

Meccanica Quantistica



25 gennaio 2022





wikitoLearn
collaborative textbooks

This book is the result of a collaborative effort of a community of people like you, who believe that knowledge only grows if shared.
We are waiting for you!

Get in touch with the rest of the team by visiting <http://join.wikitoLearn.org>

You are free to copy, share, remix and reproduce this book, provided that you properly give credit to original authors and you give readers the same freedom you enjoy.

Read the full terms at <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>



Indice

1	Introduzione	1
1.1	Approccio al corso	1
1.2	La catastrofe ultravioletta	1
1.2.1	La radiazione di corpo nero e la formula di Planck	1
1.2.2	L'ipotesi di Einstein	3
1.2.3	Radiazione di corpo nero in funzione della lunghezza d'onda	5
1.2.4	Esempi e applicazioni	5
1.3	Atomo di Bohr	7
1.3.1	Esperimento di Rutherford	7
1.3.2	L'atomo di Bohr	8
1.3.3	Caratteristiche dell'atomo di Bohr	9
1.3.4	Rate di diseccitazione	11
1.4	L'ipotesi di de Broglie e l'equazione di Schrödinger	12
1.4.1	L'equazione di Schrödinger	14
1.5	La meccanica matriciale di Heisenberg	15
1.5.1	Le proposte di Heisenberg	15
1.5.2	Operatori impulso e posizione	16
1.5.3	Operatori ed elementi di matrice	17
1.5.4	Operatori hermitiani	18
1.5.5	Prodotto righe per colonne	19
1.6	L'interpretazione della funzione d'onda: l'ipotesi probabilistica di Born	20
2	Principio di indeterminazione	23
2.1	Formule di Ehrenfest	23
2.1.1	Formule di Ehrenfest	23
2.2	Principio di indeterminazione	24
2.3	Principio di indeterminazione per osservabili qualsiasi	25

3	Metodo semi-classico	28
3.1	Approssimazione classica	28
3.1.1	Approssimazione WKB	28
3.1.2	Metodo di Hamilton-Jacobi	30
3.1.3	Condizione per WKB	32
3.2	Decadimento alpha	33
4	Potenziali unidimensionali	36
4.1	Considerazioni generali	36
4.1.1	Spettro continuo e spettro discreto	37
4.1.2	Raccordare le soluzioni	38
4.1.3	Quantizzazione di Bohr-Sommerfeld	39
4.1.4	Funzioni d'onda nello spettro continuo	39
4.2	Buche di potenziale	41
4.2.1	Buca infinita	41
4.2.2	Buca finita	42
4.2.3	Buca infinita simmetrica	44
4.2.4	Doppia buca di potenziale	45
4.2.5	Buca di potenziale infinita tridimensionale	48
4.3	Oscillatore armonico unidimensionale	49
4.3.1	Oscillatore armonico "secondo" Heisenberg	49
4.3.2	Oscillatore armonico "secondo" Schrödinger	52
4.4	Potenziale delta	54
5	Potenziali centrali	56
5.1	Momento angolare orbitale	56
5.1.1	Definizione di momento angolare	56
5.1.2	Il momento angolare genera rotazioni	59
5.1.3	Il momento angolare è hermitiano	59
5.1.4	Invarianza dell'hamiltoniana sotto rotazioni	60
5.1.5	Spoiler: manca qualcosa	60
5.2	Trattazione in coordinate sferiche	60
5.2.1	Momento angolare in coordinate sferiche	60
5.2.2	Laplaciano in coordinate sferiche	61
5.2.3	Equazione di Schrödinger in coordinate sferiche	62
5.3	Armoniche sferiche	62
5.3.1	Equazione di Schrödinger radiale	63



5.3.2	Costruzione delle armoniche sferiche	64
5.3.3	Uso delle armoniche sferiche oltre la meccanica quantistica	67
5.4	Proprietà delle armoniche sferiche	68
5.4.1	Ortogonalità	68
5.4.2	Parità	69
5.5	Atomo di idrogeno	69
5.5.1	Transizioni e parità	70
5.6	Oscillatore armonico tridimensionale	71
6	Principi generali della teoria delle trasformazioni	74
6.1	Teoria di Dirac	74
6.2	Principi degli spazi di Hilbert	75
6.2.1	Indipendenza lineare	75
6.2.2	Stati vettori	76
6.2.3	Probabilità	76
6.2.4	Stati vettori continui	77
6.3	Varie ed eventuali sugli stati	78
6.3.1	Operatori lineari	78
6.3.2	Notazione di Dirac	79
6.3.3	Diadi	79
6.3.4	Matrice densità	80
7	Trasformazioni di simmetria	82
7.1	Operatori di simmetria	82
7.2	Traslazioni spaziali	83
7.2.1	Traslazioni finite	84
7.2.2	Onde di Bloch	84
7.3	Traslazioni temporali	85
7.4	Trasformazioni di Galileo	87
8	Teoria del momento angolare	89
8.1	Spin e rotazioni	89
8.1.1	La prima proposta di spin	89
8.1.2	Simmetria per rotazioni	90
8.2	Momento angolare totale	92
8.2.1	Diversi momenti angolari	92
8.2.2	Componenti del momento angolare, operatori di scala	94
8.2.3	Autovalori degli operatori di scala	96



8.3	Matrici di Pauli, esperimento di Stern-Gerlach	97
8.3.1	Matrici di Pauli	97
8.3.2	Esperimento di Stern-Gerlach	98
8.3.3	Interazione spin-orbita	99
8.4	Somma di momenti angolari	99
8.5	Tornando alla separazione di riga	102
8.6	Stati invarianti sotto rotazioni	103
8.6.1	Applicazioni alle armoniche sferiche	104
9	Spinori, particelle identiche, simmetrie interne	106
9.1	Spinori	106
9.2	Ottenere uno stato richiesto	109
9.3	Particelle identiche	110
9.4	Distribuzioni di Fermi-Dirac e Bose-Einstein	113
9.5	Isospin	113
9.6	Simmetrie interne	115
9.6.1	Scrivere matrici a traccia nulla	117
10	Teoria delle perturbazioni	118
10.1	Rottura spontanea della simmetria	118
10.2	Teoria delle perturbazioni al primo ordine	118
10.2.1	Caso degenere	120
10.2.2	Caso non degenere	120
10.3	Teoria delle perturbazioni al secondo ordine	121
10.4	Teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo	122
10.5	Radiazione monocromatica e regola d'oro di Fermi	123
11	Appendice: tabelle e formulari	127
11.1	Tabella delle costanti fondamentali in meccanica quantistica	127
11.2	Lista delle grandezze in funzione delle costanti fondamentali	127
11.3	Armoniche sferiche	128
11.4	Formulario generale	129
11.4.1	Commutatori	129
11.4.2	Principio di indeterminazione	129
11.4.3	Formule di Ehrenfest	129
11.4.4	Atomo di Bohr	129
11.4.5	Approssimazione semiclassica	130
11.4.6	Buche di potenziale	130



11.4.7 Oscillatore armonico	130
11.4.8 Atomo di idrogeno	131
11.4.9 Matrici di Pauli	131
11.4.10 Distribuzioni statistiche	132
11.4.11 Teoria delle perturbazioni	132
12 Fonti per testo e immagini; autori; licenze	133
12.1 Testo	133
12.2 Immagini	136
12.3 Licenza dell'opera	137



Capitolo 1

Introduzione

1.1 Approccio al corso

Questo corso è impostato per essere un primo approccio alla teoria della meccanica quantistica vista in chiave moderna, con le soluzioni classiche all'equazione di Schrödinger e il moderno formalismo con lo spazio di Hilbert.

Il testo fa ampio uso di nozioni matematiche che si danno per acquisite dal lettore. Il primo capitolo del testo ripercorre velocemente i primi anni del novecento, il periodo in cui la teoria quantistica nasce e inizia a formarsi, illustrando le idee e le innovazioni che hanno potuto dar vita alla teoria moderna, che usa un elegante formalismo matematico sfruttando lo spazio di Hilbert, trattata nei capitoli successivi.

1.2 La catastrofe ultravioletta

1.2.1 La radiazione di corpo nero e la formula di Planck

Tra gli aspetti più studiati dalla fisica negli ultimi anni del XIX secolo vi era la radiazione di corpo nero. Prendiamo una cavità (per comodità la consideriamo cubica di lato L) ad alta temperatura, densa di radiazione elettromagnetica e studiamo la *densità di energia di radiazione* in un volume infinitesimo per frequenze comprese tra ν e $\nu + d\nu$ alla temperatura T , comunemente nota come $\rho(\nu, T)d\nu$; questa era stata misurata sperimentalmente, quindi si cercava una trattazione teorica che concordasse con i dati.

Un calcolo classico di questa radiazione lo si deve a Lord Rayleigh. Si può pensare che all'interno del volume vi siano i radiazioni descrivibili come moti ondulatori di frequenza di modo normale e che nel loro complesso siano descritti dalla serie di Fourier di tali oscillazioni.

$$F(r) = \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

Poiché il cubo è di lunghezza finita, così come la lunghezza d'onda della radiazione, si ha che lo spigolo deve essere un multiplo intero della lunghezza d'onda $L = n\lambda$



da cui si ricava $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}$. Per lo stesso motivo, anche le condizioni ai bordi saranno ben definite $F(0) = F(L)$.

Il vettore $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ è un vettore di interi. Oltre ciò, vanno considerate le due possibili polarizzazioni della radiazione. Dall'ottica si ha che:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{nc}{L}$$

Ogni modo normale occupa un volumetto nello spazio dei vettori \mathbf{n} pari a $4\pi n^2 dn$ (corrispondente alla superficie di una sfera; se integrato, restituisce il volume della sfera), quindi potremo scrivere il numero dei modi normali compreso tra le frequenze ν e $\nu + d\nu$, in breve $N(\nu)d\nu$ come:

$$N(\nu)d\nu = 2 \cdot 4\pi n^2 dn = 8\pi \underbrace{\left(\frac{L^2 \nu^2}{c^2}\right)}_{n^2} \underbrace{\left(\frac{L}{c} d\nu\right)}_{dn} = 8\pi \left(\frac{L}{c}\right)^3 \nu^2 d\nu$$

Il fattore 2 a moltiplicare è giustificato dalle due possibili polarizzazioni della radiazione elettromagnetica; in questo modo abbiamo calcolato il numero dei modi normali compresi tra le frequenze interessate.

Dalla meccanica statistica, ad ogni sistema assimilabile a una somma di oscillatori armonici in cui può essere definita univocamente una temperatura T si associa un'energia che risulta essere, semplicemente, proporzionale alla temperatura stessa tramite la costante di Boltzmann; in formule risulta l'espressione semplice $\bar{E}(T) = k_B T$, che deriva dalla risoluzione di:

$$\bar{E}(T) = \frac{\int_0^\infty e^{-\frac{E}{k_B T}} E dE}{\int_0^\infty e^{-\frac{E}{k_B T}} dE} = k_B T$$

Abbiamo adesso tutti gli ingredienti per poter calcolare la densità di energia volumica $\rho(\nu, T)d\nu$: questa sarà l'energia di ogni modo normale, moltiplicata per il numero dei modi normali, tutto ovviamente mediato sul volume della scatola (che abbiamo posto per comodità L^3):

$$\rho(\nu, T)d\nu = \frac{\bar{E}(T) N(\nu)d\nu}{L^3} = \frac{8\pi k_B T \nu^2 d\nu}{c^3}$$

Questa è anche nota come **formula di Rayleigh-Jeans**. La formula dipende da ν^2 e, nonostante concordasse con i dati per le basse frequenze, quando si passava ad alte frequenze le cose non tornavano: infatti, supposto che nella cavità vi siano tutte le frequenze possibili, integrando su queste otterremo ovviamente infinito $\int_0^\infty \rho d\nu = \infty$ per la dipendenza da ν^2 mentre sperimentalmente si verifica che la radiazione per alte frequenza si annulla.

Il calcolo classico non sembrava avere difetti di sorta, e l'incongruenza suscitò così tanto scalpore da essere passata alla storia come **catastrofe ultravioletta**. A risolvere il problema intervenne Max Planck nel 1900, il quale propose la funzione seguente, nota come **formula di Planck**, per risolvere l'incongruenza:



$$\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Questa formula non ha un ragionamento dietro o una dimostrazione a supporto: non è altro che un aggiustamento manuale della formula classica da parte di Planck. Infatti, per basse frequenze, dove la formula classica funzionava bene, si può espandere l'esponenziale al denominatore come $e^{\frac{h\nu}{k_B T}} \approx 1 + \frac{h\nu}{k_B T}$, riottenendo la formula classica:

$$\frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{1 + \frac{h\nu}{k_B T} - 1} = \frac{8\pi k_B T \nu^2 d\nu}{c^3}$$

Ad alte frequenze l'esponenziale al denominatore tende ad abbassare la radiazione e i dati risultarono in perfetto accordo con questa formula, permettendo anche di ricavare la costante h che viene chiamata **costante di Planck**, pari a:

$$h = 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 6.6 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{s}$$

Questa formula funziona particolarmente bene; oltre a interpolare alla perfezione i dati sperimentali, infatti, l'energia totale di radiazione non diverge:

$$\int_0^\infty \rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \frac{\nu^3 d\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} < \infty$$

Per risolvere l'integrale operiamo per sostituzione di variabile, ponendo $x = \frac{h\nu}{k_B T}$, da cui $\nu = \frac{k_B T}{h} x$ e $d\nu = \frac{k_B T}{h} dx$; andando a sostituire, otteniamo:

$$\int_0^\infty \rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{k_B T}{h}\right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{8\pi^5 k^4}{15c^3 h^3} T^4 = 7.56 \cdot 10^{-15} \frac{\text{erg}}{\text{cm}^3 \text{K}^4} \cdot [T^4(\text{K})]$$

Quindi, abbiamo ottenuto una formula che funziona bene, resta solo da capire *perché* funziona. Planck stesso provò a giustificare la sua formula paragonando l'energia al burro: nel mondo ne esiste a tonnellate, ma viene venduto solo a pacchetti da 200 grammi. In parole più fisiche, Planck ipotizzava che l'energia fosse continua, ma che lo scambio di energia dovesse avvenire solo per pacchetti.

1.2.2 L'ipotesi di Einstein

Einstein invece estremizzò questa ipotesi, affermando che non è lo scambio di energia a essere quantizzato, ma che **l'energia stessa lo fosse**, e che a ogni frequenza di radiazione ν corrispondesse un pacchetto di energia $h\nu$; per una data frequenza ci sono n "quanti di luce", che poi verranno chiamati **fotoni**, per cui si associa a quella frequenza l'energia $E = nh\nu$. Per la fisica classica l'energia era una quantità *continua*: si poteva assorbire o emettere energia in modo continuo senza alcun vincolo, quindi questa ipotesi faceva cadere uno dei capisaldi della fisica per come era allora conosciuta, e all'inizio non venne presa sul serio.



Lo stesso Einstein confermò la quantizzazione dell'energia tramite l'effetto fotoelettrico: colpendo un metallo con radiazioni, si vide che, al di sotto di una frequenza minima ν_{\min} non accadeva nulla; quando invece questa frequenza minima veniva superata, si riuscivano ad estrarre elettroni dal materiale, e questi elettroni avevano proprio energia pari a $E = h(\nu - \nu_{\min})$

Possiamo calcolare l'energia media di ogni fotone, semplicemente dividendo l'energia totale per l'energia caratteristica; teniamo conto in questo calcolo della quantizzazione di Einstein: non ci saranno più integrali bensì sommatorie.

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{kT}} (nh\nu)}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{kT}}} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \left[\ln \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu\beta} \right) \right] = \\ &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \left[\ln \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-h\nu\beta} \right)^n \right) \right] = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \left(\frac{1}{e^{-A} - 1} \right) = \\ &= \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \neq kT \end{aligned}$$

Dove abbiamo considerato $A = \nu h\beta$; osserviamo che questa energia media è diversa da quella che abbiamo poco fa ricavato seguendo il calcolo classico.

Con questo calcolo si spiega anche la presenza di un fattore ν^3 nella formula di Planck: un fattore ν^2 ci è dato dalla formula classica della radiazione di corpo nero, mentre il restante termine ν^1 ci viene dall'energia media dei fotoni; in sintesi, l'ipotesi di Einstein spiega anche la legge di Planck.

L'esistenza dei fotoni venne confermata dall'**effetto Compton**: usando raggi X, ovvero fotoni molto energetici assimilabili a proiettili che venivano sparati sulle particelle di un gas, si studiava l'urto tra fotone ed elettrone in maniera relativistica, e i risultati sperimentali confermarono queste previsioni teoriche. Vediamolo in breve.

La prima legge da tener conto è la conservazione dell'energia: un fotone di energia $h\nu$ urta un elettrone, che consideriamo fermo, con energia mc^2 : da questa interazione ne esce un fotone con diversa energia $h\nu'$ e un elettrone in movimento:

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$$

L'altra legge che entra in gioco è la conservazione dell'impulso; consideriamo \mathbf{n} un versore che ci indica semplicemente la direzione in cui viaggia il fotone; l'elettrone è fermo prima dell'urto:

$$\frac{h\nu}{c} \mathbf{n} + 0 = \frac{h\nu'}{c} \mathbf{n}' + \mathbf{p}$$

Da questa relazione ricaviamo l'impulso dell'elettrone \mathbf{p} e lo inseriamo nella conservazione dell'energia; posto $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' = \cos \theta$, dove θ è l'angolo di scattering del fotone, possiamo trovare la frequenza del fotone scatterato dopo l'urto:

$$\nu' = \frac{\nu}{1 - \frac{h\nu}{mc^2} (\cos \theta - 1)}$$



Un caso particolare è quando $\theta = \pi$, in questo caso si ha $\lambda' = \lambda + 2\lambda_c$, dove λ_c è detta **lunghezza d'onda Compton** e vale:

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 2,4 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

Tutte queste previsioni teoriche furono confermate sperimentalmente, dando un'ulteriore prova dell'esistenza dei fotoni e, quindi, della quantizzazione dell'energia.

1.2.3 Radiazione di corpo nero in funzione della lunghezza d'onda

Possiamo anche riscrivere la densità di radiazione in funzione della lunghezza d'onda, posto $\nu = \frac{c}{\lambda}$; avremo quindi $d\nu = d\left(\frac{c}{\lambda}\right) = -\frac{c}{\lambda^2} d\lambda$. In questo ci andrebbe un segno negativo davanti, ma se le frequenze si integrano da 0 a ∞ , le lunghezze d'onda andrebbero integrate da ∞ a 0: invertendo gli estremi di integrazione questo segno scompare, ottenendo:

$$\rho(\lambda, T) d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{d\lambda}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$

Anche questa ha un equivalente classico, nota col nome di **formula di Rayleigh**:

$$\rho(\lambda, T) d\lambda = \frac{8\pi kT}{\lambda^4} d\lambda$$

La curva descritta dalla $\rho(\lambda, T)$ ha un massimo assoluto, che si ha in corrispondenza della lunghezza d'onda $\lambda \approx 0,29 \frac{\text{cm}}{[T(\text{K})]}$ (a temperatura ambiente); la coda della curva va all'infinito poi come λ^{-4} . Variando la temperatura, il picco si sposta; questo non è un effetto casuale: l'energia cresce linearmente con la temperatura $E \sim T$, ma la proporzionalità con la lunghezza d'onda è inversa $E \sim \frac{1}{\lambda}$; mettendo assieme le due cose, otterremo che $\lambda \sim \frac{1}{T}$.

1.2.4 Esempi e applicazioni

Esempio (1.1)

Vogliamo calcolare il numero di fotoni contenuti tra due diverse lunghezze d'onda λ a una temperatura fissata T . Partendo dalla densità di radiazione possiamo ottenere il numero di fotoni compreso tra due diverse lunghezze d'onda λ e $\lambda + d\lambda$:

$$dN = \frac{\rho(\lambda, T)}{\frac{hc}{\lambda}} = \frac{8\pi}{\lambda^4} \frac{d\lambda}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$

Operando di nuovo lo stesso cambio di variabili $x = \frac{hc}{kT} \frac{1}{\lambda}$, da cui ricaviamo $\lambda = \frac{1}{x} \left(\frac{hc}{kT}\right)$, otteniamo:



$$dN = 8\pi x^2 \left(\frac{kT}{hc} \right)^3 \frac{dx}{e^x - 1}$$

Integrando otterremo:

$$N = \int_0^\infty dx 8\pi \left(\frac{kT}{hc} \right)^3 \frac{x^2}{e^x - 1} = 20,28 \cdot [T^3(\text{K})]$$

L'energia totale di radiazione, che abbiamo calcolato, ci permette adesso di ricavare l'energia media di ogni singolo fotone:

$$\bar{E}(\gamma) = \frac{7,56 \cdot 10^{-15} T^4}{20,28 T^3} = 3,73 \cdot 10^{-16} \text{ erg } [T(\text{K})]$$

La radiazione di corpo nero non soltanto riguarda esperimenti in laboratorio con scatole di radiazione: un esempio perfetto in questo caso è la radiazione di fondo del Big Bang.

Esempio (1.2 Radiazione di fondo del Big Bang)

Gamow e Alpher, a cavallo degli anni '40 e '50 del secolo scorso, stimarono che la radiazione di fondo dell'universo dovesse avere diverse temperature: prima 5K, poi 6K, poi Gamow rifece i calcoli ottenendo 50K. Tutti questi calcoli erano in realtà sbagliati. Penzias e Wilson, negli anni '60 costruirono un'antenna per lo studio di comunicazione satellitare, osservando un costante rumore di fondo a una lunghezza d'onda di circa $\lambda = 7,3 \text{ cm}$; in qualsiasi direzione puntassero l'antenna il rumore era presente sempre allo stesso modo: stavano osservando per la prima volta **la radiazione cosmica di fondo**, la luce primordiale dell'universo. Questo rumore di fondo si distribuisce *alla perfezione*, con un errore vergognosamente piccolo, come una radiazione di corpo nero. Fittando i dati sperimentali si ricavò la temperatura della radiazione: circa 3K. Questa radiazione di fondo **esisteva da quando esisteva l'universo stesso: era stata generata fin dall'inizio**. L'interpretazione dei cosmologi fu che, nei primi istanti di vita di dell'universo, questo fosse pieno di fotoni *molto energetici*, che impedivano la formazione di elementi più pesanti. La cosa strana di tutto ciò era proprio la temperatura.

3K sembrano essere molto, molto pochi per essere in accordo con la teoria che, all'inizio, la radiazione fosse molto energetica. La soluzione pensata fu che, espandendosi, le dimensioni dell'universo fossero state tutte scalate; questa dilatazione genera una sorta di effetto Doppler sulle lunghezze d'onda, scrivibile come $\lambda' = f\lambda$, dove con f consideriamo la scala di dilatazione dell'universo. Quindi, tutti i volumi scalano di un fattore $\frac{1}{f^3}$; le energie dei fotoni scalano come $\frac{1}{f}$ e, quindi, ci si aspetta che la densità di energia volumica scali di un fattore $\frac{1}{f^4}$. Possiamo allora scrivere $\rho' d\lambda' = \frac{1}{f^4} \rho d\lambda$:

$$\rho' d\lambda' = \frac{8\pi hc}{\lambda^5 f^4} \frac{d\lambda}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$

Sostituendo in questa $\lambda = \frac{\lambda'}{f}$, da cui $d\lambda = \frac{d\lambda'}{f}$ otteniamo:



$$\rho' d\lambda' = \frac{8\pi hc}{\lambda'^5 f^4} \frac{\frac{d\lambda'}{f}}{e^{\frac{hc}{kT\lambda'}} - 1} = \frac{8\pi hc}{\lambda'^5} \frac{d\lambda'}{e^{\frac{hc}{\lambda'kT}} - 1}$$

Questa è la formula di Planck, con una temperatura diversa e pari a $T' = \frac{T}{f}$. Quindi, l'universo, espandendosi, ha abbassato la propria temperatura dello stesso fattore con cui si sono dilatate le lunghezze. Essendo l'universo veramente molto ampio, e ipotizzando che all'inizio fosse concentrato in dimensioni piccole, il fatto che la sua temperatura sia circa 3K non sorprende poi così tanto.

È lecito chiedersi come mai ci siano in giro per l'universo ancora i fotoni primordiali; la risposta è che non tutti i fotoni primordiali diedero vita a particelle più pesanti come elettroni e positroni, ma alcuni sopravvissero, continuando a girare indefinitamente. Più l'universo si espandeva, più la loro energia diminuiva, fino a raggiungere il punto in cui non possedevano energia sufficiente a creare altre particelle: a questo punto, l'unico modo di convertirsi diventa quello di essere assorbiti da un nucleo. Quando l'energia scende ancora più in basso, il fotone è costretto a girare per un tempo indeterminato nell'universo: infatti la vita di un fotone libero nel vuoto è indefinita.

Esempio (1.3)

Vogliamo semplicemente calcolare la densità di energia per litro di radiazione cosmica; sfruttando la densità di radiazione già calcolata, otteniamo un valore di circa:

$$7,56 \cdot 10^{-15} \frac{\text{erg}}{\text{cm}^3 \text{K}^4} [T^4(\text{K})] \rightarrow \sim 380 \frac{\text{eV}}{\text{lt}}$$

1.3 Atomo di Bohr

1.3.1 Esperimento di Rutherford

Ernest Rutherford riprese un esperimento di scattering già effettuato da Geiger e Marsden, con delle particelle α (nuclei di elio privi di elettroni) come raggio incidente su una sottilissima lamina d'oro; queste particelle attraversavano la lamina per poi colpire uno schermo di fluoruro di zinco, su cui poteva essere tracciato il passaggio della particella.

L'esperimento si proponeva di ricostruire le figure di scattering (diffusione) delle particelle; usando la meccanica classica per prevedere gli angoli di scattering, i dati sperimentali erano abbastanza in accordo con le previsioni teoriche.

Tuttavia, Geiger e Marsden osservavano solo la diffusione oltre la lamina d'oro, per angoli piccoli; Rutherford provò a studiare anche diffusioni a grandi angoli nonostante la meccanica classica della teoria atomica non prevedesse diffusione di questo tipo. Il calcolo si basava infatti sul modello atomico di Thomson in cui le particelle α di massa molto maggiore degli elettroni (circa 7300 volte maggiore) non avrebbero dovuto risentire dell'urto con questi ultimi a grande angolo. Così non fu, ci furono alcune particelle che vennero addirittura respinte totalmente dalla lamina d'oro.



Questi risultati, che erano completamente senza senso per quanto si sapeva all'epoca della natura atomica, spinsero Rutherford a riformulare l'ipotesi dell'atomo, proponendo, invece del modello a panettone di Thomson, un modello planetario, in cui gli elettroni ruotavano attorno a un nucleo, molto denso e carico positivamente, che si trovava al centro dell'atomo; le particelle α venivano respinte quando urtavano questi nuclei molto pesanti (all'epoca neanche si sapeva quanto potessero pesare i nuclei di oro). Sfruttando queste poche ipotesi e le leggi della meccanica classica si poteva anche ricavare il raggio di urto tra le particelle e i nuclei:

$$\frac{1}{2}m_{\alpha}v^2 = \frac{2e(Z_{\text{oro}}e)}{r} \rightarrow r = \frac{4Z_{\text{oro}}e^2}{m_{\alpha}v^2} \approx 10^{-14} \text{ cm}[Z]$$

Dove Z è un intero che indica il numero di cariche positive presenti nel nucleo (numero atomico). Un raggio di ordine 10^{-16} m era troppo piccolo anche per le scale atomiche. Inoltre, nell'ipotesi di Rutherford, non aveva senso che tutta la carica positiva fosse concentrata in un raggio piccolissimo: l'interazione coulombiana avrebbe dovuto allontanare le cariche positive con una forza pazzesca. Tuttavia, di questi problemi non se ne preoccuparono molto all'epoca, perché intervenne Niels Bohr, allievo di Rutherford, proponendo un modello atomico che diede origine alla meccanica quantistica.

1.3.2 L'atomo di Bohr

Dal modello di Rutherford possiamo immaginare che gli elettroni girino attorno al nucleo, tuttavia non sappiamo null'altro: con che frequenza lo fanno, in che modo, ecc. Il potenziale di Coulomb, che attrae gli elettroni al nucleo, non permette tuttavia orbite chiuse, ma il modello di Rutherford si basava proprio su questa ipotesi fondamentale. Questo andava a cozzare totalmente con l'elettrodinamica classica, secondo cui una particella accelerata avrebbe dovuto irraggiare, per poi collassare sul nucleo. Ciò evidentemente non accadeva altrimenti non sarebbe potuta esistere la materia: gli atomi dovevano essere stabili.

Bohr risponde a questi dubbi in una maniera bellissima: affermò che il moto degli elettroni è diverso da qualsiasi altro moto naturale, e che **il momento degli elettroni è quantizzato**. La quantizzazione del momento di Bohr è in termini di $\hbar = \frac{h}{2\pi}$:

$$m_e v r = n \hbar$$

La costante \hbar fu ricavata successivamente al postulato, vedremo a breve come. L'idea di Bohr è che gli atomi avessero dei livelli discreti di energia, con i fotoni di frequenza ν che si trovavano in questi livelli con energia $h\nu$. Si chiamano quindi E_1, E_2, \dots, E_n **stati energetici dell'atomo**. Questa idea comporta che **non esistano energie più basse della minima energia possibile**, ovvero che lo spettro energetico, oltre a essere discreto, fosse anche *limitato*: insomma, in pochi anni tutte le convinzioni della fisica classica caddero una ad una.

Si può passare da un livello energetico a un altro solo attraverso salti quantizzati. L'atomo, quando si trova nel livello di energia più basso, si dice che si trova **allo**



stato fondamentale (ground state in inglese); se si trova invece in livelli energetici maggiori si dice che è **eccitato**. Cosa accade ad atomi eccitati? I sistemi fisici tendono a spostarsi sempre verso le energie più basse, quindi un atomo eccitato *tende spontaneamente a diseccitarsi*, emettendo fotoni ad energie quantizzate, per poter raggiungere lo stato fondamentale; la frequenza di questi fotoni, supposta una transizione tra lo stato m e lo stato n , con $m > n$ ovviamente interi, è pari a:

$$\nu = \frac{E_m - E_n}{h}$$

Ad ogni transizione di un livello viene emesso un fotone; per poter scendere di due livelli, verranno irraggiati due fotoni di frequenze diverse.

Tutto questo sembra una bella favola, tuttavia all'epoca si studiava moltissimo la spettroscopia atomica; tramite gli spettri atomici si notavano che alcune energie venivano assorbite dagli atomi, mentre altre passavano attraverso questi totalmente ignorate. Queste idee di Bohr riuscirono a spiegare perché ciò avvenisse, e a loro volta i dati sperimentali degli studi spettroscopici confermavano il postulato di Bohr.

1.3.3 Caratteristiche dell'atomo di Bohr

Bohr pensava che gli elettroni compissero orbite circolari, in cui la forza centripeta fosse equilibrata dalla forza di Coulomb:

$$m_e \frac{v^2}{r} = \frac{Z e e}{r^2}$$

Ricordando il postulato sul momento $m_e v r = n \hbar$, possiamo ricavare i raggi delle orbite degli elettroni:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e Z e^2}$$

Quindi la quantizzazione del momento angolare *implica che le orbite siano quantizzate*; per l'atomo di idrogeno, con $Z = 1$, otteniamo un raggio orbitale pari (noto anche come *raggio di Bohr*) a:

$$r_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Ovvero circa mezzo angstrom (ricordiamo $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$); confrontandolo col raggio di collisione tra le particelle α e i nuclei di oro dell'esperimento di Rutherford (circa 10^{-16} m) notiamo che il nucleo risulta essere circa 10000 volte più piccolo dell'atomo stesso, e sembrava assurda una cosa simile.

La quantizzazione del momento angolare non comporta solo la quantizzazione del raggio orbitale, ma anche la quantizzazione dei livelli energetici. L'energia dell'elettrone è data dalla sua energia cinetica più l'energia potenziale, che in questo caso è il potenziale di Coulomb:



$$E = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r}$$

Dove abbiamo utilizzato l'ipotesi che la forza centripeta uguagli la forza di Coulomb $\frac{m_e v^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$. Sostituendo in questa equazione il raggio orbitale quantizzato otteniamo i **livelli energetici dell'atomo**:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 m_e e^4}{n^2 \hbar^2}$$

Osserviamo innanzitutto che è un'energia negativa e, al crescere di n , tende a 0. Inoltre, sostituendo $n = Z = 1$ otteniamo il valore energetico dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno, pari circa a:

$$E_0 = -13.6 \text{ eV}$$

Questa è a volte anche chiamata **costante di Rydberg** e indica l'energia che bisogna fornire a un atomo di idrogeno per ionizzarlo completamente. Dall'espressione dei livelli energetici possiamo anche ricavare la frequenza di un fotone emesso quando l'atomo passa da uno stato E_n a E_{n-1} :

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{Z^2 e^4 m_e}{2\hbar^2 h} \left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

La costante \hbar , come abbiamo già accennato, non è stata ricavata immediatamente; per poterlo fare si è fatto uso del **principio di corrispondenza**. Ad esempio, nel caso sia $n \gg 1$, avremo uno stato energetico con energia ancora negativa $E_n < 0$, ma sarà prossima ad essere nulla: ci troviamo quindi in uno stato in cui l'atomo è quasi slegato. Bohr propose che, più si cresce coi livelli energetici, più le orbite degli elettroni somigliano a quelle della meccanica classica, così come la frequenza. Riprendendo la dipendenza da n che compare nella formula della frequenza:

$$\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} = \frac{n^2 - n^2 - 1 + 2n}{n^2(n-1)^2} \rightarrow \frac{2n}{n^4} = \frac{2}{n^3}$$

Dove abbiamo considerato $n \gg 1$. Sostituendola nell'espressione della frequenza:

$$\nu = \frac{Z^2 e^4 m_e}{\hbar^2 h n^3}$$

Possiamo tuttavia ricavare la frequenza anche come $\nu = \frac{v}{2\pi r}$; al raggio sostituiamo il raggio orbitale quantizzato, mentre per la velocità possiamo sfruttare la relazione del momento angolare quantizzato $m_e v r = n\hbar$, da cui ricaviamo:

$$\begin{aligned} v &= \frac{Ze^2}{n\hbar} \\ r &= \frac{n^2 \hbar^2}{m_e Ze^2} \end{aligned} \quad \nu = \frac{v}{2\pi r} = \frac{Z^2 e^4 m_e}{2\pi \hbar^3 n^3}$$



Confrontando queste due espressioni per la frequenza, osserviamo che differiscono per un fattore $2\pi\hbar$:

$$2\pi\hbar = h \rightarrow \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Ricavata così la costante, si procede a fare i calcoli teorici e le previsioni, per poi confrontarle con i dati sperimentali delle spettroscopie, ritrovando una perfetta corrispondenza.

1.3.4 Rate di diseccitazione

Abbiamo detto che gli atomi possono diseccitarsi naturalmente, senza stimoli esterni. Possiamo quindi studiare il rate di atomi che sono passati da un livello m a un livello n in un dato tempo t , che indichiamo come A_m^n .

Tuttavia, oltre che avvenire per via spontanea la diseccitazione può essere anche indotta. Al contrario, invece, per eccitare un atomo occorre stimolarlo fornendogli l'energia giusta per permettere la transizione. Indichiamo i rate di atomi che hanno compiuto la transizione per via indotta con $B_m^n\rho(\nu_{n,m},T)d\nu$ per la diseccitazione indotta e $B_n^m\rho(\nu_{m,n},T)d\nu$ per l'eccitazione.

Possiamo studiare la corrispondenza di questi rate per atomi investiti da radiazione elettromagnetica:

$$N_m (A_m^n + B_m^n\rho) = N_n B_n^m\rho$$

Dove con N_m indichiamo il numero di atomi nello stato m e N_n il numero di atomi nello stato n . Posto $\nu_{n,m} = \frac{E_m - E_n}{h}$, sappiamo dalla meccanica statistica che vale:

$$e^{-\frac{h\nu_{n,m}}{kT}} \approx \frac{N_m}{N_n} \propto \frac{e^{-\frac{E_m}{kT}}}{e^{-\frac{E_n}{kT}}}$$

Quindi possiamo scrivere il rate di atomi diseccitati per via spontanea come:

$$A_m^n = \frac{8\pi h\nu_{n,m}}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu_{n,m}}{kT}} - 1} \left(e^{\frac{h\nu_{n,m}}{kT}} \cdot B_n^m - N_m^n \right)$$

Vogliamo avere questo rate indipendente dalla temperatura; affinché ciò avvenga, deve essere $B_n^m = B_m^n$; se ciò avviene (e sperimentalmente è confermato), avremo allora:

$$A_m^n = \frac{8\pi\nu_{n,m}^3}{c^3} B_m^n$$

Esempio (1.4)

Consideriamo adesso un sistema semplificato, con due soli livelli energetici, che viene esposto a radiazione. Poiché è presente una densità di radiazione $\rho(\nu, T)$,



sono possibili sia emissioni spontanee che indotte. Possiamo allora scrivere un'equazione differenziale per la popolazione di atomi che si trovano nello stato 2:

$$\begin{aligned} \dot{N}_2 &= -N_2\rho B_2^1 + N_1\rho B_1^2 - N_2A_2^1 = \\ &= B_1^2 \left[-N_2 \left(\rho + \frac{8\pi h V_{1,2}^3}{c^3} \right) + N_1\rho \right] \end{aligned}$$

Poniamo $x = N_2$, otterremo un'espressione del tipo $\dot{x} = -xA + B$; operiamo un cambio di variabile ponendo $-dt = \frac{dx}{Ax-B}$, da cui otteniamo che $\frac{1}{A} \ln(Ax - B) = -t + c$, in definitiva $Ax - B = ce^{-tA}$. Come condizioni iniziali poniamo che non ci siano atomi al livello 2, quindi $x(0) = 0$, da cui ricaviamo che $c = -B$. Questo ci porta all'espressione della popolazione degli atomi nel livello energetico 2:

$$N_2 = x = \frac{B}{A} (1 - e^{-tA}) = \frac{N_1}{1 + \frac{8\pi h V_{1,2}^3}{c^3} \rho}$$

Da questo otteniamo che N_2 non è confrontabile con N_1 , ovvero **non si può invertire la popolazione**. Questo limite fenomenologico ha bloccato per anni la costruzione dei laser (i quali si basano proprio sul principio di inversione della popolazione: infatti i laser non sono altro che fasci coerenti e monocromatici di fotoni, ovvero un fascio di fotoni tutti in fase tra loro con la stessa frequenza), che richiesero più tempo per poter essere ottenuti.

1.4 L'ipotesi di de Broglie e l'equazione di Schrödinger

Un'altra delle idee che rinnovarono il modo di pensare la fisica e la natura stessa è di de Broglie, il quale cercava di trovare una spiegazione al postulato di Bohr sulla quantizzazione del momento angolare. L'idea è semplice: come la luce ha una doppia natura ondulatoria e corpuscolare, anche gli elettroni (e le particelle in generale) si comportano sia come onde che come corpuscoli. Che gli elettroni potessero essere delle onde non sembrava plausibile, tuttavia questa ipotesi fu poi confermata dagli esperimenti sulla diffrazione di Germer, Davisson e Thomson.

Classicamente, possiamo scrivere un'onda piana come:

$$e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)}$$

Inoltre, de Broglie sosteneva che la quantità (ω, \mathbf{k}) fosse un quadrivettore. Per gli elettroni era già noto il quadrivettore (E, \mathbf{p}) . La base su cui (ω, \mathbf{k}) è un quadrivettore è che, come sosteneva de Broglie, vale la relazione:

$$(E, \mathbf{p}) \sim \hbar(\omega, \mathbf{k})$$

Di queste erano già note le relazioni per i fotoni:



$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \cdot 2\pi\nu = \hbar\omega$$

$$|\mathbf{p}| = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} = \hbar|\mathbf{k}|$$

Da questo punto in poi si iniziò a parlare di **onda dell'elettrone**, studiando la diffrazione e l'interferenza degli elettroni, che sono studi alla base della fisica dello stato solido.

Tutto questo servì a de Broglie per spiegare la quantizzazione del momento angolare di Bohr; supponendo che l'elettrone compisse un moto circolare, l'onda dell'elettrone risulta essere *un'onda stazionaria* tale che $2\pi r = n\lambda$, ovvero la circonferenza percorsa dall'elettrone è un multiplo intero della sua lunghezza d'onda. Poiché $p = \hbar k = \hbar \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) = \frac{\hbar n}{r}$, si riottiene il postulato di Bohr $mvr = n\hbar$.

Ma che vuol dire che l'elettrone ha caratteristiche ondulatorie? Infatti l'elettrone è localizzato, mentre le onde piane sono dei concetti totalmente delocalizzati per definizione; tuttavia si può sempre costruire un **pacchetto d'onda** (consideriamo il caso unidimensionale per semplicità, nel caso a tre dimensioni è esattamente la stessa cosa solo che compaiono i vettori):

$$\psi(x, t) = \int g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

In questa espressione la funzione $g(k)$ si chiama **modulazione** e definisce la "forma" e l'espressione matematica del pacchetto d'onda.

I pacchetti d'onda possono essere riscritti in termini di tutte le variabili del problema k, ω, x, t semplicemente effettuando le varie trasformate di Fourier. Sviluppando l'espressione della pulsazione $\omega(k)$ in Taylor attorno al valore k_0 otterremo $\omega(k) = \omega(k_0) + \omega'(k_0)(k - k_0)$; la funzione d'onda acquisirà l'espressione:

$$\psi(x, t) = e^{-it(\omega(k_0) - k_0\omega'(k_0))} \int g(k) e^{ik(x - \omega'(k_0)t)} dk$$

Supponendo adesso che la funzione $\psi(x, t)$ si trovi, al tempo $t = 0$ nell'origine $x = 0$, la funzione che otterremo è *ben lontana dall'essere un'onda piana*. A tempi successivi la funzione si troverà nella posizione soddisfatta dall'equazione $x - \omega'(k_0)t = 0$, ovvero in $\frac{x}{t} = \omega'(k_0) = \frac{\partial\omega}{\partial k}(k_0)$; questa viene chiamata **velocità di gruppo** del pacchetto d'onda:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t} = \frac{1/\hbar \partial E}{1/\hbar \partial p}$$

Sostituendo $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ otterremo:

$$\frac{\partial E}{\partial p} = \frac{1}{2\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}} 2pc^2 = \frac{p}{E}c^2 = v_{\text{gruppo}}$$

Quindi, la descrizione tramite onde piane degli elettroni non rappresenta un problema così grande, basta creare dei pacchetti d'onda che si muovono con una propria velocità di gruppo.



Alle ipotesi di de Broglie seguirono esperimenti che studiavano le figure di scattering degli elettroni, che risultano simili ai raggi x.

Cosa sono, rispetto a ψ , l'energia E e l'impulso \mathbf{p} ? Possiamo entrambi ottenerli dalla funzione d'onda semplicemente operando:

$$\begin{cases} -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{p}\psi(\mathbf{x}, t) \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) = E\psi(\mathbf{x}, t) \end{cases}$$

Si può risolvere questo sistema di equazioni differenziali, la soluzione sarà:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(\mathbf{x})$$

Inoltre, da questo sistema otteniamo due informazioni fondamentali: **gli operatori** impulso e energia possono essere espressi come $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ e $E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$. Vedremo successivamente come lavorare con questi operatori.

La funzione d'onda può quindi essere fattorizzata tra parte spaziale e parte temporale. Questo discorso, tuttavia, non vale per tutti i problemi in cui si studia la funzione d'onda, ma vale solo per quei problemi modellizzabili con onde piane, ovvero solo per **particelle libere**. Come vedremo quando studieremo l'atomo d'idrogeno, troveremo un'espressione ben diversa.

1.4.1 L'equazione di Schrödinger

Cosa succede quando l'elettrone interagisce con un potenziale qualsiasi? Erwin Schrödinger risolse questo problema ricavando un'equazione differenziale che, secondo lui, dovesse essere l'equazione del moto dell'elettrone nell'atomo di idrogeno. L'**equazione di Schrödinger** è un'equazione *classica*: lui voleva ottenere un'equazione relativistica, ma facendo i calcoli si ritrovò cose strane, come masse negative e cariche opposte, abbandonando quindi questo tentativo e ripiegando nel caso "semi-classico". Paul Dirac, pochi anni dopo, pubblicò i suoi studi sulla meccanica quantistica relativistica: le cose strane che si ritrovava Schrödinger non erano errori di calcolo, solo cose strane come antimateria e antiparticelle. L'equazione di Schrödinger *per una particella libera* è una semplice riedizione delle ipotesi di de Broglie, ovvero del sistema di equazioni differenziali in cui compaiono per la prima volta gli operatori impulso e posizione:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x})$$

Essendo una riedizione dei risultati di de Broglie, l'onda piana risolve questa equazione differenziale. L'operatore $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ non è altro che l'*hamiltoniana* $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m}$ (l'operatore $\Delta = \nabla^2$ è il laplaciano); questa equazione quindi non uguagli altro che l'hamiltoniana di un sistema alla sua energia, per farla facile. In questo caso, però, l'hamiltoniana, l'energia, l'impulso e la posizione sono **operatori lineari** che si comportano in un determinato e specifico modo.

Quando la particella interagisce con un potenziale cambia anche la sua hamiltoniana, e quindi l'equazione di Schrödinger sarà diversa:



$$E\psi(\mathbf{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x})$$

Il potenziale $V(\mathbf{x})$ va sostituito, di volta in volta, col potenziale del particolare sistema fisico che si sta studiando; vedremo successivamente delle soluzioni all'equazione. Questa equazione vale per particelle non libere: risolvendola si trova una funzione d'onda ψ che *non può in alcun modo* essere un'onda piana.

Schrödinger pose due condizioni fondamentali a questa equazione. La prima è che la funzione $\psi(x)$ è a valore singolo, ovvero è un funzione; la seconda invece è:

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \psi(\mathbf{x}) = 0$$

Ovvero tutte le funzioni d'onda sono nulle all'infinito; per fare un paragone classico, in questo caso Schrödinger non ha fatto altro che estremizzare il problema della corda vibrante a una lunghezza infinita. Tuttavia questa semplice condizione ha conseguenza **fondamentali** per tutta la fisica moderna.

L'idea di Schrödinger era quella di rimpiazzare tutte le ipotesi precedenti, quelle di de Broglie e di Bohr, con questa equazione differenziale. Egli risolse l'equazione differenziale inserendo il potenziale di Coulomb $V(|\mathbf{x}|) = -\frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|}$, e trovò un risultato sorprendente: la soluzione trovata rispetta le condizioni all'equazione solo per determinati livelli discreti di energia, pari a:

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{mc^2}{2} \alpha^2$$

(in questa espressione $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ è la **costante di struttura fine**, è una costante adimensionale e compare in quasi tutte le teorie moderne della fisica). Questi livelli energetici non sono altro che quelli dell'atomo di Bohr. Quindi l'idea di Schrödinger di sostituire questa equazione alle ipotesi precedenti funziona: le idee di Bohr infatti, come abbiamo già detto, trovano conferma negli esperimenti di spettroscopia. Questo fa, quindi, della teoria di Schrödinger una teoria apprezzabile e valida, e comunemente è indicata come **teoria ondulatoria della meccanica quantistica**.

