$

Il termine $-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi$ è proprio $\hat{p}^2 \psi$, per cui portando il termine con la $\delta(x)$ a destra abbiamo

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \psi(x) - \frac{\hbar^2 k N}{m} \delta(x) = E\psi(x)$$

A questo punto, visto che il nostro obiettivo è confrontare tale espressione con l'equazione di Schrödinger e dunque è necessario un termine che dipenda da $\psi(x)$, facciamo la seguente considerazione: nel termine con la delta abbiamo un fattore N , il quale è uguale a $\psi(0)$; poiché in tale termine è presente una delta, possiamo usare la proprietà adoperata prima ma al contrario e dire che

$$N\delta(x) = \psi(0)\delta(x) = \psi(x)\delta(x)$$

In definitiva l'espressione può essere scritta come

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k}{m} \delta(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

Attenzione! La delta che figura non l'abbiamo calcolata dal potenziale, bensì dalla funzione d'onda: non siamo stati noi a imporre che avessimo un potenziale a forma di delta, abbiamo risolto l'equazione per $x > 0$ e per $x < 0$, abbiamo imposto che la funzione avesse una certa forma visto che volevamo avere degli stati legati e infine abbiamo imposto le condizioni di continuità, ma la delta di per sé l'abbiamo trovata dalla derivata della funzione d'onda.

Tale espressione ci dà un'informazione in più sul problema, perché se la confrontiamo con l'equazione di Schrödinger otteniamo

$$-\frac{\hbar^2 k}{m} \delta(x) = -W\delta(x) \implies W = \frac{\hbar^2 k}{m} = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \frac{\hbar^2}{m}$$

da cui segue che possiamo avere soltanto un valore dell'energia tale per cui questa uguaglianza sia verificata, il quale si ricava essere

$$W^2 = \frac{2m|E|}{m} \hbar^2 \implies |E| = \frac{mW^2}{2\hbar^2}$$

Quindi non possiamo avere un'energia arbitraria: essa sarà legata a W tramite questa relazione. In particolare essa sarà l'autovalore dello stato legato.

Passiamo alla seconda parte del problema. Dobbiamo innanzitutto dire se è in generale soddisfatto il teorema del Viriale e poi verificare se è soddisfatto con un calcolo esplicito. Ricordiamo che il teorema del Viriale ci dice che se abbiamo un potenziale del tipo $V = V(\alpha \mathbf{r})$ che gode della seguente proprietà

$$V(\alpha \mathbf{r}) = \alpha^k V(\mathbf{r})$$

ovvero che è omogeneo di grado k nelle coordinate, allora vale la seguente relazione

$$k \langle \hat{V} \rangle = 2 \langle \hat{T} \rangle$$

dove k è il grado di omogeneità del potenziale.

Attenzione! La media di \hat{V} e la media di \hat{T} sono rigorosamente calcolate in autostati dell'hamiltoniana, quindi tale relazione non vale in stati che non sono autostati di $\hat{\mathcal{H}}$. La domanda che adesso ci poniamo è se in tale problema abbiamo un potenziale omogeneo. La risposta è sì: la delta di Dirac gode infatti della proprietà

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x)$$

che si può dimostrare nella seguente maniera: consideriamo l'integrale da $-\infty$ a $+\infty$ tra una generica funzione f e $\delta(\alpha x)$ con $\alpha > 0$, avremo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(\alpha x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d(\alpha x)}{\alpha} f\left(\frac{\alpha x}{\alpha}\right) \delta(\alpha x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{\alpha} f\left(\frac{y}{\alpha}\right) \delta(y) = \frac{f(0)}{\alpha}$$

dove abbiamo posto $y = \alpha x$.

Siccome tale relazione vale qualunque sia f , allora $\delta(\alpha x)$ deve essere uguale a $\delta(x)/\alpha$. Quindi in realtà la delta di Dirac in un certo senso è una funzione (sebbene non sia una funzione bensì distribuzione) omogenea di grado -1 . In conseguenza a ciò, nel nostro caso ci aspettiamo che

$$\langle \hat{V} \rangle = -2 \langle \hat{T} \rangle$$

Per verificare tale relazione con un calcolo esplicito operiamo nella seguente maniera: siccome vale la relazione $\langle \hat{T} \rangle = E - \langle \hat{V} \rangle$, possiamo sostituire nell'equazione di sopra e ottenere

$$\langle \hat{V} \rangle = -2(E - \langle \hat{V} \rangle) \implies \langle \hat{V} \rangle = 2E$$

Dimostrare che vale tale uguaglianza sarà allora equivalente a dimostrare che vale il teorema del Viriale per il problema in esame. Abbiamo già calcolato E , dunque ci resta da calcolare soltanto $\langle \hat{V} \rangle$:

$$\langle \hat{V} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx -W \delta(x) |\psi(x)|^2 = -W |\psi(0)|^2 = -W |N|^2$$

e quindi la relazione diventa

$$-W |N|^2 = -\frac{mW^2}{\hbar^2} \implies |N|^2 = -\frac{mW}{\hbar^2}$$

avendo esplicitato E .

