Corso:Meccanica quantistica/La struttura formale della meccanica quantistica/Separazione delle variabili e degenerazione. Numeri quantici.

Per illustrare il concetto di *degenerazione* e di *numero quantico*, consideriamo una buca di potenziale infinita in due dimensioni, per semplicità quadrata di lato a e centrata sull'origine:

$$\begin{cases} V(\bar{x},\bar{y}) = 0 & (\bar{x},\bar{y}) \in [-\frac{a}{2},\frac{a}{2}] \times [-\frac{a}{2},\frac{a}{2}] \\ V(\bar{x},\bar{y}) = +\infty & (\bar{x},\bar{y}) \not\in [-\frac{a}{2},\frac{a}{2}] \times [-\frac{a}{2},\frac{a}{2}] \end{cases}$$

Detta E l'energia, l'equazione di Schrödinger è:

$$\hat{H}\psi(x,y) = E\psi(x,y) \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + V(x,y)$$

dove la funzione d'onda $\psi(x,y)$ si deve annullare ai bordi. L'Hamiltoniana del sistema si può scrivere come la somma di due Hamiltoniane $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y$ (*[1]) e risulta:

$$[\hat{H}_x, \hat{H}_y] = 0$$

In base al principio di sovrapposizione dell'equazione di Schrödinger, si può allora considerare una soluzione nella forma:

$$\psi(x,y) = \varphi(x)\chi(y)$$

ovvero come il prodotto di funzioni indipendenti che dipendono da una sola variabile. Da questo segue:

$$\hat{H}\psi(x,y) = \left[\hat{H}_x + \hat{H}_y\right]\varphi(x)\chi(y) = \hat{H}_x\varphi(x)\chi(y) + \varphi(x)\hat{H}_y\chi(y)$$

Supponendo che $\varphi(x)$ e $\chi(y)$ siano autofunzioni della rispettiva parte di Hamiltoniana:

$$\hat{H}_x\varphi_n(x) = E_x^{(n)}\varphi_n(x)$$
$$\hat{H}_y\chi_m(y) = E_y^{(m)}\chi_m(y)$$

per la posizione fatta sulla $\psi(x,y)$ si ricava:

$$\hat{H}\psi(x,y) = [E_x^{(n)} + E_y^{(m)}]\psi(x,y)$$

ovvero, il prodotto di due autofunzioni è un'autofunzione appartenente all'autovalore somma degli autovalori. Vale il viceversa:

$$\hat{H}\psi(x,y) = \left[\hat{H}_x + \hat{H}_y\right]\varphi(x)\chi(y) = E\varphi(x)\chi(y)$$

e dividendo ambedue i membri per $\psi(x,y) = \varphi(x)\chi(y)$:

$$\frac{1}{\varphi(x)}\hat{H}_x + \frac{1}{\chi(y)}\hat{H}_y = E$$

ne segue che i membri a sinistra devono essere separatamente costanti:* [2]

$$\frac{1}{\varphi(x)}\hat{H}_x\varphi(x) = \lambda_1 \qquad ; \qquad \frac{1}{\chi(y)}\hat{H}_y\chi(y) = \lambda_2$$

con $\lambda_1 + \lambda_2 = E$. Ma questo significa che:

$$\hat{H}_x\varphi(x) = \lambda_1\varphi(x) \qquad ; \qquad \hat{H}_y\chi(y) = \lambda_2\chi(y)$$

ovvero, $\varphi(x)$ e $\chi(y)$ sono autofunzioni agli autovalori λ_1 e λ_2 . Questo metodo di ricerca delle soluzioni prende il nome di *metodo di separazione delle variabili. Questo non significa che ogni autofunzione sia esprimibile come prodotto di due autofunzioni e infatti questo in genere non è possibile. Tuttavia, le funzioni espresse nella forma* $\psi_{n,m}(x,y) = \varphi_n(x)\chi_m(y)$ *costituiscono una base, cioé*:

$$\psi(x,y) = \sum_{n,m} c_{n,m}\psi_{n,m}(x,y) = \sum_{n,m} c_{n,m}\varphi_n(x)\chi_m(y)$$

Gli autovalori della buca bidimensionale sono:

$$E_{n_x} = \frac{n_x^2\hbar^2}{2ma^2} \qquad ; \qquad E_{n_y} = \frac{n_y^2\hbar^2}{2ma^2}$$

la cui somma è un autovalore di $\hat{H}$:

$$E = E_{n_x} + E_{n_y} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2\right) \qquad\qquad n_i \in \mathbb{N}$$

Si vede in questo caso la cosiddetta *degenerazione*: diverse combinazioni di n_x e n_y possono dare origine allo stesso autovalore dell'energia. In altri termini, *fissato l'autovalore dell'energia, non è possibile da questo risalire ad uno stato quantistico definito*. In questo caso specifico, i numeri i cui quadrati hanno la stessa somma danno origine allo stesso autovalore dell'energia:

Con la buca centrata intorno all'origine le autofunzioni dei primi due livelli sono date da:

	Ex	Ey	E
non degenere (1,1)	nx=1	ny=1	n=2
2*degenere (2,1) ; (1,2)	nx=2	ny=1	n=5
	nx=1	ny=2	n=5

$$\psi_{1,1}(x,y) = N\cos\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi y}{a} \qquad E = \frac{2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\psi_{2,1}(x,y) = N\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{\pi y}{a} \qquad E = \frac{5\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\psi_{1,2}(x,y) = N\cos\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a} \qquad E = \frac{5\hbar^2}{2ma^2}$$

A un $\bar{y}$ fissato risulta $\psi(x,\bar{y}) = \sum_n c_n(\bar{y})\varphi_n(x)$, dove i coefficienti $c_n(y)$ dipendono da y . Quindi:

$$\psi(x,y) = \sum_{n,m} c_{n,m}\chi_m(y)\varphi_n(x)$$

Una combinazione lineare del tipo:

$$\psi(x,y) = \alpha\psi_{2,1}(x,y) + \beta\psi_{1,2}(x,y)$$

ha ancora lo stesso autovalore, pur non essendo in forma di prodotto di autofunzioni. Lo spettro di $\hat{H}$ è quindi detto *degenere*. Se si considerano però i due operatori $\hat{H}$ e $\hat{H}_x$, questi commutano e pertanto ammettono una base di autovettori in comune. Questa base in comune permette di ottenere gli autovalori n e n_x , dai quali si può quindi ottenere n_y : *se si forniscono due osservabili che commutano è possibile rimuovere la degenerazione. Del tutto in generale, però, un insieme di osservabili che commutano riducono solo la degenerazione.*

Si definisce **insieme di osservabili completo** *un insieme che ha un* **unico** *sistema di autofunzioni in comune. Gli autovalori di questi osservabili sono i cosiddetti* **numeri quantici**, *che definiscono univocamente il sistema.*

[1] Si noti che questo risulta possibile perché il potenziale stesso è separabile in due componenti indipendenti, una lungo x e l'altra lungo y .

[2] Il membro a destra è una costante e il membro a sinistra è composto dalla somma di due termini di due variabili diverse e indipendenti.

1 Fonti per testo e immagini; autori; licenze

1.1 Testo

- **Corso:Meccanica quantistica/La struttura formale della meccanica quantistica/Separazione delle variabili e degenerazione. Numeri quantici.** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_quantistica/La_struttura_formale_della_meccanica_quantistica/Separazione_delle_variabili_e_degenerazione._Numeri_quantici.?oldid=47564 *Contributori:* Toma.luca95 e Mapelli Dario

1.2 Immagini

1.3 Licenza dell'opera