1.5 La meccanica matriciale di Heisenberg

1.5.1 Le proposte di Heisenberg

Facciamo un passo indietro, abbandonando le ipotesi ondulatorie, per introdurre gli studi di Werner Heisenberg. Egli partì dal problema dell'atomo di Bohr procedendo con un approccio oscuro e totalmente diverso, per poter capire il perché i livelli energetici fossero discreti e perché i fotoni emessi avessero una frequenza pari a $\nu = \frac{\Delta E}{h}$.

Dalla teoria classica dell'elettrodinamica sappiamo la potenza irraggiata da una carica elettrica accelerata, che è pari a:



$$\mathcal{P} = \frac{2e^2}{3c^3} |\ddot{\mathbf{x}}|^2$$

Questo era il problema principale dell'atomo di Bohr: gli elettroni non irraggiavano. Heisenberg, per studiare le transizioni tra due livelli energetici $E_m \rightarrow E_n$ scrive tutto in termini di vettori complessi, quindi possiamo scrivere:

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_{n,m} + \mathbf{x}_{n,m}^*$$

L'asterisco indica il complesso coniugato; questi vettori indicano l'ampiezza della transizione. Secondo Heisenberg, più è grande \mathbf{x} più è alta la possibilità che avvenga la transizione. Per Heisenberg la potenza va considerata in ogni transizione tra i livelli m e n e propone un *ansatz* (ovvero un'idea), cioè che:

$$x_{n,m} \propto e^{-\frac{i(E_m - E_n)}{\hbar}t} = e^{i\omega_{n,m}t}$$

In questa abbiamo considerato $\hbar\omega_{n,m} = E_m - E_n$. Questa è una semplice proposta, nulla da dimostrare. Possiamo allora riscrivere la potenza irraggiata in una transizione:

$$\mathcal{P}_{m \rightarrow n} = \frac{2e^2}{3c^3} \omega_{n,m}^4 (\dot{x}_{n,m}^2 + 2\mathbf{x}_{n,m} \cdot \mathbf{x}_{n,m}^* + \mathbf{x}_{n,m}^* \cdot \mathbf{x}_{n,m})$$

Considerate le medie temporali e le frequenze realistiche delle transizioni i termini quadratici non sono importanti. L'espressione della potenza diventa quindi:

$$\mathcal{P}_{m \rightarrow n} = \frac{4e^2}{3c^3} \omega_{n,m}^4 |\mathbf{x}_{n,m}|^2$$

Questa allora si può utilizzare per calcolare i rate di diseccitazione degli atomi:

$$A_m^n = \frac{\bar{\mathcal{P}}_{m \rightarrow n}}{\hbar\omega} = \frac{4e^2}{3c^3} \frac{\omega_{n,m}}{\hbar} |\mathbf{x}_{n,m}|^2$$

Tutto questo però è oscuro, che roba so sti $x_{n,m}$, cose a caso...? Intervenne Max Born, il quale propose a Heisenberg che questi fattori altro non fossero che *elementi di matrici*. Heisenberg accettò la proposta, allargandola e proponendo che fossero realizzazione di operatori **hermitiani**, in sintesi i vettori sono del tipo:

$$\mathbf{x}_{n,m} = \mathbf{x}_{n,m}^*$$

1.5.2 Operatori impulso e posizione

Avendo posto $x_{n,m} \propto e^{-i\omega_{n,m}t}$ possiamo scrivere l'impulso utilizzando la formula classica $\mathbf{p} = M\dot{\mathbf{x}}$, ottenendo quindi $p_{n,m} = -iM\omega_{n,m}x_{n,m}$.

Abbiamo detto che questi non sono altro che matrici, quindi possiamo scrivere il prodotto $\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}$ come un prodotto righe per colonne:



$$\sum_m p_{n,m} x_{m,k}$$

In questo caso di m sappiamo solo che un set di intero e corrisponde ai livelli energetici, quindi non sappiamo quanti sono, ma sappiamo solo essere discreti. Questa espressione si può semplificare come fece lo stesso Heisenberg:

$$(px)_{n,m} = \sum_m p_{n,m} x_{m,n} = \sum_m -iM\omega_{n,m} x_{n,m} x_{m,n} = -iM \sum_m \omega_{n,m} |x_{n,m}|^2$$

Nell'ultimo passaggio abbiamo sfruttato l'hermitianità degli operatori per cui $x_{m,n} = x_{n,m}^* = x_{n,m}$.

Possiamo fare la stessa cosa per il prodotto $(xp)_{n,m}$; infatti non è detto che siano uguali, perché non è scontato che due matrici (o operatori) commutino tra loro:

$$(x,p)_{n,m} = -iM \sum_m \omega_{m,n} |x_{m,n}|^2$$

Il fattore $|x_{n,m}|^2$ è identico a $|x_{m,n}|^2$, ma $\omega_{n,m} \neq \omega_{m,n}$ (infatti differiscono di un segno). Andando a sottrarre otterremo:

$$(px)_{n,m} - (xp)_{n,m} = -2iM \sum_m \omega_{n,m} |x_{n,m}|^2$$

Si vede che questa differenza è in realtà proporzionale a \hbar , possiamo quindi scrivere, in termini di operatori *vettoriali* (che quindi hanno come autovalori dei vettori) $\underline{\mathbf{P}}, \underline{\mathbf{X}}$:

$$\underline{\mathbf{P}}\underline{\mathbf{X}} - \underline{\mathbf{X}}\underline{\mathbf{P}} = -i\hbar\mathbb{I}$$

Con \mathbb{I} indichiamo la matrice identità. Gli operatori impulso e posizione, quindi, **non commutano**; infatti, i due operatori sono così definiti:

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{P}}\psi(\mathbf{x}, t) = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{x}, t) \\ \underline{\mathbf{X}}\psi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{x}\psi(\mathbf{x}, t) \end{cases}$$

Questi non sono quindi impulso e posizione classici: in quel caso avremmo potuto invertire l'ordine senza problemi, ma in questo caso l'impulso è un operatore differenziale, e quando opera su $\underline{\mathbf{P}}(\underline{\mathbf{X}}\psi)$ agisce su $\mathbf{x}\psi(\mathbf{x}, t)$, che non dà lo stesso risultato di $\underline{\mathbf{X}}(\underline{\mathbf{P}}\psi)$. Poiché quindi posizione e impulso non commutano, **in meccanica quantistica non ha senso parlare né di spazio delle fasi né di traiettorie**. Questo non è un problema dovuto all'osservatore o agli errori di misura di un esperimento, è una caratteristica **intrinseca** della funzione d'onda.

1.5.3 Operatori ed elementi di matrice

Cosa sono gli elementi di matrice? Schrödinger affronta il problema in maniera diretta, chiedendosi: cosa è $x_{n,m}$? In che senso $x_{n,m} \propto e^{-i\omega_{n,m}t}$?



Egli propose che ogni elemento di matrice $A_{n,m}$ derivasse dalla soluzione di:

$$A_{n,m} = \int \psi_n^*(q) \underline{A} \psi_m(q) dq$$

Dove q è una qualsiasi variabile. In parole, l'elemento di matrice $A_{n,m}$ è l'azione dell'operatore \underline{A} sullo stato m , poi proiettato sullo stato n (o viceversa). L'aver potuto fattorizzare la parte temporale dalla parte spaziale nella funzione d'onda $\psi_n(\mathbf{x}, t) = e^{-i\omega_n t} \psi(\mathbf{x})$ ci permette di scrivere:

$$\int \psi_n^*(\mathbf{x}, t) \underline{A} \psi_m(\mathbf{x}, t) = \int \left(e^{-i\frac{E_n}{\hbar} t} \psi_n(\mathbf{x}) \right)^* \underline{A} \left(e^{-i\frac{E_m}{\hbar} t} \psi_m(\mathbf{x}) \right) d^3x = e^{-i\frac{E_m - E_n}{\hbar} t} \int \psi^* \underline{A} \psi d^3x$$

Ora la transizione di Heisenberg assume un significato diverso: l'elemento di matrice $A_{n,m}$ ci fornisce l'ampiezza della transizione, dove con *ampiezza di transizione* indichiamo **la probabilità che la transizione avvenga** (ne discuteremo meglio nella prossima sezione).

1.5.4 Operatori hermitiani

La definizione di operatore hermitiano è:

$$\int \psi_n^* \underline{A} \psi_m = \int (\underline{A} \psi)^* \psi_m$$

Per esempio, l'operatore posizione è hermitiano:

$$\int \psi_n^* \underline{X} \psi_m = x_{n,m} = \int (\underline{X} \psi_n)^* \psi_m = \left(\int \psi_m^* \underline{X} \psi_n \right)^* = x_{m,n}^* = x_{n,m}$$

Gli operatori hermitiani, oltre ad avere un'importanza rilevante in tutta la teoria quantistica, sono molto comodi proprio per la loro caratteristica di poter passare a destra e a sinistra del prodotto scalare senza particolari controindicazioni, oltre ad avere **autovalori reali**.

Assumiamo adesso che l'operatore hamiltoniana visto nella sezione precedente sia hermitiano, allora potremo scrivere:

$$\left. \begin{aligned} \int \psi_m^* \underline{H} \psi_n &= \int (\underline{H} \psi_m)^* \psi_n = E_m^* \int \psi_m^* \psi_n \\ \underline{H} \psi_n &= E_n \psi_n \rightarrow E_n \int \psi_m^* \psi_n \end{aligned} \right\} (E_n - E_m^*) \int \psi_m^* \psi_n$$

Se $m = n$, avremo che **l'energia è un operatore hermitiano**, e ha quindi autovalori reali. Ora, che l'energia abbia autovalori complessi non si è mai vista come cosa, quindi ci aspettiamo che l'hamiltoniana sia proprio un operatore hermitiano. Questa è definita come:

$$\underline{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x})$$



Il potenziale è un qualsiasi potenziale, e ci interessa solo che sia hermitiano affinché l'hamiltoniana lo sia. Resta quindi da vedere se il laplaciano $\Delta = \nabla^2$ è un operatore hermitiano. Scriviamo:

$$\begin{aligned} (\nabla^2 f)^* g - f^* (\nabla^2 g) &= (\nabla \cdot \nabla f)^* g - f^* (\nabla \cdot \nabla g) = \\ &= \nabla \cdot [(\nabla f)^* g - f^* (\nabla g)] = [(\nabla \cdot \nabla f)^* g + (\nabla f)^* \nabla g - (\nabla f)^* \nabla g - f^* (\nabla \cdot \nabla g)] \end{aligned}$$

Integriamo adesso sul volume dello spazio e applichiamo il teorema della divergenza:

$$\int_V d^3x \nabla \cdot [\dots] = \int_{\partial V} d^2x \hat{\mathbf{n}} \cdot [(\nabla f)^* g - f^* (\nabla g)]$$

Se il volume si estende su tutto lo spazio, l'integrale di superficie è nullo. Le funzioni f, g sono dei prototipi per le funzioni d'onda ψ_n, ψ_m , che rispettano la condizione di Schrödinger di essere nulle all'infinito. Da questo ricaviamo che:

$$\int (\nabla^2 f)^* g = \int f^* (\nabla^2 g)$$

Ovvero il laplaciano è hermitiano quando è soddisfatta l'equazione di Schrödinger. Da questo ricaviamo che anche gli operatori hamiltoniana e energia sono hermitiani e hanno autovalori reali: da questo punto in poi quindi non li indicheremo più con un trattino sotto, e considereremo $\mathcal{H} = \underline{\mathcal{H}}$ e così via per gli altri operatori hermitiani.

Da questa informazione ricaviamo alcune notizie sulle funzioni d'onda ψ che sono le autofunzioni dell'energia; per queste valgono due regole: la prima è che possono sempre essere normalizzate per avere:

$$\int \psi_n^* \psi_n = 1$$

Questo è accessorio e può essere fatto o meno, ma come vedremo nella prossima sezione è molto conveniente farlo. Una caratteristica *non accessoria* è che due funzioni d'onda associate a due diversi autovalori dell'energia sono **ortogonali**:

$$\int \psi_n^* \psi_m = 0$$

Ah, non lo avevamo detto, ma quando scriviamo il simbolo di integrale senza estremi si intende l'integrale su tutto lo spazio. Giusto per saperlo.

1.5.5 Prodotto righe per colonne

Possiamo vedere se funziona il prodotto righe per colonne, che abbiamo usato a inizio sezione. Presi due operatori $\underline{A}, \underline{B}$ vogliamo vedere che:

$$\int \psi_n^* \underline{A} \underline{B} \psi_m = \sum_l A_{n,l} B_{l,m}$$



Possiamo adesso sempre scrivere:

$$\underline{B}\psi_m = \sum_r b_r(m)\psi_r$$

Questa espressione ci dice che stiamo sviluppando la funzione ψ_m sull'insieme delle autofunzioni dell'operatore \underline{B} , moltiplicate per alcuni coefficienti; l'indice r scorre sulle autofunzioni. Posto questo, possiamo allora esplicitare:

$$B_{l,m} = \int \psi_l^* \underline{B}\psi_m = \sum_r b_r(m) \int \psi_l^* \psi_r = \sum_r b_r(m) \delta_{l,m} = b_l(m)$$

Dove $\delta_{l,m}$ è la delta di Kronecker che vale 1 se $l = m$, 0 altrimenti. Ricaviamo da questo calcolo che $b_r(m) = B_{r,m}$, quindi:

$$\underline{B}\psi_m = \sum_r b_r(m)\psi_r = \sum_r B_{r,m}\psi_r$$

Allora possiamo lasciar agire anche l'operatore \underline{A} :

$$\underline{A}\underline{B}\psi_m = \underline{A} \left(\sum_r B_{r,m}\psi_r \right) = \sum_r B_{r,m} \underline{A}\psi_r = \sum_r B_{r,m} \sum_s A_{s,r}\psi_s = \sum_{r,s} A_{s,r} B_{r,m}\psi_s$$

Questo lo sostituiamo nel prodotto scalare che vogliamo verificare fin dall'inizio:

$$\int \psi_n^* \left(\sum_{r,s} A_{s,r} B_{r,m}\psi_s \right) = \sum_{r,s} A_{s,r} B_{r,m} \underbrace{\int \psi_n^* \psi_s}_{\delta_{n,s}} = \sum_r A_{n,r} B_{r,m}$$

Quindi il prodotto righe per colonne funziona, non vi abbiamo venduto fumo quando abbia visto che gli operatori impulso e posizione non commutano.

1.6 L'interpretazione della funzione d'onda: l'ipotesi probabilistica di Born

Alla fine della storia, che roba è ψ ? Qual è il significato fisico associato alla funzione d'onda? Questa, come abbiamo visto, assume la forma di un'onda piana per particelle libere, diverse forme per diversi problemi poi a seconda del potenziale con cui interagisce la particella. Quindi, che senso ha?

Diverse furono le interpretazioni, e la prima fu dello stesso Schrödinger, il quale, in una maniera semiclassica, interpretò la funzione d'onda come *un'onda di pressione in un fluido*, come delle onde che si propagano su una superficie d'acqua. Questa interpretazione però non corrisponde esattamente al comportamento delle particelle come notò subito Max Born, studiando le figure di diffrazione degli elettroni, che si presentano nettamente diversa dalla diffusione classica.

Quando infatti una particella libera, matematicamente descrivibile come un'onda, scattera su un'altra particella l'onda da piana diventa sferica: lo scattering avviene



in tutte le direzioni, ed è come se si fossero formati infiniti fronti d'onda piana. Questo significa che, se interpretiamo la funzione d'onda come una perturbazione in un fluido, dovremmo avere un po' di particella da una parte, un po' da un'altra e così via. Tuttavia nei detector si riscontrava sempre e solo un elettrone intero, che poteva trovarsi in qualsiasi direzione. Di certo non stiamo smembrando l'elettrone per lanciarne pezzettini a destra e a manca, cosa sta succedendo?

Born interpretò in un modo completamente diverso il problema, e tutt'oggi la sua interpretazione dà diversi grattacapi ai filosofi: la funzione d'onda, secondo Born, non è legata in alcun modo a una perturbazione e non ci dice *quanto* della particella si trovi in \mathbf{x} al tempo t , bensì ci indica **la probabilità di trovare la particella in \mathbf{x} al tempo t** .

Quindi alla funzione d'onda è associata una densità di probabilità:

$$dp = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x$$

Ovviamente consideriamo il modulo quadro della funzione d'onda, per evitare funzioni complesse. Però anche qui qualcosa scricchiola, infatti sappiamo che l'evoluzione temporale della funzione d'onda è data da $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$, che è *deterministica* e ha ben poco a che fare con la probabilità. Tuttavia funziona, funziona alla grande, e questa interpretazione ha avuto delle conseguenze incredibili nello svilupparsi della fisica moderna e contemporanea.

Affinché sia una densità di probabilità dobbiamo ovviamente porre la condizione ontologica per eccellenza, ovvero che **la particella esiste**:

$$\int |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x = 1$$

Sappiamo che le autofunzioni di operatori hermitiani possono essere normalizzate: questa ipotesi ci *impone* di farlo.

Potremmo provare a studiare come varia nel tempo la probabilità; ci aspettiamo ovviamente che resti costante nel tempo, altrimenti ci staremmo raccontando un sacco di balle, e infatti:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\int |\psi|^2 \right) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\int \psi^* \psi \right) = \\ &= \int \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \right)^* \psi + \int \psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \right) = \int (-E\psi)^* \psi + \int \psi^* (E\psi) = \\ &= (-E\psi, \psi) + (\psi, E\psi) = -(\psi, E\psi) + (\psi, E\psi) = 0 \end{aligned}$$

Possiamo fare di più, possiamo addirittura introdurre una **corrente di probabilità** e ricavare un'equazione di continuità per la probabilità. Poniamo $p = |\psi|^2$ e vediamo l'evoluzione temporale:

$$\frac{\partial}{\partial t} p = \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) \psi + \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi \right)$$

Moltiplichiamo adesso per $i\hbar$, ottenendo l'operatore energia; sappiamo, dall'equazione di Schrödinger, che $E\psi = H\psi$, e $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$, otterremo:



$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p &= \left(\frac{i\hbar}{2m} \Delta\psi - \frac{i}{\hbar} V\psi \right)^* \psi + \psi^* \left(\frac{i\hbar}{2m} \Delta\psi - \frac{i}{\hbar} V\psi \right) = \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} [(\Delta\psi)^* \psi - \psi^* (\Delta\psi)] = +\frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot [\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*] = \nabla \mathbf{J} \end{aligned}$$

Abbiamo quindi ottenuto una *corrente di probabilità* definita come:

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*)$$

Per cui, **la probabilità è conservata nello spazio e nel tempo** e ce lo assicura la legge di continuità: se ad esempio la probabilità di trovare una particella in un volume diminuisce nel tempo è perché c'è evidentemente un "flusso di probabilità" fuori dal volume, ovvero cresce la probabilità di trovare la particella fuori dal volume considerato.

Possiamo sempre scrivere una funzione d'onda come sovrapposizione di autofunzioni di un sistema completo:

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_n c_n \psi_n \\ H\psi_n &= E_n \psi_n \end{aligned}$$

Con i coefficienti $c_n \in \mathbb{C}$. Sfruttando questa proprietà possiamo procedere ad esprimere la probabilità in termine dei coefficienti delle autofunzioni. Ricordando che $\int \psi_n^* \psi_m = \delta_{nm}$ e $\int |\psi|^2 = 1$, avremo:

$$1 = \int |\psi|^2 = \int \left(\sum_n c_n \psi_n \right)^* \left(\sum_m c_m \psi_m \right) = \sum_{n,m} c_n^* c_m \int \psi_n^* \psi_m$$

Da questa ricaviamo immediatamente che $1 = \sum_n |c_n|^2$. Quindi, ognuno dei coefficienti c_n ci indica la probabilità che, misurando un osservabile, questo si trovi nello stato associato ψ_n .



Capitolo 2

Principio di indeterminazione

2.1 Formule di Ehrenfest

Consideriamo un qualsiasi osservabile fisico. A questo è associato un operatore hermitiano in meccanica quantistica, di cui si può calcolare il valore atteso. Consideriamo la posizione \mathbf{x} , a questo è associato l'operatore hermitiano \mathbf{X} che agendo su una funzione d'onda ha come autovalori le posizioni della particella. Lo stesso si può fare per tutti gli osservabili fisici (impulso, momento angolare, energia ecc).

2.1.1 Formule di Ehrenfest

Le formule di Ehrenfest esprimono la derivata totale rispetto al tempo del valore atteso di posizione e impulso. Partiamo dalla posizione; il valore atteso per definizione è $\langle \mathbf{X} \rangle = \int \psi^* \mathbf{X} \psi$, quindi:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{X} \rangle &= \frac{d}{dt} \int \psi^* \mathbf{X} \psi = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\int \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \right)^* \mathbf{X} \psi + \int \psi^* \mathbf{X} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \right) \right] = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\int (-\mathcal{H}\psi)^* \mathbf{X} \psi + \int \psi^* \mathbf{X} (\mathcal{H}\psi) \right] = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\int \psi^* \mathbf{X} (\mathcal{H}\psi) - \int \psi^* \mathcal{H} \mathbf{X} \psi \right] \end{aligned}$$

L'operatore hamiltoniana agisce sia sulla posizione (che ciccia fuori dopo che l'operatore X agisce sulla funzione d'onda) che sulla funzione d'onda stessa. Sostituendo a $\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\langle \mathbf{x} \rangle)$ nella precedente espressione, osserviamo che il termine potenziale si semplifica, e resta il termine dipendente da Δ . Questo possiamo calcolarlo in una dimensione per poi sommare:

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{X}\psi)_x &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\mathbf{X}\psi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\hat{\mathbf{x}}\psi + x \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) = \\ &= \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} \psi + \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} \psi + x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = 2\hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} \psi + x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \end{aligned}$$



Alla fine, sommando sulle tre componenti, otterremo che $\Delta(\mathbf{X}\psi) = 2\nabla\psi + \mathbf{x}\Delta\psi$. Questo calcolo ci leva di mezzo il secondo termine del nostro calcolo., mentre il primo è semplicemente:

$$\int \psi^* \mathbf{X}(\mathcal{H}\psi) = \int \psi^* \mathbf{X}\Delta\psi$$

Raccogliendo tutti i pezzi al proprio posto otteniamo:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{X} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \left[\int \psi^* \mathbf{x}\Delta\psi - \int \psi^* \mathbf{x}\Delta\psi - 2 \int \psi^* \nabla\psi \right] = \\ &= \frac{1}{m} \int \psi^* (-i\hbar\nabla)\psi = \frac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m} \end{aligned}$$

Passiamo ora al calcolo di $\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle &= \frac{d}{dt} \int \psi^* \mathbf{P}\psi = \frac{d}{dt} \int \psi^* (-i\hbar\nabla)\psi = i\hbar \frac{d}{dt} \int \psi^* (-\nabla)\psi = \\ &= \int \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \right)^* (-\nabla)\psi + \int \psi^* (-\nabla) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \right) = \\ &= \int (-\mathcal{H}\psi)^* (-\nabla)\psi + \int \psi^* (-\nabla)(\mathcal{H}\psi) = \\ &= \int (\mathcal{H}\psi)^* \nabla\psi - \int \psi^* \nabla(\mathcal{H}\psi) \end{aligned}$$

Sempre ricordando la definizione dell'operatore hamiltoniana, osserviamo che, per il teorema di Schwartz sulle derivate composte avremo $\nabla(\Delta) = \Delta(\nabla)$, quindi i termini dipendenti dal laplaciano si semplificano nella precedente espressione, e restano solo i termini dipendenti dal potenziale:

$$\begin{aligned} &\int \psi^* V \nabla\psi - \int \psi^* \nabla(V\psi) = \\ &= \int \psi^* V \nabla\psi - \int \psi^* V \nabla\psi - \int \psi^* (\nabla V)\psi \end{aligned}$$

Concludiamo quindi il calcolo con la soluzione:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = - \langle \nabla V \rangle$$

Queste due espressioni *assomigliano* molto alle leggi di Newton della meccanica classica, ma non lo sono: gli operatori agiscono in maniera differente in quantistica, come abbiamo già detto. Inoltre, queste valgono sotto l'ipotesi che la forza caratterizzata da ∇V non vari troppo nel range in cui ψ è apprezzabile.

2.2 Principio di indeterminazione

Il solo nominare **principio di indeterminazione** porta alla mente una legge intrinseca e fondamentale della meccanica quantistica che ad oggi è nota ai più.



Vediamo in questa breve sezione come Heisenberg ci arrivò e, nella seguente, come sia applicabile a diversi osservabili.

Definendo $\Delta x = \sqrt{\langle (\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle)^2 \rangle}$ e $\Delta p = \sqrt{\langle (\mathbf{p} - \langle \mathbf{p} \rangle)^2 \rangle}$, Heisenberg *calcolò* che:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

L'indeterminazione sulla precisione di misura di posizione e impulso è mutua, e non si può scendere sotto il valore minimo (detto stato di minima indeterminazione, in cui vale anche l'uguaglianza, che vedremo nella prossima sezione). In meccanica classica la precisione di una misura dipende dalla "bravura" del misuratore e dalla capacità di minimizzare gli errori; in meccanica quantistica, invece, **l'indeterminazione è una caratteristica intrinseca della natura stessa.**

Vediamo come Heisenberg capì la natura dell'indeterminazione; a discapito di quanto si pensi, ci arrivò in base a considerazioni prettamente fisiche, più che matematiche. Supponiamo di voler misurare il $\Delta \mathbf{x}$ di una particella: per farlo dovremo utilizzare una certa onda luminosa con λ molto piccola, così da avere informazioni più precise. In prima grezza approssimazione possiamo quindi porre $\Delta x \geq \lambda$.

Misurando la posizione con la luce, però, colpiamo la particella con dei fotoni, che sono più energetici più è bassa la lunghezza d'onda; questi fotoni possono scatterare sulla particella e fornirle quindi energia, modificando il suo impulso, la cui incertezza sarà quindi il minimo valore della relazione di de Broglie $\Delta p \geq k\hbar = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$. Mettendo assieme le relazioni otteniamo:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \cdot \lambda \sim o(\hbar)$$

La misura precisa è stata poi calcolata nello stato di minima indeterminazione, come vedremo nella seguente sezione. Inoltre, secondo la teoria di Heisenberg, *lo stato viene perturbato dalla misura* in ogni caso.

2.3 Principio di indeterminazione per osservabili qualsiasi

Si può estendere il principio di indeterminazione a qualunque coppia di osservabili il cui commutatore non è nullo. Supponiamo due osservabili, a cui è associato un operatore hermitiano, tali che $[A, B] \neq 0$. Definiamo i **valori di aspettazione** e le **incertezze** dei due come:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= (\psi, A\psi) & (\Delta A)^2 &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \\ \langle B \rangle &= (\psi, B\psi) & (\Delta B)^2 &= \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2 \end{aligned}$$

Dimostriamo adesso che vale la seguente disuguaglianza, in cui l'uguaglianza la si ha solo nello *stato di minima indeterminazione*:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} | \langle [A, B] \rangle |$$



Per dimostrarla iniziamo col definire due nuove variabili $\bar{A} = A - \langle A \rangle$ e $\bar{B} = B - \langle B \rangle$; con una veloce verifica troviamo che $(\Delta A)^2 = \langle \bar{A}^2 \rangle$, lo stesso per l'altro operatore $(\Delta B)^2 = \langle \bar{B}^2 \rangle$. Possiamo inoltre verificare che:

$$[\bar{A}, \bar{B}] = [(A - \langle A \rangle), (B - \langle B \rangle)] = [A, B]$$

(ricordiamo che i valori di aspettazione sono due numeri reali, e tutti i reali commutano con operatori lineari). Definiamo anche $C = \bar{A} + i\lambda\bar{B}$ e $C^\dagger = \bar{A} - i\lambda\bar{B}$, con i unità immaginaria e $\lambda \in \mathbb{R}$. Il fatto che A, B siano due operatori hermitiani non implica che lo sia anche C , come possiamo facilmente notare:

$$\langle CC^\dagger \rangle = (\psi, CC^\dagger\psi) = (C^\dagger\psi, C^\dagger\psi) \geq 0$$

Esplicitando:

$$\langle CC^\dagger \rangle = \langle (\bar{A} + i\lambda\bar{B}) \rangle = \langle (\bar{A}^2 + \lambda^2\bar{B}^2 - i\lambda[\bar{A}, \bar{B}]) \rangle = f(\lambda)$$

$f(\lambda)$ è una funzione di variabile reale positiva o nulla, essendo un prodotto scalare; presenta quindi un minimo ricavabile ponendo $\frac{df}{d\lambda} = 0$, avremo

$$\lambda_0 = \frac{i \langle [\bar{A}, \bar{B}] \rangle}{2 \langle \bar{B}^2 \rangle}$$

(si può verificare che è un minimo calcolando la derivata seconda $f''(\lambda_0)$). Poiché deve essere un reale, ne ricaviamo che $\langle [\bar{A}, \bar{B}] \rangle$ è un numero immaginario puro. Calcolando il valore della funzione nel minimo otteniamo la tesi:

$$(\Delta A \Delta B)^2 \geq -\frac{(\langle [\bar{A}, \bar{B}] \rangle)^2}{4}$$

Applicando il caso particolare in cui $A = \mathbf{X}, B = \mathbf{P}$ otteniamo il principio di indeterminazione classico $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$. Possiamo ora cercare lo stato di minima incertezza per questo caso particolare; consideriamo il caso unidimensionale (il caso tridimensionale è uguale), in cui avremo $\bar{A} = X - \langle X \rangle, \bar{B} = P_x - \langle P_x \rangle$; ricordando il commutatore notevole $[X, P_x] = [\bar{X}, \bar{P}_x] = i\hbar$, riapplicando il ragionamento precedente lo stato di minima incertezza deve soddisfare la condizione $\langle CC^\dagger \rangle = 0$, il che implica $C^\dagger\psi = (\bar{A} - i\lambda_0\bar{B})\psi = 0$. Nel nostro caso $\lambda_0 = -\frac{\hbar}{2\Delta P_x^2}$, allora:

$$\left[(x - \langle x \rangle) - i \left(-\frac{\hbar}{2\Delta P_x} \right) (P_x - \langle P_x \rangle) \right] \psi = 0$$

Ricordando $P_x = -i\hbar\partial_x$. Poniamo le ψ per ipotesi della forma:

$$\psi(x) = e^{i\frac{\langle P_x \rangle}{\hbar}x} \phi(x - \langle x \rangle)$$

Svolgendo le derivate che compaiono, otterremo:

$$\frac{\hbar^2}{2\Delta P_x^2} \frac{d\phi}{dx} = -\bar{x}\phi(\bar{x})$$



(vale $d_x \phi = d_{\bar{x}} \phi$). Integrando per separazione di variabili:

$$\int_{\phi_0}^{\phi} \frac{d\phi'}{\phi} = \int_0^{\bar{x}} -2 \frac{(\Delta P_x)^2}{\hbar^2} \bar{x}' d\bar{x}'$$

Compiendo i calcoli e tralasciando le costanti di integrazione (che vanno tutte a finire poi nella normalizzazione), otteniamo $\phi(x) = \phi_0 e^{-\frac{(\Delta P_x)^2}{\hbar^2} (x - \langle x \rangle)^2}$

Troviamo allora che **lo stato di minima incertezza** è un **pacchetto d'onda gaussiano**:

$$\psi(x) = \phi_0 e^{i \frac{\langle P_x \rangle}{\hbar} x} e^{-\frac{(\Delta P_x)^2}{\hbar^2} (x - \langle x \rangle)^2}$$



Capitolo 3

Metodo semi-classico

3.1 Approssimazione classica

3.1.1 Approssimazione WKB

In questo capitolo tratteremo il **metodo quasi-classico**, meglio conosciuto come **approssimazione WKB**, da Wentzel-Kramers-Brillouin, i nomi di chi per la prima volta ha ipotizzato questo studio (tutti e tre pubblicarono i loro risultati nel 1926, *indipendentemente dagli altri*). Come vedremo nella sezione successiva, questo scherzetto permette nonostante tutto di calcolare con precisione rilevante fenomeni reali come il decadimento alpha.

Passeremo dall'equazione di Schrödinger alle equazioni della meccanica classica imponendo come soluzione dell'equazione di Schrödinger la funzione $\psi = ae^{i\frac{S}{\hbar}}$ con a costante reale e S **azione** del sistema (ricordiamo che \hbar ha le dimensioni di un'azione). Questa funzione possiamo riscriverla come:

$$\psi \approx e^{\frac{iS + \ln(a)\hbar + \hbar^2(\dots)}{\hbar}}$$

Nel limite quasi classico ignoriamo tutti i termini in \hbar^2 e superiori (che da qui in poi quindi non compariranno mai), considerando il limite $\hbar \rightarrow 0$. Applichiamo allora l'equazione di Schrödinger a questa funzione imponendo che ne sia soluzione; procedendo con il membro di destra:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(ae^{i\frac{S}{\hbar}} \right) = i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} e^{i\frac{S}{\hbar}} - a \frac{\partial S}{\partial t} e^{i\frac{S}{\hbar}}$$

Il membro di sinistra invece:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \left(\nabla a e^{i\frac{S}{\hbar}} + a \frac{i}{\hbar} \nabla S e^{i\frac{S}{\hbar}} \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla^2 a e^{i\frac{S}{\hbar}} + (\nabla a) \frac{2i}{\hbar} (\nabla S) e^{i\frac{S}{\hbar}} + a \frac{i}{\hbar} (\nabla^2 S) e^{i\frac{S}{\hbar}} + a \frac{i}{\hbar} (\nabla S)^2 \frac{i}{\hbar} e^{i\frac{S}{\hbar}} \right] = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla^2 a + \frac{2i}{\hbar} (\nabla a) (\nabla S) + a \frac{i}{\hbar} (\nabla^2 S) - \frac{a}{\hbar^2} (\nabla S)^2 \right] e^{i\frac{S}{\hbar}} \end{aligned}$$



A questo va aggiunto il termine di potenziale ($V\psi = ae^{i\frac{S}{\hbar}}V$). Uguagliando poi il membro di destra e quello di sinistra otteniamo l'equazione (nabla quadro a mi dà 0 perchè moltiplicando per $\hbar^2/2m$ mi dà un termine di ordine superiore ad \hbar):

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} - a \frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{m}(\nabla a)(\nabla S) - \frac{i\hbar}{2m}a(\nabla^2 S) + \frac{a}{2m}(\nabla S)^2 + Va$$

I termini in \hbar^1 e \hbar^0 devono essere uguali tra loro affinché sia valida questa uguaglianza. Partiamo dal termine \hbar^0 : questo impone che sia vera la seguente espressione.

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V$$

Ricordiamo la definizione di azione $S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt$, da cui una variazione dell'azione corrisponde a $\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) dt$. Possiamo esplicitare $\delta \dot{q} = \delta \left(\frac{dq}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \delta q$, e quindi risolvere l'integrale di variazione dell'azione:

$$\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right) \delta q dt$$

L'integrale è nullo perché compare all'interno l'equazione di Eulero-Lagrange. Il primo termine invece è quello che conta: di solito si considerano fermi gli estremi $q(t_1)$ e $q(t_2)$, ma se li lasciamo liberi di muoversi questa espressione diventa:

$$\delta q \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \delta q p = \delta S \quad \rightarrow \quad \frac{\delta S}{\delta q} = p \Rightarrow \frac{\partial S}{\partial q} = \nabla S = \mathbf{p}$$

Quindi abbiamo ottenuto che $\nabla S = \mathbf{p}$. Sostituendo questa nell'espressione di \hbar^0 , otteniamo **l'equazione di Hamilton-Jacobi**:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V = E$$

Quindi, se ci fermiamo all'ordine \hbar^0 **riotteniamo le equazioni della meccanica classica**. Basta rifletterci un attimo per osservare che è un risultato per nulla scontato ma, tuttavia, sensato.

Passiamo invece all'ordine \hbar^1 ; l'equazione che deve essere valida è:

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

Abbiamo moltiplicato entrambi i membri per $2a$ perché siamo pazz... Perché conviene, infatti in questa forma possiamo riscrivere tutto come:

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \frac{1}{m} \nabla \cdot (a^2 \nabla S) = 0$$



Osservando l'espressione di ψ imposta all'inizio del nostro ragionamento appare evidente che $a^2 = |\psi|^2$, e quindi possiamo riscrivere questa equazione come:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\frac{1}{m} \nabla \cdot (|\psi|^2 \nabla S)$$

Chiamando $\rho = |\psi|^2$, sostituendo a $\nabla S = \mathbf{p}$ e a $\frac{\nabla S}{m} = \frac{\mathbf{p}}{m} = \mathbf{v}$, otteniamo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$$

Ovvero **un'equazione di continuità per la probabilità in versione classica**. Possiamo riprendere l'espressione della corrente di probabilità \mathbf{J} e applicarla alla funzione d'onda che stiamo esaminando adesso, giusto per vedere se tornano i calcoli:

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= -\frac{i\hbar}{m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \left(a e^{-i\frac{S}{\hbar}} \left(\nabla a e^{i\frac{S}{\hbar}} + a \frac{i}{\hbar} \nabla S e^{i\frac{S}{\hbar}} \right) - a e^{i\frac{S}{\hbar}} \left(\nabla a e^{-i\frac{S}{\hbar}} - a \frac{i}{\hbar} \nabla S e^{-i\frac{S}{\hbar}} \right) \right) = \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{a^2 i}{\hbar} (\nabla S) + \frac{a^2 i}{\hbar} (\nabla S) \right) = a^2 \frac{\nabla S}{m} = \rho \mathbf{v} = \mathbf{J} \end{aligned}$$

Le cose tornano, come dovevamo aspettarci.

3.1.2 Metodo di Hamilton-Jacobi

Risolviamo il metodo di Hamilton-Jacobi ignorando totalmente l'evoluzione temporale del sistema. Possiamo porre, per quanto abbiamo visto finora, $\frac{\partial S}{\partial t} = -E$, da cui ricaviamo $S = S_0 - Et$. Ancora, avremo $E = \frac{1}{2m} (\nabla S_0)^2 + V$. Risolviamo in una dimensione questo problema:

$$2m(E - V) = \left(\frac{dS_0}{dx} \right)^2 \rightarrow \frac{dS_0}{dx} = \sqrt{2m(E - v)} \rightarrow p(x) = \pm \sqrt{2m(E - V)}$$

Da cui otteniamo anche che $S_0 = \int p(x) dx$. Sostituendo nella funzione d'onda:

$$\psi = a e^{i\frac{S_0}{\hbar}} = a e^{\pm i\frac{1}{\hbar} \int p(x) dx}$$

Sovrapponendo le soluzioni otteniamo l'espressione generale della funzione d'onda $\psi(x) = c_1 e^{i\frac{1}{\hbar} \int p(x) dx} + c_2 e^{-i\frac{1}{\hbar} \int p(x) dx}$. Resta da determinare le due costanti di normalizzazione c_1, c_2 . Per queste sfruttiamo l'equazione di continuità poco prima trovata:

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} = 0 = \nabla \cdot (a^2 p(x)) \rightarrow a^2 p(x) = \text{cost}$$



Dall'ultima espressione ricaviamo che $a = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}$; questo ha senso fisico: più è alta la velocità della particella, più bassa sarà la probabilità di trovare la particella da qualche parte, per cui ha senso la normalizzazione. Detto questo, abbiamo trovato **la soluzione all'equazione di Schrödinger sfruttando il metodo semi-classico**:

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx}$$

Studiamo adesso questa funzione d'onda. È indubbiamente un'onda piana, sovrapposizione di onde regressive e progressive. In particolare però, cosa risolviamo?

Consideriamo un potenziale qualunque, in questo caso le particelle interagiscono con questo e non assumono più la forma di onde piane. Se infatti l'impulso $p(x)$ non dipende dalla posizione x , dall'integrale verrebbe fuori una costante qualsiasi per la posizione kx , esattamente come un'onda piana. Qualora l'impulso dipendesse dalla posizione, invece, avremmo funzioni ben più complicate.

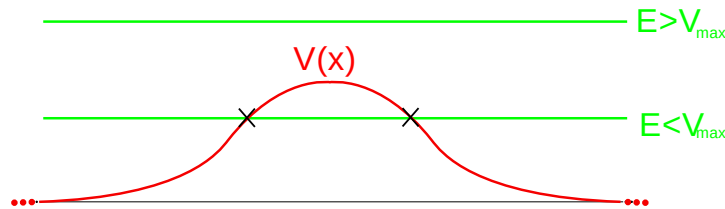


Fig. 3.1: in rosso il potenziale e in verde le diverse configurazioni di energia. Le croci indicano i punti di inversione del moto, secondo la meccanica classica.

Immaginiamo adesso una situazione simile a quella della figura 3.1; abbiamo due casi ben distinti: l'energia della particella è maggiore del massimo del potenziale o è minore. Anche qui avremo situazioni diverse: infatti, quando l'energia della particella è maggiore del massimo del potenziale, la meccanica classica ci fornisce due fenomeni diversi. Per una particella, se questa ha energia maggiore del potenziale, non ne risente minimamente e continua dritta per la sua strada, ignorandolo; un'onda, invece, viene trasmessa e riflessa. In meccanica quantistica **la particella viene trasmessa e riflessa**, anche se ha energia superiore al massimo del potenziale.

Nel caso in cui $E < V_{\max}$, invece, abbiamo situazione ben distinte: in meccanica classica c'è un punto di inversione del moto, dove la particella "urta" il potenziale e viene rispedita indietro. In meccanica quantistica le cose si fanno leggermente imbarazzanti, infatti avremo un impulso $p(x) = \sqrt{2m(E - V)}$; poiché $E < V$ nell'intervallo compreso tra i due punti di inversione del moto, avremo che $p(x) = i|p(x)|$ l'impulso è un immaginario puro. La funzione d'onda allora sarà:

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int p(x) dx} + 0$$



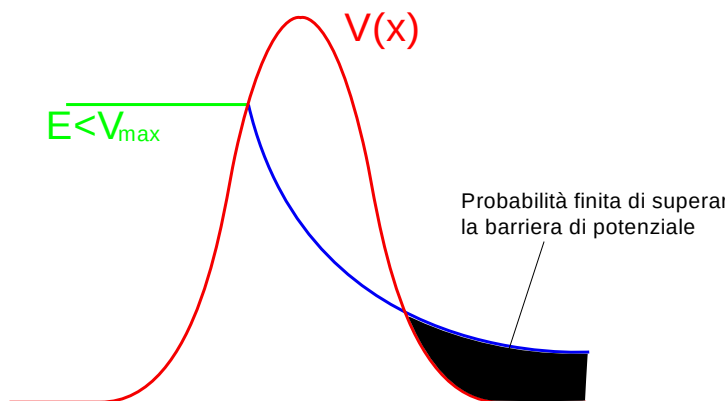


Fig. 3.2

L'esponenziale positivo *scompare* perché, per la condizione di Schrödinger, **le funzioni d'onda devono essere tutte nulle all'infinito**. Quindi, dopo il punto di inversione del moto la particella smette di essere un'onda piana e si comporta come un'esponenziale negativo. In figura 3.2 è presentato uno schema molto semplificato di come questa condizione, se la barriera di potenziale non è molto ampia, *possa permettere alla particella di superare la barriera di potenziale* nonostante abbia energia minore: è il caso dell'**effetto tunnel**, sperimentalmente verificato e ben chiaro con l'approssimazione WKB.

3.1.3 Condizione per WKB

Riassumendo le cose, abbiamo trovato due soluzioni differenti dell'equazione di Schrödinger utilizzando il metodo semi-classico, partendo dalla soluzione proposta $\psi = ae^{i\frac{S}{\hbar}}$, trovando le soluzioni:

$$\psi = \begin{cases} E > V_{\max} & \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} \\ E < V_{\max} & \frac{b_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{1}{\hbar} \int p(x) dx} + \frac{b_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int p(x) dx} \end{cases}$$

Con $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$. È lecito chiedersi quando possiamo applicare questa approssimazione senza troppi sentimenti: sviluppando in serie ci siamo fermati al primo ordine in \hbar , considerando ovviamente il limite per $\hbar \rightarrow 0$. Il requisito minimo affinché allora possiamo ignorare tutti i termini quadratici o superiori è che $\hbar^1 < \hbar^0$. I due termini li abbiamo precedentemente scritti, deve quindi essere:

$$\frac{i\hbar a}{2m} \frac{dp}{dx} < \frac{ap^2}{2m} \rightarrow \frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1$$

Posto $\mathcal{K} = \frac{\hbar}{p(x)}$, questa condizione si traduce col porre $\left| \frac{d\mathcal{K}}{dx} \right| \ll 1$. Questa condizione ovviamente può essere verificata solo conoscendo il potenziale; allo stesso modo, se conosciamo la lunghezza caratteristica l con cui varia il potenziale possiamo anche approssimare la condizione di approssimazione (se qualcosa scricchiola nel vostro cervello avete sbagliato facoltà), ottenendo:

$$\frac{\hbar p}{l} \frac{1}{p^2} \ll 1 \rightarrow lp \gg \hbar$$



Questa è una condizione minima per poter procedere col metodo semiclassico. Se il potenziale quindi varia con lunghezze caratteristiche molto piccole (tipico dei potenziali singolari), non possiamo approssimare nel limite classico l'equazione di Schrödinger.

3.2 Decadimento alpha

Iniziamo a risolvere problemi particolari, che tratteremo meglio nel prossimo capitolo interamente dedicato ai potenziali unidimensionali. Ora tratteremo il problema del decadimento alpha.

C'è una possibilità, specialmente per nuclei pesanti, di emettere spontaneamente particelle alpha, fenomeno comunemente chiamato "decadimento alpha". Prima di poter trattare il problema, dobbiamo parlare del modello di potenziale da considerare.

Intorno al nucleo vi è un potenziale di tipo Coulombiano proporzionale a $\frac{1}{r}$ mentre all'interno del nucleo ci deve essere un potenziale tale da mantenere le particelle strettamente vincolate a corto raggio: una **buca di potenziale**. La forza che caratterizza questa "buca" è l'**interazione forte**, che tiene uniti i nucleoni ed è un'interazione a corto raggio. In figura 3.3 vediamo rappresentato lo schema del potenziale nucleare modificato, con il termine di Coulomb e la buca di potenziale.