A questo punto dobbiamo calcolare la costante di normalizzazione. Ricordando che $\psi(x) = N e^{-k|x|}$ avremo

$$1 = |N|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2k|x|} = 2|N|^2 \int_0^{+\infty} dx e^{-2kx} = \frac{2|N|^2}{2k} = \frac{|N|^2}{k} \implies |N|^2 = k$$

Capitolo 2. Problemi unidimensionali

In definitiva troviamo

$$k = -\frac{mW}{\hbar^2}$$

relazione che è in accordo con quanto trovato prima. Dunque il teorema del Viriale è effettivamente valido.

Esercizio 2.4 (14/11/2024 n°1)

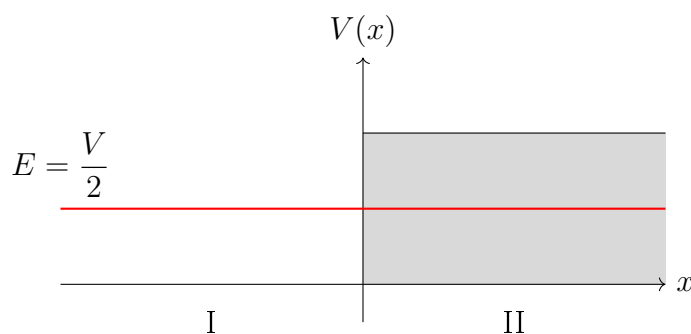
In una dimensione, un fascio di particelle di massa m proviene da $x = -\infty$, con una intensità di N particelle al secondo, e incide sul grado di potenziale

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

con $V > 0$. Sapendo che l'energia delle particelle incidenti è $E = V/2$, determinare il numero di particelle che mediamente si trovano nella regione $x > 0$ in condizioni stazionarie.

Svolgimento

Notiamo innanzitutto che il testo ci dice che N è il numero di particelle al secondo, quindi esso non è altro che la corrente J . Passiamo adesso ad analizzare la situazione: lo spazio è diviso in una regione I, per $x < 0$, in cui il potenziale è nullo e in una regione II, per $x > 0$, in cui il potenziale è uguale ad una costante $V > 0$. Inoltre il fascio ha energia $E = V/2$:



Poiché nella regione II è presente un potenziale e l'energia è minore di questo, la funzione d'onda assume forma

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{-qx}$$

dove C è un coefficiente e Q è una costante reale data da

$$q = \sqrt{\frac{2m(V - E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{mV}{\hbar^2}}$$

Invece, nella regione I abbiamo un'onda incidente e un'onda riflessa, quindi la funzione d'onda è del tipo

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

dove

$$k = \sqrt{\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{mV}{\hbar^2}} \equiv q$$

in quanto in tale regione $V(x) = 0$. Riassumendo, la funzione d'onda è data da

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & \text{per } x < 0 \\ Ce^{-qx} & \text{per } x > 0 \end{cases} \quad \text{dove } q = \sqrt{\frac{mV}{\hbar^2}}$$

Facciamo adesso una considerazione sulle correnti. Nella regione I abbiamo una corrente incidente J_I e una corrente riflessa J_R , date rispettivamente da⁵

$$J_I = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_I^* \frac{d\psi_I}{dx} - \psi_I \frac{d\psi_I^*}{dx} \right) \quad \text{dove } \psi_I(x) = Ae^{iqx}$$

$$J_R = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_R^* \frac{d\psi_R}{dx} - \psi_R \frac{d\psi_R^*}{dx} \right) \quad \text{dove } \psi_R(x) = Be^{-iqx}$$

da cui segue che

$$J_I = \frac{\hbar q}{m} |A|^2, \quad J_R = \frac{\hbar q}{m} |B|^2$$

Notiamo adesso che la corrente incidente non è altro che la corrente pari a N fornita dal testo, per cui possiamo uguagliarle e ricavare $|A|^2$, che sarà dunque pari a

$$|A|^2 = \frac{mN}{\hbar k}$$

Per quanto riguarda la regione II abbiamo una corrente trasmessa J_T che data da

$$J_T = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_T^* \frac{d\psi_T}{dx} - \psi_T \frac{d\psi_T^*}{dx} \right)$$

ma siccome $\psi_T = Ce^{-qx}$ è una funzione reale segue che $J_T = 0$, da cui a sua volta segue che il coefficiente di trasmissione $T = J_T/J_I = 0$. Bisogna però stare attenti al fatto che $T = 0$ non implica che non ci siano particelle nella regione II, in quanto potremmo trovarci nella situazione in cui ci sono particelle ma sono ferme, per cui abbiamo corrente nulla.