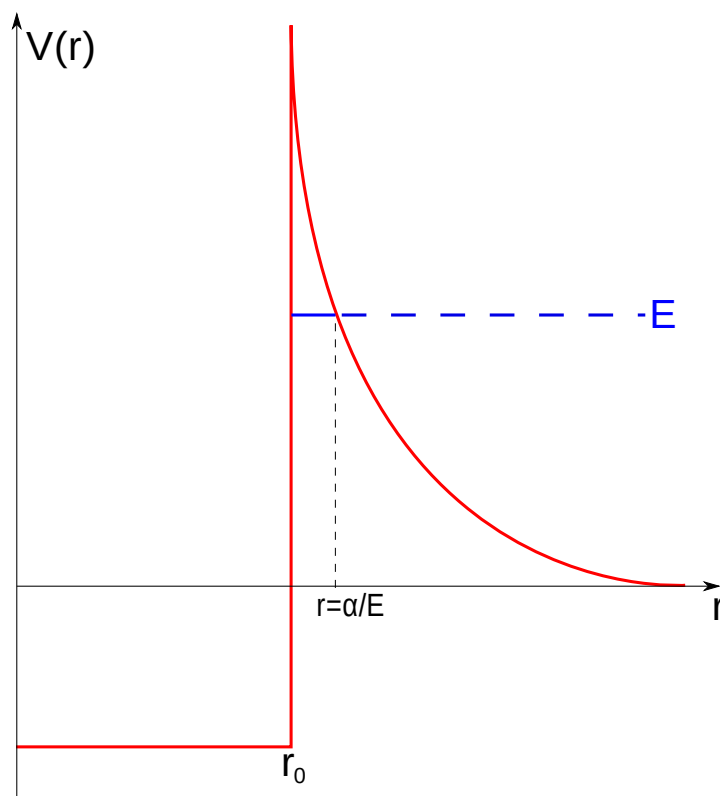


Fig. 3.3

Abbiamo parlato di una particella α che si avvicina a un nucleo, anche se vogliamo in realtà studiare il decadimento, cioè un nucleo che produce una α ; in realtà i due fenomeni sono quasi equivalenti: in ogni caso c'è anche una piccola probabilità che una α possa entrare o uscire dal nucleo, per via dell'effetto tunnel descritto



nella sezione precedente. Come possiamo vedere dalla figura 3.3, più energia ha la particella, più stretta è la barriera di potenziale che incontra e, di conseguenza, maggiore è la probabilità che, per effetto tunnel, possa superarla e andare oltre. Poiché nella regione classicamente proibita avremo $|\psi| \sim e^{-\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx}$, la probabilità sarà ovviamente $|\psi|^2 \sim e^{-\frac{2}{\hbar} \int |p(x)| dx}$, dove l'integrale sull'impulso è valutato solo nella regione in cui si verifica l'effetto tunnel (ovvero quella in cui la particella è descritta da un'esponenziale negativo).

Facendo sempre riferimento alla figura 3.3, la probabilità che un' α entri o esca dal nucleo è quindi:

$$D \sim e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{\alpha/E} dr \sqrt{2m(\frac{\alpha}{r} - E)}}$$

Possiamo esplicitare l'esponente e calcolarlo. Nei prossimi calcoli approssimeremo $r_0 \sim 0$, e poniamo $a = \frac{\alpha}{E}$. Fattorizziamo l'esponente come $-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2mE} \int_{r_0}^a (a/r - 1)^{\frac{1}{2}} dr$, e procediamo col calcolare l'integrale per cambio di variabili:

$$\int_0^a \sqrt{\left(\frac{a}{r} - 1\right)} dr = a \int_0^1 \left(\frac{1}{t} - 1\right)^{\frac{1}{2}} dt = 2a \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 \theta d\theta = a \frac{\pi}{2}$$

Dove abbiamo operato il cambio di variabile $t = \sin^2 \theta$ e $dt = 2 \sin \theta \cos \theta d\theta$. L'esponente diventa quindi:

$$-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2mE} \frac{\alpha}{E} \frac{\pi}{2} = -\frac{\pi \alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} = -\frac{\pi \alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\frac{1}{2} m v^2}} = -\frac{2\pi \alpha}{\hbar v}$$

Concludiamo che la probabilità che una particella alpha esca dal nucleo è

$$D \sim e^{-\frac{2\pi \alpha}{\hbar v}}$$

Poiché è presente \hbar al denominatore, ci aspettiamo che l'esponenziale sia bassissimo. Possiamo ancora modificare questo valore: come vedremo subito la velocità delle alpha è $v \sim 10^{-1}c$, quindi possiamo di nuovo esplicitare (ricordando che $\alpha = 2|e|$):

$$\frac{2\pi 2e Ze}{\hbar v} = \frac{4\pi Z e^2}{\hbar} \frac{1}{v} = 4\pi Z \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \frac{1}{\frac{1}{10}c} = 40\pi Z \alpha_{\text{fine}}$$

Dobbiamo tuttavia rivedere il nostro modello di nucleo: raggio del nucleo lo consideriamo pari a $r_0 \approx 10$ fm, e l'altezza della buca di potenziale in figura 3.3 è circa 20 MeV. Questa la uguagliamo all'energia della particella alpha (dove $m_\alpha = 4$ GeV è la massa della particella):

$$20 \text{ MeV} = \frac{p^2}{2m_\alpha} \rightarrow v \sim 10^{-1}c$$

Abbiamo il raggio della buca e la velocità della particella: possiamo calcolare la frequenza con cui la particella urta sulla parete:



$$\nu = \frac{v}{r_0} = \frac{10^9 \text{ cm/s}}{10 \text{ fm}} = 10^{21} \text{ Hz}$$

Da questo si può ricavare il *tempo caratteristico* con cui avviene il decadimento alpha come $\tau = (D\nu)^{-1}$.

Tutto questo discorso è diverso se non consideriamo $r_0 \sim 0$: i calcoli si complicano e il risultato è:

$$\frac{1}{\tau} \sim 10^{-1} \exp \left[-\sqrt{\frac{8m2(Z-2)e^2}{\hbar^2}} \left(\arccos \left(\sqrt{\frac{r_0}{b}} \right) - \sqrt{\frac{r_0}{b} - \frac{r_0^2}{b^2}} \right) \right]$$



Capitolo 4

Potenziali unidimensionali

4.1 Considerazioni generali

In questo capitolo ci proponiamo di risolvere l'equazione di Schrödinger con diversi potenziali *unidimensionali*; sebbene lo studio unidimensionale poi non trovi riscontro pratico nella realtà, è comunque un ottimo strumento teorico per imparare a maneggiare l'equazione e trovare delle semplici soluzioni per i livelli energetici.

È utile rivedere le caratteristiche generali dell'equazione di Schrödinger nel caso unidimensionale. L'ipotesi fondamentale è che $\psi \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow \infty$: questa condizione è strettamente collegata agli stati legati e fa sì che si abbia un'ampiezza di probabilità finita. Quando parliamo di particelle libere, descritte da onde piane, non è ben chiaro come interpretare il modello in termini probabilistici.

Parliamo allora di probabilità solo per gli stati legati.



4.1.1 Spettro continuo e spettro discreto

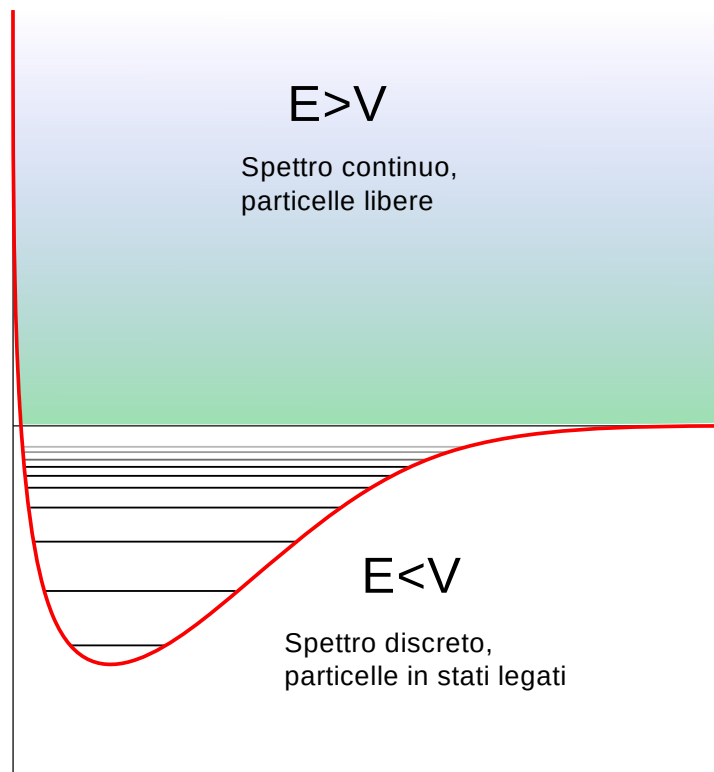


Fig. 4.1.1

Avremo sempre a che fare con due diversi casi, che possiamo osservare in figura 4.1.1: particelle libere, a cui corrisponde uno **spettro energetico continuo**, e particelle in stati legati, a cui corrisponde uno **spettro energetico discreto**. Possiamo provare a capire il perché questo avviene usando l'approssimazione WKB: nel caso in cui sia presente un potenziale, occorre *raccordare* le soluzioni nelle diverse zone dello spazio (zone classicamente permesse e zone classicamente proibite): questo si può fare sfruttando il piano complesso, poiché non possiamo avvicinarci infinitesimamente al punto di inversione del moto. Facendo questo, si paga un prezzo: gli stati energetici diventano discreti, seguendo la **quantizzazione di Bohr-Sommerfeld**:

$$\frac{1}{\hbar} \int p(x) dx = n\pi$$

Supponiamo adesso una *doppia degenerazione* nello spettro discreto, ovvero abbiamo due funzioni d'onda ψ_1, ψ_2 che descrivono la particella allo stesso livello energetico. È possibile una situazione simile?

Entrambe rispettano l'equazione di Schrödinger $\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi$, quindi potremo scrivere:

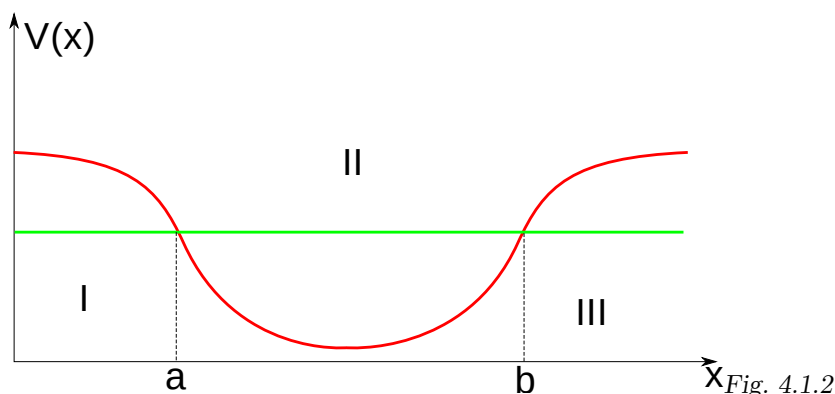
$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2}$$

Da questa ricaviamo facilmente che $\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}$, ovvero **le due non sono linearmente indipendenti**: non può quindi esserci degenerazione energetica nello



spettro discreto **per potenziali unidimensionali** (come vedremo nel caso dell'oscillatore armonico tridimensionale si può avere degenerazione energetica). Un altro valido motivo a sostegno di ciò è che gli operatori hermitiani hanno autofunzioni tali da formare *sistemi completi*, quindi non è possibile una degenerazione nel caso discreto.

4.1.2 Raccordare le soluzioni



Facciamo riferimento alla figura 4.1.2 per un veloce esempio. Le regioni I,III sono regioni classicamente proibite, che si trovano oltre i punti di inversione del moto: la funzione d'onda della particella in questa regione sarà un'esponenziale decrescente. Se il potenziale resta maggiore dell'energia fino agli estremi dello spazio, non ci sarà alcuna possibilità di avere l'effetto tunnel, e quindi questi esponenziali moriranno immediatamente. La regione II, d'altro canto, è classicamente permessa, e la funzione che descrive la particella in questa regione sarà un'onda piana. Questa possiamo già scriverla, in virtù del metodo semi-classico affrontato nel capitolo precedente:

$$\psi_{II} = \begin{cases} \psi_1 = \frac{c_1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx} + \frac{c_2}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx} \\ \psi_2 = \frac{c_1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^b p(x) dx} + \frac{c_2}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^b p(x) dx} \end{cases}$$

Questa soluzione va raccordata con quelle che descrivono la particella nelle regioni I e III. Il problema che incontriamo è che, nei punti $x = a$, $x = b$ **non vale** l'approssimazione semi-classica. Possiamo allora supporre che, poiché il potenziale resta maggiore dell'energia indefinitamente oltre i punti di inversione del moto, *gli esponenziali decrescenti siano così decrescenti da essere nulli*. Quindi, per raccordare le soluzioni, avremo che $\psi_1(x = a) = \psi_2(x = b) = 0$, da cui ricaviamo velocemente che $c_1 = -c_2$. Le soluzioni diventano quindi circolari:



$$\psi_1 = \frac{c}{\sqrt{p}} \sin \left(\overbrace{\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right)}^{\phi_1} \right)$$

$$\psi_2 = \frac{c}{\sqrt{p}} \sin \left(\underbrace{\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx \right)}_{\phi_2} \right)$$

Detto questo, **non** c'è alcun motivo ovvio per cui debba essere $\psi_1 \neq \psi_2$, anzi descrivono la stessa particella nella stessa regione di spazio: sostanzialmente sono la stessa cosa, a meno di una fase. Possiamo quindi forzarle ad avere la stessa fase, ponendo $\phi_1 + \phi_2 = n\pi$, con $n \in \mathbb{Z}$ numero intero. Questa corrisponde *esattamente* alla quantizzazione di Bohr-Sommerfeld, infatti avremo:

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = n\pi$$

Questa si trova spesso scritta come $\oint p dq = n\pi$, ma è chiaro che descrivono la stessa cosa. Se $\hbar \rightarrow 0$, allora sarà n molto grande, e ricadiamo nel metodo quasi-classico (coerentemente col principio di corrispondenza). La funzione ψ ha una fase che va da 0 a $n\pi$: avrà quindi $n - 1$ **zeri**, che, se n è grande, si approssimano all'ordine $O(n)$ (risultato noto altrove come **teorema delle oscillazioni**).

Possiamo allora chiederci da dove venga fuori lo spettro discreto: avendo forzato le due fasi come $\phi_1 = -\phi_2 + n\pi$, imponiamo alla funzione ψ di essere *continua* ai bordi della regione II classicamente permessa.

4.1.3 Quantizzazione di Bohr-Sommerfeld

Diciamo qualcosina in più sulla quantizzazione di Bohr-Sommerfeld che abbiamo già incontrato. Per un ciclo completo $a \rightarrow b \rightarrow a$ questa può essere scritta come $\oint p dq = 2\pi\hbar n$. Deriviamo entrambi i membri per n , ricordando che l'impulso è $p = \sqrt{2m(E(n) - V)}$, otterremo, portando dentro l'integrale dn :

$$2\pi\hbar = \oint \frac{m}{p} \frac{dE_n}{dn} dq = \frac{dE_n}{dn} \underbrace{\oint \frac{1}{\frac{p}{m}} dq}_{\frac{dx}{v} = T} = \frac{dE_n}{dn} T$$

Da questo otteniamo immediatamente

$$\frac{dE_n}{dn} = \frac{2\pi}{T} \hbar = \hbar\omega$$

Ovvero che la **spaziatura dei livelli energetici** è $\hbar\omega$.

4.1.4 Funzioni d'onda nello spettro continuo

Se la particella è libera, come abbiamo detto, normalizzare non è così banale, visto che l'integrale di un'onda piana diverge evidentemente. Come funziona allora



l'ipotesi di Born nello spettro continuo? Comunque possiamo sempre dire che ψ sia in qualche modo proporzionale alla probabilità. Un problema tipico per capire è la riflessione di una particella su una barriera di potenziale.

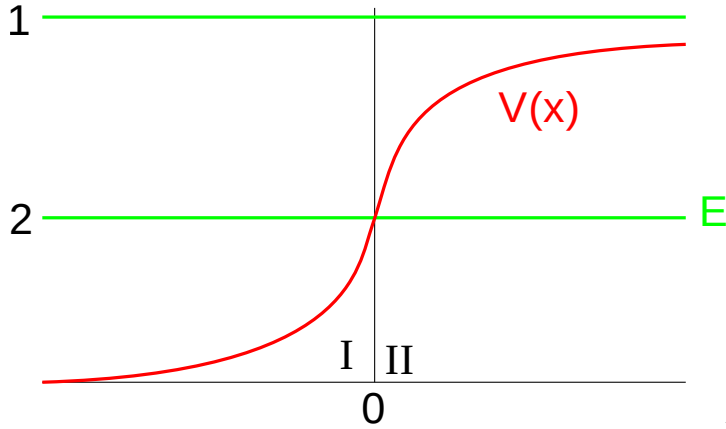


Fig.4.1.3

Consideriamo la figura 4.1.3, distinguiamo due casi per l'energia della particelle. In entrambi i casi non è interessante studiare la trasmissione, che sarà comunque sempre nulla. Nel primo caso abbiamo una particella libera con $k = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar}}$ che varia in base alla posizione, mentre nel secondo caso ci può essere una riflessione dell'onda da parte della barriera di potenziale. In questo caso abbiamo solo una condizione al bordo e quindi procediamo raccordando le soluzioni nel punto di inversione del moto. Avremo $\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, mentre $\psi_{II} = Ce^{-\kappa x}$, imponendo la continuità nell'origine abbiamo il sistema:

$$\begin{cases} A + B = C \\ ikA - ikB = -\kappa C \end{cases} \rightarrow \begin{cases} A + B = C \\ (A - B) = -\frac{C}{ik}\kappa \end{cases}$$

Sommiamo e sottraiamo le due espressioni, ottenendo:

$$\begin{aligned} 2A &= C \left(1 + i\frac{\kappa}{k}\right) = Cz = Ce^{i\delta} \\ 2B &= C \left(1 - i\frac{\kappa}{k}\right) = Cz^* = Ce^{-i\delta} \end{aligned}$$

Dove $z = \rho e^{i\delta}$ è un generico numero complesso. La soluzione a questo problema è $C \cos(kx + \delta) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$. Poiché il moto è limitato a destra, la doppia degenerazione dell'onda piana si rompe.

Il modo usuale di vedere il problema è partire dalla generica funzione d'onda piana $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ e studiare come parte di questa onda viene riflessa dalla barriera. Si utilizza la corrente di probabilità nella sua definizione; considereremo $V(x) \sim 0$ a sinistra dell'origine, così da avere anche $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$. La corrente di probabilità incidente è:

$$\mathbf{J}_{\text{inc}} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = |A|^2 \frac{\hbar}{m} \kappa \frac{p}{m} \sim |A|^2 k$$



Dall'altra parte, la corrente di onda riflessa è $\mathbf{J}_{\text{rif}} \sim |B|^2 k$. Usualmente si tratta il **coefficiente di riflessione** come il rapporto tra le due correnti, che in questo caso sarà:

$$R = \left| \frac{\mathbf{J}_{\text{rif}}}{\mathbf{J}_{\text{inc}}} \right| = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

Stabilendo le due costanti si ottiene quindi il rapporto tra onda riflessa e onda incidente.

4.2 Buche di potenziale

I problemi unidimensionali più semplici sono le buche di potenziale. Abbiamo già incontrato nel capitolo precedente, parlando del decadimento alpha, una buca di potenziale per poter modellizzare l'interazione forte. Ce ne sono diversi tipi e qui facciamo un po' di zoologia a riguardo.

4.2.1 Buca infinita

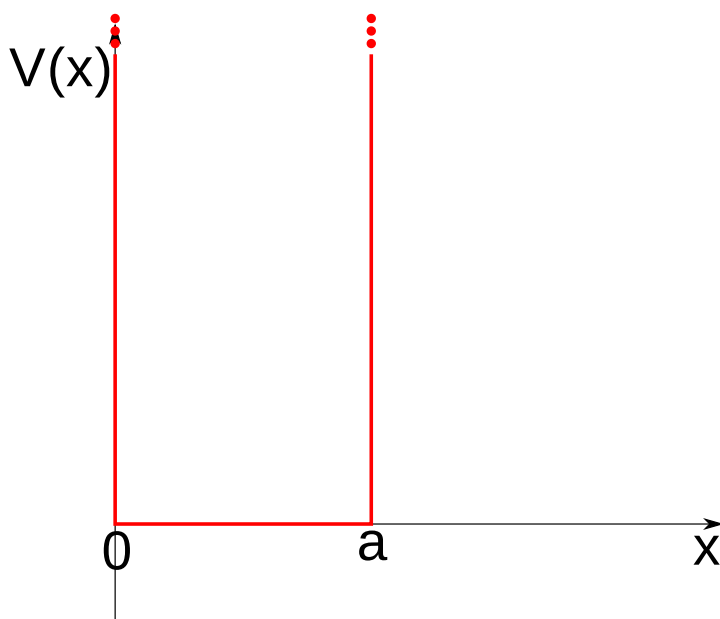


Fig. 4.2.1: buca di

potenziale infinita.

Consideriamo il potenziale in figura 4.2.1: una classica buca di potenziale infinita, le cui pareti non sono in alcun modo oltrepasabili. Le regioni I e III sono classicamente proibite e, proprio perché la buca è infinita, la funzione d'onda in queste regioni può essere approssimata come nulla. Osserviamo anche che nella regione II il potenziale è nullo, $V(x) = 0$, per cui l'equazione di Schrödinger si riduce a $\psi'' + k^2\psi = 0$, posto $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$. La soluzione è quindi $\psi = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$.

Abbiamo quindi due soluzioni, due diverse onde piane, che descrivono lo stesso sistema nella stessa regione alla stessa energia. Per quanto abbiamo detto nella precedente sezione, questo caso non può avvenire, quindi non possiamo accettare



che ci siano due soluzioni indipendenti tra loro: dobbiamo procedere a vincolare le fasi, ponendo:

$$\psi_{II} = c \sin(kx + \delta)$$

Ponendo le condizioni al contorno $\psi_{II}(0) = \psi_{II}(a) = 0$, ricaviamo che $\delta = 0$ e $ka = n\pi$; ricordando la definizione di k ricaviamo così i livelli energetici per la buca infinita:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m a^2}$$

I livelli energetici dipendono quindi anche dalla larghezza della buca; questo può facilmente essere capito applicando rozzamente il principio di indeterminazione: possiamo porre $\Delta x \sim a$, da cui $\Delta p \sim \frac{\hbar}{a}$ e l'energia $E = \frac{p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2m a^2}$, come abbiamo trovato.

Ora non ci resta che *normalizzare* la funzione d'onda per la regola di Born:

$$\int_0^a |\psi|^2 dx = \int_0^a c^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = 1$$

Da questa otteniamo che $c = \sqrt{\frac{2}{a}}$, quindi abbiamo trovato le funzioni d'onda associate ai diversi livelli energetici per la buca infinita:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Osserviamo che c'è uno stato fondamentale; questa è una caratteristica di tutte le buche di potenziale unidimensionali: per poco che possono essere profonde, esse avranno sempre uno stato fondamentale. Osserviamo che gli stati eccitati del sistema *presentano dei nodi* in cui la funzione è nulla: di conseguenza sarà nulla la probabilità di trovare la particella in questi nodi.

4.2.2 Buca finita

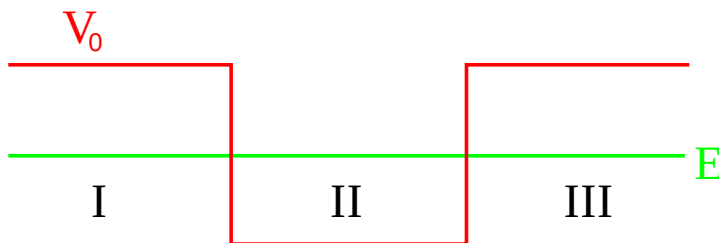


Fig. 4.2.2: buca di

potenziale finita.

Per quanto semplice possa sembrare la buca infinita, le cose si complicano notevolmente quando studiamo la buca finita, rappresentata in figura 4.2.2: in questo caso non ci basta la continuità della funzione d'onda ai bordi ma, per via della corrente di probabilità, dovremo imporre che anche le derivate prime siano continue. Le funzioni associate a ogni regione sono:



$$\begin{aligned}\psi_I &= c_1 e^{kx} & k &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \\ \psi_{II} &= c_2 \sin(\tilde{k}x + \delta) & \tilde{k} &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \\ \psi_{III} &= c_3 e^{-kx}\end{aligned}$$

Detto questo basta quindi imporre che $\frac{d}{dx}(\ln \psi) = \frac{\psi'}{\psi}$ sia continua:

$$\left. \frac{d}{dx}(\ln \psi_{II}) \right|_{x=0} = \tilde{k} \cot(\delta) = \left. \frac{d}{dx}(\ln \psi_I) \right|_{x=0} = k$$

$$\left. \frac{d}{dx}(\ln \psi_{II}) \right|_{x=a} = \tilde{k} \cot(\tilde{k}a + \delta) = \left. \frac{d}{dx}(\ln \psi_{III}) \right|_{x=a} = -k$$

Questo si traduce in:

$$\tilde{k} \cot(\delta) = -\tilde{k} \cot(\tilde{k}a + \delta) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - \tilde{k}^2}$$

Essendo la cotangente una funzione periodica, nulla vieta di aggiungere a δ un fattore $+n\pi$: iniziamo ad avere a che fare con dei numeri interi che ovviamente ci porteranno alla quantizzazione dei livelli energetici.

$$\cot(\delta + n_1\pi) = -\cot(\tilde{k}a + \delta + n_2\pi) \quad n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$$

Posto $\cot(\delta) = \frac{1}{\hbar\tilde{k}} \sqrt{2mV_0 - \tilde{k}^2}$ risolviamo ponendo $\sin^2 x = \frac{1}{1+\cot^2 x}$, ovvero

$$\sin^2(\delta) = \frac{1}{1 + \frac{2mV_0}{\hbar^2\tilde{k}^2} - 1}$$

Otteniamo l'uguaglianza $\sin(\delta) = -\sin(\tilde{k}a + \delta) = \frac{\hbar\tilde{k}}{\sqrt{2mV_0}} = \gamma\tilde{k}a$ con $\gamma = \frac{\hbar}{a\sqrt{2mV_0}}$; da queste otteniamo la soluzione:

$$\begin{aligned}\delta &= \arcsin(\gamma\tilde{k}a) + n_1\pi \\ \tilde{k}a + \delta &= -\arcsin(\gamma\tilde{k}a) + n_2\pi\end{aligned}$$

A questo punto sottraiamo la prima espressione alla seconda, ottenendo:

$$\tilde{k}a = -2 \arcsin(\gamma\tilde{k}a) + \underbrace{(n_2 - n_1)}_n \pi = n\pi - 2 \arcsin(\gamma\tilde{k}a)$$

Poniamo $\xi = \frac{\tilde{k}a}{2}$ e distinguiamo due casi: n pari o dispari. Se $n = 2n + 1$ è dispari, troviamo

$$\xi = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi - \arcsin(2\gamma\xi)$$

Bel problema quell'arcoseno; lo risolviamo calcolando il coseno di ξ , applicando il coseno della somma:



$$\cos(\xi) = \cos \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \pi - \arcsin(2\gamma\xi) \right] = \cos \left(\left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \right) \cos(\arcsin(2\gamma\xi)) + \sin \left(\left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \right) 2\gamma\xi$$

Otteniamo semplicemente $\cos(\xi) = \pm 2\gamma\xi$. Il caso con n pari si risolve allo stesso modo, ottenendo $\sin(\xi) = \pm 2\gamma\xi$. Osserviamo che $\frac{\cos(\xi)}{\xi} = \pm 2\gamma$ e questo può essere molto grande, se V_0 è piccolo. In questo caso anche ξ sarà piccolo (ricordiamo che l'energia si trova sotto il picco massimo del potenziale) e avremo quindi una buca poco profonda: possiamo studiarla sviluppando in serie.

$$\cos(\xi) = \pm 2\gamma\xi \rightarrow 1 - \frac{\xi^2}{2} = 2\gamma\xi$$

Da questa ricaviamo $\xi \approx \frac{1}{2\gamma} - \frac{1}{16\gamma^2}$, esplicitando troviamo il livello fondamentale:

$$E_0 = V_0 - \frac{ma^2}{2\hbar^2} V_0^2$$

Come avevamo detto per la buca infinita, per quanto poco profonda possa essere una buca unidimensionale, ammetterà sempre un livello fondamentale.

4.2.3 Buca infinita simmetrica

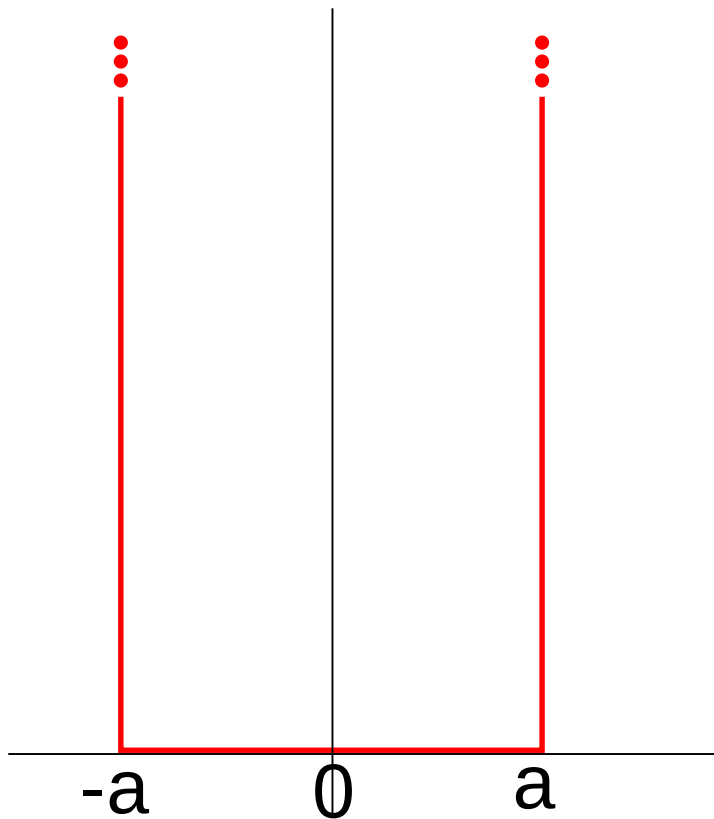


Fig. 4.2.3: buca di

potenziale infinita simmetrica.

Consideriamo il potenziale in figura 4.2.3: una buca infinita, solo che stavolta è simmetrica rispetto l'origine. Sostanzialmente non cambia nulla rispetto alla



buca infinita normale (abbiamo solo traslato gli assi), solo che la simmetria presente ci farà comodo. Abbiamo infatti $V(x) = V(-x)$, quindi ci aspetteremo una situazione del tipo $\psi(x) = c\psi(-x)$; ripetendo il passaggio otteniamo che $|\psi(x)|^2 = c^2|\psi(-x)|^2 = 1$, ovvero $c = \pm 1$. Le soluzioni che risolvono questo problema sono del tipo:

$$\psi(x) = \pm\psi(-x)$$

Ovvero **avremo soluzioni o pari, o dispari**. Possiamo scrivere la generica soluzione come $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$. Se non c'è degenerazione energetica, le due soluzioni saranno indipendenti tra loro e quindi otteniamo $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$, con $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Come nel caso della buca infinita dobbiamo raccordare la soluzione con quelle esterne alla regione permesse, ovvero $\psi(a) = \psi(-a) = 0$:

$$\begin{cases} A \sin(ka) + B \cos(ka) = 0 \\ -A \sin(ka) + B \cos(ka) = 0 \end{cases}$$

Sommando e sottraendo tra loro queste due relazioni otteniamo il sistema:

$$\begin{cases} A \sin(ka) = 0 \\ B \cos(ka) = 0 \end{cases}$$

Avremo quindi diversi casi: quando $\sin(ka) = 0$, la costante A può essere qualsiasi cosa, basta che sia $B = 0$; allo stesso modo, quando $\cos(ka) = 0$ deve essere $A = 0$, mentre B può essere qualsiasi cosa. Possiamo quindi scrivere le due soluzioni:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & n \text{ pari} \\ \psi(x) &= B \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) & n \text{ dispari} \end{aligned}$$

La prima sarà la soluzione dispari, la seconda la soluzione pari. Ovviamente i livelli energetici restano gli stessi della buca infinita studiata precedentemente.

4.2.4 Doppia buca di potenziale

"This is getting out of hand. Now there are two of them!" - Nute Gunray, Star Wars Episode 1 - The Phantom Menace



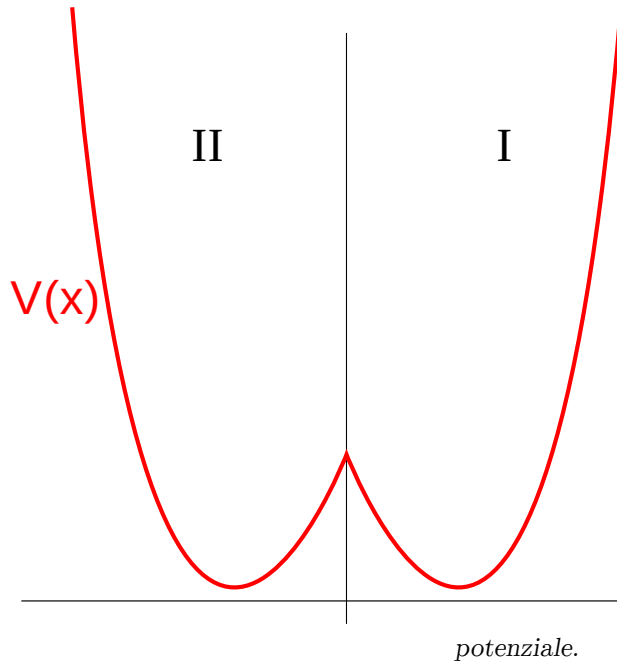


Fig. 4.2.4: doppia buca di

potenziale.

La doppia buca di potenziale è spesso presente nella teoria delle interazioni fondamentali, di solito però presentata sotto una forma diversa, ovvero tramite la *densità di potenziale* $\mathcal{V}(x)$, definita come $V(x) = \int d^3x \mathcal{V}(x)$. Spesso, le doppie buche sono associate al fenomeno della **rottura spontanea della simmetria** (SSB, spontaneous symmetry breaking); un esempio sono i ferromagneti, all'interno dei quali gli elettroni possono assumere due valori dello spin: il sistema si sposta dal massimo locale (simmetrico rispetto ai due minimi delle buche) in uno dei due minimi, restandoci indefinitamente (questo è un chiaro esempio di SSB).

Nella teoria delle interazioni fondamentali si esclude l'effetto tunnel perché si considera l'energia nel massimo locale *molto* maggiore di quella dei minimi: la barriera si presenta come se fosse infinita e quindi l'effetto tunnel svanisce. Noi non faremo così *ma* consideriamo il massimo a un'altezza finita, così che ci possa essere effetto tunnel, come nel caso della figura 4.2.4.

Cosa ci aspettiamo riguardo i livelli energetici? Che ovviamente siano speculari e simmetrici: se la barriera fosse impenetrabile, i due spettri sarebbero perfettamente uguali. Purtroppo per noi non è così: la barriera è penetrabile e, come vedremo, se consideriamo un livello energetico E_0 questo si spezza in due stati E_1, E_2 . Possiamo considerare le funzioni d'onda associate alle due regioni come se fossero degeneri quando $V(M) \rightarrow \infty$, al contrario si separano quando $V(M) < \infty$; nel nostro caso poniamo il massimo $x = M = 0$ nell'origine. Possiamo quindi scrivere:

$$\psi_1(x) = \frac{\psi_0(x) + \psi_0(-x)}{\sqrt{2}}$$

$$\psi_2(x) = \frac{\psi_0(x) - \psi_0(-x)}{\sqrt{2}}$$

Dove $\psi_0(x)$ vale nella buca I ed è relativo al livello energetico E_0 , mentre $\psi_0(-x)$ vale nella buca II ed è sempre relativo al livello E_0 . Stiamo considerando una sovrapposizione delle due funzioni d'onda perché la barriera è penetrabile: se non



lo fosse, il moto nelle due buche resterebbe limitato solo nella buca in cui si trova il sistema, ma nel nostro caso c'è possibilità che avvenga l'effetto tunnel e quindi una piccola parte della vita del sistema si svolge inevitabilmente nell'altra buca. Poiché il potenziale è simmetrico, come abbiamo visto per la buca infinita simmetrica avremo soluzioni pari e dispari, e infatti ψ_1 è pari e simmetrica, mentre ψ_2 è dispari e antisimmetrica. Avremo anche casi diversi nelle due buche:

$$\text{Buca I} \begin{cases} |\psi_0(x)|^2 \text{ grande} \\ |\psi_0(-x)|^2 \text{ piccolo} \end{cases} \quad \text{Buca II} \begin{cases} |\psi_0(x)|^2 \text{ piccolo} \\ |\psi_0(-x)|^2 \text{ grande} \end{cases}$$

La distinzione tra i livelli che si vengono a creare E_1, E_2 sta tutta in quale dei due è maggiore dell'altro. La cosa certa è che in entrambe le buche la funzione $\psi_0(x)\psi_0(-x)$, in modulo, è una quantità molto piccola.

La sovrapposizione di $\psi_0(x)$ e $\psi_0(-x)$ è coerente con l'equazione di Schrödinger e col potenziale simmetrico, ma ancora non abbiamo stabilito che si vengono a creare due livelli energetici distinti. Questo è anche dovuto al fatto che, per problemi unidimensionali, non c'è la degenerazione energetica, e quindi non possono coesistere due funzioni d'onda indipendenti tra loro allo stesso livello d'energia.

Supponendo che sia $E_1 < E_0$, applichiamo l'equazione di Schrödinger alla buca I:

$$\begin{cases} \psi_0''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 - V)\psi_0(x) = 0 \\ \psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - V)\psi_1(x) = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \psi_1\psi_0''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 - V)\psi_1\psi_0 = 0 \\ \psi_0\psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - V)\psi_0\psi_1 = 0 \end{cases}$$

Dove nel secondo passaggio abbiamo moltiplicato la prima per ψ_1 e la seconda per ψ_0 . Adesso sottraiamo la prima alla seconda e troviamo esattamente il gap energetico $E_1 - E_0$:

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - E_0)\psi_0\psi_1 + \psi_0\psi_1'' - \psi_1\psi_0'' = 0$$

$$(E_1 - E_0)\psi_0\psi_1 = (\psi_1\psi_0'' - \psi_0\psi_1'') \frac{\hbar^2}{2m}$$

Integriamo adesso in tutto lo spazio. Il membro a destra si compone di due elementi (integriamo per parti):

$$\left. \begin{aligned} \int_0^\infty dx \psi_1\psi_0'' &= [\psi_0'\psi_1]_0^\infty - \int_0^\infty dx \psi_1'\psi_0' \\ - \int_0^\infty dx \psi_0\psi_1'' &= -[\psi_1'\psi_0]_0^\infty + \int_0^\infty dx \psi_0'\psi_1' \end{aligned} \right\} [\psi_0'\psi_1]_0^\infty - [\psi_1'\psi_0]_0^\infty$$

All'infinito, per la condizione di Schrödinger, tutte le funzioni d'onda sono nulle; otteniamo quindi:



$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= \frac{\psi_0(x) + \psi_0(-x)}{\sqrt{2}} \\ \psi_1(0) &= \frac{\psi_0(0) + \psi_0(0)}{\sqrt{2}} = \sqrt{2}\psi_0(0) \\ \psi_1'(x) &= \frac{\psi_0'(x) - \psi_0'(-x)}{\sqrt{2}}\end{aligned}$$

Ma $\psi_1'(0) = 0$, quindi $\left[\psi_1'\psi_0\right]_0^\infty = 0$; il membro a destra, infine, è $-\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar^2}{m}\psi_0'(0)\psi_0(0)$.
 Il membro a sinistra invece:

$$\int_0^\infty dx \psi_1\psi_0 = \int_0^\infty dx \left(\frac{\psi_0(x) + \psi_0(-x)}{\sqrt{2}}\right)\psi_0(x) = \int_0^\infty dx \frac{|\psi_0(x)|^2}{\sqrt{2}} + \int_0^\infty dx \frac{\psi_0(x)\psi_0(-x)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Questo perché, come abbiamo già detto, $\psi_0(-x)\psi_0(x)$ è trascurabile in ognuna delle buche. In sintesi abbiamo trovato il gap energetico:

$$E_1 - E_0 = -\frac{\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi_0'(0)$$

Per simmetria, avremo che $E_2 - E_1 = \frac{2\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi_0'(0)$

Quindi, non appena il massimo da infinito diventa un numero finito, il livello energetico E_0 si sdoppia nelle due buche in due livelli energetici distinti, poiché le particelle che si trovavano in una buca hanno possibilità non nulla di passare nell'altra buca per effetto tunnel.

Poiché $\psi_0(0)$ si trova in una regione classicamente proibita, questa avrà forma:

$$\psi_0(0) = \frac{c}{\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^a |p(x)|dx}$$

Con $V(a) = E_0$. Si può inoltre calcolare che $c = \frac{\hbar\omega}{\pi}$.

4.2.5 Buca di potenziale infinita tridimensionale

Accenniamo velocemente al problema in tre dimensioni; il potenziale ha sempre la stessa forma:

$$V(\mathbf{x}) = \begin{cases} \infty & \text{altrove} \\ 0 & x \in [0, a], y \in [0, b], z \in [0, c] \end{cases}$$

L'equazione di Schrödinger in tre dimensioni è un'equazione *separabile*, ovvero si possono risolvere singolarmente i tre problemi lungo le tre dimensioni e poi moltiplicarle tra loro. Supposto allora che la buca sia di dimensioni a, b, c avremo le seguenti soluzioni associate ai seguenti livelli energetici:



$$\psi_{n_1, n_2, n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{\pi n_1}{a} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_2}{a} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_3}{a} z\right)$$

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$

4.3 Oscillatore armonico unidimensionale

Un classico problema unidimensionale è l'oscillatore armonico, la cui soluzione tuttavia è di gran lunga ben più complicata delle buche di potenziale. Possiamo già iniziare col dire qualcosa, in virtù di ciò che sappiamo dalla teoria atomica e dalle proprietà delle funzioni d'onda: per i livelli energetici, quando n è grande possiamo approssimare il gap tra E_n e E_{n+1} a $\hbar\omega$. Insomma, vogliamo porre $E_n \sim n\hbar\omega$, il che *non è poi così sbagliato*, essendo il valore vero $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega$.

Il termine $\frac{1}{2}$ che compare nella relazione degli stati energetici *non* può essere colto sfruttando l'approssimazione semiclassica. Inoltre, per $n = 0$ si ha $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, che ancora una volta non ripesciamo da altre parti.

Risolveremo l'oscillatore armonico in due modi, sfruttando prima il formalismo di Heisenberg e poi quello di Schrödinger.

4.3.1 Oscillatore armonico “secondo” Heisenberg

Nella teoria matriciale la soluzione è leggermente più sofisticata, come andremo subito a vedere. Partiamo dall'equazione classica dell'oscillatore armonico $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$; sostituiamo, come abbiamo visto nel primo capitolo, $x \rightarrow x_{n,m}$ con n, m numeri interi legati a due stati dell'oscillatore armonico. In questo senso, l'oscillatore armonico viene concepito *a priori* essere quantizzato. Ricordiamo che $x_{n,m} = e^{i\omega_{n,m}t} x_{n,m}$, quindi l'equazione dell'oscillatore armonico diventa:

$$(\omega_{n,m}^2 - \omega^2)x_{n,m} = 0$$

Questa ammette ovviamente la soluzione banale e utile quanto un fiammifero bruciato $x_{n,m} = 0$ e la soluzione che ci interessa $\omega_{n,m}^2 = \omega^2$, da cui ricaviamo $\omega_{n,m} = \pm\omega$. Come la scegliamo? Poiché gli indici n, m indicano i livelli energetici tra cui avviene la transizione, poniamo:

$$\omega_{n,n-1} = \omega$$

$$\omega_{n,n+1} = -\omega$$

A questo punto è palese un'assunzione fatta in precedenza, ma chiara solo adesso: gli elementi di matrice per l'oscillatore armonico sono **reali**; essendo anche hermitiani, concludiamo che sono matrici **simmetriche** per cui $x_{n,m} = x_{m,n}$.

Partiamo adesso dal commutatore fondamentale $[\mathbf{P}_i, \mathbf{X}_j] = -i\hbar\delta_{i,j}$, e dimentichiamoci totalmente di cosa siano gli operatori \mathbf{P}, \mathbf{X} e facciamo finta che questi indichino la posizione e l'impulso classici; questa relazione di commutazione può essere allora scritta come:



$$\dot{x}x - x\dot{x} = -\frac{i\hbar}{M}$$

Con M massa dell'oscillatore armonico. Calcoliamo allora gli elementi di matrice:

$$\begin{aligned}\sum_l (\dot{x}_{n,l}x_{n,l} - x_{n,l}\dot{x}_{n,l}) &= -\frac{i\hbar}{M}\delta_{n,m} \\ \sum_l (i\omega_{n,l}x_{n,l}x_{n,l} - i\omega_{l,n}x_{n,l}x_{n,l}) &= -\frac{i\hbar}{M} \\ \sum_l i\omega_{n,l}(2x_{n,l}^2) &= -\frac{i\hbar}{M}\end{aligned}$$

In quanto somma sull'indice muto l , sommiamo su tutti i termini *non nulli*: poiché $\omega_{n,m}$ è definita non nulla solo per due intervalli, avremo:

$$2i \underbrace{\omega_{n,n-1}}_{\omega} (x_{n,n-1})^2 + 2i \underbrace{\omega_{n,n+1}}_{-\omega} (x_{n,n+1})^2 = -\frac{i\hbar}{M}$$

Svolgendo i dovuti calcoli otteniamo:

$$(x_{n,n+1})^2 - (x_{n,n-1})^2 = \frac{\hbar}{2M\omega} \geq 0$$

Questa è una *progressione aritmetica* limitata dal basso, il che indica la presenza di **un livello fondamentale**. Quindi poniamo $x_{0,-1} = 0$, ovvero *non c'è nessun livello sotto quello fondamentale*. Allora una transizione dal livello 0 al livello 1 avrà ampiezza $(x_{1,0})^2 - (x_{0,-1})^2 = \frac{\hbar}{2M\omega}$; iterando il processo otteniamo:

$$x_{n,n-1} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2M\omega}} = x_{n-1,n}$$

Per calcolare i livelli energetici sfruttiamo l'equazione di Schrödinger, usando come hamiltoniana la classica hamiltoniana dell'oscillatore armonico:

$$\begin{aligned}E_n = H_{n,n} &= \frac{1}{2}M \left((\dot{x}^2)_{n,n} + \omega^2 (x^2)_{n,n} \right) = \\ &= \frac{1}{2}M \sum_l \left(\omega_{n,l}\omega_{l,n} i^2 x_{n,l}x_{l,n} + \omega^2 x_{n,l}x_{l,n} \right) = \\ &= \frac{1}{2}M \sum_l \left(\omega_{n,l}^2 x_{n,l}^2 + \omega^2 x_{n,l}^2 \right) = \\ &= \frac{1}{2}M \left[\underbrace{(\omega_{n,n+1}^2 + \omega^2)}_{\omega} x_{n,n+1}^2 + \underbrace{(\omega_{n,n-1}^2 + \omega^2)}_{-\omega} x_{n,n-1}^2 \right] = \\ &= \frac{1}{2}M \left(2\omega^2 x_{n,n+1}^2 + 2\omega^2 x_{n,n-1}^2 \right) = M\omega^2 (x_{n,n+1}^2 + x_{n,n-1}^2)\end{aligned}$$

Dove abbiamo sostituito la sommatoria con la somma sulle uniche due transizioni non nulle. Sostituendo il valore di $x_{n,n+1}$ trovato poco fa, otteniamo i livelli energetici preannunciati:



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

Vediamo adesso quali funzioni d'onda sono associate a questi livelli energetici. Vedremo come nel metodo di Schrödinger il calcolo delle funzioni d'onda sia più diretto, mentre in questo caso la teoria matriciale è leggermente più complicata; tuttavia, in meccanica quantistica relativistica questa soluzione viene ripresa e ampliata, per cui è bene che la si abbia presente.

Definiamo due operatori, l'operatore **creazione** $\hat{x}+i\omega x$ e l'operatore **distruzione** $\hat{x}-i\omega x$, anche comunemente chiamati operatori di scala. Vediamo come agiscono su una generica transizione:

$$(\hat{x}-i\omega x)_{n-1,n} \rightarrow (\hat{x})_{n-1,n} - i\omega(x)_{n-1,n} = -2i\omega x_{n-1,n} \neq 0$$

Tuttavia è immediato verificare che, se avessimo considerato $(\hat{x}-i\omega x)_{n,n-1} = 0$ questo sarebbe stato nullo. Il contrario avviene per l'operatore di creazione, $(\hat{x}+i\omega x)_{n,n+1} = 0$ e $(\hat{x}+i\omega x)_{n+1,n} \neq 0$.

Ricordiamo al volo che $A\psi_n = \sum_m A_{m,n}\psi_m$; applichiamo allora l'operatore distruzione allo stato fondamentale:

$$(\hat{x}-i\omega x)\psi_0 = \sum_m (\hat{x}-i\omega x)_{m,0}\psi_m = (\hat{x}-i\omega x)_{-1,0}\psi_{-1} + (\hat{x}-i\omega x)_{1,0}\psi_1 = 0$$

Questo sempre perché solo due transizioni permettono valori non nulli; tuttavia, la funzione d'onda ψ_{-1} deve essere nulla in quanto associata a un livello energetico non ammesso, mentre dall'altra parte $(\hat{x}-i\omega x)_{1,0} = 0$ per quanto abbiamo detto poco fa su questi operatori; in sintesi, questi operatori ci permettono di salire e scendere tra i livelli energetici e, non potendo scendere oltre lo stato fondamentale, ci troviamo davanti un termine nullo. Questo però ci permette di ricavare proprio lo stato fondamentale:

$$\begin{aligned} (\hat{x}-i\omega x)\psi_0 &= 0 \\ \left(-i\frac{\hbar}{M}\frac{d}{dx} - i\omega x\right)\psi_0 &= 0 \\ \frac{i\hbar}{M}\frac{d}{dx}(\psi_0) &= -i\omega x\psi_0 \\ \rightarrow \psi_0' &= \frac{M\omega}{\hbar}x\psi_0 \\ \psi_0 &= (\text{cost})e^{-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2} \end{aligned}$$

La costante si ricava ovviamente normalizzando l'integrale della funzione d'onda. Per calcolare le funzioni d'onda degli stati eccitati si utilizza allora l'operatore di creazione, in modo che $(\hat{x}+i\omega x)\psi_{n-} = (\hat{x}+i\omega x)_{n,n-1}\psi_n$, e iterando il processo. Alla fine otteniamo l'espressione generale delle funzioni d'onda dell'oscillatore armonico:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{M}{2\omega\hbar}} \left(-\frac{\hbar}{M}\frac{d}{dx} + \omega x\right)\psi_{n-1}$$



4.3.2 Oscillatore armonico “secondo” Schrödinger

Ignorando totalmente qualsiasi tipo di ragionamento causa-effetto che potrebbe essere fatto in una situazione simile, risolviamo direttamente l'equazione di Schrödinger senza neanche fermarsi a chiedersi se sia o meno una buona idea; l'equazione ovviamente è:

$$\psi'' + \frac{2M}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} M \omega^2 x^2 \right) \psi = 0$$

Cambiamo variabile per operare con quantità adimensionali, ponendo $\xi = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} x$; da questo $\frac{d}{dx} = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} \frac{d}{d\xi}$ e, quindi, $\frac{d^2}{dx^2} = \frac{M\omega}{\hbar} \frac{d^2}{d\xi^2}$. In sintesi l'equazione diventa:

$$\psi''(\xi) + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \psi(\xi) = 0$$

Ora, ci sono due modi per procedere. Si può cercare se un'equazione simile è già stata risolta e tabulata, e prendere la soluzione dalla tavole, oppure lavorare di gomito e ricavarcela. Ovviamente questa equazione è nota e anche le sue soluzioni, chiamate **polinomi di Hermite**, ma noi procederemo a ricavarli manualmente.

Il potenziale dell'oscillatore armonico permette orbite chiuse e, di conseguenza, uno spettro discreto. Al di fuori della regione permessa, come ormai abbiamo imparato, le funzioni d'onda diventano esponenziali decrescenti. Cerchiamo allora queste funzioni dove ξ è molto grande, così da avere $\xi \rightarrow \infty, \psi \rightarrow 0$. Se consideriamo il limite per ξ molto grande, il termine $\frac{2E}{\hbar\omega}$ è più o meno come il Belgio durante la seconda guerra mondiale, quindi l'equazione diventa semplicemente:

$$\psi'' - \xi^2 \psi = 0$$

La cui soluzione è $\psi \sim e^{\pm\xi}$. Tuttavia, se prendessimo come soluzione $\psi = e^{\pm\frac{\xi^2}{2}}$, questa è comunque soluzione (si verifica in un passaggio); la differenza tra questa e l'esponenziale di primo ordine è che questa soluzione va a zero più rapidamente e ci piace di più. Razzismo tra esponenziali.

Posto infatti:

$$\psi = \chi(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0$$

Affinché sia valida, basta richiedere che $\chi(\xi)$ sia al più un polinomio. Se sostituiamo questa soluzione nell'equazione di Schrödinger otteniamo:

$$\chi''(\xi) - 2\xi \chi'(\xi) + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) \chi(\xi) = 0$$

Poniamo $\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n$ con n qualsiasi cosa (potrei dirvi che non è un intero ma tanto non mi credereste). Proviamo una soluzione polinomiale qualsiasi e la sostituiamo nell'equazione:



$$\begin{aligned}\chi &= \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s \\ \chi' &= \sum_{s=0}^{\infty} a_s s \xi^{s-1} \\ \chi'' &= \sum_{s=0}^{\infty} a_s s(s-1) \xi^{s-2} \\ \sum_{s=0}^{\infty} a_s s(s-1) \xi^{s-2} - 2 \sum_{s=0}^{\infty} a_s s \xi^s + 2n \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s &= 0\end{aligned}$$

Osserviamo che per $s = 0, 1$ il primo termine è sempre nullo, e quindi possiamo far partire la sommatoria direttamente da $s = 2$ senza perdere di generalità; a questo punto possiamo riportarla a $s = 0$ modificando i coefficienti; in sintesi l'equazione diventa:

$$\sum_{s=0}^{\infty} [a_{s+2}(s+2)(s+1) - 2sa_s + 2na_s] \xi^s = 0$$

Esclusa la soluzione inutile $\xi = 0$, la soluzione di questa equazione riguarda i coefficienti della sommatoria:

$$a_{s+2} = -\frac{2(n-s)}{(s+2)(s+1)} a_s$$

A un certo punto però $\chi(\xi)$ deve fermarsi, così da permettere all'esponenziale di vincere e ammazza la funzione d'onda; dovrà quindi essere $s = n$ ovvero n è **un numero intero** (chi l'avrebbe mai detto, eh).

A questo punto possiamo trovare le funzioni d'onda per serie; partendo dal caso più semplice, quando il polinomio muore subito con $n = s = 0$, abbiamo la funzione:

$$\psi_0 = (\text{cost}) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Osserviamo che è la stessa soluzione trovata col metodo di Heisenberg; ricaviamo per normalizzazione la costante:

$$c^2 \int dx |\psi|^2 = 1 \rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}} c^2 \int d\left(\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\left(\sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} x\right)^2} = 1$$

L'integrale di una gaussiana è $\sqrt{\pi}$, quindi ricaviamo che $c = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$. Troviamo quindi la funzione d'onda associata al primo livello energetico:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad \psi_0 = \left(\frac{M\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar} x^2}$$



Se volessimo trovare le altre funzioni d'onda dobbiamo salire di grado nel polinomio; per $n = 1$ la funzione d'onda è $\psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ associata al livello $E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$. Normalizziamo per ricavare il coefficiente a_1 :

$$|a_1|^2 \int d\xi \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 1$$

$$|a_1|^2 = \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\int d\xi e^{-\alpha \xi^2} \right) = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{\alpha}} \right) \int d(\sqrt{\alpha} \xi) e^{-(\sqrt{\alpha} \xi)^2} \right] = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \right)$$

Da questo ricaviamo $a_1 = \sqrt{2} \left(\frac{M\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}}$.

Potremmo continuare così all'infinito, ma ormai il procedimento è ben chiaro. Riprendiamo quindi le soluzioni tabulate, che abbiamo detto essere i **polinomi di Hermite**, e scriviamo la generica funzione d'onda:

$$\psi_m = \left(\frac{M\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2^{\frac{m}{2}} \sqrt{m!}} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar} x^2} \cdot H_m \left(x \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} \right)$$

$$H_m(\xi) = (-1)^m e^{\xi^2} \frac{d^m}{d\xi^m} e^{-\xi^2}$$

4.4 Potenziale delta

Consideriamo un potenziale del tipo $V(x) = -V_0 \delta(x)$, dove $V_0 > 0$ e $\delta(x)$ indica la delta di Dirac. Ci chiediamo se un potenziale simile ammette stati legati.

L'equazione di Schrödinger diventa:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0 \delta(x)) \psi(x) = 0$$

Esclusa l'origine, in cui è presente un'evidente singolarità, avremo altrove $\psi'' - \kappa^2 \psi = 0$, con $\kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$. Come al solito, raccordiamo le soluzioni per x maggiore e minore dell'origine, ottenendo:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{-\kappa x} & x > 0 \\ e^{\kappa x} & x < 0 \end{cases}$$

Nell'origine vale invece:

$$\psi''(x) - \kappa^2 \psi(x) + \underbrace{\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)}_{\mu_0} \delta(x) \psi(x) = 0$$

Integrando questa espressione in un intervallo piccolo e simmetrico attorno l'origine:

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx |\psi''(x)| - \kappa^2 \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \psi(x) + \mu_0 \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \delta(x) \psi(x) = 0$$



Da questa ricaviamo un'informazione sulla funzione d'onda nell'origine: $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\mu_0\psi(0)$. Questo ci dice che abbiamo una discontinuità nella derivata prima della funzione d'onda; nei casi precedente potevamo raccordare anche le derivate prime ma, in questo caso, non possiamo farlo in quanto sono determinate dal potenziale considerato. Tuttavia la funzione resta continua nell'origine.

Ricapitolando:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{-\kappa x} & x > 0 \\ e^{\kappa x} & x < 0 \end{cases} \quad \psi'(x) = \begin{cases} -\kappa e^{-\kappa x} & x > 0 \\ \kappa e^{\kappa x} & x < 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi'(0^+) = -\kappa = -\kappa\psi(0) & x > 0 \\ \psi'(0^-) = \kappa = \kappa\psi(0) & x < 0 \end{cases}$$

Unendo queste informazioni con la condizione sulle derivate prime otteniamo che $\mu_0 = 2\kappa$. Da questa ricaviamo l'energia:

$$|E| = \frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

Esiste quindi uno stato legato.

Ora ci chiediamo invece quale sia la posizione x_0 tale che la probabilità di trovare la particella nell'intervallo $(-x_0, x_0)$ sia $\frac{1}{2}$. Dal tipo di potenziale con cui abbiamo a che fare ci aspettiamo che sia parecchio vicina all'origine. Poiché $\kappa = \frac{\mu_0}{2} = \frac{mV_0}{\hbar^2}$, vale

$$\psi(x) = \begin{cases} x > 0 & Ae^{-\frac{mV_0}{\hbar^2}x} \\ x < 0 & Ae^{\frac{mV_0}{\hbar^2}x} \end{cases}$$

Quindi dobbiamo porre:

$$\int_{-x_0}^{x_0} dx |A|^2 e^{-\frac{2mV_0}{\hbar^2}x} = 2 \int_0^{x_0} dx |A|^2 e^{-\frac{mV_0}{\hbar^2}x} = \frac{1}{2} = -\frac{\hbar^2}{mV_0} |A|^2 \left(1 - \exp\left\{-\frac{2mV_0}{\hbar^2}x\right\} \right)$$

Normalizzando e ponendo $P(-\infty < x < \infty) = 1$, ovvero $\frac{|A|^2\hbar^2}{mV_0} = 1$ otteniamo il risultato:

$$x_0 = \frac{\hbar^2}{2mV_0} \ln 2$$



Capitolo 5

Potenziali centrali

5.1 Momento angolare orbitale

Tratteremo in questo capitolo le caratteristiche dei *potenziali centrali*, ovvero quei potenziali che dipendono solo dalla distanza da un centro $V(r) = V(\sqrt{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}})$. La caratteristica fondamentale di questi potenziali, come vedremo, è la loro invarianza sotto rotazioni: a fine capitolo tratteremo due problemi, l'atomo di idrogeno e l'oscillatore armonico tridimensionale, che rientrano in questa categoria.

I potenziali centrali possono essere di diverso tipo, a seconda della loro dipendenza dal raggio. I potenziali che vanno come $\frac{1}{r}$ non presentano una caduta sul centro e permettono agli atomi di essere stabili al loro livello fondamentale; quelli che vanno come $\frac{1}{r^2}$ sotto opportune condizioni presentano una caduta nel centro mentre quelli del tipo $\frac{1}{r^3}$ presentano sempre la caduta sul centro, anche se non ci sono riscontri fisici di potenziali simili.

Risolveremo, per problemi simili, l'equazione di Schrödinger in tre dimensioni. L'hamiltoniana di problemi simili si può ricavare dal problema classico dei due corpi:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r)$$

Con $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ massa ridotta. L'equazione di Schrödinger ha la forma classica vista finora:

$$E\psi = H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi$$

Con $\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(\mathbf{x})$.

5.1.1 Definizione di momento angolare

Agli operatori di posizione e impulso visti finora si affianca l'operatore **momento angolare** definito come:

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} = -i\hbar(\mathbf{x} \times \nabla)$$



Spesso viene indicato per componenti, e anche noi useremo spesso la notazione $L_i = -i\hbar\epsilon_{ijk}x_j\partial_k$ (indici ripetuti indicano una sommatoria sull'indice, da qui in avanti), dove ϵ_{ijk} è il **simbolo di Levi-Civita**:

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \epsilon_{123} \text{ e permutazioni pari} \\ -1 & \epsilon_{132} \text{ e permutazioni dispari} \\ 0 & \text{per indici ripetuti} \end{cases}$$

Il simbolo di Levi-Civita indica un tensore di rango 3 *antisimmetrico* con proprietà definite:

- $\epsilon_{ijk} \cdot \epsilon_{irs} = \delta_{jr}\delta_{ks} - \delta_{js}\delta_{rk}$;
- $\epsilon_{ijr} \cdot \epsilon_{ijk} = 2\delta_{kr}$;
- $\epsilon_{ijk}\epsilon_{ijk} = 6$

Calcoliamo adesso i commutatori di \mathbf{L} , partendo dalla posizione $[L_i, x_l] = L_i x_l - x_l L_i$. Per comodità, vediamo prima il commutatore $[\partial_k, x_l] = \partial_k x_l - x_l \partial_k$, applicandolo a una generica funzione d'onda:

$$[\partial_k, x_l]\psi = \partial_k(x_l\psi) - x_l\partial_k(\psi) = \frac{\partial x_l}{\partial x_k}\psi + x_l\frac{\partial\psi}{\partial x_k} - x_l\frac{\partial\psi}{\partial x_k} = \delta_{kl}\psi$$

Concludiamo da questo che $[\partial_k, x_l] = \delta_{kl}$. Nel momento angolare, poiché definito come prodotto vettoriale tra posizione e impulso, compare l'operatore ∂_k , quindi avremo che:

$$[L_i, x_l] = [-i\hbar\epsilon_{ijk}x_j\partial_k, x_l] = -i\hbar\epsilon_{ijk}[x_j\partial_k, x_l]$$

Vale che $[AB, C] = ABC - CAB = ABC - ACB + ACB - CAB = A[B, C] + [A, C]B$, quindi:

$$-i\hbar\epsilon_{ijk}[x_j\partial_k, x_l] = -i\hbar\epsilon_{ijk}\{x_j[\partial_k, x_l] + \underbrace{[x_j, x_l]}_{=0}\partial_k\}$$

Da cui concludiamo che $[L_i, x_j] = +i\hbar\epsilon_{ijk}x_k$ perchè $-i\hbar\epsilon_{ijk}x_j\delta_{kl} = -i\hbar\epsilon_{ijl}x_j = i\hbar\epsilon_{ilj}x_j \rightarrow i\hbar\epsilon_{ijk}x_k$. Ripetiamo il procedimento con l'operatore impulso, partendo prima dal commutatore:

$$[L_i, \partial_l] = -i\hbar\epsilon_{ijk}[x_j\partial_k, \partial_l] = -i\hbar\epsilon_{ijk}\{x_j\underbrace{[\partial_k, \partial_l]}_{=0} + [x_j, \partial_l]\partial_k\}$$

Ci tocca quindi esprimere $[x_j, \partial_l]$, lo applichiamo a una generica funzione d'onda:

$$[x_j, \partial_l]\psi = x_j\partial_l\psi - \partial_l(x_j\psi) = -\delta_{lj}\psi$$

Quindi concludiamo $[L_i, \partial_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\partial_k$. Qua c'è puzza di risultato comune. Vuoi vedere che questo vale per ogni operatore vettoriale \mathbf{V} ? Ovvero che $[L_i, V_j] =$



$i\hbar\epsilon_{ijk}V_k$? Proviamo con un altro operatore vettoriale, ovvero calcoliamo il commutatore del momento angolare con se stesso. Vale proprio $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$: questa è una regola generale che definisce **l'algebra di Lie per i generatori delle rotazioni** in spazi tridimensionali. Infatti, come vedremo meglio prossimamente, una generica rotazione si può scrivere come $e^{i\boldsymbol{\theta}\cdot\mathbf{L}}$ con $\boldsymbol{\theta}$ che indica l'asse attorno cui si effettua la rotazione, mentre \mathbf{L} è il momento angolare.

Vediamo allora se è vero che $[L_1, L_2] = i\hbar L_3$.

$$\begin{aligned} &= [L_1, -i\hbar\epsilon_{231}x_3\partial_1 - i\hbar\epsilon_{213}x_1\partial_3] = \\ &= -i\hbar[L_1, x_3\partial_1] + i\hbar[L_1, x_1\partial_3] = \\ &= -i\hbar[-i\hbar x_2\partial_1 + i\hbar x_1\partial_2] = i\hbar L_3 \end{aligned}$$

Quindi la regola generale del commutatore tra il momento angolare e operatori vettoriali, per quanto ci riguarda, funziona.

Cosa dire adesso riguardo $[L_i, V_j V_j]$?

$$[L_i, \mathbf{V}^2] = V_j[L_i, V_j] + [L_i, V_j]V_j = V_j(i\hbar\epsilon_{ijk}V_k) + i\hbar\epsilon_{ijk}V_k V_j = i\hbar\epsilon_{ijk}(V_j V_k + V_k V_j)$$

Chiamiamo $S_{jk} = (V_j V_k + V_k V_j)$ (è un tensore simmetrico di rango 2, vale $S_{jk} = S_{kj}$ poiché $[V_j, V_k] = 0$). Osserviamo che $\epsilon_{ijk}S_{jk}$, se cambiamo i nomi degli indici $j = k$ e $k = j$ (essendo indici muti è lecito farlo), otteniamo che $\epsilon_{ijk}S_{jk} = \epsilon_{ikj}S_{kj} = -\epsilon_{ijk}S_{jk}$, quindi in conclusione $\epsilon_{ijk}S_{jk} = 0$. Questa è una regola generale per tutti i tensori: moltiplicando tra loro un tensore simmetrico con uno antisimmetrico il risultato è sempre zero. Questo ci indica che il commutatore:

$$[L_i, \mathbf{V}^2] = 0$$

Il momento angolare commuta con tutti i prodotti scalari. Poiché l'hamiltoniana scritta in forma $H = \frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}}{2m} + V(\sqrt{\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}})$ dipende *solo* da prodotti scalari, ne consegue che **l'hamiltoniana di potenziali centrali commuta con il momento angolare**. Poiché \mathbf{L} è il generatore delle rotazioni (come in meccanica classica), possiamo anche dire che in questo caso **l'hamiltoniana è invariante sotto rotazioni**, ovvero presenta una simmetria. In meccanica classica, a ogni legge di simmetria si associa una legge di conservazione. Dalle leggi di Ehrenfest vale:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H, A] \right\rangle$$

Se $[\mathbf{L}, H] = 0$ vuol dire che il valore atteso del momento angolare è conservato nel tempo, ovvero è una costante del moto. Inoltre, il momento angolare ha anche altre proprietà:

- è hermitiano;
- ha propri autovettori (chiamati *armoniche sferiche*) e autovalori (i rispettivi momenti angolari);
- è quantizzato per interi.



Diciamo allora che l'autovalore di \mathbf{L} è un numero quantico conservato per hamiltoniane in campi centrali.

Riassumendo, valgono i seguenti commutatori:

$$\begin{aligned} [L_i, H] &= 0 \\ [L_i, \mathbf{V}^2] &= 0 \\ [\mathbf{L}^2, H] &= 0 \end{aligned}$$

Questo vuol dire che tutti questi operatori hanno un set di autovettori comuni. Le autofunzioni dell'hamiltoniana sono le funzioni d'onda ψ_n ; poiché $[\mathbf{L}^2, H] = 0$, hamiltoniana e momento angolare hanno autofunzioni comuni ψ_{nl} ; poiché vale anche $[L_i, H] = 0$, ci sarà un set di autofunzioni ψ_{nlm} comune ai tre operatori. I pedici indicano rispettivamente:

- n il livello energetico, dall'equazione di Schrödinger;
- l è l'autovalore di \mathbf{L}^2 ;
- m è l'autovalore di uno dei L_i .

5.1.2 Il momento angolare genera rotazioni

In che senso il momento angolare genera le rotazioni? Prendiamo $L_3 = -i\hbar(x_1\partial_2 - x_2\partial_1)$ e consideriamo l'operatore:

$$\exp\left(\frac{i\theta L_3}{\hbar}\right) = \exp[\theta(x_1\partial_2 - x_2\partial_1)]$$

Se consideriamo θ piccolo possiamo espandere in serie l'esponenziale ottenendo $1 + \theta(x_1\partial_2 - x_2\partial_1) + O(\theta^2)$; lo facciamo operare su un generico vettore (x_1, x_2, x_3) :

$$\begin{vmatrix} 1 + \theta(x_1\partial_2 - x_2\partial_1) & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \theta(x_1\partial_2 - x_2\partial_1) & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \theta(x_1\partial_2 - x_2\partial_1) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_1 - \theta x_2 \\ x_2 + \theta x_1 \\ x_3 \end{vmatrix}$$

Questa corrisponde, per θ piccoli, a una rotazione del vettore attorno l'asse \hat{x}_3 , quindi l'operatore L_i non fa altro che generare rotazioni attorno l' i -esimo asse. Ritourneremo a parlare di rotazioni e simmetrie in futuro, entrando meglio nei dettagli.

5.1.3 Il momento angolare è hermitiano

Abbiamo detto che il momento angolare è hermitiano; tuttavia, essendo un operatore prodotto, non è così scontato che lo sia, anche se i due fattori sono hermitiani. Infatti, dati A, B hermitiani, per essere AB esso stesso hermitiano deve verificarsi:

$$\int \psi^* AB\psi = \int (A\psi)^* B\psi = \int (BA\psi)^* \psi \xrightarrow{\text{se hermitiano}} \int (AB\psi)^* \psi$$



Quindi, affinché sia hermitiano, gli operatori A, B devono commutare tra loro. La posizione e l'impulso sappiamo non commutare, tuttavia non commutano nelle stesse coordinate, infatti $[X_i, P_j] = -i\hbar\delta_{ij}$. Poiché nel momento angolare appaiono coordinate diverse di entrambi, queste commutano tra loro e quindi il momento angolare è un operatore hermitiano.

5.1.4 Invarianza dell'hamiltoniana sotto rotazioni

Consideriamo il valore atteso dell'hamiltoniana $\langle H \rangle = (\psi, H\psi)$; prendiamo un operatore *unitario* che genera rotazioni, ad esempio:

$$e^{i\frac{\theta \cdot \mathbf{L}}{\hbar}} \psi = \mathcal{U}\psi$$

Generando una rotazione della funzione d'onda, vediamo che il valore atteso dell'hamiltoniana resta invariato:

$$(\mathcal{U}\psi, H(\mathcal{U}\psi)) = (\mathcal{U}\psi, \mathcal{U}H\psi) = (\mathcal{U}^{-1}\mathcal{U}\psi, H\psi) = (\psi, H\psi)$$

Questo vale ovviamente se l'hamiltoniana commuta con l'operatore unitario.

5.1.5 Spoiler: manca qualcosa

Quello che abbiamo detto, e che diremo per tutto il capitolo, vale ovviamente per il momento angolare \mathbf{L} come lo abbiamo definito. Tuttavia, *non è tutta la storia* che dobbiamo raccontare: come vedremo meglio, a questo momento angolare se ne affianca un altro, intrinseco del sistema quantistico, detto *di spin*, e quindi si è soliti chiamare \mathbf{L} come **momento angolare orbitale** per distinguerlo dal momento angolare del sistema, che risulterà essere la somma dell'orbitale e dello spin. Giusto per rovinarvi la sorpresa diciamo.

5.2 Trattazione in coordinate sferiche

5.2.1 Momento angolare in coordinate sferiche

Riscriviamo il momento angolare orbitale in coordinate sferiche, partendo dalla definizione delle stesse:

$$\begin{aligned} x_1 &= r \sin \theta \cos \phi \\ x_2 &= r \sin \theta \sin \phi \\ x_3 &= r \cos \theta \end{aligned}$$

Riscriviamo gli operatori di derivazione rispetto agli angoli in funzione delle coordinate euclidee:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} &= \partial_\theta = \partial_\theta(x_i)\partial_i = r \cos \theta \cos \phi \partial_1 + r \cos \theta \sin \phi \partial_2 - r \sin \theta \partial_3 \\ \frac{\partial}{\partial \phi} &= \partial_\phi = \partial_\phi(x_i)\partial_i = -r \sin \theta \sin \phi \partial_1 + r \sin \theta \cos \phi \partial_2 \end{aligned}$$



Osserviamo subito che $\partial_\phi = -x_2\partial_1 + x_1\partial_2 = \frac{i}{\hbar}L_3$, da cui otteniamo subito la prima componente in coordinate sferiche:

$$L_3 = -i\hbar\partial_\phi$$

Passiamo alle altre coordinate. Scriviamo le seguenti quantità:

$$\begin{aligned}\cos\phi\cot\theta\partial_\phi &= -r\cos\theta\sin\phi\cos\phi\partial_1 + r\cos\theta\cos^2\phi\partial_2 \\ \sin\phi\partial_\theta &= r\cos\theta\cos\phi\sin\phi\partial_1 + r\cos\theta\sin^2\phi\partial_2 - r\sin\theta\sin\phi\partial_3\end{aligned}$$

Sommandole otteniamo $r\cos\theta\partial_2 - r\sin\theta\sin\phi\partial_3 = x_3\partial_2 - x_2\partial_3$, quindi abbiamo ottenuto la componente 1 del momento angolare:

$$L_1 = i\hbar(\cos\phi\cot\theta\partial_\phi + \sin\phi\partial_\theta)$$

Allo stesso modo, si verifica l'ultima componente:

$$L_2 = i\hbar(\sin\phi\cot\theta\partial_\phi - \cos\phi\partial_\theta)$$

Possiamo adesso calcolare $\mathbf{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$ in coordinate sferiche:

$$\begin{aligned}L_1^2 &= -\hbar^2(\sin\phi\partial_\theta + \cos\phi\cot\theta\partial_\phi)(\sin\phi\partial_\theta + \cos\phi\cot\theta\partial_\phi) = \\ &= -\hbar^2[\sin^2\phi\partial_\theta^2 + \sin\phi(\partial_\theta\cot\theta)\cos\phi\partial_\phi + \sin\phi\cos\phi\cot\theta\partial_\theta\partial_\phi + \\ &\quad + \cos^2\phi\cot\theta\partial_\theta + \cos\phi\cot\theta\sin\phi\partial_\phi\partial_\theta - \cos\phi\sin\phi\cot\theta\partial_\phi + \cos^2\phi\cot^2\theta\partial_\phi^2] \\ L_2^2 &= -\hbar^2(-\cos\phi\partial_\theta + \sin\phi\cot\theta\partial_\phi)(-\cos\phi\partial_\theta + \sin\phi\cot\theta\partial_\phi) = \\ &= -\hbar^2[\cos^2\phi\partial_\theta^2 - \cos\phi\sin\phi(\partial_\theta\cot\theta)\partial_\phi - \cos\phi\sin\phi\cot\theta\partial_\theta\partial_\phi + \\ &\quad + \sin^2\phi\cot\theta\partial_\theta - \cos\phi\sin\phi\cot\theta\partial_\phi\partial_\theta + \sin\phi\cos\phi\cot^2\theta\partial_\phi + \sin^2\phi\cos^2\phi\cot^2\theta\partial_\phi^2] \\ L_3^2 &= -\hbar^2\partial_\phi^2\end{aligned}$$

Sommando tutti i termini otteniamo l'espressione del momento angolare in coordinate sferiche:

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\phi^2 \right]$$

5.2.2 Laplaciano in coordinate sferiche

Per poter scrivere il laplaciano in coordinate sferiche utilizziamo la definizione di \mathbf{L} , riscriviamo di nuovo \mathbf{L}^2 e lo avremo bello che pronto in un'equazione algebrica. Più facile a dirsi che a farsi.

$$\begin{aligned}\mathbf{L}^2 &= -\hbar^2(\epsilon_{ijk}x_j\partial_k)(\epsilon_{irs}x_r\partial_s) = \\ &= -\hbar^2\epsilon_{ijk}\epsilon_{irs}x_j\partial_k(x_r\partial_s) = \\ &= -\hbar^2(\delta_{jr}\delta_{ks} - \delta_{js}\delta_{kr})(x_j\delta_{rk}\partial_s + x_jx_r\partial_k\partial_s) = \\ &= -\hbar^2(x_j\partial_j + \underbrace{x^2}_{r^2} \underbrace{\partial^2}_{\Delta} - 3x_j\partial_j - x_jx_k\partial_j\partial_k)\end{aligned}$$



Riscriviamo il termine $x_j x_k \partial_j \partial_k = x_k \partial_k (x_j \partial_j) - x_k \delta_{jk} \partial_j$. Osserviamo poi che $\partial_r = \partial_r(x_i) \partial_i$, ma in tutte le coordinate $\partial_r(x_i) = \frac{x_i}{r}$, quindi possiamo porre $r \partial_r = x_i \partial_i$:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= -\hbar^2(r^2 \Delta - 2x_j \partial_j - x_k \partial_k (x_j \partial_j) + x_k \delta_{jk} \partial_j) = \\ &= -\hbar^2(r^2 \Delta - x_j \partial_j - x_k \partial_k (x_j \partial_j)) = \\ &= -\hbar^2(r^2 \Delta - r \partial_r - r \partial_r (r \partial_r)) \end{aligned}$$

Da questa otteniamo che $\mathbf{L}^2 = -\hbar^2(r^2 \Delta - \partial_r (r^2 \partial_r))$, esplicitando otteniamo il **laplaciano in coordinate sferiche**:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

5.2.3 Equazione di Schrödinger in coordinate sferiche

Partendo dall'equazione di Schrödinger per potenziali centrali che abbiamo visto nella precedente sezione $E\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \psi + V(r)\psi$, esprimendo il laplaciano in coordinate sferiche otteniamo l'equazione in coordinate sferiche:

$$E\psi(\mathbf{x}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) \right) \psi(\mathbf{x}) + \left(\frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) \psi(\mathbf{x})$$

Abbiamo isolato i due termini per evidenziarli: il primo è il termine cinetico dell'equazione, mentre il secondo è il termine di potenziale, potremmo chiamare *potenziale efficace* $V_{\text{eff}}(r) = \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)$.

Da questo punto di vista sembra tutto uguale alla meccanica classica, tuttavia dobbiamo ancora discutere di come opera il momento angolare quando agisce su una funzione d'onda. Abbiamo detto che momento angolare e hamiltoniana hanno autofunzioni comuni, ma gli autovalori di \mathbf{L}^2 non è il momento angolare: che vedremo sono valori discreti.

5.3 Armoniche sferiche

Per potenziali del tipo $\frac{1}{r}, \frac{1}{r^2}, \dots$ l'origine rappresenta una singolarità evidente. Supponendo però i potenziali non siano troppo rigidi, come nel caso coulombiano, le funzioni d'onda possono essere ben descritte da polinomi moltiplicati per esponenziali decrescenti, come nel caso dell'oscillatore armonico. I polinomi in questo caso sono omogenei.

In coordinate sferiche un polinomio generico di grado l è esprimibile come $r^l f(\theta, \phi)$; possiamo quindi imporre:

$$\psi(\mathbf{x}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^l Y(\theta, \phi)$$

In questo caso $Y(\theta, \phi)$ può essere scritto anche come $Y(\hat{\mathbf{x}})$ essendo una generica funzione dell'angolo, dove $\hat{x}_i = \frac{x_i}{r}$. Secondo questo limite, il comportamento delle funzioni d'onda è regolare vicino all'origine e, per potenziali non troppo cattivi,



ci aspettiamo che sia corretto. Per potenziali più rigidi, come ad esempio $\frac{1}{r^3}$, avremo una caduta sul centro, che corrisponde ad avere come livello fondamentale $E_0 = -\infty$.

Consideriamo l'equazione di Schrödinger in coordinate sferiche scritta nella scorsa sezione e giriamo i termini, riscrivendola come:

$$\mathbf{L}^2\psi(\mathbf{x}) = \hbar^2\partial_r(r^2\partial_r)\psi(\mathbf{x}) + \left(2\mu r^2(E - V(r))\right)\psi(\mathbf{x})$$

Se il potenziale non è troppo singolare nell'origine, possiamo considerare il secondo termine nullo, e quindi:

$$\mathbf{L}^2\psi(\mathbf{x}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \hbar^2\partial_r(r^2\partial_r\psi(\mathbf{x}))$$

Sfruttando la condizione sulle funzioni d'onda per distanze che tendono a zero, avremo:

$$\mathbf{L}^2\psi(\mathbf{x}) = \hbar^2\partial_r(r^2\partial_r(r^l Y(\theta, \phi))) = \hbar^2\partial_r(lr^{l+1}Y(\theta, \phi)) = \hbar^2l(l+1)r^l Y(\theta, \phi)$$

Ovvero $\mathbf{L}^2\psi(\mathbf{x}) = \hbar^2l(l+1)\psi(\mathbf{x})$: abbiamo trovato che **gli autovalori di \mathbf{L}^2 sono interi pari a $\hbar^2l(l+1)$** . Quindi il momento angolare è quantizzato e per ottenere questo risultato abbiamo solo sfruttato la definizione; questa regola vale ovviamente vicino all'origine.

Il problema è che le componenti del momento angolare generano rotazioni, mantenendo comunque il raggio costante; possiamo allora generalizzare la funzione d'onda come il prodotto tra una funzione radiale e una funzione angolare $\psi(\mathbf{x}) = R(r)Y(\theta, \phi)$. Osserviamo a questo punto che:

$$\mathbf{L}^2\psi(\mathbf{x}) = \mathbf{L}^2(R(r)Y(\theta, \phi)) = R(r)\mathbf{L}^2(Y(\theta, \phi))$$

Ovvero il momento angolare, mantenendo il raggio costante, non agisce sulla parte radiale della funzione d'onda. Questa relazione *vale ovunque* e non solo vicino all'origine, è una caratteristica intrinseca del momento angolare; nel limite per raggi piccoli riotteniamo il precedente risultato che, quindi, non vale solo per $r \rightarrow 0$. Generalizzando possiamo quindi dire che:

$$\mathbf{L}^2Y(\theta, \phi) = \hbar^2l(l+1)Y(\theta, \phi)$$

Le autofunzioni del momento angolare sono quindi le $Y(\theta, \phi)$ con autovalori $l(l+1)$. Queste funzioni sono note come **armoniche sferiche**.

5.3.1 Equazione di Schrödinger radiale

Gli operatori L_3, \mathbf{L}^2 commutano tra loro, quindi avranno autofunzioni comuni; non ci aspettiamo allora che le autofunzioni di L_3 siano qualcosa di diverso dalle armoniche sferiche; ricordando la definizione di L_3 in coordinate sferiche avremo quindi:



$$(-i\hbar\partial_\phi)Y(\theta, \phi) = \hbar mY(\theta, \phi)$$

Dove m è un qualche autovalore. Da questa relazione possiamo scrivere la forma generale delle armoniche sferiche:

$$Y(\theta, \phi) = e^{im\phi} f(\theta)$$

Un'altra condizione che vale sulle armoniche sferiche è la periodicità, ovvero $Y(\theta, 0) = Y(\theta, 2\pi)$. Questo ci indica che **gli autovalori di L_3 sono numeri interi**.

Possiamo adesso riscrivere l'equazione di Schrödinger:

$$E R(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} l(l+1) R(r) + V(r) R(r)$$

Questa è anche nota come **equazione di Schrödinger radiale**; notiamo come le armoniche sferiche escano fuori da tutti gli operatori che compaiono nell'equazione, semplificandosi. Questa equazione è ovviamente diversa dalla formulazione classica, anche perché abbiamo sostituito al momento angolare i suoi autovalori. Le armoniche sferiche restano vincolate dall'equazione $\mathbf{L}^2 Y(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y(\theta, \phi)$

Il termine $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ rappresenta la barriera centrifuga in un atomo o sistema dotato di potenziale; questa va sempre considerata, anche quando non lo abbiamo fatto, come nel caso del decadimento alpha.

L'equazione radiale ha caratteristiche note e coerenti con tutto quello che abbiamo detto finora. Per la regola di Born vogliamo che sia finita l'ampiezza della funzione d'onda, da cui

$$\int |\psi|^2 d^3x < \infty \quad \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr \int_0^{4\pi} d\Omega |Y(\theta, \phi)|^2 < \infty$$

Possiamo quindi normalizzare tutto a 1 per ottenere delle ampiezze di probabilità; l'integrale radiale può essere riscritto come $\int_0^\infty |\chi|^2 dr$ dove abbiamo posto $Rr = \chi$; sostituendola nell'equazione radiale otteniamo un risultato già noto:

$$\chi'' + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V_{\text{eff}}) \chi = 0$$

Abbiamo riottenuto l'equazione di Schrödinger unidimensionale, solo che al posto del potenziale è presente il potenziale efficace con la caratteristica barriera centrifuga. Inoltre, avendo posto $R(r) \rightarrow r^l$ per $r \rightarrow 0$, otteniamo che per lo stesso limite $\chi(r \rightarrow 0) = 0$: questa condizione, con l'equazione appena trovata, formano un completo problema unidimensionale con condizione al contorno intrinseca.

5.3.2 Costruzione delle armoniche sferiche

Vediamo come poter costruire le armoniche sferiche. Queste sono spesso definite in modi diversi, solitamente si è soliti indicarle con Y_l^m , dove l è l'autovalore di L^2 e m l'autovalore di L_3 :



$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 Y_l^m &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m \\ L_3 Y_l^m &= \hbar m Y_l^m \end{aligned}$$

Generalmente, poste queste come le autofunzioni del momento angolare, si può quindi scrivere la funzione d'onda come $\psi(\mathbf{x}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$. Un'altra proprietà fondamentale nel calcolo delle armoniche sferiche è l'azione del laplaciano su queste:

$$\Delta(r^l Y_l^m) = 0$$

Unendo tutte queste proprietà si possono costruire esplicitamente le funzioni a *meno della fase*; come vedremo, questa è scelta una volta per le armoniche sferiche e, di conseguenza, tutte le armoniche sferiche presentano poi una fase coerente con quella scelta. I polinomi $r^l Y_l^m$ sono omogenei di ordine l nelle variabili x_i tradotte in coordinate sferiche. Possiamo ridefinire queste come:

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= r \sin \theta \cos \phi \\ x_2 &= r \sin \theta \sin \phi \\ x_3 &= r \cos \theta \end{aligned} \right\} \rightarrow \begin{cases} x_{\pm} = x_1 \pm i x_2 = r \sin \theta e^{\pm i \phi} \\ x_3 = x_3 = r \cos \theta \end{cases}$$

Come abbiamo già detto, la funzione in ϕ è un esponenziale complesso $e^{im\phi}$. Passiamo alla costruzione delle armoniche sferiche. Se consideriamo, ad esempio, $m = 2$, avremo un termine $e^{i2\phi}$ e un polinomio omogeneo, ad esempio di grado 2, che possiamo costruire utilizzando x_{\pm} e x_3 . Ad esempio, x_{\pm}^2 è già un termine di secondo grado, e può rientrare tra i termini del polinomio, mentre $x_{\pm}^4 x_{\mp}^2$ è di grado 6 e non può essere preso in considerazione. Se allora chiamiamo η_{\pm} il numero dei fattori in x_{\pm} . Dall'equazione alle autofunzioni di L_3 ricaviamo che le armoniche sferiche devono contenere un numero η_{\pm} di fattori in x_{\pm} tali che $\eta_+ - \eta_- = m$.

Poiché il numero totale di fattori in tutte le variabili x_{\pm}, x_3 deve essere l , il coefficiente m è un intero positivo o negativo, che assume il massimo quando $\eta_+ = l, \eta_- = 0$ e il minimo quando $\eta_- = -l, \eta_+ = 0$. In conclusione il range è $-l \leq m \leq l$, ovvero **ci sono $2l + 1$ valori di m disponibili**, corrispondenti a $2l + 1$ armoniche sferiche per ogni l . Questo è algebricamente calcolabile.

Se contiamo il numero di polinomi indipendenti di grado l omogenei, dobbiamo partire dal considerare che $0 \leq \eta_+ \leq l$ e, quindi, $0 \leq \eta_- \leq (l - \eta_+)$. Quindi il numero di polinomi sarà:

$$\begin{aligned} \sum_{\eta_+=0}^l \sum_{\eta_-=0}^{l-\eta_+} 1 &= \sum_{\eta_+=0}^l (l - \eta_+ + 1) = \sum_{\eta_+=0}^l l - \sum_{\eta_+=0}^l \eta_+ + \sum_{\eta_+=0}^l 1 \\ &= l(l+1) - \frac{l}{2}(l+1) + (l+1) = \frac{1}{2}(l+1)(l+2) \end{aligned}$$

Questo è il numero totale di polinomi omogenei possibili, tuttavia non è l'unica condizione che abbiamo sulle armoniche sferiche: infatti $\Delta(r^l Y_l^m)$ ci fornisce un polinomio di grado $l - 2$ che, ripetendo questo calcolo, sono in totale $\frac{1}{2}l(l - 1)$



. Quindi il numero di polinomi indipendenti validi per costruire le armoniche sferiche sarà:

$$\frac{1}{2}(l+1)(l+2) - \frac{1}{2}l(l-1) = 2l + 1$$

Esattamente come avevamo considerato.

Partiamo col calcolare le armoniche sferiche. Il caso più semplice è $l = m = 0$, e avremo:

$$\int d\Omega |Y_0^0|^2 = 1 \rightarrow Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Troviamo che quindi è una costante senza dipendenza dagli angoli. Appena sappiamo di livello, con $l = 1$, abbiamo 3 possibilità: $m = -1, 0, 1$. La fase viene scelta a partire dall'armonica Y_1^0 , che tuttavia non è la più facile da calcolare: la più facile infatti è sempre quella col massimo valore di m , in questo caso $m = 1$. Per questa avremo un polinomio $Y_1^1 \propto \hat{x}_+$, dove con $\hat{x}_i = \frac{x_i}{r}$:

$$\begin{aligned} \int d\Omega |Y_1^1|^2 = 1 &\rightarrow |\alpha|^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta e^{i\phi} d\phi = 1 \\ &= |\alpha|^2 2\pi \int_0^\pi \sin \theta (1 - \cos^2 \theta) d\theta = |\alpha|^2 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta + \int_0^\pi \cos^2 \theta d \cos \theta = \\ &= |\alpha|^2 2\pi \frac{4}{3} \pi = 1 \\ \rightarrow \alpha &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \rightarrow Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \end{aligned}$$

Per determinare la fase occorre calcolare l'armonica Y_1^0 , che sarà data dal polinomio $Y_1^0 \propto \hat{x}_3$ per avere la giusta fase in ϕ :

$$|\alpha|^2 \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = 1 \rightarrow Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

Lo stesso procedimento vale per $Y_1^{-1} \propto \hat{x}_-$, da cui si ricava che $Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$.

Per le armoniche di grado $l = 2$ e superiori le cose funzionano allo stesso modo: avremo $Y_2^2 \propto \hat{x}_+^2, Y_2^1 \propto \hat{x}_+ \hat{x}_3$ e così via; unica attenzione va posta alle armoniche del tipo Y_l^0 , per le quali esistono diverse combinazioni possibili che ci forniscono la giusta fase in ϕ . Infatti, nel caso Y_2^0 abbiamo due possibilità: $Y_2^0 \propto \hat{x}_+ \hat{x}_-; \hat{x}_3^2$. Per poterla calcolare allora poniamo $Y_2^0 = A\hat{x}_+ \hat{x}_- + B\hat{x}_3^2$ e applichiamo la condizione del laplaciano $\Delta(r^2(A\hat{x}_+ \hat{x}_- + \hat{x}_3^2)) = 0$:

$$\Delta(r^2(A\hat{x}_+ \hat{x}_- + \hat{x}_3^2)) = \Delta(A(x_1^2 + x_2^2) + Bx_3^2) = 0$$

Da cui ricaviamo $4A+2B = 0$, possiamo quindi porre $Y_2^0 \propto \hat{x}_+ \hat{x}_- - 2\hat{x}_3^2$ e calcolare come prima l'espressione generale. Le armoniche del tipo Y_l^0 sono semplici da



calcolare, a patto che ci si ricordi i **polinomi di Legendre**: queste infatti sono definite come:

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$$

Dove $P_l(\cos \theta)$ sono i polinomi di Legendre. È riportata una tabella nelle appendici per le armoniche sferiche fino a $l = 4$ a cui si affianca anche una tabella dei polinomi di Legendre.