Detto ciò, imponiamo la continuità della funzione e della derivata in $x = 0$. Imponendo la continuità della funzione otteniamo la relazione

$$\left. \begin{aligned} \psi_I(0) &= A + B \\ \psi_{II}(0) &= C \end{aligned} \right\} \implies A + B = C$$

⁵Precisiamo che con ψ_I intendiamo la funzione d'onda incidente e con ψ_R quella riflessa.

Capitolo 2. Problemi unidimensionali

Imponendo invece la continuità della derivata otteniamo la relazione

$$\left. \begin{aligned} \psi_I'(0) &= iq(A - B) \\ \psi_{II}'(0) &= -qC \end{aligned} \right\} \implies i(A - B) = -C$$

Mettendo insieme le due relazioni troviamo B in funzione di A :

$$i(A - B) = -(A + B) \implies (i + 1)A = (i - 1)B \implies B = \frac{i + 1}{i - 1} = iA$$

Possiamo ora esprimere C in funzione di A :

$$C = A + B = (1 + i)A$$

A questo punto calcoliamo il numero di particelle nella regione per $x > 0$. Scegliendo la normalizzazione tale che il modulo quadro della funzione d'onda corrisponda alla densità, cioè $\rho = |\psi|^2$, tale numero sarà dato da

$$\text{n}^\circ \text{ particelle} = \int_0^{+\infty} dx |\psi|^2 = |C|^2 \int_0^{+\infty} dx e^{-2qx}$$

Poiché

$$|C|^2 = |1 + i|^2 |A|^2 = 2|A|^2 = \frac{2mN}{\hbar q}$$

avremo

$$\text{n}^\circ \text{ particelle} = \frac{2mN}{\hbar q} \int_0^{+\infty} dx e^{-2qx} = \frac{2mN}{\hbar q} \frac{1}{2q} = \frac{mN}{\hbar} \frac{1}{q^2} = \frac{mN}{\hbar} \frac{\hbar}{mV} = \frac{N\hbar}{V}$$

Verifichiamo quanto trovato mediante un'analisi dimensionale. \hbar/V ha le dimensioni di un tempo mentre N è il numero di particelle al secondo, per cui il risultato ottenuto è corretto.

3 Oscillatore armonico 1D

Esercizio 3.1 (07/10/2020 n°2)

Un oscillatore armonico unidimensionale si trova al tempo $t = 0$ nello stato

$$|\psi(0)\rangle = |3\rangle + i|4\rangle + |5\rangle$$

dove $|n\rangle$ è il generico autostato dell'Hamiltoniano con autovalore E_n ed $n = 0, 1, 2, \dots$. Calcolare al tempo $t > 0$ il valore medio dell'impulso. Senza fare calcoli aggiuntivi, dedurre il valore medio della posizione allo stesso tempo.

Svolgimento

Ci sono due modi per ottenere le due quantità richieste dal problema:

- O le troviamo nella rappresentazione di Schrödinger, quindi prima facciamo evolvere lo stato (cioè calcoliamo $|\psi(t)\rangle$) e poi calcoliamo la media rispetto a tale stato, cioè come $\langle \hat{p}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{p} | \psi(t) \rangle$ e analogamente per \hat{x} ;
- Oppure prima facciamo evolvere gli operatori, cioè calcoliamo $\hat{p}(t)$ e $\hat{x}(t)$ nella rappresentazione di Heisenberg e poi li applichiamo allo stato $|\psi(0)\rangle$ trovando così la media di questi operatori.

È chiaro che in generale i due modi sono equivalenti, cioè le soluzioni che si ottengono sono le stesse. Tuttavia, mentre per la prima parte dell'esercizio, cioè calcolare $\langle \hat{p}(t) \rangle$, i due modi sono esattamente equivalenti, per la seconda parte dell'esercizio, che chiede di ricavare $\langle \hat{x}(t) \rangle$ senza fare calcoli aggiuntivi, è necessario che nella prima parte dell'esercizio si debba aver fatto qualcosa che dia $\langle \hat{x}(t) \rangle$ automaticamente (o quasi). Alla luce di ciò, svolgeremo i calcoli nella rappresentazione di Schrödinger, ma utilizzeremo la rappresentazione di Heisenberg per determinare $\langle \hat{x}(t) \rangle$.