Piccolo avvertimento: in alcuni libri di testo la fase è scelta in modo diverso, ad esempio alcuni riportano una fase i^{-l} ; del come la fase scelta per l'armonica Y_l^0 definisca la fase per tutte le altre, lo vedremo in futuro parlando di somma di momenti angolari e operatori di scala.

Fisicamente, le armoniche sferiche descrivono gli orbitali atomici degli atomi: ad esempio, nell'atomo di idrogeno, Y_1^1 "descrive" l'orbitale dell'elettrone con $l = 1$ e $m = 1$; come vedremo, una più accurata descrizione dell'elettrone è fornita quando entra in mezzo anche lo spin.

5.3.3 Uso delle armoniche sferiche oltre la meccanica quantistica

Le armoniche sferiche non sono importanti solo in meccanica quantistica: in diverse branche della fisica sono utilizzate, come ad esempio per i potenziali gravitazionali o, in cosmologia, per studiare le **anisotropie della radiazione cosmica di fondo**. Nel capitolo 1 come esempio di radiazione di corpo nero avevamo descritto la radiazione cosmica di fondo, dicendo che, in ogni direzione, questa era sempre alla stessa temperatura di circa 3K, quando in realtà non è così, e sono presenti delle piccole anisotropie a seconda della direzione in cui si "punta" l'antenna. Queste anisotropie sono state prima ipotizzate teoricamente e poi confermate sperimentalmente.

Possiamo esprimere una variazione della temperatura di fondo dalla media $T_0 \approx 3\text{K}$ come $\Delta T(\hat{\mathbf{n}}) = T(\hat{\mathbf{n}}) - T_0$, e questa variazione, che dipende anche dalla posizione degli osservatori (che non possono trovarsi tutti sulla Terra (neanche in punti opposti di questa), perché sarebbero a distanze infinitesime per poter osservare le variazioni) è espressa come:

$$\Delta T(\hat{\mathbf{n}}) = \sum_{l,m} a_{lm} Y_l^m(\hat{\mathbf{n}})$$

Le armoniche sferiche *sono* queste stesse armoniche sferiche che abbiamo trattato finora, ma non hanno nulla a che vedere con la teoria del momento angolare quantistico (sono infatti, al di là di tutto, oggetti matematici). I coefficienti a_{lm} sono detti **coefficienti di multipolo**. Le anisotropie della radiazione di fondo possono essere di diversa scala e di diverse cause, ad esempio anche il moto della Terra produce delle piccole anisotropie dalla temperatura media.



5.4 Proprietà delle armoniche sferiche

5.4.1 Ortogonalità

Vediamo più in dettaglio qualche proprietà delle armoniche sferiche. Partiamo col dire che, essendo autofunzioni di operatori hermitiani, deve esistere una relazione di ortogonalità: per $m \neq m'$ avremo

$$\int d^2\hat{\mathbf{n}} Y_l^m(Y_l^m)^* = \int_0^{2\pi} d\phi \underbrace{e^{i(m-m')\phi}}_{\delta_{mm'}=0} \int d\theta \dots$$

Questo vale per gli autovalori m relativi a L_3 . Per gli autovalori di \mathbf{L}^2 invece si procede diversamente. Definiamo i **polinomi di Legendre associati** (diversi dai polinomi di Legendre incontrati nella precedente sezione) come:

$$-\frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta(\sin\theta \partial_\theta P_l^{|m|}(\theta)) + \frac{m^2}{\sin^2\theta} P_l^{|m|}(\theta) = l(l+1)P_l^{|m|}(\theta)$$

Moltiplicando entrambi i membri per $P_{l'}^{|m|} \sin\theta$ otteniamo una prima relazione:

$$l(l+1)P_l^{|m|}(\theta)P_{l'}^{|m|}(\theta) \sin\theta = \frac{m^2}{\sin\theta} P_l^{|m|}(\theta)P_{l'}^{|m|}(\theta) - P_{l'}^{|m|}(\theta) \partial_\theta(\sin\theta \partial_\theta P_l^{|m|}(\theta))$$

Scambiando adesso $l \rightarrow l'$ otteniamo una seconda relazione:

$$l'(l'+1)P_{l'}^{|m|}(\theta)P_l^{|m|}(\theta) \sin\theta = \frac{m^2}{\sin\theta} P_{l'}^{|m|}(\theta)P_l^{|m|}(\theta) - P_l^{|m|}(\theta) \partial_\theta(\sin\theta \partial_\theta P_{l'}^{|m|}(\theta))$$

Sottraendo membro a membro:

$$[-l'(l'+1)+l(l+1)]P_l^{|m|}(\theta)P_{l'}^{|m|}(\theta) \sin\theta = \partial_\theta[P_l^{|m|}(\theta) \sin\theta \partial_\theta P_{l'}^{|m|}(\theta) - P_{l'}^{|m|}(\theta) \sin\theta \partial_\theta P_l^{|m|}(\theta)]$$

Osserviamo che il secondo membro di questa uguaglianza, se integrato in $d\theta$ da 0 a π , è nullo; quindi:

$$[-l'(l'+1)+l(l+1)] \int_0^\pi d\theta P_{l'}^{|m|}(\theta)P_l^{|m|}(\theta) \sin\theta = 0 \rightarrow \int_0^\pi d\theta Y_l^m(Y_{l'}^m)^* = 0$$

Otteniamo quindi la regola generale di ortogonalità per armoniche sferiche:

$$\int d^2\hat{\mathbf{n}} Y_l^m(\hat{\mathbf{n}})(Y_{l'}^{m'}(\hat{\mathbf{n}}))^* = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$



5.4.2 Parità

Le leggi della fisica non sono invisibili a operazione di parità (ottenute invertendo gli assi); per esempio, i vettori posizione e impulso \mathbf{x}, \mathbf{p} sono quantità *polari*, ovvero, sotto inversione degli assi, si trasformano cambiando di segno $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$. Altre quantità, come ad esempio il momento angolare $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$, sono quantità *assiali*, ovvero restano identiche sotto parità.

Moltiplicando tra loro una quantità polare con una assiale, per esempio $\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{p})$ otteniamo una quantità nota come **pseudoscalare**: questa infatti *cambia segno invertendo gli assi*.

Quantità pseudo scalari sono state osservate sperimentalmente, ad esempio per il Cobalto-60, dove, sfruttando il decadimento beta, si osservava un diverso impulso degli elettroni emessi a seconda dello spin dell'elettrone stesso.

Questa breve parentesi serve per introdurre le operazioni di parità:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 \rightarrow -x_1 \\ x_2 \rightarrow -x_2 \\ x_3 \rightarrow -x_3 \end{array} \right| \begin{array}{l} \hat{x}_+ \rightarrow -\hat{x}_+ \\ \hat{x}_- \rightarrow -\hat{x}_- \\ \hat{x}_3 \rightarrow -\hat{x}_3 \end{array}$$

Sotto operazione di parità le armoniche sferiche, poiché sono polinomi omogenei, si trovano a essere moltiplicate per un fattore $(-1)^l$, rispettando quindi la condizione:

$$Y_l^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi)$$

5.5 Atomo di idrogeno

Procediamo a testa bassa a sfondare il muro di cose che dobbiamo vedere. Il potenziale di Coulomb è $\frac{Ze^2}{r}$ in unità gaussiane. Sfruttando $\chi = Rr$, l'equazione radiale è in questo caso:

$$-\chi'' + \left(-\frac{2mZe^2}{\hbar^2 r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi = -\kappa^2 \chi$$

Con $-\kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Come nel caso dell'oscillatore armonico cambiamo variabile in una adimensionale, scegliendo $\rho^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} r^2$, oppure più semplicemente $\rho = \kappa r$. Posto $\xi = \frac{2mZe^2}{\kappa \hbar^2}$ l'equazione diventa

$$-\frac{d^2}{d\rho^2} \chi + \left[-\frac{\xi}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \chi = -\chi$$

La soluzione che dobbiamo cercare deve rispettare le classiche condizioni:

- $\chi \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \rho^{l+1}$;
- $\chi \sim e^{-\rho}$ per ρ grandi.



Applicando la prima condizione l'equazione diventa:

$$-l(l+1)\rho^{l-1} + \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1\right)\rho^{l+1} = 0$$

Per rispettare la seconda condizione, possiamo porre $\chi = \rho^{l+1} F(\rho) e^{-\rho}$, con $F(\rho)$ al massimo un polinomio. Applicando questa funzione, l'equazione diventa un'equazione differenziale in $F(\rho)$:

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} - 2\left(1 - \frac{l+1}{\rho}\right) \frac{dF}{d\rho} + \left(\frac{\xi - 2l - 2}{\rho}\right) F = 0$$

Anche questa equazione è tabulata. Come per l'oscillatore armonico allora tentiamo una serie di potenze per $F = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \rho^s$, dove dobbiamo però porre $a_0 \neq 0$, altrimenti la soluzione non si comporterebbe come ρ^{l+1} per $\rho \rightarrow 0$. Applicando questa nell'equazione, troviamo la relazione sui coefficienti:

$$a_{s+1} = \frac{-\xi + 2l + 2 + 2s}{(s+1)(2l+2+s)} a_s$$

Ovviamente la serie non può avere infiniti termini, deve terminare a un certo punto in modo che l'esponenziale vinca per grandi valori di ρ , quindi dovrà esserci un a_s per cui $2s + 2(l+1) - \xi = 0$. ξ deve quindi essere uguale a un qualche intero, posto allora $\xi = 2n$, troviamo che la serie termina per $2s = 2(n - l - 1) \geq 0$, da cui otteniamo anche che $n \geq l + 1$.

Le funzioni $F(\rho)$ vengono chiamate **polinomi di Laguerre** e dipendono sia da l che da n . Al contrario, l'energia dipende solo da n ; riprendendo la definizione di ξ , otteniamo che $\kappa_n = \frac{2mZe^2}{\xi\hbar^2} = \frac{1}{n} \frac{\hbar^2}{mZe^2}$, da cui ricaviamo i livelli energetici:

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{1}{n^2} 13.6 Z^2 \text{ eV}$$

Può essere anche riscritta in termini di costanti note come $E = \frac{-Z^2}{n^2} \frac{mc^2}{2} \alpha^2$ con $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$.

Per ogni n possiamo avere l che va da 0 a $n - 1$ e per ogni l abbiamo $2l + 1$ possibili m . Per questo, il numero di stati possibili con la stessa energia E_n non è unico:

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = 2n \frac{n-1}{2} + n = n^2$$

Questo vuol dire che c'è una *degenerazione* di livelli energetici, che capiremo meglio in futuro.

5.5.1 Transizioni e parità

Vediamo come poter esprimere la possibilità che avvengano transizioni tra un livello e un altro. Come abbiamo visto nel capitolo 1, a una transizione è associato un prodotto scalare:



$$\mathbf{x}_{nm} = \int (\psi_n)^* \mathbf{X} \psi_m$$

Quando l'integrando è dispari avremo ovviamente $|\mathbf{x}_{nm}|^2 = 0$. Compiendo operazione di parità, supposto l associato a ψ_n^* e l' associato a ψ_m , l'integrando viene moltiplicato per un fattore $(-1)^{l+l'+1}$, quindi:

$$\begin{aligned} l + l' + 1 \text{ pari} &\rightarrow \text{transizione permessa} \\ l + l' + 1 \text{ dispari} &\rightarrow \text{transizione proibita} \end{aligned}$$

5.6 Oscillatore armonico tridimensionale

Consideriamo un potenziale del tipo $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$, l'equazione di Schrödinger per l'oscillatore armonico tridimensionale diventa quindi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \right) \psi = E\psi$$

Osserviamo che sia il laplaciano che r^2 possono essere scritti come somma di tre termini $\Delta = \sum_i \partial_i^2, r^2 = \sum_i x_i^2$. L'equazione dell'oscillatore armonico tridimensionale allora è *separabile* e la soluzione sarà il prodotto di tre oscillatori armonici unidimensionali:

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\psi_{n_3}(x_3)$$

I livelli energetici sono quindi dipendenti da tre diversi set di livelli, per cui $E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3}$. È anche in questo caso quindi presente una degenerazione energetica, infatti l'energia è anche scrivibile come:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2} \right)$$

Con $N = n_1 + n_2 + n_3$.

Definiamo i seguenti operatori:

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (-i\hbar\partial_i - im\omega x_i) && \text{abbassamento} \\ a_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (-i\hbar\partial_i + im\omega x_i) && \text{innalzamento} \end{aligned}$$

Per questi valgono le seguenti regole di commutazione:

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{ij} \\ [a_i, a_j] &= 0 \\ [a_i^\dagger, a_j^\dagger] &= 0 \end{aligned}$$



Poiché inoltre vale $\hbar\omega a_i^\dagger a_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_i^2 - \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2$, possiamo anche riscrivere l'hamiltoniana in funzione di questi due operatori come:

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

Da questa e dalle regole di commutazione derivano i commutatori tra hamiltoniana e i due operatori:

$$[H_i, a_i] = -\hbar\omega a_i \quad [H_i, a_i^\dagger] = +\hbar\omega a_i^\dagger$$

A che servono questi operatori? Supponiamo di voler conoscere l'energia dello stato $(a_i\psi)$ posto che E sia il livello energetico di ψ , avremo:

$$H(a_i\psi) = (H_i a_i)\psi = (a_i H_i - \hbar\omega a_i)\psi = (H_i - \hbar\omega)(a_i\psi)$$

Ovvero l'energia di $a_i\psi$ è $E - \hbar\omega$. Allo stesso modo si vede che $a_i^\dagger\psi$ si trova a un livello energetico $E + \hbar\omega$: questi due operatori ci permettono quindi di salire e scendere tra le funzioni d'onda dei diversi livelli energetici. Secondo questo ragionamento, quindi, se esiste uno stato fondamentale E_0 , applicando a_i a ψ_0 dovremmo ottenere come risultato 0:

$$(-i\hbar\partial_i - im\omega x_i)\psi_0 = 0 \rightarrow \frac{\partial_i\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}x_i$$

Da questa otteniamo che $\ln(\psi_0) = -\frac{m\omega}{2\hbar}x_i^2 + \text{cost}$, da cui otteniamo la funzione d'onda del livello fondamentale:

$$\psi_0 = \text{cost} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x_i^2}$$

Osserviamo che questo è esattamente il livello fondamentale che avevamo trovato nel caso unidimensionale. D'altro canto *non esiste un livello superiore massimo*: l'equazione $a_i^\dagger\psi_{\text{max}} = 0$ fornisce come soluzione $\psi_{\text{max}} = \text{cost} \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}x_i^2\right)$, che risulta essere non normalizzabile e, quindi, insensata come soluzione al problema.

Tuttavia, una volta conosciuto il livello fondamentale, possiamo conoscere tutti i livelli superiori applicando l'operatore a_i^\dagger : è in questo modo che **si costruiscono i polinomi di Hermite**. La soluzione dell'oscillatore armonico tridimensionale sarà quindi:

$$\psi(\mathbf{x}) \propto (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} (a_3^\dagger)^{n_3} \psi_0(r)$$

Ovvero ogni a_i^\dagger ci fa salire di un livello lungo la coordinata x_i , mentre le altre restano al loro livello energetico. A questo punto capiamo il perché i livelli energetici sono distribuiti esattamente come:

$$E = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right)$$



Ogni a_i^\dagger è usato n_i volte, alzando di n_i volte l'energia di un fattore $\hbar\omega$. Poiché possiamo ottenere $N = n_1 + n_2 + n_3$ in diversi modi a seconda delle combinazioni, ci saranno diversi modi per ottenere il livello di energia N :

$$\mathcal{N}_N = \sum_{n_1=0}^N \sum_{n_2=0}^{N-n_1} 1 = \sum_{n_1=0}^N (N - n_1 + 1) = (N + 1)^2 - \frac{N(N - 1)}{2} = \frac{(N + 1)(N + 2)}{2}$$

Questi sono i diversi modi per poter ottenere un intero N a partire da tre diversi interi n_1, n_2, n_3 .



Capitolo 6

Principi generali della teoria delle trasformazioni

6.1 Teoria di Dirac

Quello che abbiamo visto finora era una trattazione coerente e chiusa della meccanica quantistica considerata studiando le funzioni d'onda. Questo è il modo in cui è stata prima studiata e teorizzata dai pionieri come De Broglie, Schrödinger e gli altri; tuttavia, il formalismo classico è stato per la prima volta teorizzato da **Paul Dirac** pochi anni dopo. Dirac parla della meccanica quantistica come *teoria delle trasformazioni* e procede con formalismo e approccio matematico allo studio dei fenomeni quantistici a partire da pochi postulati e principi generali.

Il postulato fondamentale della teoria delle trasformazioni è che **gli stati fisici sono dei vettori nello spazio di Hilbert**. Possiamo comprendere questi stati vettori guardando in maniera diversa la funzione d'onda $\psi(\mathbf{x})$, considerandola un vettore $\Psi_{\mathbf{x}}$ che assume valori continui e complessi. Quindi possiamo immaginare i valori che assume la funzione d'onda come se fossero componenti di un vettore di dimensioni infinite:

$$\Psi = (\dots, \psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x} + d\mathbf{x}), \dots)$$

Ovviamente non è fondamentale che siano funzioni della posizione: qualsiasi variabile fisica può essere oggetto di studio, come ad esempio l'impulso, e si può passare da una variabile all'altra semplicemente operando una trasformata di Fourier:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3p e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}} \tilde{\psi}(\mathbf{p})$$

Da ora in avanti vedremo quindi la meccanica quantistica seguendo il formalismo di Dirac: rivedremo alcune cose già viste in questo nuovo formalismo e vedremo anche come questo approccio matematico permetta di capire meglio la natura dei sistemi quantistici.



6.2 Principi degli spazi di Hilbert

Indichiamo con \mathbb{H} lo spazio di Hilbert. Useremo questo simbolo ben poco in tutto il testo. Siano Ψ, Ψ' due vettori nello spazio di Hilbert, allora:

1. $\Psi + \Psi'$ è un vettore nello spazio di Hilbert;
2. $\Psi + (\Psi' + \Psi'') = (\Psi + \Psi') + \Psi''$;
3. $\Psi' + \Psi = \Psi + \Psi'$.

Sia $\alpha \in \mathbb{C}$ un numero complesso:

1. $\alpha(\alpha'\Psi) = \alpha\alpha'\Psi$;
2. $\alpha(\Psi + \Psi') = \alpha\Psi + \alpha\Psi'$;
3. $(\alpha + \alpha')\Psi = \alpha\Psi + \alpha'\Psi$.

È definito un elemento neutro $\mathbf{0}$ tale che:

1. $\Psi + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \Psi = \Psi$;
2. $\Psi \cdot \mathbf{0} = \mathbf{0}$.

È definito il concetto di **norma**; principio generale $(\Psi, \Psi) \geq 0$:

1. $(\Psi'', \alpha'\Psi' + \alpha\Psi) = \alpha'(\Psi'', \Psi') + \alpha(\Psi'', \Psi)$;
2. $(\alpha\Psi + \alpha'\Psi', \Psi'') = \alpha^*(\Psi, \Psi'') + \alpha'^*(\Psi', \Psi'')$;
3. $(\Psi', \Psi)^* = (\Psi, \Psi')$.

I vettori Ψ **non sono** funzioni d'onda.

6.2.1 Indipendenza lineare

Siano Ψ_1, \dots, Ψ_n vettori nello spazio di Hilbert, se

$$\alpha_1\Psi_1 + \dots + \alpha_n\Psi_n = 0$$

è vero solo per $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = 0$, allora diciamo che Ψ_1, \dots, Ψ_n sono vettori **linearmente indipendenti** e si possono combinare per formare **set completi di vettori**.

C'è un teorema matematico, di cui non forniremo la dimostrazione, in cui si dimostra che se $\dim \mathbb{H} = d$, allora d vettori linearmente indipendenti formano un set completo. Nella nostra teoria $\dim \mathbb{H} = \infty$.

Un altro postulato della meccanica quantistica è che, dato un set completo $\{\Phi_i\}$ nello spazio di Hilbert, **questo si trova in corrispondenza biunivoca con**



un osservabile fisico; l'indice i è quindi continuo. Ogni sistema fisico si trova in uno stato Ψ e la misura di un'osservabile lo proietta sullo stato Φ_i tale che:

$$A\Phi_i = a_i\Phi_i$$

Il risultato della misura è l'autovalore a_i .

6.2.2 Stati vettori

Posto Ψ vettore nello spazio di Hilbert, possiamo scriverlo come sovrapposizione su un set completo di vettori:

$$\Psi = \alpha_i\Phi_i$$

Da questa ricaviamo anche che $(\Phi_j, \Psi) = \sum_i \alpha_i (\Phi_j, \Phi_i) = \alpha_j$, essendo tutti i Φ_i ortogonali tra loro. Quindi, se il sistema è ortonormale, possiamo scrivere:

$$\Psi = \sum_{j=1}^n (\Phi_j, \Psi)\Phi_j$$

Se il sistema non è normalizzato, possiamo procedere a renderlo tale:

$$(\Phi, \Psi) = \sum_i \alpha_i \underbrace{(\Phi_j, \Phi_i)}_{\delta_{ij}} (\Phi_i, \Phi_i) = \alpha_j (\Phi_j, \Phi_j)$$

Da cui ricaviamo che

$$\Psi = \sum_i \frac{(\Phi_i, \Psi)}{(\Phi_i, \Phi_i)} \Phi_i$$

Preso questa come "definizione" per un generico stato, possiamo allora scrivere il prodotto scalare tra due stati nella sua forma generale:

$$\begin{aligned} (\Psi, \Psi') &= \sum_{i,j=1}^n \left(\frac{(\Phi_i, \Psi')}{(\Phi_i, \Phi_i)} \Phi_i, \frac{(\Phi_j, \Psi)}{(\Phi_j, \Phi_j)} \Phi_j \right) = \\ &= \sum_{i,j=1}^n \frac{(\Phi_i, \Psi')^*}{(\Phi_i, \Phi_i)^*} \frac{(\Phi_j, \Psi)}{(\Phi_j, \Phi_j)} (\Phi_i, \Phi_j) = \sum_{j=1}^n \frac{(\Phi_j, \Psi')^* (\Phi_j, \Psi)}{(\Phi_j, \Phi_j)} \end{aligned}$$

6.2.3 Probabilità

Abbiamo detto che un sistema fisico che si trova nello stato Ψ , dopo la misura di un'osservabile, "collassa" su uno stato Φ_i . È lecito quindi chiedersi con quale probabilità da Ψ si finisce in Φ_i . Ricollegandoci all'ipotesi di Born:

$$P(\Psi \rightarrow \Phi_i) = \frac{|(\Phi_i, \Psi)|^2}{(\Psi, \Psi)}$$

Ricordando che $P(\psi(\mathbf{x})) = |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3x$. Da questa possiamo anche dire qualcosa riguardo le funzioni d'onda: supponendo che queste siano funzione della posizione, allora potremo scrivere:



$$\psi(\mathbf{x}) = (\Phi_{\mathbf{x}}, \Psi)$$

Dove gli stati $\Phi_{\mathbf{x}}$ sono gli autovettori dell'operatore posizione, con autovalori la posizione stessa. Quindi, la regola di Born è anche esprimibile semplicemente come:

$$P(\Psi \rightarrow \Phi_i) = |(\Phi_i, \Psi)|^2$$

Affinché sia una probabilità deve ovviamente valere che $\sum_i P(\Psi \rightarrow \Phi_i) = 1$, ovvero che $\sum_i (\Phi_i, \Psi)^* (\Phi_i, \Psi) = 1$. In notazione di Dirac (che accenneremo nella prossima sezione) questa scrittura è molto elegante:

$$\sum_i \langle \Psi | \Phi_i \rangle \langle \Phi_i | \Psi \rangle = 1$$

Questa, se estesa, porta alla relazione di completezza $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$.

Osserviamo che se moltiplichiamo uno stato vettore generico Ψ per un numero complesso di modulo unitario (ovvero gli cambiamo semplicemente fase) tutte le regole riguardo la probabilità dette finora *non cambiano*: questo vuol dire che gli stati vettori sono in corrispondenza biunivoca con i **raggi dello spazio di Hilbert** (oppure possiamo semplicemente dire che gli stati vettori sono dei raggi nello spazio di Hilbert, è la stessa cosa). Questa caratteristica tornerà molto utile in futuro.

6.2.4 Stati vettori continui

Quando parliamo di un set completo in un sistema completo, passiamo da un indice discreto i a un qualsiasi indice continuo ξ . Immaginiamo questi valori siano discreti in un piccolo intervallo $(\xi, \xi + d\xi)$ e siano $\rho(\xi)d\xi$. Se $d\xi \rightarrow 0$, avremo:

$$\sum_{\xi} \rightarrow \int \rho(\xi) d\xi$$

È utile normalizzare un set completo di vettori come:

$$(\Phi_{\xi'}, \Phi_{\xi}) = \rho(\xi) \delta_{\xi' \xi}$$

Quindi un qualsiasi stato del tipo $\Psi = \sum_i (\Phi_i, \Psi) \Phi_i$ nel continuo diventa:

$$\Psi = \int d\xi (\Phi_{\xi}, \Psi) \Phi_{\xi}$$

Allo stesso modo il prodotto scalare di due stati:

$$(\Psi, \Psi') = \int (\Phi_{\xi}, \Psi)^* (\Phi_{\xi}, \Psi') d\xi$$



Un vettore di norma unitaria sarà quindi tale che:

$$\int |(\Phi_\xi, \Psi)|^2 d\xi = 1$$

Supponiamo per esempio di avere a che fare con la posizione, per cui $\xi \rightarrow x$; la funzione d'onda dipendente dalla posizione, come già detto, sarà $\psi(x) = ((\Phi_x, \Psi))$; da questa il prodotto scalare tra due vettori è esprimibile anche attraverso le rispettive funzioni d'onda associate:

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx$$

Se consideriamo quindi un vettore di norma unitaria, sarà $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$, da cui $dP = |\psi(x)|^2 dx$, coerentemente con la regola di Born già discussa in precedenza.

6.3 Varie ed eventuali sugli stati

6.3.1 Operatori lineari

Gli operatori lineari agiscono sui vettori dello spazio di Hilbert seguendo le proprietà qui elencate:

1. $A(\Psi, \Psi') = A\Psi + A\Psi'$;
2. $A(\alpha\Psi) = \alpha A\Psi$;
3. $(\Psi', A\Psi) = (A^\dagger \Psi', \Psi) = (\Psi, A^\dagger \Psi')^*$
4. (è la 3 riscritta in notazione di Dirac) $\langle \Psi' | A | \Psi \rangle = \langle \Psi | A^\dagger | \Psi' \rangle^*$;
5. $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$;
6. $(A^\dagger)^\dagger = A$;
7. $(\alpha A)^\dagger = \alpha^* A^\dagger$

L'elemento di matrice del prodotto di due operatori si ottiene tramite la moltiplicazione righe per colonne.

Si definisce il **valore di aspettazione** della misura di un operatore su uno stato come:

$$\langle A \rangle_\Psi = (\Psi, A\Psi)$$

Possiamo riscriverla come $\langle A \rangle_\Psi = \sum_s (\Psi, A\Psi_s)(\Psi_s, \Psi)$; tirando fuori il valore dell'operatore otteniamo:

$$\langle A \rangle_\Psi = \sum_s a_s (\Psi, \Psi_s)(\Psi_s, \Psi) = \sum_s a_s |(\Psi_s, \Psi)|^2$$



Da questa ricaviamo anche che $|(\Psi_s, \Psi)|^2$ è l'ampiezza di probabilità che il risultato della misura sia proprio a_s .

Il valore di aspettazione di un operatore al quadrato è sempre positivo:

$$\langle B^2 \rangle_{\Psi} = (\Psi, B^2 \Psi) = (B\Psi, B\Psi) \geq 0$$

Possiamo anche parlare di *traccia di un operatore*, definita come:

$$\text{tr}(A) = \sum_i \underbrace{(\Phi_i, A\Phi_i)}_{A_{ij}}$$

Ovvero corrisponde alla somma degli elementi sulla diagonale. Vale $\text{tr}(A^\dagger) = \text{tr}(A)^*$; se quindi un operatore è hermitiano $A = A^\dagger$, la traccia è un numero reale, così come tutti gli elementi della diagonale, che corrispondono in questo caso agli *autovalori dell'operatore*.

6.3.2 Notazione di Dirac

Nella notazione di Dirac i vettori (e stati in generale) vengono indicati con $|\Psi\rangle$, che si chiama *ket*. Un prodotto scalare è espresso come il prodotto tra un *bra* $\langle\Psi|$ e un *ket* e viene chiamato *bra-ket*:

$$(\Psi', \Psi) = \langle\Psi'|\Psi\rangle$$

Per prodotti in cui compare un operatore, *questo deve sempre agire sul ket*: è questo il limite e il vantaggio della notazione di Dirac, che a volte può essere conveniente usare, altre volte no. Un esempio in cui non è conveniente usarla è la proprietà 4 degli operatori lineari prima elencata.

6.3.3 Diadi

A partire dagli stati vettori si possono creare degli operatori lineari. Dati due stati vettori, si definisce **diade**:

$$[\Psi\Omega^\dagger] \Phi = \Psi(\Omega, \Phi)$$

Usando la notazione di Dirac le diadi sono molto comode da scrivere:

$$(|\Psi\rangle \langle\Omega|) |\Phi\rangle = |\Psi\rangle (\langle\Omega| \Phi\rangle)$$

Le diadi hanno le seguenti proprietà:

1. $[\Psi\Omega^\dagger]^\dagger = [\Omega\Psi^\dagger]$;
2. $[\Psi_1\Omega_1^\dagger] [\Psi_2\Omega_2^\dagger] = [\Psi_1\Omega_1^\dagger] \Psi_2(\Omega_2\Phi) = (\Omega_1, \Psi_2) [\Psi_1\Omega_2^\dagger] \Phi$;



3. $[\Psi\Psi^\dagger]^2 = [\Psi\Psi^\dagger]$: questi sono proiettori i cui autovalori sono quindi o 0 o 1, rispettano la condizione $\lambda^2 = \lambda$;
4. $[\Phi\Phi^\dagger]\Phi = \Phi(\Phi, \Phi) = \Phi$.

Le diadi possono essere usate per scrivere la *rappresentazione spettrale dell'operatore*: se A è un operatore hermitiano con autovalori a_i e autovettori Φ_i , con $\{\Phi_i\}$ set completo, allora possiamo rappresentare l'operatore come:

$$A = \sum_i a_i [\Phi_i\Phi_i^\dagger]$$

Allo stesso modo, se invece dell'operatore abbiamo una funzione dell'operatore $f(A)$ questa si scriverà:

$$f(A) = f\left(\sum_i a_i [\Phi_i\Phi_i^\dagger]\right) = \sum_i f(a_i) [\Phi_i\Phi_i^\dagger]$$

6.3.4 Matrice densità

Supponiamo che il nostro stato fisico sia una sovrapposizione coerente di stati:

$$\Psi = \sum_j c_j \Phi_j$$

La probabilità che il sistema collassi su uno di questi stati è $P(\Psi \rightarrow \Phi_j) = |c_j|^2 = |(\Phi_j, \Psi)|^2$. Diciamo che non sappiamo su quale stato collasserà il nostro sistema, ma conosciamo tutti gli stati di cui è una sovrapposizione e anche la probabilità che collassi su uno di questi, ad esempio $P(\Psi_1) = \frac{3}{10}, P(\Psi_2) = \frac{1}{5}, P(\Psi_3) = \frac{1}{2}$. Osserviamo che questi stati possibili *non sono per forza ortogonali tra loro*, cosa che invece è necessari per gli stati Φ_i . Introduciamo allora la **matrice densità**:

$$\rho = \sum_n P_n [\Psi_n \Psi_n^\dagger]$$

Il sistema è in questo caso costituito da una miscela di stati, non da una sovrapposizione coerente. Ci possiamo allora chiedere quale sia il valore di aspettazione di un operatore su questa miscela; questo sarà il valore di aspettazione di ogni stato pesato con la propria probabilità, da cui:

$$\langle A \rangle = \sum_n P_n (\Psi_n, A\Psi_n) = \text{tr}(A\rho)$$

La matrice densità ha **traccia unitaria**.

Esempio (6.1)

Consideriamo una Ψ miscela di stati con le rispettive probabilità:



$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_1 = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} \\ \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix} \\ \Psi_3 = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} P_1 = \frac{1}{3} \\ P_2 = \frac{1}{3} \\ P_3 = \frac{1}{3} \end{array}$$

Vogliamo trovare il valor medio dell'operatore J_z così definito:

$$J_z = \begin{vmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & -1 \end{vmatrix}$$

Ovviamente, valor medio e valore aspettato coincidono. Sfruttiamo la matrice densità $\rho = \sum_n P_n [\Psi_n \Psi_n^\dagger]$; bisogna moltiplicare ogni stato per il suo trasposto e poi pesarlo con la propria probabilità, ovvero:

$$P_1 |\Psi_1\rangle \langle \Psi_1| = \frac{1}{3} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & & \\ 0 & & \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{1}{3} & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{vmatrix}$$

Ripetendo questo per gli altri due stati si ottengono altre due matrixi 3×3 ; sommandole otteniamo la matrice densità:

$$\rho = \begin{vmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{2} \end{vmatrix}$$

A questo punto non resta che calcolare $\text{tr}(\rho \cdot J_z) = -\frac{1}{6}$.



Capitolo 7

Trasformazioni di simmetria

7.1 Operatori di simmetria

Lo studio delle simmetrie è sempre un punto fondamentale in ogni teoria fisica; in meccanica classica, a ogni legge di simmetria corrisponde una legge di conservazione e, in meccanica quantistica, a ogni operazione di simmetria corrisponde un operatore che commuta con l'hamiltoniana e i cui autovalori sono conservati. In virtù di questo approccio, andiamo a vedere cosa comportano le simmetrie e le rispettive trasformazioni.

Compiere operazioni di simmetria non è mai gratis: gli stati Ψ cambiano sotto le simmetrie, tuttavia le leggi fisiche devono restare le stesse. In meccanica quantistica l'aspetto fisico della teoria è l'ampiezza di probabilità: tutto il resto sono giochi matematici; se le leggi devono conservarsi, allora la probabilità deve restare invariata sotto trasformazioni di simmetria. Queste operazioni sono descritte da **operatori unitari**, che mantengono inalterati i prodotti scalari e, quindi, l'ampiezza di probabilità:

$$\left. \begin{array}{l} \Psi \rightarrow \mathcal{U}\Psi \\ \Phi \rightarrow \mathcal{U}\Phi \end{array} \right\} |(\mathcal{U}\Phi, \mathcal{U}\Psi)|^2 = |\underbrace{(\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} \Phi, \Psi)}_{\mathbb{I}}|^2 = |(\Phi, \Psi)|^2$$

Ovviamente, le operazioni di simmetria si possono invertire per tornare allo stato iniziale, semplicemente operando $\mathcal{U}^{-1}(\mathcal{U}\Psi) = \Psi$. Oltre agli operatori unitari, si possono utilizzare anche gli *operatori antiunitari* per descrivere le simmetrie, che hanno le seguenti proprietà:

1. $\mathcal{U}(\alpha\Psi + \beta\Psi) = \alpha^*\mathcal{U}\Psi + \beta^*\mathcal{U}\Psi$;
2. $(\mathcal{U}\Phi, \mathcal{U}\Psi) = (\Phi, \Psi)^* = (\Psi, \Phi)$;
3. $\alpha(\mathcal{U}\Phi, \mathcal{U}\Psi) = (\mathcal{U}\Phi, \alpha\mathcal{U}\Psi) = (\mathcal{U}\Phi, \mathcal{U}(\alpha^*\Psi)) = (\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U}\Phi, \alpha^*\Psi) = \alpha^*(\Phi, \Psi)^*$

Si possono combinare più operazioni di simmetria moltiplicandole tra loro, ottenendo operazioni in sequenza. Esiste l'inverso, l'operatore identità e le simmetrie in sequenza sono anch'esse simmetrie, quindi questi operatori formano dei **gruppi** e seguono l'algebra a loro associata.



Considereremo simmetrie continue e non discrete; queste si possono considerare come sequenze di operazioni infinitesime, che possiamo scrivere come:

$$U = \mathbb{I} + i\epsilon T + o(T^2)$$

Dove T viene chiamato **generatore della simmetria**, mentre ϵ è un numero reale piccolo a piacere. Poiché le operazioni di simmetria sono unitarie, T deve essere tale da renderle unitarie. Affinché sia verificato, quindi, deve essere:

$$\mathbb{I} = U^\dagger U = (\mathbb{I} - i\epsilon T^\dagger)(\mathbb{I} + i\epsilon T) = \mathbb{I} - i\epsilon(T^\dagger - T) + o(T^2)$$

In conclusione deve essere $T^\dagger = T$, ovvero **i generatori devono essere hermitiani**. In meccanica quantistica tutti gli osservabili sono hermitiani, quindi partono con l'essere buoni candidati.

Per poter ottenere trasformazioni finite a partire da una infinitesima basta metterle tante in sequenza; ad esempio, se poniamo $\epsilon = \frac{\theta}{N}$, con N grande, se mettiamo in sequenza N operazioni infinitesime:

$$(\mathbb{I} + i\frac{\theta}{N}T)(\mathbb{I} + i\frac{\theta}{N}T)(\dots) = (\mathbb{I} + i\frac{\theta}{N}T)^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} e^{i\theta T}$$

L'ultimo termine è proprio una trasformazione finita.

Possiamo chiederci cosa succede agli osservabili sotto simmetria. Poiché $\Psi \rightarrow U\Psi$, il valore atteso di un osservabile si trasforma come:

$$\langle A \rangle_\Psi = (\Psi, A\Psi) \rightarrow (U\Psi, AU\Psi) = (\Psi, (U^\dagger AU)\Psi)$$

Quindi $A \rightarrow U^\dagger AU$. Sfruttando la definizione generica di operatore unitario prima scritta, vediamo anche che questo dipende da come commutano osservabile e generatore:

$$\begin{aligned} A \rightarrow U^\dagger AU &= (\mathbb{I} - i\epsilon T)A(\mathbb{I} + i\epsilon T) = \\ &= (\mathbb{I} - i\epsilon T)(A + i\epsilon AT) = A - i\epsilon TA + i\epsilon AT + o(T^2) = \\ &= A - i\epsilon [T, A] \end{aligned}$$

7.2 Traslazioni spaziali

Consideriamo il vettore posizione \mathbf{x} e compiamo una traslazione spaziale che ci porta in $\mathbf{x} + \mathbf{a}$. Poiché se ci spostiamo da un'altra parte nello spazio le leggi della fisica devono restare le stesse, siamo di fronte a una simmetria e, quindi, possiamo definire un'operatore unitario che compie la traslazione:

$$U^{-1}\mathbf{X}U = \mathbf{x} + \mathbf{a}$$

Dove $U(\mathbf{a})$ deve ovviamente dipendere dalla traslazione che compiamo. Per costruire l'operatore abbiamo bisogno, come visto nella precedente sezione, di un



generatore hermitiano; tutti gli osservabili sono hermitiani, quindi proviamo ad usarli; l'impulso è l'operatore scelto affinché:

$$\left(\mathbb{I} + i \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}}{\hbar} \right) \mathbf{X} \left(\mathbb{I} - i \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}}{\hbar} \right) = \mathbf{x} + \mathbf{a}$$

La forma scelta è coerente con la teoria: le traslazioni non devono infatti cambiare il rango dei tensori, essendo \mathbf{X} un operatore vettoriale, il risultato deve essere un vettore stesso e, quindi, il prodotto scalare ci permette di evitare dubbi su questo punto di vista. Anche, la costante \hbar ci fa tornare le giuste dimensioni fisiche. Compiendo i calcoli, la precedente uguaglianza risulta soddisfatta.

7.2.1 Traslazioni finite

Trovato il generatore della trasformazione, possiamo esprimere una traslazione finita come:

$$\mathcal{U}(\mathbf{a}) = e^{-i \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{P}}{\hbar}}$$

Preso l'autostato dell'operatore posizione $\Phi_{\mathbf{x}}$, possiamo considerarlo come l'autostato della posizione situato nell'origine e poi traslato, ovvero:

$$\Phi_{\mathbf{x}} = \mathcal{U}(\mathbf{x}) \Phi_{\mathbf{0}} = e^{-i \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{P}}{\hbar}} \Phi_{\mathbf{0}}$$

Se consideriamo il prodotto scalare con un altro stato (ovvero consideriamo una funzione d'onda):

$$(\Psi, \Phi_{\mathbf{x}}) = \left(\Psi, e^{-i \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{P}}{\hbar}} \Phi_{\mathbf{0}} \right) = e^{-i \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{P}}{\hbar}} (\Psi, \Phi_{\mathbf{0}}) = \mathcal{U}(\mathbf{x})(\Psi, \Phi_{\mathbf{0}})$$

Possiamo sempre esprimere uno stato espandendolo su un set completo, scegliendo per esempio come base gli autostati dell'impulso, ottenendo:

$$\Phi_{\mathbf{x}} = \int d^3p (\Psi_{\mathbf{p}}, \Phi_{\mathbf{x}}) \Psi_{\mathbf{p}} = \int d^3p e^{-i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}} \Psi_{\mathbf{p}}$$

Il precedente risultato è una proporzionalità (ovvero abbiamo tralasciato eventuali termini numerici di normalizzazione). Questo ci dice che possiamo sempre passare dagli autostati dell'impulso a quelli della posizione operando una trasformata di Fourier (e tornare indietro, eventualmente, con l'antitrasformata).

7.2.2 Onde di Bloch

Questi brevi accenni ci permettono di capire delle particolari situazioni che si studiano in fisica dello stato solido, in particolare parlando di metalli. In questi è ormai noto che gli elettroni non restano limitati attorno ai propri atomi ma si comportano a tutti gli effetti come un oggetto unico (chiamata di solito *nube elettronica*) occupando livelli energetici fatti a bande: nei semimetalli, ad esempio, tra la banda di conduzione e la banda di valenza c'è un gap, mentre i livelli



energetici nelle bande sono talmente fitti da poter essere approssimati a continui. Questo è studiato più in particolare nella teoria a bande delle onde di Bloch.

Un esempio di metallo reticolato, ovvero che presenta una composizione spaziale che si ripete nello spazio uguale a se stessa, è il grafene, un particolarissimo cristallo **bidimensionale** composto di soli atomi di carbonio a struttura planare esagonale. Si può risolvere il problema della funzione d'onda dell'elettrone nel grafene semplicemente partendo da questa caratteristica fisica: la struttura si ripete uguale a se stessa in miliardi di stati, e possiamo quindi approssimare che la funzione sia uguale in ogni punto del materiale. In che senso uguale? Nel senso che differisce al massimo di una fase. L'ipotesi di base è quindi che:

$$e^{i\theta_r} \psi(\mathbf{x}_r) = \psi(\mathbf{x}_r + \mathbf{L}_r)$$

Con \mathbf{L}_r indichiamo lo spostamento dopo il quale si ripete la struttura cristallina del materiale, mentre l'indice $r = 1, 2, 3$ indica componenti **non ortogonali tra loro**. Possiamo allora definire un impulso tale che $\mathbf{q} \cdot \mathbf{L}_r = \theta_r$ e introduciamo quindi la fase $e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}$:

$$e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} + \mathbf{L}_r)} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{L}_r) = e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{L}_r} e^{i\theta_r} \psi(\mathbf{x}) = e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x})$$

Dove nella seconda uguaglianza abbiamo usato l'ipotesi di base della teoria a bande. Da questa ricaviamo proprio ciò che cercavamo: la funzione d'onda si ripete nello spazio, cambiando di una fase.

$$\psi(\mathbf{x} + \mathbf{L}_r) = e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{L}_r} \psi(\mathbf{x}) = e^{i\theta_r} \psi(\mathbf{x})$$

7.3 Traslazioni temporali

Anche le traslazioni temporali sono ovviamente un'operazione di simmetria: ci aspettiamo che una legge fisica non vari da ora fino alla fine dell'universo (posto ovviamente che la legge fisica in questione sia giusta quasi a livelli metafisici, ipotesi mentale che facciamo). Partendo dall'equazione di Schrödinger avevamo già trovato che la parte temporale della funzione d'onda è una fase $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$, per cui possiamo dire tranquillamente che:

$$\psi(t) = e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \psi(0)$$

Questo descrive l'evoluzione temporale della funzione d'onda. Adesso siamo però nella teoria di Dirac, dove trattiamo stati invece che funzioni d'onda, ma non possiamo che aspettarci lo stesso risultato, in quanto anche per gli stati vale l'equazione di Schrödinger. Possiamo allora definire un operatore unitario che descrive la traslazione temporale, il cui generatore è l'hamiltoniana stessa:

$$\mathcal{U} = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}$$

Questa è ovviamente un'operazione di simmetria, che mantiene inalterato qualsiasi prodotto scalare. Come abbiamo già anticipato, gli osservabili si trasformano sotto simmetria come $A \rightarrow \mathcal{U}^\dagger A \mathcal{U}$. Quindi un osservabile evolve nel tempo come:



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

Questa è nota come **rappresentazione di Heisenberg dell'evoluzione temporale di un osservabile**, che si differenzia dalla rappresentazione di Schrödinger in cui *gli osservabili sono indipendenti dal tempo* e a variare nel tempo sono invece gli stati. Le due rappresentazioni sono equivalenti tra loro: ciò che fisicamente conta è infatti il valore di aspettazione dell'osservabile stesso, che in entrambi i casi evolve allo stesso modo. Vedere che sono equivalenti è banale:

$$\langle A_H(t) \rangle = \underbrace{(\Psi, A_H(t)\Psi)}_{\text{rapp. Heis.}} = (\Psi, e^{i\frac{H}{\hbar}t} A e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \Psi) = (e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \Psi, A e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \Psi) = \underbrace{(\Psi(t), A \Psi(t))}_{\text{rapp. Schr.}}$$

Usando la rappresentazione di Heisenberg siamo al sicuro da eventuali dubbi: non è infatti scontato che un osservabile abbia una dipendenza esplicita dal tempo, ma $A_H(t)$ ce l'ha sicuramente. Nel caso A non abbia dipendenza esplicita dal tempo la rappresentazione di Heisenberg ci dice che:

$$\dot{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [H, A_H(t)]$$

Le simmetrie dell'hamiltoniana sono diverse dalle simmetrie di un qualunque osservabile: a queste corrispondono infatti leggi di conservazione; alla traslazione spaziale corrisponde la conservazione dell'impulso, alla traslazione temporale la conservazione dell'energia e all'invarianza dell'hamiltoniana sotto rotazioni corrisponde la conservazione del momento angolare. È quindi di non poco conto il caso in cui l'hamiltoniana sia invariante sotto simmetrie. Supponiamo infatti che un osservatore veda l'evoluzione di uno stato come $\Psi(t) = e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \Psi(0)$, mentre un altro osservatore lo vede evolvere come $\mathcal{U}\Psi(t) = e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \mathcal{U}\Psi(0)$. Lo stato può anche essere diverso a causa dell'operazione di simmetria causata da \mathcal{U} , ma l'evoluzione temporale *deve* essere la stessa: deriva direttamente dall'equazione di Schrödinger, non l'abbiamo tirata fuori da nessun cilindro magico. Affinché quindi l'evoluzione temporale sia la stessa deve valere:

$$e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \mathcal{U} = \mathcal{U} e^{-i\frac{H}{\hbar}t}$$

Ovvero $\mathcal{U}^\dagger e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \mathcal{U} = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}$, ovvero ancora $\mathcal{U}^{-1} \mathcal{U} = \mathbb{I}$. Se espandiamo in serie l'esponenziale a destra e a sinistra nella precedente uguaglianza otteniamo che:

$$\mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} = H$$

O anche $[H, \mathcal{U}] = 0$. Questo risultato fondamentale **vale per tutte le simmetrie**: quando i generatori della simmetria commutano con l'hamiltoniana, questa è invariante sotto quella simmetria e, quindi, c'è una legge di conservazione.

Discorso diverso va fatto nel caso \mathcal{U} fosse antilineare, ovvero $\mathcal{U}^{-1} H \mathcal{U} = -H$: vengono fuori cose strane. Infatti, posto $H\Phi = E\Phi$, sfruttando l'antilinearità dell'operatore:



$$\begin{aligned} H(\mathcal{U}\Phi) &= E(\mathcal{U}\Phi) \\ \mathcal{U}^{-1}H\mathcal{U}\Phi &= -E\mathcal{U}^{-1}\mathcal{U}\Phi \\ &- H\Phi = E\Phi \end{aligned}$$

Questo vorrebbe dire che, nel caso \mathcal{U} fosse antilineare, ci sarebbe una duplicazione di livelli energetici: per ogni livello di energia positivo ce ne sarebbe un corrispettivo negativo, entrambi legati allo stesso stato. Questo risultato, noto come **duplicazione di Kramer**, porterebbe a contraddizioni palesi e abbastanza preoccupanti se, ovviamente, non ci fosse una via d'uscita. Questa è veramente semplice: quando si ha a che fare con \mathcal{U} antilineare, **l'evoluzione temporale si inverte**, quindi:

$$\mathcal{U}\Psi(t) = e^{i\frac{H}{\hbar}t}\Psi(0)$$

Da questa deriva immediatamente che $\mathcal{U}^{-1}H\mathcal{U} = H$. L'inversione temporale che si presenta in questo caso è, in teoria dei campi, strettamente collegata ai concetti di parità e coniugazione di carica, tre inversioni di simmetria regolate dal **teorema CPT** che pone vincoli a come e quando queste possono verificarsi.

7.4 Trasformazioni di Galileo

Anche le trasformazioni sono un'operazione di simmetria: non fanno altro che cambiare punto di vista dell'osservatore o, per dirla meglio, sistema di riferimento. Tuttavia, dalla meccanica classica non sappiamo di leggi di conservazione legate alle trasformazioni di Galileo, quindi ci aspettiamo che i generatori di questa simmetria *non* commutino con l'hamiltoniana.

Queste trasformazioni sono descritte, in termini di operatori, da un'espressione del tipo

$$\mathcal{U}^{-1}(\mathbf{v})\mathbf{X}\mathcal{U}(\mathbf{v}) = \mathbf{x} + \mathbf{v}t$$

Sfruttando la rappresentazione di Heisenberg per l'evoluzione temporale dell'operatore posizione:

$$\mathcal{U}^{-1}(\mathbf{v})\mathbf{X}_H\mathcal{U}(\mathbf{v}) = \mathbf{X}_H(t) + \mathbf{v}t$$

Di questa prendo la derivata temporale; dalla rappresentazione di Heisenberg sappiamo che $\dot{\mathbf{X}}_H = \frac{i}{\hbar}[H, \mathbf{X}_H]$, quindi:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{-1}\dot{\mathbf{X}}_H\mathcal{U} &= \dot{\mathbf{X}}_H + \mathbf{v} \\ i\mathcal{U}^{-1}[H, \mathbf{X}_H]\mathcal{U} &= i[H, \mathbf{X}_H] + \hbar\mathbf{v} \\ i[\mathcal{U}^{-1}H\mathcal{U}, \mathbf{X}] &= i[H, \mathbf{X}] + \hbar\mathbf{v} \end{aligned}$$

Nell'ultimo passaggio abbiamo esplicitato il commutatore e posto $\mathbf{X}_H(t=0) = \mathbf{X}$. Cos'è $\mathcal{U}^{-1}H\mathcal{U}$? Se poniamo $\mathcal{U}^{-1}H\mathcal{U} = H + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$ otteniamo la seguente espressione:



$$i[H + \mathbf{P} \cdot \mathbf{v}, \mathbf{X}] = i[H, \mathbf{X}] + i[\mathbf{P} \cdot \mathbf{v}, \mathbf{X}] = i[H, \mathbf{X}] + iv_i[P_i, X_j] = i[H, \mathbf{X}] + \hbar \mathbf{v}$$

Quindi ha senso ciò che abbiamo scritto. Allora è lecito aspettarsi che $\mathcal{U} = \mathbb{I} - i\mathbf{v} \cdot \mathbf{k} + O(v^2)$, con \mathbf{k} che sono i generatori delle trasformazioni di Galileo. Di loro sappiamo solo che $\mathcal{U}^{-1}H\mathcal{U} = H + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$: per soddisfare questa condizione deve essere $[\mathbf{k}, H] = -i\mathbf{p}$, la dimostrazione è un banale prodotto scalare. L'altra informazione che abbiamo è che $[k_i, k_j] = 0$, questo per permetterci di scrivere trasformazioni in sequenza rispettando la condizione $\mathcal{U}(\mathbf{v})\mathcal{U}(\mathbf{v}') = \mathcal{U}(\mathbf{v} + \mathbf{v}')$.

Se consideriamo un sistema di N particelle non interagenti fra loro e compiamo una trasformazione di Galileo, partendo da $\mathcal{U}^{-1}(\mathbf{v})\dot{\mathbf{X}}_{n,H}(t)\mathcal{U}(\mathbf{v}) = \dot{\mathbf{X}}_{n,H} + \mathbf{v}$, moltiplicando entrambi i membri per la massa dell'ennesima particella m_n :

$$\mathcal{U}^{-1}(\mathbf{v})\mathbf{P}_{n,H}(t)\mathcal{U}(\mathbf{v}) = \mathbf{P}_{n,H}(t) + m_n\mathbf{v}$$

Questa espressione è corretta se e solo se $[k_i, P_{j,n}] = -i\delta_{ij}m_n$

Per avere quindi una simmetria sotto le trasformazioni di Galileo, dobbiamo trovare una forma esplicita per l'hamiltoniana che sia indipendente da queste trasformazioni. L'espressione già nota dell'hamiltoniana di sistemi di particelle non interagenti:

$$H = \sum_n \frac{\mathbf{P}_n^2}{2m_n}$$

Soddisfa questa caratteristica. Se quindi consideriamo le simmetrie come il nucleo di una teoria, l'espressione dell'hamiltoniana per sistemi non interagenti assume questa forma proprio per invarianza sotto trasformazioni di Galileo.

Nel caso relativistico, in cui si operano trasformazioni di Lorentz invece che trasformazioni di Galileo, le cose sono un po' diverse, e diverse sono anche le regole di commutazione che riguardano gli eventuali generatori di quella trasformazione.



Capitolo 8

Teoria del momento angolare

8.1 Spin e rotazioni

8.1.1 La prima proposta di spin

Gli atomi alcalini come il sodio presentano un solo elettrone nel livello energetico superiore e questo vede il nucleo schermato dagli altri elettroni, come se vi fosse un solo protone; in prima approssimazione, si comportano in modo simile all'idrogeno, sebbene l'elettrone più esterno degli alcalini non risente di un potenziale coulombiano.

Tra i livelli 3p e 3s c'è un piccolo gap di energia, ed è permessa una transizione solo se i due livelli sono leggermente perturbati rispetto alla loro degenerazione elettronica. In spettroscopia si verifica, per questa transizione, *una duplicazione di riga*, ovvero sono presenti due linee di transizione molto vicine tra loro (5896 e 5890 angstrom); questo fenomeno è assolutamente incomprensibile, anche alla luce degli studi di Bohr e dei primi passi della meccanica ondulatoria.

I primi a presentare una soluzione a questo problema furono **Goudsmith e Uhlenbeck** i quali proposero l'esistenza di un momento angolare intrinseco dell'elettrone, il quale può avere come proiezione sull'asse \hat{z} solo due valori. Questo momento angolare si accoppia con i deboli campi magnetici dovuti alla rotazione dell'elettrone attorno al nucleo: non serve sapere come l'elettrone gira, se gira si crea un campo magnetico che, per quanto debole possa essere, si accoppia comunque con questo momento angolare intrinseco. Esiste quindi una **relazione tra il momento magnetico e il momento angolare intrinseco di una particella**:

$$\mathbf{m} = -\frac{eg}{2m}\mathbf{S}$$

Dove g viene chiamato **fattore giromagnetico** della particella. Da questo momento in poi, il momento angolare intrinseco dei sistemi venne chiamato **momento angolare di spin**. L'interazione tra spin e campo magnetico è ben formulata: l'hamiltoniana di interazione sarà $H \propto -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$. Ovviamente, come tutte le grandi scoperte fatte dall'uomo, anche questa ipotesi venne in primo luogo ignorata dalla maggior parte degli esperti dell'epoca.

Il caso più semplice che possiamo considerare per avere un'espressione dell'hamiltoniana di interazione è che, istante per istante, il nucleo abbia una certa velocità



\mathbf{v} . Se siamo vicini alla carica del nucleo risentiamo di un campo elettrico \mathbf{e} , se il nucleo si muove, sarà presente anche un campo magnetico, che non è ovviamente presente nella direzione del moto. Supponiamo che il nucleo si muova lungo l'asse $\hat{\mathbf{x}}$, avremo il campo magnetico con le seguenti componenti:

$$\mathbf{B} = \begin{cases} B_x = 0 \\ B_y = -\frac{v}{c}E_z \\ B_z = \frac{v}{c}E_y \end{cases}$$

Vale ovviamente $\mathbf{B} = \mathbf{v} \times \mathbf{E}$ in unità gaussiane. L'hamiltoniana di interazione sarà quindi $H = -\frac{eg}{2m}\mathbf{S} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{E})$; ponendo $\mathbf{E} = -\nabla\phi = -\frac{\mathbf{r}}{r}\partial_r\phi$ in coordinate sferiche, otteniamo:

$$H = +\frac{eg}{2m}\mathbf{S} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{r}) \left(\frac{1}{r}\partial_r\phi\right) = -\frac{eg}{2m^2}\mathbf{S} \cdot (\mathbf{r} \times m\mathbf{v}) \left(\frac{1}{r}\partial_r\phi\right) = -\frac{eg}{2m^2} \left(\frac{1}{r}\partial_r\phi\right) \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

Ovvero l'interazione tra campo magnetico e spin porta a un'interazione tra momento angolare orbitale dell'elettrone con il suo spin. Parleremo ora di simmetria sotto rotazioni, di come queste permettano l'esistenza di un altro momento angolare oltre il già noto \mathbf{L} e, alla fine, torneremo sulla separazione di riga.

8.1.2 Simmetria per rotazioni

Usando come principio chiave della teoria le simmetrie vedremo come il momento angolare di un sistema sia in realtà qualcosa di più generale di \mathbf{L} .

Poichè l'hamiltoniana è invariante sotto rotazioni, commuta con i generatori della rotazione; gli autovalori dei generatori sono conservati e possono perciò essere dei buoni numeri quantici. Una rotazione è in generale una trasformazione del tipo

$$x_i \rightarrow R_{ij}x_j$$

Con R_{ij} chiamata *matrice di rotazione*. Le rotazioni sono simmetrie, e quindi mantengono invariati i prodotti scalari, infatti:

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = x_i y_i \rightarrow (R_{ij}x_j)(R_{ij'}y_{j'}) = R_{ij}R_{ij'}x_j y_{j'}$$

Da questa quindi deve essere che $R_{ij}R_{ij'} = R_{j'i}^T R_{ij'} = \delta_{jj'}$, ovvero che $R^T R = \mathbb{I}$ (sono matrici ortogonali); da questa consegue subito che $\det(R^T R) = \det(R^2) = 1$, quindi $\det(R) = \pm 1$. Questa condizione sul determinante impone che le matrici di rotazione appartengano al gruppo delle matrici ortogonali di dimensione n -esima $O(n)$. Nella realtà dei fatti esse appartengono al sottogruppo speciale $SO(n)$ delle matrici ortogonali tali che $\det(R) = 1$, ovvero il sottogruppo delle matrici invertibili e ortogonali.

Come si trasformano gli stati sotto rotazione? Ovviamente potremo scrivere un'espressione del tipo $\Psi \rightarrow \mathcal{U}\Psi$ con $\mathcal{U}(R)$ operatore di rotazione; deve valere, come tutte le simmetrie, $\mathcal{U}(R_1)\mathcal{U}(R_2) = \mathcal{U}(R_1 R_2)$. Questo operatore ovviamente rispetta la condizione:



$$\mathcal{U}_{(R)}^{-1} X_i \mathcal{U}_{(R)} = R_{ij} X_j$$

Sfruttiamo le trasformazioni infinitesime, ponendo $R_{ij} = \delta_{ij} + \omega_{ij} + o(\omega^2) \simeq \mathbb{I} + \omega$ con ω_{ij} rotazione infinitesima. Con questa definizione otteniamo un'importante informazione sulle matrici ω_{ij} :

$$R^T R = \mathbb{I} = (\mathbb{I} + \omega^T)(\mathbb{I} + \omega) = \mathbb{I} + \omega^T + \omega = \mathbb{I}$$

Ovvero $\omega^T + \omega = 0$: queste sono **matrici antisimmetriche**. Definiamo una rotazione infinitesima come:

$$\mathcal{U}(\mathbb{I} + \omega) = \mathbb{I} + \omega_{ij} J_{ij} = \mathbb{I} - \omega_{ji} J_{ij}$$

Dove J_{ij} sono i generatori delle rotazioni e sono anch'essi antisimmetrici. Mettendo al posto giusto le costanti dimensionali e complesse per sistemare le regole di commutazione, l'espressione finale è:

$$\mathcal{U}(\mathbb{I} + \omega) = \mathbb{I} + \frac{i}{2\hbar} \omega_{ij} J_{ij}$$

Ci chiediamo quali altre condizioni deve soddisfare il generatore J_{ij} , stiamo cioè cercando le sue regole di commutazione. Per ottenerle abbiamo dalla nostra solo due espressioni note:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{-1} V_i \mathcal{U} &= R_{ij} V_j \\ \mathcal{U}(\mathbb{I} + \omega) &= \mathbb{I} + \frac{i}{2\hbar} \omega_{ij} J_{ij} \end{aligned}$$

Vediamo come si ottengono **le stesse regole di commutazione di \mathbf{L}** senza però dire un accidente su \mathbf{L} stesso. Iniziamo col commutatore $[J_{ij}, V_k]$ con un vettore qualunque:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{-1}(\mathbb{I} + \omega) V_i \mathcal{U}(\mathbb{I} + \omega) &= R_{ij} V_j = (\mathbb{I} + \omega) \mathbf{V} \\ \left(\mathbb{I} - \frac{i}{2\hbar} \omega_{ij} J_{ij} \right) V_k \left(\mathbb{I} + \frac{i}{2\hbar} \omega_{rs} J_{rs} \right) &= V_k + \omega_{kk'} V_{k'} \\ - \frac{i}{2\hbar} \omega_{ij} (J_{ij} V_k - V_k J_{ij}) &= \omega_{kk'} V_{k'} \\ - \frac{i}{2\hbar} \omega_{ij} [J_{ij}, V_k] &= \omega_{kk'} V_{k'} \end{aligned}$$

Da questa ricaviamo il commutatore cercato:

$$\frac{i}{\hbar} [J_{ij}, V_k] = \delta_{ki} V_j - \delta_{kj} V_i$$

Quest'ultimo passaggio può essere dimostrato osservando che:

$$\frac{1}{2} \omega_{ij} (\delta_{ki} V_j - \delta_{kj} V_i) = \frac{1}{2} (\omega_{kj} V_j - \omega_{ik} V_i) = \frac{1}{2} (\omega_{kj} V_j + \omega_{ki} V_i) = \omega_{kj} V_j$$



Avendo sfruttato il fatto che gli indici sulle ω sono muti, e quindi possiamo rinominarli a piacimento.

L'altro commutatore che cerchiamo è quello del generatore con se stesso, $\frac{i}{\hbar}[J_{ij}, J_{kl}]$. Per calcolarlo sfruttiamo le rotazioni in catena:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^{-1}(R)\mathcal{U}(\mathbb{I} + \omega)\mathcal{U}(R) &= \mathcal{U}(1 + R^{-1}\omega R) \\ \mathcal{U}^{-1}(R)\left(\mathbb{I} + \frac{i}{2\hbar}\omega_{ij}J_{ij}\right)\mathcal{U}(R) &= \mathbb{I} + \frac{i}{2\hbar}(R^{-1}\omega R)_{ij}J_{ij} \\ \frac{i}{2\hbar}\omega_{ij}\mathcal{U}^{-1}(R)J_{ij}\mathcal{U}(R) &= \frac{i}{2\hbar}(R^{-1}\omega R)_{ij}J_{ij} \\ \omega_{ij}\mathcal{U}^{-1}(R)J_{ij}\mathcal{U}(R) &= R_{ik}^{-1}\omega_{kk'}R_{k'j}J_{ij} \\ \mathcal{U}^{-1}(R)J_{ij}\mathcal{U}(R) &= R_{ki}R_{k'j}J_{ij} \end{aligned}$$

Essendo J_{ij} un tensore di rango due, l'ultima uguaglianza ci dice che per compiere una rotazione su questo dobbiamo compiere due rotazioni in sequenza. Poniamo adesso $R = \mathbb{I} + \omega$ come rotazione infinitesima, il primo membro dell'ultima uguaglianza è:

$$\left(\mathbb{I} - \frac{i}{2\hbar}\omega_{ij}J_{ij}\right)J_{kl}\left(\mathbb{I} + \frac{i}{2\hbar}\omega_{rs}J_{rs}\right) = J_{kl} - \omega_{ij}\frac{i}{2\hbar}(J_{ij}J_{kl} - J_{kl}J_{ij}) = J_{kl} - \omega_{ij}\frac{i}{2\hbar}[J_{ij}, J_{kl}]$$

Il secondo membro è invece:

$$R_{ki}R_{lj}J_{ij} = (\delta_{ki} + \omega_{ki})(\delta_{lj} + \omega_{lj})J_{ij} = J_{kl} + J_{kj}\omega_{lj} + \omega_{ki}J_{il} = J_{kl} - J_{kj}\omega_{jl} + \omega_{ki}J_{il}$$

Uguagliandole otteniamo il commutatore cercato:

$$\frac{i}{\hbar}[J_{ij}, J_{kl}] = \delta_{ik}J_{lj} + \delta_{jk}J_{il} - \delta_{il}J_{kj} - \delta_{lj}J_{ik}$$

8.2 Momento angolare totale

8.2.1 Diversi momenti angolari

Riprendiamo il generatore J_{ij} , questo possiamo scriverlo anche come:

$$J_{ij} = \epsilon_{ijk}J_k$$

Visto che $\epsilon_{ijk'}J_{ij} = \epsilon_{ijk'}\epsilon_{ijk}J_k = 2\delta_{kk'}J_k$, sarà allora:

$$J_k = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}J_{ij}$$

Queste due espressioni sono ovviamente equivalenti. Possiamo allora sfruttare quest'uguaglianza e sostituirla nell'operatore unitario:



$$\mathcal{U}(\mathbb{I}+\omega) = \mathbb{I} + \frac{i}{2\hbar}\omega_{ij}J_{ij} = \mathbb{I} + \frac{i}{2\hbar}\omega_{ij}\epsilon_{ijk}J_k = \mathbb{I} + \frac{i}{\hbar}\underbrace{\left(\frac{\epsilon_{ijk}\omega_{ij}}{2}\right)}_{\omega_k}J_k = \mathbb{I} + \frac{i}{\hbar}\omega_k J_k = \mathbb{I} + \frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{J}$$

Questo è un nuovo modo per esprimere la rotazione infinitesima; riprendiamo la prima regola di commutazione $\frac{i}{\hbar}[J_{ij}, V_k]$ e riscriviamola in funzione di J_k , semplicemente moltiplicandola per $\frac{1}{2}\epsilon_{ijk'}$

$$\begin{aligned}\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\epsilon_{ijk'}[V_k, J_{ij}] &= \frac{1}{2}\epsilon_{ijk'}\delta_{kj}V_j - \frac{1}{2}\epsilon_{ijk'}\delta_{ki}V_i \\ \frac{i}{\hbar}[V_k, J_{k'}] &= \frac{1}{2}\epsilon_{kjk'}V_j - \frac{1}{2}\epsilon_{ikk'}V_i = \epsilon_{kjk'}V_k\end{aligned}$$

Da questa si ricava immediatamente che $[J_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k$: **questa è proprio la regola di commutazione del momento angolare orbitale con qualsiasi operatore vettoriale**, senza però usare la definizione $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$. Questo ci dice che il tensore J_{ij} è legato dalla relazione $J_{ij} = \epsilon_{ijk}J_k$ a un momento angolare che genera la rotazione. Poiché non abbiamo usato la definizione di momento angolare orbitale ci sarà spazio per altri momenti angolari oltre questo: possiamo definirne uno \mathbf{S} , lo chiamiamo *spin* e vale $\mathbf{S} = \mathbf{J} - \mathbf{L}$, da cui $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Di questo nuovo momento angolare non sappiamo ancora nulla, ma possiamo dedurre qualcosa, infatti:

$$\begin{aligned}[J_i, V_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}V_k \\ [L_i + S_i, V_j] &= [L_i, V_j] + [S_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k\end{aligned}$$

Poiché sappiamo $[L_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k$ **deduciamo che** $[S_i, V_j] = 0$. L'altra unica informazione che abbiamo sullo spin è $[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$. Abbiamo quindi un elenco di commutatori che valgono per i momenti angolari:

$$\begin{aligned}[L_i, L_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \\ [L_i, S_j] &= 0 \\ [S_i, S_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}S_k \\ [L_i, V_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}V_k \\ [S_i, V_j] &= 0\end{aligned}$$

Per avere più informazioni sullo spin occorre compiere ancora qualche passo.

Esempio (8.1)

Come si trasforma il tensore di Levi-Civita sotto rotazioni? Essendo un tensore di rango 3, occorrono 3 rotazioni in sequenza per ruotarlo:

$$\epsilon_{ijk}R_{i'i}R_{j'j}R_{k'k} = \epsilon_{ijk}\det R = \epsilon_{ijk}$$

Quindi il tensore di Levi-Civita è invariante per rotazioni. La stessa cosa vale ovviamente per la delta di Kronecker:



$$\delta_{ij}R_{ik}R_{jk'} = R_{ik}R_{ik'} = R_{ki}^T R_{ik'} = \delta_{kk'}$$

Esempio (8.2)

Vediamo che l'espressione $J_k = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}J_{ij}$ **non** dipende dal sistema di riferimento. Compriamo una rotazione su questa:

$$\epsilon_{ijk}J_{ij} \rightarrow \epsilon_{ijk}(R_{il}^T R_{lr})(R_{jm}^T R_{ms})J_{rs} = (R_{li}R_{mj}\epsilon_{ijk})(R_{lr}R_{ms})J_{rs}$$

Allo stesso modo ruotiamo J_k e uguagliamo le due espressioni:

$$J'_k = R_{nk}J_k = \frac{1}{2}R_{nk}R_{li}R_{mj}\epsilon_{ijk}J'_{lm} = \frac{1}{2}\epsilon_{lmk}J'_{lm}$$

Come volevasi dimostrare.

8.2.2 Componenti del momento angolare, operatori di scala

Entriamo nel gorgo; esattamente come per il momento angolare orbitale, è lecito aspettarsi che:

$$J_3\Psi_l^m = \hbar m\Psi_l^m$$

Ovvero che Ψ_l^m è autostato di J_3 con autovalore $\hbar m$ e m risulta ovviamente la proiezione sull'asse \hat{z} del *momento angolare totale*. Definiamo gli **operatori di scala**:

$$J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2$$

Posto $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$, vediamo come possiamo esprimere $J_3(J_{\pm}\Psi^m)$, partendo dal commutatore:

$$[J_3, J_{\pm}] = [J_3, J_1 \pm iJ_2] = [J_3, J_1] \pm i[J_3, J_2] = i\hbar\epsilon_{312}J_2 \pm i(i\hbar\epsilon_{321}J_1) = \pm\hbar J_1 + i\hbar J_2$$

Da questo si ricava facilmente che $J_3J_{\pm} = J_{\pm}J_3 \pm \hbar J_{\pm}$. Allora:

$$J_3(J_{\pm}\Psi^m) = J_{\pm}(\hbar m\Psi^m) \pm \hbar J_{\pm}\Psi^m = \hbar(m \pm 1)J_{\pm}\Psi^m$$

Questo ci dice che $J_{\pm}\Psi^m$ è autostato di J_3 con autovalore $\hbar(m \pm 1)$. Verificheremo che $J_{\pm}\Psi^m \propto \Psi^{m \pm 1}$ e troveremo anche gli autovalori.

Poiché $[\mathbf{J}^2, J_3] = 0$, lo stato Ψ_j^m è autostato comune a entrambi e, come per il momento angolare orbitale, vale:

$$\mathbf{J}^2\Psi_j^m = \hbar^2 j(j+1)\Psi_j^m$$



Solo che in questo caso \mathbf{J} è più generale di \mathbf{L} e, di conseguenza, Ψ_j^m non rappresenta le armoniche sferiche, o meglio, non rappresenta *solo* le armoniche sferiche. Poiché \mathbf{J}^2 commuta anche gli operatori di scala J_{\pm} , hanno tutti autostati comuni. Supponiamo Ψ_j^m sia autostato comune a \mathbf{J}^2 con autovalore j e a J_3 con autovalore m , sfruttando le regole generali degli spazi di Hilbert:

$$0 \leq (\Psi_j^m, (J_1^2 + J_2^2)\Psi_j^m) = (\Psi_j^m, (\mathbf{J}^2 - J_3^2)\Psi_j^m) = j - m^2$$

Da questa ricaviamo che $-\sqrt{j} \leq m \leq \sqrt{j}$, ovvero **la scala degli stati Ψ^m non è illimitata**. Posto $j = \max(m)$ e $j' = \min(m)$, vale:

$$\begin{cases} J_+ \Psi^j = 0 \\ J_- \Psi^j \propto \Psi^{j-1} \\ \vdots \\ J_- \Psi^{j'} = 0 \end{cases}$$

Ricaviamo da questo che $j - j'$ è **intero**. Costruiamo adesso altri due operatori:

$$\begin{aligned} J_- J_+ &= J_1^2 + J_2^2 + i[J_1, J_2] = \mathbf{J}^2 - J_3^2 - \hbar J_3 \\ J_+ J_- &= \mathbf{J}^2 - J_3^2 + \hbar J_3 \end{aligned}$$

Consideriamo l'equazione del peso massimo $J_+ \Psi^j = 0$, che implica $m = j$, varrà allo stesso modo $J_- J_+ \Psi^j = 0$, quindi:

$$\begin{aligned} (\mathbf{J}^2 - J_3^2 - \hbar J_3)\Psi^j &= 0 \\ \mathbf{J}^2 \Psi^j &= J_3^2 \Psi^j + \hbar m J_3 \Psi^j \\ \Rightarrow \mathbf{J}^2 \Psi^j &= \hbar^2 j(j+1)\Psi^j \end{aligned}$$

Questo vale ovviamente sul peso massimo. Possiamo ripetere il procedimento sul peso minimo, considerando che $J_- \Psi^{j'} = 0$, quindi:

$$\begin{aligned} J_+ J_- \Psi^{j'} &= 0 \\ (\mathbf{J}^2 - J_3^2 + \hbar J_3)\Psi^{j'} &= 0 \\ \Rightarrow \mathbf{J}^2 \Psi^{j'} &= \hbar^2 j'(j'-1)\Psi^{j'} \end{aligned}$$

Osserviamo che gli operatori $J_- J_+, J_+ J_-$ non fanno cambiare la proiezione sul terzo asse dello stato, quindi uguagliando i due autovalori trovati troveremo una condizione sull'autovalore del momento angolare totale \mathbf{J}^2 . Infatti $j(j+1) = j'(j'-1)$ ammette due soluzioni: la prima è paradossale, $j' = j+1$, ma non ha senso visto che $j' < j$ per come l'abbiamo costruito; la seconda invece è interessante: $j' = -j$. Riprendendo il risultato che $j - j'$ è intero, otteniamo che **$2j$ è un numero intero**: quindi j può essere sia intero che semiintero. Si apre quindi la porta della possibilità che sia $j = \frac{1}{2}$ (è questo il caso dello spin teorizzato da Goudsmith e Uhlenbeck): in questo caso infatti si hanno sole due possibili proiezioni sull'asse $\hat{\mathbf{z}}$ e sono $\pm \frac{1}{2}$. Possono anche esserci dei casi in cui lo spin vale $\frac{3}{2}$, come nel caso dei barioni Δ^{++} . Abbiamo compiuto un



passo importantissimo: è vero che c'è il momento angolare orbitale \mathbf{L} con i suoi autovalori *interi*, ma la storia permette l'esistenza di altri momenti angolari con autovalori *semiinteri*, aprendo la strada allo spin.

8.2.3 Autovalori degli operatori di scala

Essendo \mathbf{J}^2, J_3 operatori hermitiani, valgono per i loro autostati le classiche regole di ortogonalità:

$$\begin{aligned}(\Psi_j^{m'}, \Psi_j^m) &= \delta_{mm'} \\(\Psi_{j'}^m, \Psi_j^m) &= \delta_{jj'} \\ \Psi_{j'}^{m'}, \Psi_j^m &= \delta_{jj'} \delta_{mm'}\end{aligned}$$

Cerchiamo adesso gli autovalori degli operatori di scala J_{\pm} . Abbiamo anticipato che $J_{\pm} \Psi^m \propto \Psi^{m \pm 1}$. Supponiamo che $\alpha_{-}(j, m)$ sia l'autovalore di J_{-} sullo stato Ψ_j^m . Allora:

$$J_{+}(J_{-} \Psi_j^m) = J_{+}(\alpha_{-}(j, m) \Psi_j^{m-1}) = \alpha_{-}(j, m) \alpha_{+}(j, m-1) \Psi_j^m$$

Ricordando che:

$$J_{+}J_{-} \Psi_j^m = (\mathbf{J}^2 - J_3^2 + \hbar J_3) \Psi_j^m = \hbar^2(j(j+1) - m^2 + m) \Psi_j^m$$

Otteniamo una prima condizione su questi autovalori:

$$\alpha_{-}(j, m) \alpha_{+}(j, m-1) = \hbar^2(j(j+1) - m^2 + m)$$

Dobbiamo cercare un'altra equazione per determinarli. Partiamo da $(J_{\pm} \Psi^m, J_{\pm} \Psi^m) = (\Psi^m, J_{\mp} J_{\pm} \Psi^m)$. A questa uguaglianza sostituiamo la stessa in cui al posto degli operatori inseriamo i loro autovalori:

$$(\alpha_{\pm}(j, m) \Psi_j^m, \alpha_{\pm}(j, m) \Psi_j^m) = |\alpha_{\pm}(j, m)|^2 (\Psi_j^m, \Psi_j^m)$$

Soffermiamoci a guardare il membro di destra: possiamo anche esprimerlo come:

$$|\alpha_{\pm}(j, m)|^2 = (\Psi_j^m, J_{\mp} J_{\pm} \Psi_j^m) = (\Psi_j^m, (\mathbf{J}^2 - J_3^2 \mp \hbar J_3) \Psi_j^m) = \hbar^2(j(j+1) - m^2 \mp m)$$

Abbiamo ottenuto quindi due condizioni su questi autovalori:

$$\begin{cases} |\alpha_{\pm}(j, m)|^2 = \hbar^2(j(j+1) - m^2 \mp m) \\ \alpha_{-}(j, m) \alpha_{+}(j, m-1) = \hbar^2(j(j+1) - m^2 + m) \end{cases}$$

Concludiamo quindi la nostra disperata ricerca degli autovalori degli operatori di scala:

$$\mathbf{J}_{\pm} \Psi_j^m = \hbar \sqrt{j(j+1) - m^2 \mp m} \Psi_j^{m \pm 1}$$



Questi autovalori sono ovviamente definiti a meno di una fase (siamo sempre nel campo dei numeri complessi). Se però consideriamo che gli stati non sono altro che raggi nello spazio di Hilbert, moltiplicati per un numero tale che $|a|^2 = 1$ questi non variano (per la regola di Born); quando appare quindi una fase, basta moltiplicarli per una fase ulteriore per tornare nel caso di prima. In parole spicciole gli autovalori degli operatori di scala sono reali.

Questo giochetto così innocente quanto perverso (“*Ma perché stamo a fa sta cosa?*” è una domanda che è aleggiata nelle menti di chiunque sia passato per questi argomenti) ha in realtà degli utilizzi estremamente potenti: ricordate le armoniche sferiche e lo sbattimento assurdo per costruirle? Ecco, con gli operatori di scala quello sbattimento non è più necessario. Infatti, definiti $L_{\pm} = L_1 \pm iL_2$, vale $L_{\pm}Y_l^m = \hbar\sqrt{l(l+1) - m^2 \mp m}Y_l^{m\pm 1}$. Ricordando la definizione di L_1, L_2 si possono ottenere gli operatori di scala e usare questi. Il consiglio è: partire dall’armonica Y_l^0 , visto che sono noti i polinomi di Legendre, e salire e scendere con gli operatori di scala (oppure, allo stesso modo, partire dalla più alta o dalla più bassa che sono polinomi easy da scrivere come \hat{x}_{\pm}^l e salire o scendere con gli operatori di scala). La fase strana che compariva in tutte le armoniche sferiche, utilizzando questo metodo, viene fuori di per sè senza stare troppo tempo a pensarci su. Facciamo un esempio: consideriamo Y_1^0 e ricaviamo la superiore con gli operatori di scala:

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \rightarrow L_+ Y_1^0 = \hbar\sqrt{1(1+1) - 0 - 0}Y_1^1 = \hbar\sqrt{2}Y_1^1$$

A questo punto, basta osservare che $L_+ = \hbar e^{-i\phi} \partial_{\theta} + i\hbar \cot \theta e^{i\phi} \partial_{\phi}$:

$$\left. \begin{aligned} \hbar e^{i\phi} \partial_{\theta} \left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \right) &= \hbar\sqrt{2}Y_1^1 \\ e^{i\phi} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} (-\sin \theta) &= \sqrt{2}Y_1^1 \end{aligned} \right\} Y_1^1 = -e^{i\phi} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta$$

8.3 Matrici di Pauli, esperimento di Stern-Gerlach

8.3.1 Matrici di Pauli

Consideriamo solo stati a spin $\frac{1}{2}$; si definisce:

$$(\Psi_{\frac{1}{2}}^{m'}, \mathbf{J}\Psi_{\frac{1}{2}}^m) = \frac{\hbar}{2} \sigma_{m'm}$$

Dove $\sigma_{mm'}$ viene chiamata **matrice di Pauli**. Per calcolare le matrici di Pauli si calcolano uno per uno i vari prodotti scalari, ricordando che la proiezione m può assumere solo valori $\pm\frac{1}{2}$. Le matrici di Pauli sono 3, una per ogni componente di \mathbf{J} . Lo stato a sinistra del prodotto scalare indica la riga, quello a destra la colonna. le tre matrici di Pauli sono:

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



Per calcolare le matrici $\sigma_{1,2}$ si sfruttano gli operatori J_{\pm} che forniscono le matrici $\sigma_{\pm} = \sigma_1 \pm i\sigma_2$ e poi si ricavano queste. Essendo i calcoli semplici prodotti scalari, per di più normalizzati, non forniamo i calcoli delle matrici.

Parliamo però della loro funzione. Ricordiamo che \mathbf{J} genera le rotazioni, che abbiamo scritto come $\mathbb{I} + \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{J}$. Possiamo sempre sviluppare uno stato su un set completo, quindi possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}\Psi_{\frac{1}{2}}^m &= \sum_{m'} \Psi_{\frac{1}{2}}^{m'} (\Psi_{\frac{1}{2}}^{m'}, \mathcal{U}\Psi_{\frac{1}{2}}^m) = \\ &= \sum_{m'} \Psi_{\frac{1}{2}}^{m'} \left(\Psi_{\frac{1}{2}}^{m'}, \left(\mathbb{I} + \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{J} \right) \Psi_{\frac{1}{2}}^m \right) = \\ &= \sum_{m'} \Psi_{\frac{1}{2}}^{m'} \left[\delta_{mm'} + \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\omega} \cdot (\Psi_{\frac{1}{2}}^{m'}, \mathbf{J}\Psi_{\frac{1}{2}}^m) \right] \\ \Rightarrow \mathcal{U}\Psi_{\frac{1}{2}}^m &= \sum_{m'} \Psi_{\frac{1}{2}}^{m'} \left(\delta_{mm'} + \frac{i}{2} \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{m'm} \right) \end{aligned}$$

Quindi **le matrici di Pauli sono i generatori delle rotazioni per gli stati a spin $\frac{1}{2}$** . Questi stati sono detti **spinori** e si comportano in modo strano, come vedremo meglio in seguito.

Queste matrici formano un gruppo $SU(2)$, matrici unitarie a determinante unitario 2×2 , che rispettano l'algebra di Lie. Le matrici di Pauli sono tutte a traccia nulla e sono hermitiane.

8.3.2 Esperimento di Stern-Gerlach

Abbiamo visto come è stato all'inizio teorizzato lo spin, come la teoria ammetta la sua esistenza e come calcolarlo. Non resta che vedere come misurarlo sperimentalmente. Uno degli esperimenti più famosi in questo ambito è l'esperimento di Stern e Gerlach, effettuato nel 1922, addirittura prima della teorizzazione dello spin da parte di Goudsmith e Uhlenbeck.

Questo esperimento sfrutta l'interazione tra il momento angolare intrinseco di un sistema e un campo magnetico esterno. Consideriamo un campo del tipo $\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{z}} + \mathbf{B}_1(\mathbf{x})$; poniamo $(B_1)_z = B_{zj}x_j = B_{z1}x_1 + B_{z2}x_2 + B_{z3}x_3$. Le ipotesi sono che $B_0 \gg B_1$ e che \mathbf{B}_1 abbia solo componente lungo l'asse \mathbf{x} . Consideriamo atomi globalmente neutri, così che non risentano della forza di Lorentz: per questi sarà presente un'hamiltoniana di interazione $H_I = -k\mathbf{J} \cdot \mathbf{B}$, dove $\mathbf{J} = \mathbf{S}$ e può riferirsi a un solo atomo o a un intero fascio. Avremo quindi un'hamiltoniana del tipo:

$$H_I = -k(J_3 B_0 + \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}_1)$$

Studiamo il moto macroscopico sfruttando le equazioni di Ehrenfest, in particolare la seconda $\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = - \langle \nabla V \rangle = k \langle \nabla(\mathbf{J} \cdot \mathbf{B}) \rangle$. Se non vi fosse variazione spaziale nel campo magnetico *non avremmo una forza agente sulle particelle*; però, se questa variazione spaziale c'è, allora la forza agente dipenderà anche dallo spin della particelle stesse.



Guardiamo al gradiente $\nabla(\mathbf{J} \cdot \mathbf{B})$; sfruttiamo gli operatori di scala J_{\pm} , tramite questi possiamo esprimere, ad esempio, $J_1 = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$. Riprendendo le equazioni di Ehrenfest:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P}\Psi_j^m \rangle = k \langle \nabla(\mathbf{J} \cdot \mathbf{B})\Psi_j^m \rangle$$

Il termine $\mathbf{J} \cdot \mathbf{B}_1 = J_1 B_{1x} + J_2 B_{1y} + J_3 B_{1z}$ può essere riscritto in termini degli operatori di scala. Questi compariranno allora nell'hamiltoniana. Se a questo punto studiamo l'evoluzione temporale del sistema, avremo che gli stati varieranno di una fase. Calcolando il prodotto scalare $(\Psi_j^{m'}, \nabla(\mathbf{J} \cdot \mathbf{B})\Psi_j^m)$ avremo delle fasi, nelle componenti J_1, J_2 , dovute agli operatori di scala $e^{-\frac{i}{\hbar}k(m\hbar)B_0t}$ da una parte, mentre una fase $e^{\frac{i}{\hbar}(m\pm 1)B_0t}$ dall'altra. Queste fasi possono essere moltiplicate tra loro in modo da farne scomparire una e portare tutta la differenza delle due su un lato, ottenendo $e^{\pm i\hbar B_0t}$. Tuttavia, poiché per ipotesi B_0 è *molto* grande, questo è un termine altamente oscillante che, quindi, può essere trascurato nell'evoluzione temporale del sistema. Questo ci dice che tutti i contributi dovuti a J_{\pm} e, quindi, delle componenti J_1, J_2 sono trascurabili e solo la componente J_3 indice sulla forza agente sul sistema e sulla sua evoluzione temporale.

Alla fine della fiera, costruendo un campo magnetico con le caratteristiche qui descritte e preso un fascio di atomi neutri che si muove in esso, il fascio si dividerà in base alla proiezione sull'asse $\hat{\mathbf{z}}$ dello spin del sistema.

8.3.3 Interazione spin-orbita

Come abbiamo visto all'inizio del capitolo 8, l'hamiltoniana di interazione tra campi magnetici e momento di spin corrisponde a un'interazione tra il momento angolare orbitale del sistema col suo spin, $H_I = a\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$. Ci possono essere tuttavia diverse interazioni tra i momenti angolari di un sistema: ad esempio, nell'atomo di idrogeno, c'è l'interazione tra i momenti angolari orbitali dell'elettrone e del protone, o tra gli spin di entrambi (questa interazione è forte solo per brevissime distanze), o tra lo spin di uno e il momento angolare dell'altro. Insomma, ci sono diversi casi da poter considerare.

La cosa interessante è che, quando appaiono questi termini di interazione, l'hamiltoniana non commuta più con \mathbf{L} o con \mathbf{S} e quindi non sono più conservati i numeri quantici l, s . Tuttavia, se consideriamo il momento angolare totale $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, il suo quadrato è $\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, da cui possiamo ricavare $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)$. Posta così, l'hamiltoniana commuta con il momento angolare totale \mathbf{J} : dipendendo da termini quadratici, derivati da prodotti scalari, questi saranno invarianti sotto rotazioni e quindi $[H, \mathbf{J}] = 0$. In sintesi, quando entrano in gioco le interazioni tra i momenti angolari del sistema, vanno considerati come numeri quantistici quelli riferiti a \mathbf{J} e non dovuti ai singoli momenti angolari.

8.4 Somma di momenti angolari

Cosa succede quando abbiamo due diversi momenti angolari $\mathbf{J}', \mathbf{J}''$ (come ad esempio momento angolare orbitale e spin)? Abbiamo due descrizioni possibili del no-



stro sistema, che corrispondono a due diverse basi nello spazio di Hilbert su cui espandere gli stati del problema. Una è la base $\mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2, S_z$, che possiamo rappresentare come $\Psi_{l,s}^{l_z, s_z}$ o, in notazione di Dirac, $|l l_z\rangle |s s_z\rangle = |l l_z, s s_z\rangle$, mentre l'altra descrizione possibile è tramite \mathbf{J}^2, J_z , con $\mathbf{J} = \mathbf{J}' + \mathbf{J}''$. Ci aspettiamo che si possa in qualche modo passare da una rappresentazione all'altra e che siano entrambe valide.

Poiché vale $[J'_i, J''_j] = 0$, i due momenti angolari hanno autostati comuni, nonostante ognuno abbia i propri autovalori e le proprie proiezione sull'asse $\hat{\mathbf{z}}$. Possiamo scrivere le due rappresentazioni come:

$$\Psi_{l,s}^{l_z, s_z} \leftrightarrow \Psi_{l,s,j}^{j_z}$$

La domanda fondamentale è: **quali j sono ammessi?** La risposta è che j può assumere i seguenti valori:

$$j = j' + j'', j' + j'' - 1, \dots, |j' - j''|$$

Dimostreremo a breve questa regola. Per esempio, se una particella ha $l = 1, s = \frac{1}{2}$, avremo due possibili valori: $j = \frac{3}{2}, j = \frac{1}{2}$. La proiezione m , ovvero l'autovalore di J_3 , dipende ovviamente da j , in quanto assume valori $-j \leq m \leq j$. Queste regole valgono **per tutti i momenti angolari**, quanti ce sono e di che tipo non conta. Se consideriamo un sistema di due spin con $s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2}$ abbiamo 4 stati possibili:

$$\begin{aligned} \text{tripletto } j = 1 & \left\{ \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \right\} \left| \begin{array}{l} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1}^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \\ \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1}^0 \\ \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1}^{-1} \end{array} \right| \left| \begin{array}{l} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} + \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}) \\ \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \end{array} \right. \\ \text{singoletto } j = 0 & \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \right\} \left| \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0}^0 \right| \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} - \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}) \right. \end{aligned}$$

Il tripletto ha $j = 1$ ed è rappresentato da stati simmetrici, mentre il singoletto è antisimmetrico. Questo particolare sarà rilevante in seguito.

La relazione tra le diverse descrizioni è:

$$\Psi_{j', j'', j}^m = \sum_{m', m''} C_{j', j'', j}(j m, m' m'') \Psi_{j', j''}^{m', m''}$$

$C_{j', j''}(j m, m' m'')$ sono detti **coefficienti di Clebsh-Gordan** e si trovano tabulati un po' ovunque; questo sono diversi da zero se e solo se $m' + m'' = m$. L'altra caratteristica importante è che m', m'' sono *bloccati*: infatti ognuno ha la propria scala e, inoltre, la loro somma deve sempre essere uguale a m .