Vediamo innanzitutto in che senso possiamo sfruttare la rappresentazione di Heisenberg per determinare $\langle \hat{x}(t) \rangle$. Il motivo è che¹ utilizzando la rappresentazione di Heisenberg si perviene al risultato

$$\langle \hat{p}(t) \rangle = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$$

¹Nota: di fatto viene richiesto che ci si ricordi le relazioni che stiamo per enunciare, altrimenti è chiaro che per ricavarla l'unico modo è svolgere i conti.

con A e B costanti. A si ricava calcolando tale relazione per $t = 0$, ottenendo immediatamente $A = \langle \hat{p}(0) \rangle$; B si ricava dall'equazione di Heisenberg stessa per $\langle \hat{p}(t) \rangle$, che ci dice che la derivata rispetto al tempo dell'impulso è pari alla forza elastica, e quindi al tempo $t = 0$ avremo

$$\left. \frac{d}{dt} \langle \hat{p}(t) \rangle \right|_{t=0} = -m\omega^2 \langle \hat{x}(0) \rangle$$

Confrontando la derivata dell'espressione di sopra valutata per $t = 0$ con la relazione appena scritta si ricava che $B = -m\omega \langle \hat{x}(0) \rangle$. In definitiva abbiamo

$$\langle \hat{p}(t) \rangle = \langle \hat{p}(0) \rangle \cos(\omega t) - m\omega \langle \hat{x}(0) \rangle \sin(\omega t)$$

In maniera del tutto analoga, utilizzando l'equazione di Heisenberg per $\langle \hat{x}(t) \rangle$, $\frac{d\langle \hat{x}(t) \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{p}(t) \rangle}{m}$, troviamo che

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = \langle \hat{x}(0) \rangle \cos(\omega t) + \frac{\langle \hat{p}(0) \rangle}{m\omega} \sin(\omega t)$$

Pertanto, una volta nota $\langle \hat{p}(t) \rangle$ e identificati $\langle \hat{p}(0) \rangle$ e $\langle \hat{x}(0) \rangle$ con i coefficienti delle funzioni coseno e seno (a meno di eventuali costanti), scrivere $\langle \hat{x}(t) \rangle$ sarà immediato.

Ricordiamo come si ottengono queste relazioni. Nella rappresentazione di Heisenberg, gli operatori sono definiti in questo modo: se abbiamo un certo operatore \hat{A} nella rappresentazione di Schrödinger, ad esso associamo un operatore $\hat{A}_H(t)$ definito come

$$\hat{A}_H(t) = e^{i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}}$$

Attenzione: in questo passaggio stiamo assumendo che $\hat{\mathcal{H}}$ non dipenda dal tempo e che nella rappresentazione di Schrödinger \hat{A} non dipenda dal tempo, altrimenti è necessario adoperare la formula più generale

$$\hat{U}^\dagger(t) \hat{A}(t) \hat{U}(t)$$

dove $\hat{U}(t)$ è un operatore che si ottiene come soluzione dell'equazione differenziale

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{\mathcal{H}}\hat{U} \\ \hat{U}(0) = \mathbb{I} \end{cases}$$

dove 0 è il tempo iniziale t_0 .

Nel nostro caso abbiamo gli operatori $\hat{p}_H(t)$ e $\hat{x}_H(t)$ che sono definiti come

$$\hat{p}_H(t) = e^{i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}} \hat{p} e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}}, \quad \hat{x}_H(t) = e^{i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}} \hat{x} e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}}$$

Per essi è valida l'equazione di Heisenberg, che per un generico operatore \hat{A} è

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}_H(t)]$$

Capitolo 3. Oscillatore armonico 1D

che si ottiene derivando la definizione di operatore nella rappresentazione di Heisenberg:

$$\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \underbrace{\hat{\mathcal{H}} e^{i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}}}_{\hat{A}_H(t)} - \frac{i}{\hbar} \underbrace{e^{i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}}}_{\hat{A}_H(t)} \hat{\mathcal{H}} = \frac{i}{\hbar} (\hat{\mathcal{H}} \hat{A}_H - \hat{A}_H \hat{\mathcal{H}}) = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}_H]$$

In particolare per l'operatore \hat{p} avremo (ricordiamo che l'hamiltoniana è quella di un oscillatore armonico)

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

Notiamo però che nel primo membro del commutatore abbiamo gli operatori nella rappresentazione di Schrödinger, nel secondo in quella di Heisenberg. Come facciamo? Per prima cosa è necessario osservare che, nel caso in cui l'hamiltoniana non dipenda dal tempo, si ha $\hat{\mathcal{H}}_H(t) = \hat{\mathcal{H}}$ in quanto, poiché $\hat{\mathcal{H}}$ commuta con se stessa, è possibile scrivere

$$\hat{\mathcal{H}}_H(t) = e^{i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}} \hat{\mathcal{H}} e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar}} = \hat{\mathcal{H}}$$

Sempre grazie al fatto che l'hamiltoniana commuta con l'operatore di evoluzione temporale, è possibile riscrivere l'equazione di Heisenberg come

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}_H}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}_H(t)] \\ &= \{ \hat{\mathcal{H}} \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} - \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} \hat{\mathcal{H}} \} \\ &= \{ \hat{U}^\dagger \hat{\mathcal{H}} \hat{A} \hat{U} - \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{\mathcal{H}} \hat{U} \} \\ &= \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}] \hat{U} \end{aligned}$$

Tale passaggio è molto utile perché noi sappiamo calcolare il commutatore tra operatori di Schrödinger ma non quello tra un operatore di Heisenberg e un operatore di Schrödinger. Non è comunque necessario farlo esplicitamente quando svolgiamo i calcoli perché vedremo che \hat{U} e \hat{U}^\dagger verranno inglobate in altri termini.

Se applichiamo tale passaggio nel nostro caso si ha

$$\frac{d\hat{p}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2, \hat{p}_H \right] = \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2, \hat{p} \right] \hat{U} = \frac{i}{\hbar} \frac{m \omega^2}{2} \hat{U}^\dagger [\hat{x}^2, \hat{p}] \hat{U}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo sfruttato il fatto che \hat{p}^2 commuta con \hat{p} . Calcoliamo a parte il commutatore:

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

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

Portando tale risultato nell'espressione abbiamo

$$\frac{i}{\hbar} \frac{m \omega^2}{2} \hat{U}^\dagger [\hat{x}^2, \hat{p}] \hat{U} = \frac{i}{\hbar} \frac{m \omega^2}{2} 2i\hbar \hat{U}^\dagger \hat{x} \hat{U} = -m \omega^2 \hat{x}_H$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo usato la definizione $\hat{U}^\dagger \hat{x} \hat{U} = \hat{x}_H$.
In definitiva la prima equazione di Heisenberg è

$$\frac{d\hat{p}_H}{dt} = -m\omega^2 \hat{x}_H$$

Ci aspettavamo questo risultato? Sì, perché il membro di destra è la forza elastica². Tale risultato è dovuto al fatto che abbiamo il commutatore $[\hat{x}^2, \hat{p}]$, e siccome \hat{p} è un operatore differenziale rispetto ad \hat{x} abbiamo sostanzialmente calcolato la derivata spaziale del potenziale che è appunto la forza.

A questo punto calcoliamo $\frac{d\hat{x}_H}{dt}$. Notiamo che in generale non è necessario farlo, però in questo caso l'equazione di Heisenberg trovata poc'anzi dipende da \hat{x}_H , dunque per risolverla dobbiamo conoscere l'evoluzione temporale di \hat{x} e per conoscere quest'ultima dobbiamo calcolare l'equazione di Heisenberg per \hat{x} , in modo da poter disaccoppiare le equazioni.

$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{x}_H] = \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger [\hat{\mathcal{H}}, \hat{x}] \hat{U} = \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2, \hat{x} \right] \hat{U} = \frac{i}{2m\hbar} \hat{U}^\dagger [\hat{p}^2, \hat{x}] \hat{U}$$

Calcoliamo a parte il commutatore:

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

in quanto $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$.