Possiamo usare gli stati del tripletto per vedere, al volo, come poter ricavare, senza tavole, i coefficienti di Clebsh-Gordan. Partendo dallo stato più alto del tripletto $\Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1}^1$, scendiamo con l'operatore di scala $J_- = J'_- + J''_-$:



$$J_- \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1}^1 = \hbar \sqrt{1(1+1) - 1 + 1} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1}^0 = \hbar \sqrt{2} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1}^0$$

Sfruttando invece l'altra descrizione:

$$J_- \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = J'_- \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + J''_- \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{4} + \frac{1}{2}} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + \hbar \sqrt{1} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}$$

Uguagliando le due descrizioni otteniamo lo stato con $m = 0$ del tripletto:

$$\Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}$$

Da questo possiamo direttamente ottenere lo stato di singoletto, sapendo che tutti questi stati sono ortogonali tra loro; poiché quindi $(\Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1}^0, \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0}^0) = 0$ si ottiene immediatamente lo stato di singoletto:

$$\Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}$$

Per l'ultimo stato del tripletto si sfrutta ancora una volta l'operatore di scala ottenendo il risultato richiesto. Tutto questo ovviamente è macchinoso e totalmente inutile in quanto qualcuno ha già tabulato i coefficienti di Clebsh-Gordan molto tempo fa e le tavole si trovano facilmente sul web. La riportiamo nelle appendici.

Non ci resta che dimostrare il range di valori che j può assumere. Iniziamo col considerare i range di m', m'' :

$$\left. \begin{array}{l} -j' \leq m' \leq j' \\ -j'' \leq m'' \leq j'' \end{array} \right\} m = m' + m''$$

Ponendo $m' = m - m''$, questo avrà un diverso range:

$$\max(-j', m - j'') \leq m' \leq \min(j', m + j'')$$

Nello stato massimo vale $m = j' + j''$ e avremo quindi:

$$\begin{array}{l} \max(-j', j' + j'' - j'') \leq m' \leq \min(j', j' + j'' + j'') \\ j' \leq m' \leq j' \end{array}$$

Otteniamo che $m' = j'$, che è vero per lo stato massimo. A questo punto decrementiamo $m = j' + j'' - 1$, cambierà anche il range di m' :

$$\begin{array}{l} \max(-j', j' + j'' - 1 - j'') \leq m' \leq \min(j', j' + j'' - 1 + j'') \\ j' - 1 \leq m' \leq j' \end{array}$$

Notiamo che i valori che m' può assumere adesso sono due: ogni volta che decrementiamo m , si allarga di uno il range di m' . Questo algoritmo continua fino a fermarsi, e ci sono due condizioni per far fermare la discesa:



$$\left. \begin{array}{l} m - j'' = -j' \\ m + j'' = j' \end{array} \right\} m = \left\{ \begin{array}{l} j' - j'' \\ j'' - j' \end{array} \right\} |j' - j''|$$

Abbiamo dimostrato ciò che volevamo dimostrare. Quindi, per ogni j ci sono $2j + 1$ stati in m : possiamo contare quanti stati totali ci sono (posto $j' \geq j''$):

$$\sum_{j=j'-j''}^{j'+j''} (2j + 1) = 2 \sum_{j=0}^{j'+j''} j - 2 \sum_{j=0}^{j'-j''} j + \sum_{j=j'-j''}^{j'+j''} 1 = (2j' + 1)(2j'' + 1)$$

C'è una perfetta simmetria in j', j'' per quanto riguarda il numero totale di stati ammessi.

Ultimo appunto: anche i coefficienti di Clebsh-Gordana soddisfano una propria regola di simmetria: vale infatti

$$C_{j' j''}(jm, m' m'') = (-1)^{j'+j''-j} C_{j'' j'}(jm, m'' m')$$

Sotto inversione degli indici mantengono o invertono il segno in base al valore di $j' + j'' - j$.

8.5 Tornando alla separazione di riga

Possono esserci termini di interazione nell'hamiltoniana di un sistema, del tipo $H_I = \alpha \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$; questa resta in ogni caso invariata sotto rotazioni generate da $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Consideriamo l'atomo di idrogeno e vediamo un esempio di come questo spieghi la duplicazione di riga introdotta a inizio capitolo.

Sia l'elettrone che il protone hanno spin $\frac{1}{2}$; abbiamo studiato che le soluzioni dell'atomo di idrogeno dipendono da n, l con n che indica il livello energetico e l che indica il grado della parte radiale della funzione d'onda, corrispondente a quello dell'armonica sferica associata. Per $n = 1$ sono ammessi stati solo con $l = 0$, ovvero esiste un solo stato fondamentale non degenere; quando però saliamo in $n = 2, 3, \dots$ avremo che $l \leq n - 1$ potrà assumere diversi valori: abbiamo più stati per ogni livello energetico e, quindi, una degenerazione energetica.

Introducendo il termine di interazione nell'hamiltoniana questa degenerazione scompare. Chiameremo i livelli energetici in maniera differente: quando $l = 0$, avremo che il livello è ns . Per esempio, $2s$ è il livello con $n = 2, l = 0$. Quando $l = 1$ avremo i livelli p , poi d, f e così via. Ricapitolando, per $n = 1$ ci sarà solo il livello $1s_{\frac{1}{2}}$ (il pedice indica il momento angolare totale $j = l + s$ del sistema considerato), mentre per $n = 2$:

$$n = 2 \qquad \qquad \qquad 2s_{\frac{1}{2}} \qquad 2p_{\frac{1}{2}} \qquad 2p_{\frac{3}{2}}$$

Se non consideriamo il termine di interazione, i livelli $2s, 2p_{\frac{1}{2}}, 2p_{\frac{3}{2}}$ sono tutti allo stesso livello energetico. Se però entra in gioco l'interazione, che esprimiamo come



$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)$, andando a sostituire i rispettivi autovalori ci sarà una differenza tra le energie dei livelli: per il livello $2p_{\frac{1}{2}}$:

$$E_I(2p_{\frac{1}{2}}) = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} = \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - 1(1+1)}{2} = -1$$

Mentre per il livello $2p_{\frac{3}{2}}$:

$$E_I(2p_{\frac{3}{2}}) = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} = \frac{\frac{3}{2}(\frac{3}{2}+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - 1(1+1)}{2} = \frac{1}{2}$$

L'energia associata al livello $2p_{\frac{1}{2}}$ è poco più bassa dell'energia che avrebbe senza il termine di interazione mentre, al contrario, quella del livello $2p_{\frac{3}{2}}$ è leggermente più alta: in sintesi si rompe la degenerazione energetica e ci sono due livelli di energia differenti dove prima si pensava ve ne fosse uno solo. Questo è visibile in spettroscopia con la comparsa di due righe molto vicine tra loro al posto dell'unica prevista.

8.6 Stati invarianti sotto rotazioni

Cerchiamo di costruire stati che siano invarianti sotto rotazioni. Considerate le due rappresentazioni già trattate

$$\Psi_{j',j'',j}^m = \sum_{m',m''} C_{j'j''}(jm, m'm'') \Psi_{j',j''}^{m',m''}$$

Per essere invarianti sotto rotazioni questi stati non devono cambiare quando viene loro applicata la trasformazione $e^{i\theta \cdot \mathbf{J}}$. Tuttavia studiare una condizione simile non è facile: se consideriamo una rotazione infinitesima $\mathbf{I} + i\theta \cdot \mathbf{J}$ è più facile trattare le cose: vediamo subito che la condizione fondamentale è che $\theta J_3 \Psi = 0$. Questa condizione è sempre soddisfatta per $j = 0$, che si verifica nel caso $j' = j''$ (l'ultimo valore disponibile nella scala è $j = |j' - j''| = 0$). Questo ci dice che tutti gli stati del tipo $\Psi_{j',j'',0}^0$ sono invarianti sotto rotazioni.

La condizione $j' = j''$ implica direttamente che, quando $j = 0$, sia $m'' = -m'$, quindi avremo:

$$\Psi_{j',j'',0}^0 = \sum_{m'} C_{j'j'}(00, m' - m') \Psi_{j',j'}^{m',-m'}$$

Poiché $j = m = 0$ stati simili potrebbero rappresentare *particelle scalari*; queste rappresentazioni ci dicono anche che potremmo rappresentare una particella di spin 1 come se fosse un sistema di due particelle, entrambi con spin $\frac{1}{2}$, con uno stato totale **simmetrico**. Al contrario, per avere lo spin 0, possiamo sempre usare due particelle a spin $\frac{1}{2}$ il cui stato risultante è, però, antisimmetrico.

Andiamo ora alla ricerca di una condizione sui coefficienti di Clebsh-Gordan per stati invarianti sotto rotazioni. Applicando l'operatore J_+ allo stato $\Psi_{j',j'',0}^0$ avremo sicuramente un risultato nullo; la stessa cosa dovrà allora succedere nell'altra rappresentazione:



$$\begin{aligned}
 0 &= \sum_{m'} C_{j',j'} (J'_+ + J''_+) \Psi_{j',j'}^{m',-m'} \\
 0 &= \sum_{m'} \left(C_{j',m'} \sqrt{j'(j'+1) - m'^2 - m'} \Psi_{j',j'}^{m'+1,-m'} \right) + \sum_{m'} \left(C_{j',m'} \sqrt{j'(j'+1) - m'^2 - m'} \Psi_{j',j'}^{m',-m'+1} \right)
 \end{aligned}$$

La prima sommatoria scorre nell'intervallo $-j' \leq m' \leq j' - 1$, mentre la seconda su $-j' + 1 \leq m' \leq j'$ per effetto degli operatori di scala. Posto $m' = \tilde{m}' + 1$, la seconda sommatoria scorrerà su $-j' \leq \tilde{m}' \leq j' - 1$ e possiamo quindi unire tutta l'espressione sotto un'unica sommatoria; il termine numerico che compariva nella seconda sommatoria cambia e diventa:

$$\sqrt{j'(j'+1) - m'^2 - m'} \xrightarrow{m' = \tilde{m}' + 1} \sqrt{j'(j'+1) - \tilde{m}'^2 - 2\tilde{m}' - 1 + \tilde{m}' + 1} = \sqrt{j'(j'+1) - \tilde{m}'^2 - \tilde{m}'}$$

Esattamente uguale al primo, quindi otteniamo l'espressione:

$$0 = \sum_{m'} (C_{j',m'} + C_{j',m'+1}) \sqrt{j'(j'+1) - m'^2 - m'} \Psi_{j',j'}^{m'+1,-m'}$$

In generale, il termine sotto radice non è nullo, deve quindi essere nullo quello tra le parentesi. Otteniamo quindi un risultato importante:

$$C_{j',m'} = -C_{j',m'+1}$$

O, per dirla in altre parole, $C_{j',m'} = (-1)^{j'-m'} N_{j'}$ con $N_{j'}$ numero generico, che possiamo ricavare sfruttando la relazione di ortogonalità:

$$\begin{aligned}
 \sum_{m'} C_{j',m'} C_{j'',m'} &= \delta_{j',j''} \\
 \sum_{m'} \left[(-1)^{j'-m'} \right]^2 N_{j'}^2 &= 1 \\
 \sum_{m'} N_{j'}^2 &= 1 \quad \rightarrow \quad N_{j'}^2 (2j'+1) = 1 \\
 N_{j'} &= \sqrt{\frac{1}{2j'+1}}
 \end{aligned}$$

Infine, possiamo allora scrivere i coefficienti di Clebsh-Gordan per gli stati in cui $j' = j''$ e $j = m = 0$:

$$C_{j',j'}(00, m' - m') = \frac{(-1)^{j'-m'}}{\sqrt{2j'+1}}$$

8.6.1 Applicazioni alle armoniche sferiche

Vogliamo applicare questo risultato alle armoniche sferiche; ricordiamo che le rappresentazioni $\Psi_{j',j'',j}^m$, $\Psi_{j',j'',j}^{m',m''}$ si riferiscono a stati in generale ma in questi rientrano anche le armoniche sferiche. Quindi, quando $l' = l''$ e $m'' = -m'$ avremo:



$$\sum_m (-1)^{l-m} Y_l^m Y_l^{-m} \rightarrow \sum_{m=-l}^l (-1)^{l-m} Y_l^m(\hat{\mathbf{a}}) Y_l^{-m}(\hat{\mathbf{b}}) = F_l(\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}})$$

Dove $\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}$ sono due angoli generici di cui sono funzioni le armoniche sferiche. Senza perdere di generalità possiamo porre $\hat{\mathbf{b}} = \hat{\mathbf{z}} = (0, 0, 1)$ e $\hat{\mathbf{a}} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$. Ricordiamo che vale sempre la regola $Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$. Nel nostro caso allora varrà:

$$F_l(\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}}) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta) P_l(\cos 0)$$

Questo perché per $\hat{\mathbf{z}}$ vale $\theta = 0$; invertendo:

$$P_l(\hat{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{b}}) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_m (-1)^{l-m} Y_l^m(\hat{\mathbf{b}}) Y_l^{-m}(\hat{\mathbf{a}})$$

Questo è anche noto come teorema di addizione delle armoniche sferiche. Questi risultati sono largamente utilizzati in cosmologia per spiegare le *anisotropie* della radiazione cosmica di fondo. All'inizio si pensava che osservandola in tutte le direzioni restasse sempre alla stessa temperatura, ma questo non è vero e sono presenti delle differenze di temperatura a seconda della direzione. Si studia allora la discrepanza $\Delta T(\hat{\mathbf{n}}) = T(\hat{\mathbf{n}}) - T_0$ dalla temperatura media, definita come:

$$T_0 = \frac{1}{4\pi} \int d^2\hat{\mathbf{n}} T(\hat{\mathbf{n}}) = \langle T(\hat{\mathbf{n}}) \rangle$$

Possiamo espandere la discrepanza sulla base delle armoniche sferiche $\Delta T = \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m$; questo ha un problema: le discrepanze devono essere numeri reali, ma le armoniche sferiche contengono inevitabilmente termini complessi. Deve allora essere $\Delta T = (\Delta T)^*$, da cui ricaviamo che $a_{l,m}^* = a_{l,-m}$.

In questi ragionamenti la media delle temperature viene considerata da dati presi da osservatori a grandi distanze tra loro, distanze molto più grandi di quelle che si potrebbero ottenere sulla Terra o nello stesso sistema solare. Si pone allora che la media sulla discrepanza sia nulla, ovvero:

$$\langle \Delta T(\hat{\mathbf{n}}) \rangle = \langle T(\hat{\mathbf{n}}) - \langle T(\hat{\mathbf{n}}) \rangle \rangle = \langle T(\hat{\mathbf{n}}) \rangle - \langle T(\hat{\mathbf{n}}) \rangle = 0$$

Si studia solitamente anche la *correlazione*:

$$\langle \Delta T(\hat{\mathbf{n}}) \Delta T(\hat{\mathbf{n}}') \rangle = \sum_l C_l Y_l^m(\hat{\mathbf{n}}) Y_l^{-m}(\hat{\mathbf{n}}') = \sum_l C_l \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{n}}')$$

Dove i coefficienti C_l sono detti *coefficienti di multipolo*.



Capitolo 9

Spinori, particelle identiche, simmetrie interne

9.1 Spinori

Nota: c'è continuità implicita tra questo capitolo e il precedente; si è scelto di dividerlo in due per evitare di avere una trattazione eccessivamente lunga senza distinzioni, ma deve essere chiaro che il discorso è unico.

Consideriamo solo stati a spin $\frac{1}{2}$; come abbiamo visto, questi stati sono particolari: su di loro agisce il gruppo $SU(2)$ formato dalla matrici di Pauli. Chiameremo **spinore** la funzione d'onda del solo spin:

$$(\Psi_{\frac{1}{2}}^m, \Psi) = \psi^m$$

Sempre ricordando la possibilità di espandere su una base completa, in questo caso quella degli stati a spin semi intero, qualsiasi stato. Consideriamo una trasformazione dello stato:

$$\Psi \rightarrow \Psi' = \mathcal{U}\Psi = \sum_m \mathcal{U}\Psi^m (\Psi^m, \Psi)$$

Con \mathcal{U} operatore unitario nello spazio di Hilbert. Il rispettivo spinore si trasforma come segue:

$$\psi'^m = (\Psi^{m'}, \Psi') = \sum_m (\Psi^{m'}, \mathcal{U}\Psi^m) (\Psi^m, \Psi)$$

Possiamo scriverlo semplicemente come un **prodotto riga per colonna** $(\psi')^{m'} = \sum_m \mathcal{U}_{m'm} \psi^m$. L'operatore unitario in questo caso vogliamo che agisca come operatore di rotazione, quindi possiamo esprimerlo in funzione delle matrici di Pauli:



$$\mathcal{U} = \mathbb{I} + \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{J}$$

$$\left(\Psi^{m'}, \left(\mathbb{I} + \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{J} \right) \Psi^m \right) = \delta_{mm'} + \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\omega} \cdot (\Psi^{m'}, \mathbf{J} \Psi^m) = \delta_{mm'} + \frac{i}{2} \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

Che la realizzazione di una rotazione per uno spinore dipendesse dalle matrici di Pauli, tuttavia, già lo sapevamo dallo scorso capitolo. Potremo compiere una trasformazione finita semplicemente operando $\psi' = e^{\frac{i}{2} \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma}} \psi$, in termini matriciali:

$$(\psi')^m = \sum_{m'} \mathcal{U}_{m'm} \psi^{m'}$$

L'esponenziale di matrici, tuttavia, può risultare abbastanza fastidioso, per di più con operatori non lineari o che non commutano. Il caso delle matrici di Pauli tuttavia è particolarmente comodo: conosciamo già il commutatore $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k$; a questo associamo **l'anticommutatore**:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij}$$

Mettendoli in relazione:

$$2\sigma_i \sigma_j = [\sigma_i, \sigma_j] + \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} + 2i\epsilon_{ijk} \sigma_k$$

In breve $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} \sigma_k$. Espandendo in serie l'esponenziale ci torna comodo:

$$e^{\frac{i}{2} \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma}} \approx \mathbb{I} + \frac{i}{2} \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{i}{2} \frac{(\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2}{2!}$$

Posto $\boldsymbol{\omega} = \theta \hat{\mathbf{n}}$, il termine quadratico possiamo esprimerlo in funzione del vettore angolare $(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = n_i n_j \sigma_i \sigma_j$; andando a sostituire la relazione ricavata da commutatore e anticommutatore:

$$n_i n_j (\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} \sigma_k) = n_i n_j \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} n_i n_j \sigma_k = (\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{n}}) + i(\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{n}}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = 1$$

Quindi estendendo l'esponenziale otteniamo la relazione:

$$e^{\frac{i}{2} \theta (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma})} = \mathbb{I} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + i(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

Questa trasformazione è molto particolare: **se compiamo una rotazione di 2π attorno l'asse $\hat{\mathbf{z}}$ non torniamo al punto di prima!** Lo spinore cambia segno. Magia.

Un'altra importante caratteristica delle matrici di Pauli è la relazione che le vede legate al tensore di Levi-Civita di rango 2:

$$i\sigma_2 = i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \epsilon_{ij}$$



Applicando questo a uno spinore qualsiasi:

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \psi^2 \\ -\psi^1 \end{vmatrix}$$

Si definisce allora **spinore covariante**, e ha gli indici bassi rispetto alla sua versione *controvariante* (che ha gli indici alti):

$$\begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \psi^2 \\ -\psi^1 \end{vmatrix}$$

Questa non è una differenza sottile o di poco conto: considerati due spinori, uno controvariante ψ e uno covariante ϕ , il loro prodotto scalare è nullo:

$$\psi^\lambda \phi_\lambda = \psi^1 \phi_1 + \psi^2 \phi_2 = (-\psi_2)(\phi^2) + (\psi_1)(-\phi^1) = -\psi_\lambda \phi^\lambda$$

A questo punto vediamo come si trasformano gli spinori covarianti. Avremo ovviamente $\psi \rightarrow \mathcal{U}\psi$, ma se moltiplichiamo entrambi i membri per il tensore di Levi-Civita (osserviamo al secondo passaggio che $\sigma_2 \sigma_2 = \mathbb{I}$):

$$\begin{aligned} (i\sigma_2)\psi &\rightarrow i\sigma_2 e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \psi \\ &\rightarrow i\sigma_2 e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \sigma_2 \sigma_2 \psi \\ &\rightarrow \sigma_2 e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \sigma_2 (i\sigma_2)\psi \end{aligned}$$

Per le matrici di Pauli vale un'importante proprietà: $\sigma_2 \boldsymbol{\sigma} \sigma_2 = -\boldsymbol{\sigma}^T$, da cui $\sigma_2 \mathcal{U} \sigma_2 = \mathcal{U}^*$, quindi i **covarianti si trasformano con l'operatore \mathcal{U}^*** , mentre i controvarianti con l'operatore \mathcal{U} :

$$\begin{aligned} \psi^i &\rightarrow \mathcal{U}\psi^i \\ \psi_i &\rightarrow \mathcal{U}^*\psi_i \end{aligned}$$

Concludiamo con la parte più importante del discorso. Abbiamo visto che moltiplicare uno spinore per il tensore di Levi-Civita ci fa abbassare l'indice; se lo utilizziamo allora in maniera furba possiamo ottenere cose interessanti:

$$\epsilon_{m''m'} \psi^{m' m''} = \psi_{m''}^{m'}$$

Il risultato finale ha gli indici *muti* (indici ripetuti si sommano): abbiamo ottenuto **uno spinore scalare**. Se consideriamo uno spinore con $2j$ indici *simmetrici*, se lo moltiplichiamo per il tensore di Levi-Civita otterremo ovviamente **zero** (ϵ_{ij} è un tensore antisimmetrico). D'altro canto, uno spinore antisimmetrico può essere invece *degradato* sfruttando l'epsilon.

Sfruttando tutte queste nozioni, possiamo riscrivere in maniera più semplice e compatta la somma di momenti angolari utilizzando solo gli spinori:

$$\Psi_{j',j''}^{m',m''} \rightarrow \psi^{m_1, \dots, m_{2j'}; n_1, \dots, n_{2j''}}$$



Lo spinore a destra è di rango $2j' + 2j''$; moltiplicandolo per ϵ_{ij} il suo rango scenderà di 2:

$$\epsilon_{\bar{m},\bar{n}}\psi^{m_1,\dots,m_{2j'};n_1,\dots,n_{2j''}} = \psi_{\bar{m}}^{m_1,\dots,\bar{m},\dots,m_{2j'};n_1,\dots,\bar{n}-1,\bar{n}+1,\dots,n_{2j''}}$$

9.2 Ottenere uno stato richiesto

In questa sezione e nella prossima tratteremo e chiuderemo il discorso sulle particelle identiche, che in meccanica quantistica, oltre a essere leggermente complicato a un primo approccio, è la chiave per la soluzione di problemi e lo scrivere funzioni d'onda e stati associati a più particelle.

Vogliamo costruire uno stato con spin \mathcal{S} definito a partire da un generico spinore $\psi^{m_1,\dots,m_{2j'};n_1,\dots,n_{2j''}}$. Ovviamente sarà $\mathcal{S} \leq j' + j''$, ma la domanda chiave da porci adesso è: **cosa succede se scambiamo le due particelle?**

Questa domanda così innocente, che in meccanica classica susciterebbe reazioni del tipo *Ma che domande sono?!*, in meccanica quantistica ha intriso tutto il significato del mondo microscopico. Per quanto abbiamo detto a inizio corso, non si può seguire la traiettoria di una qualsiasi particella, di conseguenza, quando se ne hanno due o più identiche, non si possono etichettare e distinguere. Vogliamo quindi una regola che ci faccia passare da uno stato Φ_{x_1,x_2,m_1,m_2} (che descrive posizione e massa delle due particelle) a uno stato Φ_{x_2,x_1,m_2,m_1} in cui abbiamo invertito le particelle. Ovviamente, avremo una cosa del genere:

$$\Phi_{x_1,x_2,m_1,m_2} \rightarrow c\Phi_{x_2,x_1,m_2,m_1} \rightarrow c^2\Phi_{x_1,x_2,m_1,m_2}$$

Semplicemente sarà $c = \pm 1$. Quindi, sotto scambio di particelle, si presenta una fase sullo stato (e quindi sulla funzione d'onda) che può essere ± 1 . Si distinguono due classi di particelle in base al valore che assume questa fase:

- se $c = 1$ avremo a che fare con dei **bosoni**;
- se $c = -1$ avremo a che fare con dei **fermioni**.

Alle due classi di particelle corrispondono due diverse statistiche, nel caso di sistemi ad alti numeri di particelle, che vedremo attentamente dopo. Ora, messa così la cosa sarebbe un disastro: esistono due classi, ognuna con la propria fase e le proprie regole, ma non sappiamo distinguerle. Grazie al teorema di Pauli-Fierz di meccanica quantistica relativistica la fase ha a che fare con lo spin delle particelle: **i bosoni hanno spin intero, i fermioni spin semi intero**. Così è la natura e, ancora una volta, ringraziamo che sia tutto così semplice. Tra i bosoni ci sono i fotoni, le particelle W^\pm, Z , il famoso bosone di Higgs, ma anche i gluoni e i pioni; tra i fermioni ci sono gli elettroni, i nucleoni (protoni e neutroni), i barioni.

La questione dello scambio di particelle è anche inerente alla geometria del problema: nel caso di un gas di particelle unidimensionale (è assurdo, sì, ma immaginate tanti elettroni in fila uno dietro l'altro, l'immaginazione è molto potente) *non c'è alcun modo di scambiare tra loro due fermioni*; per un gas bidimensionale lo scambio può avvenire rispettando determinati vincoli: questi stessi vincoli fanno



sì che esistano altre particelle oltre ai bosoni e ai fermioni, chiamate **anyoni**, che possono assumere una fase qualsiasi $e^{i\phi}$; esisteranno di conseguenza altre statistiche che descrivono il comportamento di queste particelle. La fase, tutta, non cambia l'identità magnetica dello spin delle particelle. Inutile a dirlo, in caso di gas tridimensionali, lo scambio si può fare.

Ora, per avere uno stato con spin \mathcal{S} desiderato dobbiamo partire dallo spinore di rango $2j' + 2j''$ e decrementarlo con il tensore di Levi-Civita. Il risultante avrà un rango $2j' + 2j'' - 2x$ (dove x indica il numero di tensori ϵ_{ij} a moltiplicare lo spinore) che dovrà quindi essere uguale a $2\mathcal{S}$. Il caso interessante è quando le particelle hanno spin uguale, $j' = j'' = s$, allora avremo che $2s + 2s - 2x = 2\mathcal{S}$, da cui ricaviamo il numero di tensori di Levi-Civita che dobbiamo far agire sullo spinore per avere uno stato a spin richiesto: $x = 2s - \mathcal{S}$.

Sulla base di tutto questo ragionamento, alla fine del procedimento dovremo avere una fase ± 1 a moltiplicare lo stato finale. Ricordando che $\epsilon_{\lambda\mu}\psi^{\lambda\mu} = \psi_{\lambda}^{\lambda}$, la stessa cosa avverrà nel caso di più indici. Quando andremo a scambiare le due particelle, ovvero a invertire l'ordine degli indici, uscirà fuori un segno negativo. Quindi, ad ogni azione di ϵ compare un cambio di segno e, alla fine del processo, sarà $(-1)^{2s-\mathcal{S}}$.

Tuttavia, la funzione dello spin non è tutta la storia del sistema: ci saranno anche i termini orbitali funzioni della posizione, ovvero $\psi_{\text{tot}} = \psi_{\text{spin}} \cdot \psi_{\text{orb}}$. Cosa significa per la parte orbitale scambiare due particelle? Questo si traduce con l'eseguire un'operazione di parità (ovvero inversione degli assi). In totale, dopo tutto il procedimento di inversione, la funzione d'onda finale $\psi_{\text{spin}} \cdot \psi_{\text{orb}}$ dovrà avere una fase ± 1 davanti. **Questo è assimilabile a un postulato della meccanica quantistica**, non ci sono contestazioni o patteggiamenti.

Consideriamo due fermioni il cui stato è descrivibile come Φ_{ξ_1, ξ_2} dove $\xi_i = \{\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_i, m_i, \dots\}$ può essere una qualsiasi variabile associata alla particella; la funzione d'onda che realizza lo stato sarà:

$$\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1)$$

Osserviamo essere **antisimmetrica**: i bosoni sono descritti da stati e funzioni d'onda simmetrici, mentre i fermioni sono descritti da stati e funzioni d'onda antisimmetrici. Questo passaggio può essere effettuato sfruttando l'**approssimazione di Hartree** che vedremo meglio nella prossima sezione: si fattorizza la funzione d'onda in base alle variabili di ognuna delle particelle. La conseguenza immediata è che **se due fermioni hanno gli stessi numeri quantici la funzione d'onda è nulla**: questa è una diversa formulazione del **principio di esclusione di Pauli**, che possiamo enunciare come segue: *per due elettroni (o fermioni in generale) non è possibile avere gli stessi numeri quantici nello stesso sistema fisico*. La soluzione quindi deve essere che, per ogni stato, ci possono essere al massimo due fermioni, ognuno con proiezione s_m opposta tra loro.

9.3 Particelle identiche

Consideriamo uno stato che descrive più particelle Φ_{ξ_1, ξ_2} come già visto nella scorsa sezione; se le due particelle sono identiche, possiamo considerare un operatore



unitario che opera lo scambio tra le particelle:

$$\mathcal{U}\Phi_{\xi_1, \xi_2} = c\Phi_{\xi_2, \xi_1} \rightarrow \mathcal{U}(c\Phi_{\xi_2, \xi_1}) = c^2\Phi_{\xi_1, \xi_2}$$

Come abbiamo già visto, $c = \pm 1$ a seconda se sono bosoni o fermioni. Se passare alla funzione d'onda delle particelle basterà fare un prodotto scalare $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots) = (\Phi_{\xi_1, \xi_2, \dots}, \Psi)$; per il caso di due particelle avremo semplicemente due variabili ξ_1, ξ_2 da considerare. Tuttavia, lo stato Φ_{ξ_1, ξ_2} non è autostato dell'operatore che esegue lo scambio. Quindi ci troveremo a dover simmetrizzare o antisimmetrizzare lo stato, e di conseguenza la funzione d'onda, nel caso di bosoni o fermioni:

$$(\Phi_{\xi_1, \xi_2} \pm \Phi_{\xi_2, \xi_1}, \Psi) = \psi(\xi_1, \xi_2) \pm \psi(\xi_2, \xi_1)$$

Per due particelle la questione è risolta, ma nel caso in cui ci siano molte particelle le cose si complicano. In questi casi si utilizza **l'approssimazione di Hartree**: si introducono delle funzioni d'onda che risolvono la funzione di Schrödinger:

$$\sum_{\xi'} H_{\xi\xi'} \psi_a(\xi') = E_a \psi_a(\xi')$$

La somma si effettua nel caso in cui ξ' sia una variabile discreta (come ad esempio lo spin), mentre per variabili continue (come posizione e impulso) questa diventa un integrale. Con questa approssimazione la funzione d'onda ottenuta è *fattorizzata* per variabili:

$$(\Phi_{\xi_1, \xi_2, \dots}, \Psi) = \psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2)\psi_3(\xi_3)\dots$$

Dove i pedici alle funzioni d'onda si riferiscono ai livelli di energia ottenuti dalla soluzione dell'equazione di Schrödinger. Questa approssimazione ci fornisce quindi una funzione d'onda molto simile a quella che descriverebbe un gas quantistico, formato da tante particelle identiche *non* interagenti fra loro. Proprio per questo motivo ci sono dei limiti al suo utilizzo: nel caso dell'elio liquido, un sistema molto interagente, non può essere usata. Secondo ciò che abbiamo detto, quindi, per due particelle identiche la funzione d'onda sarà:

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) \pm \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1)$$

Possiamo ad esempio chiederci la probabilità che ξ_1 si trovi in una regione R_1 e ξ_2 in una regione R_2 , questa sarà:

$$p = \int_{R_1} d\xi_1 \int_{R_2} d\xi_2 |(\Phi_{\xi_1, \xi_2}, \Psi)|^2$$

Ovviamente lo stato è simmetrico o antisimmetrico a seconda del caso in cui abbiamo bosoni o fermioni; il prodotto scalare possiamo espanderlo come $|(\Phi_{\xi_1, \xi_2}, \Psi)|^2 + |(\Phi_{\xi_2, \xi_1}, \Psi)|^2 + (\Phi_{\xi_1, \xi_2}, \Psi)(\Phi_{\xi_2, \xi_1}, \Psi)^*$; l'ultimo termine è presente solo se l'intersezione tra le due regioni R_1, R_2 non è nulla, altrimenti la probabilità richiesta sarà data da:



$$p = 2 \int_{R_1} d\xi_1 \int_{R_2} d\xi_2 |(\Phi_{\xi_1, \xi_2}, \Psi)|^2$$

Quest'ultima espressione è molto utilizzata in fisica particellare quando si tratta il decadimento di particelle identiche.

Esempio (9.1)

La particella ρ^0 è una particella vettoriale neutra di spin 1 (è quindi un bosone), non è stabile e decade in due pioni π secondo la relazione

$$\pi^- \leftarrow \rho^0 \rightarrow \pi^+$$

Nel decadimento vengono conservate la carica e il momento totale del sistema. I due pioni possono essere quindi anche due π^0 neutri che mantengono la carica totale conservata. Tutti i pioni hanno spin **nulla**; il decadimento di particelle deve essere descritto da una qualche dinamica che sarà presente come termine nell'hamiltoniana del sistema. Sappiamo che H resta invariata dopo una rotazione e che il momento angolare totale del sistema deve quindi conservarsi. Il momento totale della particella iniziale sarà $\mathbf{J}(\rho^0) = (\mathbf{L} + \mathbf{S})(\rho^0) = 0 + 1 = 1$ (in unità di \hbar) dove abbiamo supposto che la particella sia ferma. Le due particelle figlie del processo, π^\pm hanno entrambe spin 0 ma sono in movimento, si suppone quindi che entrambe abbiano un momento angolare orbitale tale la funzione d'onda totale $\psi_{\pi^+\pi^-}$ abbia $l = 1$; la simmetria della funzione d'onda orbitale sotto parità è $(-1)^l$, di conseguenza sarà -1 sotto scambio di particelle.

A tal proposito, il decadimento in due π^0 fornisce una funzione d'onda $\psi_{\pi^0\pi^0}$ simmetrica sotto scambio di particelle, ma nel caso di bosoni non ha senso che si ottenga un fattore -1 dopo lo scambio: infatti in natura non si verifica il decadimento di ρ^0 in due π^0 .

Nel caso di N fermioni, per utilizzare l'approssimazione di Hartree si ricorre al *determinante di Slater*: la funzione d'onda sarà data da:

$$\det \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \cdots \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \cdots \\ \cdots & \cdots & \psi_n(\xi_n) \end{vmatrix}$$

Se al livello E_a sono presenti due fermioni con gli stessi numeri quantici, il determinante di Slater è nullo, concordemente col principio di Pauli. Il principio di Pauli ci fornisce anche la *molteplicità* di elettroni presenti un livello atomico: per ogni l ci sono $2l + 1$ valori di m , e ci possono essere solo due elettroni che hanno i tre numeri quantici n, l, m uguali: di conseguenza, per ogni livello, il numero di elettroni presenti sarà $2(2l + 1)$. Infatti, se $l = 2$ ci saranno 6 elettroni, cosa vera che si verifica nel livello $2p_{\frac{3}{2}}$.

Nel caso di bosoni, invece, tutti i segni negativi nel determinante di Slater diventano positivi; non c'è limite, per i bosoni, di occupazione di un livello energetico: in meccanica statistica quantistica si verifica infatti la **condensazione di Bose** ovvero, nel limite $T \rightarrow 0$, per determinati sistemi la cui hamiltoniana rispetta determinate proprietà si verifica che si *condensano* un numero macroscopico di bosoni nel livello fondamentale.



9.4 Distribuzioni di Fermi-Dirac e Bose-Einstein

Consideriamo un gas di particelle identiche, vogliamo calcolare la probabilità di avere N particelle nel livello di energia E ; l'energia totale del sistema sarà $E = \sum_n E_n N_n = E_1 N_1 + E_2 N_2 + \dots$, dalla meccanica statistica la probabilità sarà:

$$p(\{N_1, N_2, \dots\}) = \exp\left(-\frac{E}{k_B T} + \frac{\mu N}{k_B T}\right) = \exp\left(\sum_n -\frac{(E - \mu)N_n}{k_B T}\right) = \prod_n \exp\left(-N_n \frac{E_n - \mu}{k_B T}\right)$$

Dove μ è il potenziale chimico del sistema. Il numero di particelle medio per livello energetico è la media termodinamica:

$$\bar{N}_n = \langle N_n \rangle = \frac{\sum_n N_n \exp\left(N_n \frac{E_n - \mu}{k_B T}\right)}{\sum_n \exp\left(N_n \frac{E_n - \mu}{k_B T}\right)}$$

Per i fermioni la somma sarà solo su $n = 0, 1$ per via del principio di Pauli, che limita il numero di fermioni con gli stessi numeri quantici in un livello a 1; per i bosoni sarà invece fino al numero totale di particelle, che possiamo prendere così grande da considerare infinito, in questo caso:

$$\frac{\sum_{n=0}^{\infty} N_n \exp\left(N_n \frac{E_n - \mu}{k_B T}\right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(N_n \frac{E_n - \mu}{k_B T}\right)} = -\frac{\partial}{\partial \delta} \left(\ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\delta N_n} \right) = \frac{\partial}{\partial \delta} \ln(e^{-\delta} - 1) = -\frac{e^{-\delta}}{e^{-\delta} - 1} = -\frac{1}{e^{-\delta} - 1}$$

Otteniamo quindi le due famose distribuzioni, quella di **Fermi-Dirac** per i fermioni e quella di **Bose-Einstein** per i bosoni:

$$\bar{N}_n = \begin{cases} \frac{1}{e^{\beta(E_n - \mu)} - 1} & \text{Bosoni} \\ \frac{1}{e^{\beta(E_n - \mu)} + 1} & \text{Fermioni} \end{cases}$$

Queste distribuzioni spiegano anche lo spettro del corpo nero, in particolare la formula di Plack: il termine da lui aggiunto corrisponde alla *distribuzione di Bose-Einstein* per i fotoni (che sono per l'appunto bosoni) che hanno energia $E = h\nu$ e potenziale chimico nullo $\mu = 0$.

9.5 Isospin

Il neutrone è stato scoperto solo nel 1932, ultima tra le particelle elementari che appaiono in un atomo. La massa del neutrone, si vide subito, è *quasi* uguale a quella del protone, la differenza è davvero piccola; si pensò quindi alla possibilità che esistesse una trasformazione generica che permettesse di trasformare un neutrone in un protone e viceversa. Una trasformazione simile, che possiamo



considerare una *simmetria*, non può essere una simmetria della carica elettrica, essendo il neutrone neutro e il protone carico, e neanche quindi dell'interazione elettromagnetica, per lo stesso motivo. Tuttavia può essere una **simmetria legata all'interazione forte**: per esserlo, l'interazione forte protone-protone, neutrone-neutrone e protone-neutrone deve essere uguale e si vide che è molto simile. Anche, l'energia dello stato fondamentale del trizio H^3 è così vicina a quella dell'elio He^3 che gli permette di decadere proprio nell'isotopo He^3 .

Deve esistere quindi una trasformazione del tipo:

$$\begin{pmatrix} p \\ n \end{pmatrix} \rightarrow u \begin{pmatrix} p \\ n \end{pmatrix}$$

Dove u è una matrice 2x2 che **non agisce sulle coordinate spaziali** del doppietto neutrone-protone, a cui associamo un operatore unitario nello spazio di Hilbert $\mathcal{U}(u)$ che possiamo scrivere come:

$$\mathcal{U} = \mathbb{I} + \epsilon_i T_i$$

Dove ϵ_i è un numero molto piccolo e T_i è il generatore della simmetria, per il quale valgono le regole di commutazione già note per gli altri generatori di rotazioni, ovvero $[T_i, T_j] = i\epsilon_{ijk} T_k$, senza la costante \hbar , in quanto non è un momento angolare. Si possono anche in questo caso definire gli operatori $T_{\pm} = T_1 \pm iT_2$, che agiscono sullo stato generico come (il pedice indica la particella: p per il protone, n per il neutrone):

$$\begin{aligned} T_+ \Psi_p &= 0 & T_- \Psi_p &= \Psi_n & T_3 \Psi_p &= \frac{1}{2} \Psi_p \\ T_+ \Psi_n &= \Psi_p & T_- \Psi_n &= 0 & T_3 \Psi_n &= -\frac{1}{2} \Psi_n \end{aligned}$$

Si chiama **T isospin** e, come abbiamo visto, permette di trasformare un neutrone in un protone e viceversa; il protone ha proiezione di isospin $\frac{1}{2}$, il neutrone $-\frac{1}{2}$. Possiamo osservare anche che ogni nucleone (protone o neutrone) ha una carica elettrica pari a $q = (\frac{1}{2} + T_3) e$. Nel decadimento di particelle **anche l'isospin viene conservato**: a ogni particella elementare studiata in fisica delle particelle è associato un proprio isospin. Ci sono altre caratteristiche delle particelle, come la stranezza, che però non tratteremo in questo corso.

Esempio (9.2)

Quelle poche cose che abbiamo detto possiamo capirle meglio con un esempio. La particella Δ^{++} è un barione di spin $\frac{3}{2}$; è altamente instabile con doppia carica positiva e fa parte di un decupletto di particelle. Quando decade viene conservata la carica, viene conservato il momento angolare e, sembrerebbe, **anche l'isospin**. L'isospin di Δ^{++} è $T = \frac{3}{2}$ con proiezione $T_3 = \frac{3}{2}$; le altre particelle della famiglia sono Δ^+ , Δ^0 , Δ^- e hanno tutte lo stesso isospin, ma con proiezione diversa per ognuna, rispettivamente $\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$, $-\frac{3}{2}$.

Δ^{++} decade in un pione positivo π^+ e un protone p (cioè $\Delta^{++} \rightarrow \pi^+ + p$). Il pione positivo ha spin 0 e isospin 1, mentre il protone ha sia spin che isospin $\frac{1}{2}$: da una semplice occhiata, quindi, risulta conservato l'isospin, mentre deve



evidentemente esserci un termine $l = 1$ da qualche parte per la conservazione del momento angolare.

Con le stesse regole la particella Δ^+ può decadere o in un pione positivo e un neutrone ($\Delta^+ \rightarrow \pi^+ + n$) o in un pione neutro e un protone ($\Delta^+ \rightarrow \pi^0 + p$). Questa volta le cose sono diverse però: il neutrone sappiamo avere $T_3 = -\frac{1}{2}$, mentre $T_3\pi^0 = 0$. Osservando al volo, sono rispettate le conservazioni di carica, momento angolare e isospin.

Si possono sfruttare i coefficienti di Clebsh-Gordan, dove al posto di j', j'' e di m', m'' , quindi anche al posto di j, m , si mettono i termini di isospin, per stabilire il rapporto tra le ampiezze dei diversi decadimenti; è indubbio che questi processi siano governati da qualche dinamica, esprimibile per mezzo di un fattore M_0 ; questo fattore tuttavia è molto difficile da stabilire, però si osserva che è lo stesso per i decadimenti della stessa particella, moltiplicato per il relativo coefficiente di Clebsh-Gordan di volta in volta. Quindi la stima tra le ampiezze delle due transizioni sarà:

$$\frac{\Gamma(\Delta^+ \rightarrow \pi^+ + n)}{\Gamma(\Delta^+ \rightarrow \pi^0 + p)} \propto \frac{M_0 C_{1, \frac{1}{2}}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1 - \frac{1}{2})}{M_0 C_{1, \frac{1}{2}}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \frac{1}{2})} \approx \frac{\frac{2}{3}}{\frac{1}{3}}$$

Con lo stesso ragionamento si vede che la probabilità che $\Delta^{++} \rightarrow \pi^+ + p$, di cui abbiamo parlato prima, è 1 (dalla tavola dei coefficienti), per cui non ci sono altri modi con cui Δ^{++} può decadere. Sperimentalmente i risultati concordano con queste previsioni.

9.6 Simmetrie interne

Riprendiamo l'oscillatore armonico tridimensionale, per il quale abbiamo potuto scrivere l'hamiltoniana come $H = \hbar\omega \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right)$. Formalmente $a_i^\dagger a_i$ è un prodotto scalare nello spazio di Hilbert, che resta invariato sotto le simmetrie. L'hamiltoniana resta quindi inalterata ma gli stati cambiano: è da qui che nascono le degenerazioni energetiche.

Assunto che \mathcal{U} sia un operatore unitario descritto da una matrice 3x3, gli operatori si trasformeranno come:

$$\begin{cases} a_i \rightarrow \mathcal{U}_{ij} a_j \\ a_i^\dagger \rightarrow \mathcal{U}_{ij}^* a_j^\dagger \end{cases} \Rightarrow (a_i^\dagger a_i) \rightarrow (\mathcal{U}_{ij}^* a_j^\dagger)(\mathcal{U}_{ik} a_k) = a_j^\dagger \mathcal{U}_{ji}^* \mathcal{U}_{ik} a_k = (a_i^\dagger a_i)$$

Dove abbiamo ovviamente considerato $\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} = \mathbb{I}$; questo è un chiaro esempio di **simmetria interna**. Gli operatori di innalzamento e abbassamento agiscono sugli stati, modificandoli come sappiamo $\psi_1^{(x)} = (\Phi_x, a^\dagger \Psi_0)$; il generico stato dell'oscillatore armonico è quindi:

$$\Psi_N = a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger \cdots a_{i_N}^\dagger \Psi_0$$



Cosa combina questa simmetria interna agli stati del sistema? Restano o meno invariati sotto la simmetria? Applicando lo stesso ragionamento fatto per l'hamiltoniana, gli stati si trasformeranno come:

$$\Psi_N \rightarrow \left(\mathcal{U}_{i_1 j_1}^* \mathcal{U}_{i_2 j_2}^* \cdots \mathcal{U}_{i_N j_N}^* a_{j_1}^\dagger \cdots a_{j_N}^\dagger \right) \Psi_0$$

Ricordando i commutatori degli operatori, in particolare $[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$, osserviamo che *tutti gli operatori commutano tra di loro*, abbiamo quindi ottenuto un **tensore a N indici simmetrici**.

Ora, se avessimo parlato di un oscillatore armonico in due dimensioni, lo stato risultante sarebbe stato una combinazione lineare di $N + 1$ componenti linearmente indipendenti tra loro. Nel caso tridimensionale il conteggio di componenti indipendenti è diverso. La regola generale, dimostrabile ma di cui non forniremo la dimostrazione, è che, in uno spazio n dimensionale un tensore di rango R ha un numero di componenti linearmente indipendenti pari a:

$$\binom{n + R - 1}{R}$$

Se $n = 3$, otterremo $\frac{1}{2}(R+2)(R+1)$ componenti linearmente indipendenti, *esattamente come avevamo già riscontrato* parlando dell'oscillatore armonico tridimensionale senza mettere in gioco le simmetrie. La degenerazione dipende quindi dalla dimensione del tensore con indici simmetrici e **l'origine di essa è sempre la presenza di una simmetria**.