Portando tale risultato nell'espressione

$$\frac{i}{2m\hbar} \hat{U}^\dagger [\hat{p}^2, \hat{x}] \hat{U} = -\frac{i}{2m\hbar} 2i\hbar \hat{U}^\dagger \hat{p} \hat{U} = \frac{1}{m} \hat{U}^\dagger \hat{p} \hat{U} = \frac{\hat{p}_H}{m}$$

in definitiva

$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{\hat{p}_H}{m}$$

e tale risultato ce lo aspettavamo con certezza in quanto l'energia potenziale dell'oscillatore armonico non dipende dall'operatore \hat{p} . Il motivo è che, mentre prima avevamo il commutatore tra \hat{p} e una generica funzione di \hat{x} (e quindi nell'equazione potevano anche comparire termini non classici di ordine superiore in \hbar), se l'energia potenziale non dipende da \hat{p} , dato che in meccanica non relativistica l'energia cinetica è $\frac{\hat{p}^2}{2m}$, nell'equazione di Heisenberg per \hat{x} abbiamo sempre e solo solo il commutatore tra \hat{p}^2 e \hat{x} , che restituisce il risultato di cui sopra.

In che casi possiamo avere un potenziale che dipende dall'impulso? Ad esempio quando abbiamo una particella in un campo elettromagnetico. In tal caso in genere avremo un potenziale vettore, ed è quindi possibile che nell'hamiltoniana ci sia un termine del tipo $\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, il quale è un termine di potenziale che dipende dall'impulso.

²Attenzione! Non è sempre detto che i risultati siano identici al caso classico, perché in meccanica quantistica abbiamo dei commutatori, quindi ci possono essere dei termini di ordine superiore in \hbar .

Capitolo 3. Oscillatore armonico 1D

Tornando al problema, arrivati a questo punto dobbiamo risolvere le equazioni che abbiamo ricavato:

$$\begin{cases} \dot{\hat{p}}_H = -m\omega^2 \hat{x}_H \\ \dot{\hat{x}}_H = \frac{\hat{p}_H}{m} \end{cases}$$

le quali costituiscono delle equazioni differenziali del primo ordine accoppiate. Per disaccoppiarle passiamo alle derivate seconde:

$$\begin{cases} \ddot{\hat{p}}_H = -m\omega^2 \dot{\hat{x}}_H = -\omega^2 \hat{p}_H \\ \ddot{\hat{x}}_H = \frac{\dot{\hat{p}}_H}{m} = -\omega^2 \hat{x}_H \end{cases}$$

In questo modo abbiamo ottenuto due equazioni differenziali del secondo ordine disaccoppiate. In particolare esse sono nella forma dell'equazione dell'oscillatore armonico, di cui conosciamo bene la soluzione. Attenzione però: in generale è possibile pensare di scrivere la soluzione di tale equazione nella forma

$$p(t) = A \cos(\omega t + \phi)$$

Tuttavia non è conveniente adoperare tale espressione per gli operatori del formalismo quantistico, in quanto dovremmo scrivere

$$\hat{p}(t) = \hat{A} \cos(\omega t + \hat{\phi})$$

cioè avremmo il coseno di un operatore, il quale è ben definito se espresso come serie infinita di operatori, quindi è preferibile non adoperarla.

C'è però una forma alternativa, esattamente equivalente alla prima, che è la seguente:

$$\hat{p}(t) = \hat{A} \cos(\omega t) + \hat{B} \sin(\omega t)$$

Questo discorso vale per gli operatori, se invece scriviamo direttamente la relazione per la media dell'operatore avremo

$$\langle \hat{p}(t) \rangle = A \cos(\omega t + \phi)$$

ed essendo A e ϕ dei numeri non abbiamo problemi ad usarla.

Ci si può chiedere perché possiamo passare direttamente dagli operatori alle medie senza problemi. Innanzitutto, chiariamo che se da $\hat{p}(t)$ passiamo a $\langle \hat{p}(t) \rangle$ si avrà, per linearità della media rispetto agli operatori,

$$\hat{p}(t) = \hat{A} \cos(\omega t) + \hat{B} \sin(\omega t) \implies \langle \hat{p}(t) \rangle = \langle \hat{A} \rangle \cos(\omega t) + \langle \hat{B} \rangle \sin(\omega t)$$

Se invece fossimo passati alla media con un'espressione del primo tipo avremmo avuto

$$\hat{p}(t) = \hat{A} \cos(\omega t + \hat{\phi}) \implies \langle \hat{p}(t) \rangle = \langle \hat{A} \cos(\omega t + \hat{\phi}) \rangle$$

e siccome il coseno di un operatore è un operatore, non avremmo potuto spezzare la media del prodotto di operatori nel prodotto di medie di operatori.

Per quanto riguarda l'equazione, possiamo passare direttamente alle medie perché per un generico operatore abbiamo

$$\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}_H(t)]$$

e se prendiamo la media di entrambi i membri rispetto allo stesso stato arbitrario abbiamo:

$$\left\langle \frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}_H(t)] \rangle$$

ma a sua volta si ha

$$\left\langle \frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{A}_H(t) \rangle$$

cioè l'operazione di derivazione rispetto al tempo può essere portato sotto il segno di media. Perché questa cosa? Il motivo è che nella rappresentazione di Heisenberg la media è definita come

$$\langle \hat{A}_H(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{A}_H(t) | \psi(0) \rangle$$

Siccome gli stati non dipendono dal tempo, se in quest'ultima relazione deriviamo ambo i membri possiamo scrivere

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}_H(t) \rangle = \langle \psi(0) | \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) | \psi(0) \rangle = \left\langle \frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} \right\rangle$$

Attenzione! È chiaro che poi nei fatti dobbiamo prima calcolare il commutatore. Ad esempio nel nostro problema abbiamo

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_H \rangle = -m\omega^2 \langle \hat{x}_H \rangle \quad , \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{x}_H \rangle = \frac{\langle \hat{p}_H \rangle}{m}$$

Quindi cosa abbiamo trovato? Siccome queste sono delle equazioni lineari, e la media è lineare rispetto ad una somma di operatori, allora le medie hanno le stesse identiche equazioni degli operatori, dunque la forma delle soluzioni è la stessa.

A questo punto dobbiamo determinare gli operatori \hat{A} e \hat{B} , o equivalentemente i coefficienti $\langle \hat{A} \rangle$ e $\langle \hat{B} \rangle$. Per determinarli calcoliamo ambo i membri per certi valori di t e vediamo cosa risulta. Ad esempio, calcoliamo questi operatori per $t = 0$: si ha

$$\hat{p}_H(0) = \hat{A}$$

Per determinare \hat{B} calcoliamo la derivata e poi la valutiamo al tempo $t = 0$. La derivata è

$$\dot{\hat{p}}_H(t) = -\omega \hat{A} \sin(\omega t) + \omega \hat{B} \cos(\omega t)$$

che per $t = 0$ ci dà

$$\dot{\hat{p}}_H(0) = \omega \hat{B}$$

Perché abbiamo calcolato la derivata prima? Perché l'equazione di Heisenberg iniziale non era un'equazione alle derivate seconde, bensì alla derivata prima; per $\hat{p}_H(t)$ essa

Capitolo 3. Oscillatore armonico 1D

era $\hat{p}_H(t) = -m\omega^2 \hat{x}_H(t)$. Se quindi ora inseriamo nel membro sinistro questa relazione (che deve essere valida per ogni t , quindi in particolare per $t = 0$), avremo

$$-m\omega^2 \hat{x}_H(0) = \omega \hat{B} \implies \hat{B} = -m\omega \hat{x}_H(0)$$

In definitiva abbiamo trovato che

$$\hat{p}_H(t) = \hat{p}_H(0) \cos(\omega t) - m\omega \hat{x}_H(0) \sin(\omega t)$$

relazione che passando alle medie diventa

$$\langle \hat{p}(t) \rangle = \langle \hat{p}(0) \rangle \cos(\omega t) - m\omega \langle \hat{x}(0) \rangle \sin(\omega t)$$

Operando in maniera del tutto analoga per $\hat{x}_H(t)$ troviamo

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = \langle \hat{x}(0) \rangle \cos(\omega t) + \frac{\langle \hat{p}(0) \rangle}{m\omega} \sin(\omega t)$$

Questi sono i risultati enunciati a inizio esercizio.

Svolgiamo quindi il calcolo nella rappresentazione di Schrödinger. Innanzitutto dobbiamo trovare $|\psi(t)\rangle$, il che significa che dobbiamo applicare l'operatore di evoluzione temporale. Prima però dobbiamo ricavare la costante di normalizzazione, che è importante perché se dobbiamo trovare delle medie gli stati devono essere normalizzati. Scriviamo lo stato come

$$|\psi(0)\rangle = N(|3\rangle + i|4\rangle + |5\rangle)$$

e imponiamo che sia normalizzato:

$$1 = \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = |N|^2 \cdot 3 \implies N = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

L'evoluto temporale sarà dunque

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} (|3\rangle + i|4\rangle + |5\rangle)$$

Nota: se avessimo voluto fare il calcolo nella rappresentazione di Heisenberg, il passaggio dell'evoluzione temporale dello stato lo avremmo saltato perché in tale rappresentazione lavoriamo con stati al tempo $t = 0$. Avremmo dovuto invece calcolare le medie degli operatori solo al tempo $t = 0$, per poi utilizzarle nelle espressioni trovate in precedenza per gli operatori ad un generico tempo t .

Notiamo che tra parentesi abbiamo una somma di autostati e l'operatore di evoluzione temporale è lineare, quindi l'applicazione dell'operatore alla somma è uguale alla

somma degli stati su cui è stato applicato l'operatore. In particolare, dato che nella somma figurano solo autostati dell'hamiltoniana avremo³

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(e^{-i\frac{E_3 t}{\hbar}} |3\rangle + ie^{-i\frac{E_4 t}{\hbar}} |4\rangle + e^{-i\frac{E_5 t}{\hbar}} |5\rangle \right)$$

Possiamo semplificare tale stato portando un fattore $e^{-i\frac{E_3 t}{\hbar}}$ a moltiplicare, per cui negli altri esponenziali figureranno rispettivamente dei termini $E_4 - E_3 = \hbar\omega$ ed $E_5 - E_3 = 2\hbar\omega$, quindi

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} e^{-i\frac{E_3 t}{\hbar}} (|3\rangle + ie^{-i\omega t} |4\rangle + e^{-i2\omega t} |5\rangle)$$

A questo punto dobbiamo calcolare $\langle \hat{p}(t) \rangle$, che nella rappresentazione di Schrödinger si calcola come

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

Notiamo che, poiché appare sia lo stato che il suo complesso coniugato, la fase messa in evidenza si cancellerà con il suo coniugato, dunque possiamo ometterla sin da subito. Inoltre prima di svolgere il calcolo facciamo il seguente ragionamento: l'operatore impulso lo scriviamo, visto che stiamo agendo sugli autostati dell'oscillatore armonico, nella rappresentazione degli operatori di creazione e di annichilazione, cioè come

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a - a^\dagger)$$

e applichiamo tale espressione allo stato di destra. Dopo aver fatto ciò, scartiamo gli elementi che danno contributo non nullo, cioè tutti gli stati che vengono fuori dall'applicazione di a o a^\dagger su $|\psi(t)\rangle$ ma che non compaiono a sinistra (ad esempio $a|3\rangle = \sqrt{3}|2\rangle$, ma tale stato non appare a sinistra quindi lo scartiamo)

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}(t) \rangle &= -\frac{i}{3} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\langle 3| - ie^{i\omega t} \langle 4| + e^{i2\omega t} \langle 5|) (a - a^\dagger) (|3\rangle + ie^{-i\omega t} |4\rangle + e^{-i2\omega t} |5\rangle) \\ &= -\frac{i}{3} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\langle 3| - ie^{i\omega t} \langle 4| + e^{i2\omega t} \langle 5|) \cdot \\ &\quad \cdot (ie^{-i\omega t} \sqrt{4} |3\rangle + e^{-i2\omega t} \sqrt{5} |4\rangle - \sqrt{4} |4\rangle - ie^{-i\omega t} \sqrt{5} |5\rangle) \end{aligned}$$

È da notare che, dovendo essere la media reale ed essendoci un fattore i a moltiplicare, ci aspettiamo che l'espressione tra parentesi sia immaginaria pura.

³Ricordiamo che l'esponenziale di un operatore è definito come la sua serie di Taylor, per cui se lo applichiamo ad un autostato avremo

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} \implies e^{\hat{A}} |a\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n |a\rangle}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n |a\rangle}{n!} = e^a |a\rangle$$

cioè l'applicazione dell'esponenziale di un operatore ad un autostato del medesimo operatore restituisce l'esponenziale dell'autovalore.

Capitolo 3. Oscillatore armonico 1D

Svolgendo il calcolo in conclusione si ha

$$\begin{aligned}\langle \hat{p}(t) \rangle &= -\frac{i}{3} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(ie^{-i\omega t} \sqrt{4} - ie^{-i\omega t} \sqrt{5} + ie^{i\omega t} \sqrt{4} - ie^{i\omega t} \sqrt{5} \right) \\ &= -\frac{i}{3} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} i (\sqrt{4} - \sqrt{5}) (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \\ &= \frac{2}{3} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\sqrt{4} - \sqrt{5}) \cos(\omega t)\end{aligned}$$

Per la seconda parte dell'esercizio si confrontano le espressioni ottenute per $\langle \hat{p}(t) \rangle$ nelle due rappresentazioni. Affinché le due espressioni siano uguali, si deve avere $\langle \hat{x}(0) \rangle = 0$, in quanto non compare il seno, e banalmente

$$\langle \hat{p}(0) \rangle = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\sqrt{4} - \sqrt{5})$$

Pertanto

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{4} - \sqrt{5}) \sin(\omega t)$$