Se consideriamo una trasformazione infinitesima $\mathcal{U}_{ij} = \delta_{ij} + \epsilon_{ij}$ con $\epsilon_{ij}^* = -\epsilon_{ji}$ antihermitiano, questa è una trasformazione unitaria in quanto $\mathcal{U}_{ij}^\dagger \mathcal{U}_{jk} = \delta_{ik}$. Richiediamo inoltre che sia $\det(\mathcal{U}) = 1$, allora avremo $\det(\mathbb{I} + \epsilon) = 1 + \text{tr}(\epsilon) = 1$, quindi la matrice ϵ è a traccia nulla.

Il gruppo di trasformazioni che adesso stiamo descrivendo è $SU(3)$, matrici speciali unitarie 3x3, ed è il gruppo di trasformazioni fondamentale per descrivere i processi regolati dalle interazioni forti, come i decadimenti di alcune particelle (che abbiamo visto nella precedente sezione) che rispettano tutte l'invarianza di isospin. Consideriamo il primo stato eccitato dell'oscillatore armonico $\Psi_1 = a_k^\dagger \Psi_0$, compiamo una di queste trasformazioni su di esso:

$$\Psi_1 \rightarrow \mathcal{U}_{ik}^\dagger a_k^\dagger \Psi_0 = (\delta_{ik} + \epsilon_{ik})^* a_k^\dagger \Psi_0 = a_k^\dagger \Psi_0 - \epsilon_{ki} a_k^\dagger \Psi_0$$

Vogliamo adesso dimostrare che il generatore delle simmetrie nascoste è $e^{\epsilon_{ij} a_i a_j^\dagger}$; consideriamo una trasformazione infinitesima, espandendo in serie l'esponenziale:

$$(\mathbb{I} + \epsilon_{ij} (a_i a_j^\dagger)) a_k^\dagger \Psi_0 = a_k^\dagger \Psi_0 + \epsilon_{ij} (a_i a_j^\dagger) a_k^\dagger \Psi_0$$

Il primo termine è uguale a quello generato dalla trasformazione effettuata con \mathcal{U} , il secondo termine non ancora, possiamo però aggiustarlo: se facciamo in modo che a_i guardi direttamente lo stato, il risultato di quell'operazione sarà nullo. Allora possiamo sfruttare le regole di commutazione $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$, e scrivere:



$$\begin{aligned}
 \epsilon_{ij}(a_i a_j^\dagger) a_k^\dagger \Psi_0 &= \epsilon_{ij}(\delta_{ij} + a_j^\dagger a_i) a_k^\dagger \Psi_0 = \\
 &= \epsilon_{ij}(a_j^\dagger a_i) a_k^\dagger \Psi_0 = \epsilon_{ij} a_j^\dagger (\delta_{ik} + a_k^\dagger a_i) \Psi_0 = \\
 &= \epsilon_{ik} a_k^\dagger \Psi_0 + \epsilon_{ij} a_j^\dagger a_k^\dagger a_i \Psi_0 = \epsilon_{ik} a_k^\dagger \Psi_0
 \end{aligned}$$

Quindi i generatori delle simmetrie interne dipendono esplicitamente da $a_i a_j^\dagger$.

9.6.1 Scrivere matrici a traccia nulla

Abbiamo imposto che ϵ_{ij} fosse una matrice a traccia nulla, vogliamo adesso trovare un modo generale per poter scrivere $\epsilon_{ij} X_{ij}$ in modo che sia X_{ij} a traccia nulla; ricordiamo che la traccia di una matrice è scrivibile come $\text{tr}(\tilde{\epsilon}) = \epsilon_{ij} \delta_{ij}$. Avremo allora:

$$\text{tr}(\epsilon_{ij}) = \text{tr} \left(\tilde{\epsilon}_{ij} - \delta_{ij} \frac{\text{tr}(\tilde{\epsilon})}{N} \right) = \text{tr}(\tilde{\epsilon}_{ij}) - \text{tr}(\delta_{ij}) \frac{\text{tr}(\tilde{\epsilon})}{N}$$

Questa è a traccia nulla evidentemente. Moltiplicata per X_{ij} , allora, per avere X_{ij} a traccia nulla basterà scrivere:

$$\tilde{\epsilon}_{ij} \left(X_{ij} - \frac{\text{tr}(X)}{N} \delta_{ij} \right)$$

A questo punto possiamo scrivere il generatore $\epsilon_{ij} a_i a_j^\dagger$ come:

$$\epsilon_{ij} \left(a_i a_j^\dagger - \frac{a_i a_j^\dagger}{3} \delta_{ij} \right)$$

Le matrici tra parentesi sono quelle che formano il gruppo $SU(3)$ e sono anche chiamate **matrici di Gell-Mann**. Sono in totale 8 matrici anitermitiane a traccia nulla che descrivono i fenomeni delle interazioni forti.



Capitolo 10

Teoria delle perturbazioni

10.1 Rottura spontanea della simmetria

Abbiamo visto il caso particolare della doppia buca di potenziale e abbiamo descritto come, quando il massimo locale è finito, si presenti una rottura spontanea della simmetria. Una cosa simile non accade solo nella nostra immaginazione ma anche nella realtà: un esempio è la molecola di ammoniaca NH_3 , dove l'atomo di azoto si posiziona sulla verticale rispetto al piano formato dai tre atomi di idrogeno, e può mettersi a destra o a sinistra di questo; questo significa che anche in quel caso ci sono due minimi locali del potenziale e la scelta di quale dei due minimi assumere comporta la chiralità della molecola, corrispondente a una risposta ottica ben precisa (assorbiranno fotoni con polarizzazione orientata a destra o a sinistra).

Riprendendo proprio il caso della doppia buca, supponiamo che a $t = 0$ si rompa la simmetria, ottenendo quindi le funzioni d'onda già note $\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2(x)$. Consideriamo un'evoluzione temporale del sistema, $e^{-i\frac{H}{\hbar}t}\psi(x, 0) = \psi(x, t)$: questa agirà diversamente sulle due componenti della funzione d'onda, infatti a ψ_1 è associato un livello energetico $E_1 < E_0$, mentre a ψ_2 è associato un livello $E_2 > E_0$. Posta $\delta E = E_2 - E_1$, avremo $E_1 = E_0 - \frac{\delta E}{2}$ e $E_2 = E_0 + \frac{\delta E}{2}$. La funzione d'onda al tempo generico sarà quindi:

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 - \frac{\delta E}{2})t} \frac{\psi_1}{\sqrt{2}} + e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + \frac{\delta E}{2})t} \frac{\psi_2}{\sqrt{2}} = e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} \left[\psi_0(x) \cos\left(\frac{\delta E}{\hbar}t\right) + \psi_0(-x) \sin\left(\frac{\delta E}{\hbar}t\right) \right]$$

Osserviamo a questo punto che la stabilità della rottura della simmetria non è infinita: infatti, se fosse $\delta E = 0$ si resterebbe in una delle due buche indefinitamente, ma abbiamo $\delta E \neq 0$ proprio perché la barriera di potenziale non è finita. Allora si potrà tornare nell'altra buca, esattamente a un tempo tale che $t \approx \frac{\hbar}{\delta E}$.

10.2 Teoria delle perturbazioni al primo ordine

Supponiamo di avere un'hamiltoniana imperturbata H_0 che soddisfa l'equazione $H_0\Psi_a = E_a\Psi_a$ e di conoscerne le soluzioni; supponiamo inoltre che H_0 sia hermitiana e che quindi le soluzioni formino un set completo di autofunzioni ortogonali



$(\Psi_a, \Psi_b) = \delta_{ab}$. Affrontiamo allora il caso in cui sia presente una perturbazione nell'hamiltoniana del sistema tale che $H = H_0 + \delta H$, dove $\delta H \sim o(\epsilon)$ è un numero piccolo rispetto al termine imperturbato. A questo corrisponderà quindi una perturbazione nei livelli energetici, che potremo esprimere come $E_a + \delta E_a$ e, di conseguenza, anche sugli stati che verranno leggermente modificati da Ψ_a a $\Psi_a + \delta\Psi_a$. Come possiamo trattare le correzioni che otteniamo?

Per poterle studiare riscriviamo l'equazione alle autofunzioni con i termini corretti e consideriamo di questa solo i termini *al primo ordine nella teoria delle perturbazioni*:

$$\begin{aligned} (H_0 + \delta H)(\Psi_a + \delta\Psi_a) &= (E_a + \delta E_a)(\Psi_a + \delta\Psi_a) \\ H_0\delta\Psi_a + (\delta H)\Psi_a &= \delta E_a\Psi_a + E_a\delta\Psi_a \end{aligned}$$

Moltiplichiamo ora scalarmente a sinistra (ovvero moltiplichiamo per $\langle\Psi_a|$) per Ψ_a ; nel secondo passaggio sfruttiamo l'hermitianità di H_0 , portandola a sinistra nel prodotto scalare e sostituendola con il suo autovalore:

$$\begin{aligned} (\Psi_a, H_0\delta\Psi_a) + (\Psi_a, (\delta H)\Psi_a) &= (\Psi_a, \delta E_a\Psi_a) + (\Psi_a, E_a\delta\Psi_a) \\ E_a(\Psi_a, \delta\Psi_a) + (\Psi_a, (\delta H)\Psi_a) &= \delta E_a(\Psi_a, \Psi_a) + E_a(\Psi_a, \delta\Psi_a) \end{aligned}$$

Da questa otteniamo quindi **la correzione ai livelli energetici al primo ordine**:

$$\delta E_a = (\Psi_a, (\delta H)\Psi_a) = \langle \delta H \rangle_{\Psi_a}$$

Esempio (10.1)

Vediamo con un esempio come applicare questo studio. Consideriamo una correzione al potenziale coulombiano dell'atomo di idrogeno pari a:

$$\delta V = V_0 e^{-\frac{r}{R}}$$

Con $R \ll a_B$ dove a_B è il raggio di Bohr, mentre r è la variabile radiale. Vogliamo vedere come variano i livelli degli stati legati $2s, 2p$ al primo ordine nella teoria delle perturbazioni. Le funzioni dei due livelli imperturbati sono $\psi_{2s} = R_{20}(r)Y_0^0$ e $\psi_{2p} = R_{21}(r)Y_1^m$, dove la parte radiale è in generale esprimibile come:

$$R_{nl} \propto r^l e^{-\frac{r}{na_B}} F_{nl} \left(\frac{r}{na} \right)$$

Con F_{nl} i polinomi di Laguerre. Avremo $F_{20} = 1 - \frac{r}{2a}$ e $F_{21} = 1$. Con le giuste normalizzazioni le due funzioni cercate sono:

$$\begin{aligned} \psi_{2s} &= \frac{1}{\sqrt{2a_B^3}} \left(2 - \frac{r}{a_B} \right) e^{-\frac{r}{2a_B}} Y_0^0 \\ \psi_{2p} &= \frac{1}{\sqrt{2a_B^3}} \frac{r}{a_B\sqrt{3}} e^{-\frac{r}{2a_B}} Y_1^m \end{aligned}$$



Possiamo quindi applicare la regola che ci fornisce la perturbazione sui livelli energetici, ricordando che nell'hamiltoniana compare l'energia potenziale (quindi $e \cdot V$ e non solo il potenziale coulombiano):

$$\begin{aligned}\delta E_{2s} &= (\psi_{2s}, (\delta H)\psi_{2s}) = \int \psi_{s2}^* eV_0 e^{-\frac{r}{R}} \psi_{2s} d^3x = \frac{eV_0 R(R^2 - a_B R + a_B^2)}{(a_B + R)^5} \\ \delta E_{2s} &\xrightarrow{R \ll a_B} \frac{eV_0 R^3}{a_B^3} \\ \delta E_{2p} &\rightarrow eV_0 \frac{R^5}{a_B^5}\end{aligned}$$

10.2.1 Caso degenere

Cosa succede se al livello E_a sono associate due o più stati/funzioni d'onda? Ripartendo dall'espressione $\delta H \Psi_a + H_0 \delta \Psi_a = \delta E_a \Psi_a + E_a \delta \Psi_a$, moltiplichiamo scalarmente a sinistra per Ψ_b :

$$\begin{aligned}(\Psi_b, (\delta H)\Psi_a) + (\Psi_b, H_0 \delta \Psi_a) &= (\Psi_b, \delta E_a \Psi_a) + (\Psi_b, E_a \delta \Psi_a) \\ (\Psi_b, (\delta H)\Psi_a) &= \delta E_a \underbrace{(\Psi_b, \Psi_a)}_{\delta_{ab}=0} + (E_a - E_b)(\Psi_b, \delta \Psi_a) \\ \rightarrow (\Psi_b, (\delta H)\Psi_a) &= (E_a - E_b)(\Psi_b, \delta \Psi_a)\end{aligned}$$

Abbiamo supposto che sia $a \neq b$ cosicché $\delta_{ab} = 0$; se ora consideriamo un caso degenere, quindi, avremo che $E_a - E_b = 0$; questo ci dice che $(\Psi_b, (\delta H)\Psi_a)$ deve avere elementi di matrice fuori dalla diagonale **non nulli**. Questa matrice fa riferimento a tutti gli stati degeneri, che possiamo esprimere come $(\Psi_{ar}, (\delta H)\Psi_{as})$. Supposto sia hermitiana, avrà un set completo di autovettori, possiamo allora scrivere l'equazione secolare:

$$(\Psi_{ar}, (\delta H)\Psi_{as}) \mu_r^{(n)} = \Delta^{(n)} \mu_s^{(m)}$$

Scriviamo allora degli autostati come $\Phi_a^{(n)} = \sum_r \mu_r^{(n)} \Psi_{ar}$; questi sono tanti quanti gli stati degeneri Ψ_{ar} , mentre n è l'indice del vettore che va da 1 alla dimensione della matrice, che dipende proprio dalla degenerazione.

10.2.2 Caso non degenere

Supponendo invece che non ci sia degenerazione energetica per gli stati Ψ_a, Ψ_b , dall'ultima espressione del caso degenere possiamo scrivere:

$$(\Psi_b, \delta \Psi_a) = \frac{(\Psi_b, (\delta H)\Psi_a)}{E_a - E_b}$$

Andiamo adesso a cercare un'espressione per poter ricavare la correzione sugli stati perturbati $\delta \Psi_a$; quando questa sarà presente, otterremo lo stato $\Psi_a + \delta \Psi_a$; possiamo supporre che sia normalizzato, ottenendo una condizione su di esso:



$$\begin{aligned}
 (\Psi_a + \delta\Psi_a)(\Psi_a + \delta\Psi_a) &= 1 \\
 \underbrace{(\Psi_a, \Psi_a)}_{=1} + (\delta\Psi_a, \Psi_a) + (\Psi_a, \delta\Psi_a) &= 1 \\
 2\Re(\Psi_a, \delta\Psi_a) &= 0
 \end{aligned}$$

(si ottiene osservando che i due termini rimanenti sono uno il coniugato dell'altro). La parte immaginaria di questo prodotto scalare è allora totalmente arbitraria, e possiamo scegliere una fase qualsiasi come $e^{i\phi_a}$, basta che sia di ordine ϵ . A questo punto, possiamo espandere la correzione allo stato sul set di stati non degeneri, ovvero $\delta\Psi_a = \sum_b \Psi_b(\Psi_b, \delta\Psi_a)$; ricordando l'espressione già ottenuta per $(\Psi_b, \delta\Psi_a)$ otteniamo la perturbazione sugli stati:

$$\delta\Psi_a = \sum_{b \neq a} \Psi_b \frac{(\Psi_b, (\delta H)\Psi_a)}{E_a - E_b}$$

10.3 Teoria delle perturbazioni al secondo ordine

Passiamo adesso al secondo ordine della teoria delle perturbazioni. Poste le ipotesi già considerate al primo ordine, adesso avremo un'hamiltoniana del tipo $H_0 + \delta_1 H + \delta_2 H$, con $\delta_1 H \sim o(\epsilon)$, $\delta_2 H \sim o(\epsilon^2)$. Allo stesso modo quindi avremo una correzione ai livelli energetici e ai rispettivi stati associati che arriva al secondo ordine in ϵ . Come prima, riscriviamo l'equazione alle autofunzioni con le correzioni, stavolta continuando al secondo ordine e fermandoci a questo; avremo:

$$\begin{aligned}
 (H_0 + \delta_1 H + \delta_2 H)(\Psi_a + \delta_1 \Psi_a + \delta_2 \Psi_a) &= (E_a + \delta_1 E_a + \delta_2 E_a)(\Psi_a + \delta_1 \Psi_a + \delta_2 \Psi_a) \\
 H_0 \delta_2 \Psi_a + \delta_1 H \delta_1 \Psi_a + \delta_2 H \Psi_a &= E_a \delta_2 \Psi_a + \delta_1 E_a \delta_1 \Psi_a + \delta_2 E_a \Psi_a
 \end{aligned}$$

Come prima moltiplichiamo a sinistra per Ψ_a , risfruttiamo l'hermitianità di H_0 e ricaviamo l'espressione per la correzione al secondo ordine dei livelli energetici:

$$\begin{aligned}
 (\Psi_a, H_0 \delta_2 \Psi_a) + (\Psi_a, (\delta_1 H) \delta_1 \Psi_a) + (\Psi_a, (\delta_2 H) \Psi_a) &= (\Psi_a, E_a \delta_2 \Psi_a) + (\Psi_a, \delta_1 E_a \delta_1 \Psi_a) + (\Psi_a, \delta_2 E_a \Psi_a) \\
 \delta_2 E_a &= (\Psi_a, (\delta_1 H) \delta_1 \Psi_a) + (\Psi_a, (\delta_2 H) \Psi_a)
 \end{aligned}$$

Notiamo che, rispetto al primo ordine, è presente, oltre al valore aspettato della perturbazione al secondo ordine $\langle \delta_2 H \rangle_{\Psi_a}$ un ulteriore termine, dovuto dall'effetto della perturbazione al primo ordine sulla prima correzione agli stati. Ricordando l'espressione della correzione $\delta_1 \Psi_a$ trovata al primo ordine possiamo riscrivere per esteso la seconda correzione ai livello energetici:

$$\begin{aligned}
 \delta_2 E_a &= \sum_{b \neq a} \frac{(\Psi_b, (\delta_1 H) \Psi_a)(\Psi_a, (\delta_1 H) \Psi_b)}{E_a - E_b} + (\Psi_a, (\delta_2 H) \Psi_a) = \\
 &= \sum_{b \neq a} \frac{|(\Psi_b, (\delta_1 H) \Psi_a)|^2}{E_a - E_b} + (\Psi_a, (\delta_2 H) \Psi_a)
 \end{aligned}$$



Al secondo ordine si genera un fenomeno noto come *repulsione dei livelli*; consideriamo ad esempio un sistema composto solo di due stati e due livelli energetici non degeneri; la correzione totale ai livelli energetici sarà la somma della correzione al primo ordine più quella al secondo ordine, ovvero:

$$\begin{aligned}\delta E_a &= (\Psi_a, (\delta_1 H) \Psi_a) + \frac{|(\Psi_a, (\delta_1 H) \Psi_b)|^2}{E_a - E_b} + (\Psi_a, (\delta_2 H) \Psi_a) \\ \delta E_b &= (\Psi_b, (\delta_1 H) \Psi_b) + \frac{|(\Psi_b, (\delta_1 H) \Psi_a)|^2}{E_b - E_a} + (\Psi_b, (\delta_2 H) \Psi_b)\end{aligned}$$

Supposto sia in origine $E_a > E_b$, osserviamo che $\delta_2 E_a$ è positivo, mentre $\delta_2 E_b$ è negativo, ovvero *i livelli si allontanano*.

Ovviamente l'espressione trovata per la correzione al secondo ordine dei livelli energetici non va bene se è presente degenerazione energetica; possiamo riscrivere $\delta_1 \Psi_a$ espandendo sulla base degli stati non degeneri come fatto prima, ma stavolta sfruttando anche la regola di completezza, ovvero:

$$\delta_1 \Psi_a = \sum_{c: E_c \neq E_a} \frac{(\Psi_a, (\delta_1 H) \Psi_c)}{E_a - E_c} + \sum_{b: E_b = E_a} \Psi_b (\Psi_b, (\delta_1 H) \Psi_a)$$

Possiamo sostituire questa espressione nel calcolo di $\delta_2 E_a$, ottenendo:

$$\delta_2 E_a = (\Psi_a, (\delta_2 H) \Psi_a) + \sum_{c: E_c \neq E_a} \frac{|(\Psi_a, (\delta_1 H) \Psi_c)|^2}{E_a - E_c} + \sum_{b: E_b = E_a} (\Psi_a, (\delta_1 H) \Psi_b) (\Psi_b, \delta_1 \Psi_a)$$

Osserviamo a questo punto che, se $b = a$, il termine $(\Psi_b, \delta_1 \Psi_a)$ è nullo, mentre se $b \neq a$ è nullo il termine $(\Psi_a, (\delta_1 H) \Psi_b)$. In sintesi l'ultimo termine è nullo in ogni caso, quindi l'espressione della correzione al secondo ordine dei livelli energetici nel caso degeneri è identica al caso non degeneri:

$$\delta_2 E_a = (\Psi_a, (\delta_2 H) \Psi_a) + \sum_{c: E_c \neq E_a} \frac{|(\Psi_a, (\delta_1 H) \Psi_c)|^2}{E_a - E_c}$$

10.4 Teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo

Normalmente si ha un'hamiltoniana non dipendente dal tempo, che descrive quindi un sistema isolato, ma in alcuni non succede e abbiamo una $H(t)$ che varia nel tempo, descrivendo un sistema più o meno complesso che scambia energia con l'ambiente. Consideriamo un caso simile con una perturbazione $\delta H(t) = H'(t)$ dipendente da un parametro piccolo ϵ come nei casi precedenti; H_0 sarà l'hamiltoniana imperturbata del problema e avremo quindi $H(t) = H_0 + H'(t)$ da inserire nell'equazione di Schrödinger $i\hbar \partial_t \psi(t) = H(t) \psi(t)$. Supponiamo anche questa volta di conoscere le soluzioni di $H_0 \Psi_n = E_n \Psi_n$, anche qui con $(\Psi_n, \Psi_m) = \delta_{nm}$ set completo. Scriviamo allora lo stato generico dipendente dal tempo in funzione di questa base come:



$$\sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Psi_n$$

Dove $e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t}$ è l'evoluzione temporale già nota. I coefficienti di espansione $c_n(t)$ dipendono anch'essi dal tempo. Andiamo a sostituire questi stati nell'equazione di Schrödinger; il membro di sinistra è:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n(t) = i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Psi_n + i\hbar \sum_n c_n(t) \left(-i\frac{E_n}{\hbar}\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Psi_n$$

Il termine a destra è invece:

$$H(t) \Psi_n(t) = (H_0 + H'(t)) \Psi_n(t) = \sum_n c_n(t) E_n \Psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} + \sum_n c_n(t) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} H'(t) \Psi_n$$

Uguagliando le due espressioni otteniamo:

$$i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Psi_n = \sum_n c_n(t) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} H'(t) \Psi_n$$

Moltiplichiamo a sinistra per Ψ_m e, saltando un passaggio, otteniamo:

$$i\hbar \dot{c}_m(t) e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t} = \sum_n c_n(t) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} H'_{mn}$$

Abbiamo ottenuto **un'equazione esatta** per i coefficienti di espansione in serie; possiamo considerare, al primo ordine nella teoria delle perturbazioni, $c_n(t) \approx c_n(0)$: questa può essere una condizione che viene esplicitamente data dal problema a cui si fa riferimento. In questo caso, allora, avremo:

$$C_m(t) = c_n(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n c_n(0) \int_0^t dt' e^{i\frac{(E_m - E_n)}{\hbar}t'} H'_{mn}(t')$$

Osserviamo che l'elemento di matrice H'_{mn} è *fondamentale* per poter ottenere efficacemente i coefficienti di espansione e, di conseguenza, gli stati che andiamo a cercare.

10.5 Radiazione monocromatica e regola d'oro di Fermi

Applichiamo quello che abbiamo imparato a un caso pratico. Consideriamo una perturbazione dipendente dal tempo del tipo $H'(t) = \mathcal{U}e^{-i\omega t} + \mathcal{U}^\dagger e^{i\omega t}$. Supponiamo sia l'hamiltoniana hermitiana e ω una frequenza fissata, questa perturbazione rappresenta dunque **una radiazione elettromagnetica monocromatica** che perturba il nostro sistema (per esempio un fascio di fotoni su un atomo). Cosa



succede all'atomo in questione? Prendiamo per esempio l'idrogeno, che conosciamo e possiamo risolvere, ci chiediamo se lo stato fondamentale si eccita o meno. I coefficienti di espansione saranno quindi:

$$c_n(t) \approx c_n(0) + \sum_m \mathcal{U}_{nm} c_m(0) \frac{e^{i \frac{(E_n - E_m - \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_m - \hbar\omega} + \sum_m \mathcal{U}_{mn}^* c_m(0) \frac{e^{i \frac{(E_n - E_m + \hbar\omega)t}{\hbar}} - 1}{E_n - E_m + \hbar\omega}$$

Abbiamo semplicemente risolto gli integrali che compaiono nella formula esplicitandoli. A seconda della condizione iniziale, possiamo semplificare questa espressione. Se consideriamo $c_1(0) = 1$, vorrà dire che a $t = 0$ il nostro atomo si trova nello stato fondamentale, infatti la sua funzione d'onda è:

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \psi_n \xrightarrow{t=0} c_1(0) e^{-i0} \psi_1 = \psi_1$$

Se infatti $c_1 = 0$ tutti gli altri devono essere per forza nulli, considerato che le funzioni d'onda sono normalizzate e, di conseguenza, anche i coefficienti di espansione. Se invece ad essere non nullo è un c_n con $n \neq 1$, avremo:

$$c_n(t) \approx \mathcal{U}_{n1} \frac{e^{i \frac{E_n - E_1 - \hbar\omega}{\hbar} t} - 1}{E_n - E_1 - \hbar\omega} + \mathcal{U}_{1n}^* \frac{e^{i \frac{E_n - E_1 + \hbar\omega}{\hbar} t} - 1}{E_n - E_1 + \hbar\omega}$$

Dipende tutto da $\hbar\omega$ e E_n , ovvero dall'energia fornita dalla radiazione e da quale livello eccitato stiamo guardando. Per t piccoli, espandendo l'esponenziale, ritroviamo un comportamento oscillante, per cui va escluso questo caso. Allora ci sono due casi validi: il primo è $E_n \approx E_1 + \hbar\omega$, che ci dice che finiamo su E_n alla fine del processo (è quindi un'eccitazione stimolata) partendo dallo stato fondamentale, mentre il secondo è $E_n \approx E_1 - \hbar\omega$, che ci dice il contrario, ovvero finiamo sullo stato fondamentale partendo dallo stato eccitato (diseccitazione stimolata). Se consideriamo il primo caso, quello dell'assorbimento di un fotone, il tempo caratteristico sarà:

$$\frac{1}{\tau} = E_n - E_1 - \hbar\omega \rightarrow \tau \sim +\infty$$

Quindi τ è una scala molto lunga dei tempi, e l'espansione dell'esponenziale $e^{i \frac{t}{\tau}} - 1 \sim \frac{it}{\tau}$ è valida solo se consideriamo tempi $t \sim \tau$ dallo stesso ordine di grandezza. Questo ci dice allora che il termine \mathcal{U}_{n1} cresce nel tempo fino a $t = \tau$, mentre \mathcal{U}_{1n}^* resta oscillante tutta la durata del processo e, quindi, trascurabile. I coefficienti di espansione dipendono quindi solo da \mathcal{U}_{1n} . La probabilità di essere finiti su uno stato eccitato ci è data ovviamente da $|c_n(t)|^2$, che sarà:

$$|c_n(t)|^2 = 4|\mathcal{U}_{n1}|^2 \frac{\sin^2 \left(\frac{E_n - E_1 - \hbar\omega}{2\hbar} t \right)}{(E_n - E_1 - \hbar\omega)^2}$$

Poiché vale il limite

$$\frac{2\hbar \sin^2 \left(\frac{\omega t}{2\hbar} \right)}{\pi \omega^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \delta(\omega)$$



Otteniamo

$$|c_n|^2 = 4|\mathcal{U}_{n1}|^2 \frac{\pi t}{2\hbar} \delta(E_1 + \hbar\omega - E_n)$$

Ovvero *si finisce sul livello eccitato E_n solo se $\hbar\omega$ è l'energia giusta per farci finire lì*. Si definisce **rate**, o tasso, di probabilità di finire su un determinato stato eccitato la quantità $\Gamma = \frac{|c_n|^2}{t}$, ottenendo così quella che è nota come **regola d'oro di Fermi** (o anche *Fermi's golden rule*):

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{U}_{n1}|^2 \delta(E_1 + \hbar\omega - E_n)$$

Se la frequenza ω è tale da ionizzare l'atomo, ovvero $\hbar\omega > 13.6$ eV la probabilità dipenderà dal termine

$$\mathcal{U}_{n1} = \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{z}}\psi_1 \right)$$

Dove abbiamo considerato le onde piane polarizzate lungo $\hat{\mathbf{z}}$. Gli elettroni ionizzati si diffondono in $4\pi\hat{\mathbf{n}}$ direzioni. Come si effettua la somma su tutte le direzioni? Questo si può fare con un trucco largamente usato in meccanica statistica: immaginiamo di chiudere il sistema in un volume finito (ovvero in una buca di potenziale tridimensionale): facendo così passeremo dallo spettro continuo a quello discreto e avremo delle **condizioni al contorno periodiche**; lavorando con onde piane normalizzate:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \rightarrow \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{\sqrt{L_1 L_2 L_3}} = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{\sqrt{V}} = \frac{e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}}}{\sqrt{V}}$$

L'elemento di matrice considerato sarà $\mathcal{U}_{n1} = \left(\psi_{\mathbf{p}}, \mathcal{U} e^{-\frac{r}{a_B}} \frac{1}{\sqrt{a_B^3}} \right)$, applicando le condizioni al contorno periodiche che vedono $\mathbf{k} = \frac{2\pi\hat{\mathbf{n}}}{L}$ ricaviamo che $\hat{\mathbf{n}} = \frac{L}{2\pi}\mathbf{k}$. Ora, quante triplette di interi $\hat{\mathbf{n}}$ ci sono in un infinitesimo $d\mathbf{p} = d^3p$? Questo può essere calcolato al volo:

$$dn_x dn_y dn_z = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 dk_x dk_y dk_z = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d^3p$$

Questo ci dice che la somma si trasforma in integrale secondo la formula $\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3p$. Questo semplice truccetto, ideato da Fermi, è alla base di tutta la teoria della diffusione (o scattering). La regola d'oro sarà quindi:

$$\Gamma(1 \rightarrow \mathbf{p}) = \frac{V}{h^3} \int d^3p \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{U}_{\mathbf{p}1}|^2 \delta(E_{\mathbf{p}} - E_1 - \hbar\omega)$$

A questo punto portiamo il volume della buca di potenziale all'infinito. La funzione d'onda per onde piane è normalizzata, e compare un termine $\frac{1}{\sqrt{V}}$ in ogni elemento $\mathcal{U}_{\mathbf{p}1}$ di ogni particella libera. Il volume davanti l'integrale è quindi semplificato da $|\mathcal{U}_{\mathbf{p}1}|^2$. Per il fattore $\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}$ si usa un'altra convenzione: si scrive la funzione d'onda di particella libera normalizzata come:



$$\psi_{\mathbf{p}} = \frac{e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}$$

In questo modo si porta il termine sotto il segno di integrale e la regola d'oro di Fermi è:

$$\Gamma(1 \rightarrow \mathbf{p}) = \frac{2\pi}{\hbar} \int d^3p |\mathcal{U}_{\mathbf{p}1}|^2 \delta(E_{\mathbf{p}} - E_1 - \hbar\omega)$$

In tutto il nostro ragionamento abbiamo dato per scontate due ipotesi: la prima è che, quando l'atomo viene colpito dal fotone, il nucleo *non rinculi* e resti fermo dov'è, approssimando la massa del nucleo molto più grande di quella dell'elettrone (cosa tra l'altro vera); l'altra ipotesi considerata è che, quando abbiamo dei fotoni con energia dell'ordine del MeV approssimiamo che l'elettrone scattato abbia tutta e solo l'energia del fotone incidente.



Capitolo 11

Appendice: tabelle e formulari

11.1 Tabella delle costanti fondamentali in meccanica quantistica

Riportiamo una tabella delle costanti più utilizzate in meccanica quantistica, coi loro valori e le unità di misura (prevalentemente nel sistema naturale).

Costante	Simbolo	Valore numerico	Unità di misura
Velocità della luce nel vuoto	c	299 792 458	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$
Costante di Plack	h	$6.6 \cdot 10^{-27}$	erg · s
Costante di Dirac	$\hbar = \frac{h}{2\pi}$	$1.05 \cdot 10^{-27}$	erg · s
Costante di Boltzmann	k_B	$1.38 \cdot 10^{-16}$	$\frac{\text{erg}}{\text{K}}$
Raggio di Bohr	a_B	$0.5 \cdot 10^{-10}$	m
Energia di ionizzazione dell'idrogeno	–	13.6	eV
Unità di massa atomica	1amu	$1.6 \cdot 10^{-24}$	g
Massa a riposo dell'elettrone	$m_e c^2$	0.5	MeV
Massa a riposo di un nucleone	$m_n c^2, m_p c^2$	0.9	GeV
Costante di struttura fine	$\alpha_{\text{fine}}, \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$	$\frac{1}{137}$	–
Costante naturale	$\hbar c$	197	MeV · fm

11.2 Lista delle grandezze in funzione delle costanti fondamentali

Si possono scrivere le grandezze fondamentali in funzioni delle costanti della meccanica quantistica; ne riportiamo una breve tabella.

Grandezza	Costanti
Lunghezza	$\frac{\hbar^2}{m_e^2}$
Tempo	$\frac{\hbar^3}{m_e^4}$
Velocità	$\frac{e^2}{\hbar}$
Energia	$\frac{m_e^4}{\hbar^2}$



11.3 Armoniche sferiche

Riportiamo la lista delle armoniche sferiche fino a $l = 3$.

L'armonica iniziale è:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Per $l = 1$:

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta$$

Per $l = 2$:

$$Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta$$

$$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_2^{-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta \cos \theta$$

$$Y_2^{-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{-2i\phi} \sin^2 \theta$$

Per $l = 3$:

$$Y_3^3 = -\sqrt{\frac{35}{64\pi}} e^{3i\phi} \sin^3 \theta$$

$$Y_3^2 = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta \cos \theta$$

$$Y_3^1 = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}} e^{i\phi} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$$

$$Y_3^{-1} = \sqrt{\frac{21}{64\pi}} e^{-i\phi} (\sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1))$$

$$Y_3^{-2} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{-2i\phi} \sin^2 \theta \cos \theta$$

$$Y_3^{-3} = \sqrt{\frac{35}{64\pi}} e^{-3i\phi} \sin^3 \theta$$



11.4 Formulario generale

Forniamo infine un formulario generale del corso.

11.4.1 Commutatori

$$[\mathbf{P}, \mathbf{X}] = -i\hbar\mathbb{I}$$

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar\mathbb{I}$$

$$[\mathbf{X}, H] = [\mathbf{P}, H] = [\mathbf{L}, H] = [\mathbf{L}^2, H] = 0$$

$$[L_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k$$

$$[\mathbf{L}^2, L_i] = 0$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$$

trasf. di Galileo $[\mathbf{k}, H] = -i\mathbf{p}$

trasf. di Galileo $[k_i, P_{j,n}] = -i\delta_{ij}m_n$

$$\frac{i}{\hbar}[J_{ij}, V_k] = \delta_{kj}V_j - \delta_{ki}V_i$$

$$\frac{i}{\hbar}[J_{ij}, J_{kl}] = \delta_{ik}J_{lj} + \delta_{jk}J_{il} - \delta_{il}J_{kj} - \delta_{lj}J_{ik}$$

$$[J_i, V_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}V_k$$

$$[S_i, V_k] = 0$$

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$$

$$[J_k, H] = [\mathbf{J}^2, H] = 0$$

11.4.2 Principio di indeterminazione

Posti A, B due osservabili qualsiasi:

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} | \langle [A, B] \rangle |$$

11.4.3 Formule di Ehrenfest

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{X} \rangle = \frac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m}$$

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = - \langle \nabla V \rangle$$

11.4.4 Atomo di Bohr

Raggio:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e e^2}$$

Livelli energetici:



$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m^2 Z^2 e^4}{n^2 \hbar^2}$$

11.4.5 Approssimazione semiclassica

Condizione affinché sia valida:

$$\frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1$$

Funzione d'onda per stati non legati:

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} e^{i \int p(x) dx} + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-i \int p(x) dx}$$

Funzioni d'onda in zone classicamente proibite:

$$\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int p(x) dx}$$

11.4.6 Buca di potenziale

Livelli energetici della buca unidimensionale:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Funzioni d'onda per la buca unidimensionale:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

Separazione energetica per la doppia buca di potenziale:

$$E_2 - E_1 = \frac{2\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0)$$

Funzione d'onda sotto il massimo locale:

$$\frac{c}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^a p(x) dx}$$

11.4.7 Oscillatore armonico

Caos unidimensionale, livelli energetici:

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

Funzioni d'onda:



$$\psi_m = \left(\frac{M\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2^{\frac{m}{2}} \sqrt{m!}} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2} \cdot H_m\left(x\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}\right)$$

$$H_m(\xi) = (-1)^m e^{\xi^2} \frac{d^m}{d\xi^m} e^{-\xi^2}$$

Caso tridimensionale, operatori di innalzamento e abbassamento:

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (-i\hbar\partial_i - im\omega x_i)$$

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (-i\hbar\partial_i + im\omega x_i)$$

Livelli energetici:

$$E_n = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2}\right) \quad N = n_x + n_y + n_z$$

Hamiltoniana:

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

Degenerazione dei livelli:

$$\mathcal{N}_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$$

11.4.8 Atomo di idrogeno

Funzioni d'onda:

$$\psi = R_{nl}(r)Y_l^m$$

$$R_{nl}(r) \propto r^l e^{-\frac{r}{na_B}} F_{nl}\left(\frac{r}{na_B}\right)$$

11.4.9 Matrici di Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$



11.4.10 Distribuzioni statistiche

Distribuzione di Fermi-Dirac:

$$\bar{N}_n = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$$

Distribuzione di Bose-Einstein:

$$\bar{N}_n = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1}$$

11.4.11 Teoria delle perturbazioni

Primo ordine:

$$\begin{aligned} \delta E_a &= (\Psi_a, (\delta H) \Psi_a) = \langle \delta H \rangle_{\Psi_a} \\ \delta \Psi_a &= \sum_{b \neq a} \Psi_b \frac{(\Psi_b, (\delta H) \Psi_a)}{E_a - E_b} \end{aligned}$$

Secondo ordine:

$$\delta_2 E_a = (\Psi_a, (\delta_2 H) \Psi_a) + \sum_{c: E_c \neq E_a} \frac{|(\Psi_a, (\delta_1 H) \Psi_c)|^2}{E_a - E_c}$$

Dipendente dal tempo:

$$c_m(t) = c_n(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n c_n(0) \int_0^t dt' e^{i \frac{(E_m - E_n)t'}{\hbar}} H'_{mn}(t')$$

Regola d'oro di Fermi:

$$\Gamma(1 \rightarrow n) = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{U}_{n1}|^2 \delta(E_n - E_1 - \hbar\omega)$$

Regola d'oro per una perturbazione monocromatica:

$$\Gamma(1 \rightarrow \mathbf{p}) = \frac{V}{\hbar^3} \int d^3p \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{U}_{\mathbf{p}1}|^2 \delta(E_{\mathbf{p}} - E_1 - \hbar\omega)$$



Capitolo 12

Fonti per testo e immagini; autori; licenze

12.1 Testo

- **Corso:Meccanica Quantistica/Introduzione/Approccio al corso** *Fonte:* https://it.wikiversity.org/wiki/Meccanica_Quantistica/Introduzione/Approccio_al_corso?oldid=47126 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Introduzione/La catastrofe ultravioletta** *Fonte:* https://it.wikiversity.org/wiki/Meccanica_Quantistica/Introduzione/La_catastrofe_ultravioletta?oldid=50714 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96 e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Introduzione/Atomo di Bohr** *Fonte:* https://it.wikiversity.org/wiki/Meccanica_Quantistica/Introduzione/Atomo_di_Bohr?oldid=50718 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96 e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Introduzione/L'ipotesi di de Broglie e l'equazione di Schrödinger** *Fonte:* https://it.wikiversity.org/wiki/Meccanica_Quantistica/Introduzione/L'ipotesi_di_de_Broglie_e_l'equazione_di_Schr%C3%B6dinger?oldid=50721 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96, EdoardoFossati, Bernardo e Caridore
- **Corso:Meccanica Quantistica/Introduzione/La meccanica matriciale di Heisenberg** *Fonte:* https://it.wikiversity.org/wiki/Meccanica_Quantistica/Introduzione/La_meccanica_matriciale_di_Heisenberg?oldid=50197 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96 e Thomas Bino
- **Corso:Meccanica Quantistica/Introduzione/L'interpretazione della funzione d'onda: l'ipotesi probabilistica di Born** *Fonte:* https://it.wikiversity.org/wiki/Meccanica_Quantistica/Introduzione/L'interpretazione_della_funzione_d'onda%3A_l'ipotesi_probabilistica_di_Born?oldid=50198 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Axis96
- **Corso:Meccanica Quantistica/Principio di indeterminazione/Formule di Ehrenfest** *Fonte:* https://it.wikiversity.org/wiki/Meccanica_Quantistica/Principio_di_indeterminazione/Formule_di_Ehrenfest?oldid=50724 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Principio di indeterminazione/Principio di indeterminazione** *Fonte:* https://it.wikiversity.org/wiki/Meccanica_Quantistica/Principio_di_indeterminazione/Principio_di_indeterminazione?oldid=47145 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Principio di indeterminazione/Principio di indeterminazione per osservabili qualsiasi** *Fonte:* https://it.wikiversity.org/wiki/Meccanica_Quantistica/Principio_di_indeterminazione/Principio_di_indeterminazione_per_osservabili_qualsiasi?oldid=50725 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Thomas Bino e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Metodo semi-classico/Approssimazione classica** *Fonte:* https://it.wikiversity.org/wiki/Meccanica_Quantistica/Metodo_semi-classico/Approssimazione_classica?oldid=52683 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Bernardo



- **Corso:Meccanica Quantistica/Metodo semi-classico/Decadimento alpha** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Metodo_semi-classico/Decadimento_alpha?oldid=50741 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96 e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Potenziali unidimensionali/Considerazioni generali** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Potenziali_unidimensionali/Considerazioni_generali?oldid=52019 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96 e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Potenziali unidimensionali/Buche di potenziale** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Potenziali_unidimensionali/Buche_di_potenziale?oldid=52170 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96 e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Potenziali unidimensionali/Oscillatore armonico unidimensionale** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Potenziali_unidimensionali/Oscillatore_armonico_unidimensionale?oldid=52721 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Tenet e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Potenziali unidimensionali/Potenziale delta** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Potenziali_unidimensionali/Potenziale_delta?oldid=47165 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Potenziali centrali/Momento angolare orbitale** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Potenziali_centrali/Momento_angolare_orbitale?oldid=52189 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96 e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Potenziali centrali/Trattazione in coordinate sferiche** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Potenziali_centrali/Trattazione_in_coordinate_sferiche?oldid=50226 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96 e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Potenziali centrali/Armoniche sferiche** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Potenziali_centrali/Armoniche_sferiche?oldid=52245 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Thomas Bino e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Potenziali centrali/Proprietà delle armoniche sferiche** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Potenziali_centrali/Propriet%C3%A0_delle_armoniche_sferiche?oldid=47176 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Potenziali centrali/Atomo di idrogeno** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Potenziali_centrali/Atomo_di_idrogeno?oldid=50227 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96, Thomas Bino e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Potenziali centrali/Oscillatore armonico tridimensionale** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Potenziali_centrali/Oscillatore_armonico_tridimensionale?oldid=48666 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Marcuzzolo e Thomas Bino
- **Corso:Meccanica Quantistica/Principi generali della teoria delle trasformazioni/Teoria di Dirac** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Principi_generali_della_teorica_delle_trasformazioni/Teoria_di_Dirac?oldid=47185 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Principi generali della teoria delle trasformazioni/Principi degli spazi di Hilbert** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Principi_generali_della_teorica_delle_trasformazioni/Principi_degli_spazi_di_Hilbert?oldid=50201 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Axis96
- **Corso:Meccanica Quantistica/Principi generali della teoria delle trasformazioni/Varie ed eventuali sugli stati** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Principi_generali_della_teorica_delle_trasformazioni/Varie_ed_eventuali_sugli_stati?oldid=47189 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Trasformazioni di simmetria/Operatori di simmetria** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Trasformazioni_di_simmetria/Operatori_di_simmetria?oldid=50228 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Axis96
- **Corso:Meccanica Quantistica/Trasformazioni di simmetria/Traslazioni spaziali** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Trasformazioni_di_simmetria/Traslazioni_spaziali?oldid=47196 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan



- **Corso:Meccanica Quantistica/Trasformazioni di simmetria/Traslazioni temporali** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Trasformazioni_di_simmetria/Traslazioni_temporali?oldid=47198 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Trasformazioni di simmetria/Trasformazioni di Galileo** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Trasformazioni_di_simmetria/Trasformazioni_di_Galileo?oldid=48762 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Thomas Bino
- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria del momento angolare/Spin e rotazioni** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_del_momento_angolare/Spin_e_rotazioni?oldid=52413 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96, Thomas Bino e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria del momento angolare/Momento angolare totale** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_del_momento_angolare/Momento_angolare_totale?oldid=50052 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96 e Thomas Bino
- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria del momento angolare/Matrici di Pauli, esperimento di Stern-Gerlach** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_del_momento_angolare/Matrici_di_Pauli%2C_esperimento_di_Stern-Gerlach?oldid=50053 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Axis96
- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria del momento angolare/Somma di momenti angolari** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_del_momento_angolare/Somma_di_momenti_angolari?oldid=50149 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Axis96
- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria del momento angolare/Tornando alla separazione di riga** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_del_momento_angolare/Tornando_alla_separazione_di_riga?oldid=50054 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Axis96
- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria del momento angolare/Stati invarianti sotto rotazioni** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_del_momento_angolare/Stati_invarianti_sotto_rotazioni?oldid=47217 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Spinori, particelle identiche, simmetrie interne/-Spinori** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Spinori%2C_particelle_identiche%2C_simmetrie_interne/Spinori?oldid=48768 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Thomas Bino
- **Corso:Meccanica Quantistica/Spinori, particelle identiche, simmetrie interne/Ottenere uno stato richiesto** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Spinori%2C_particelle_identiche%2C_simmetrie_interne/Ottenere_uno_stato_richiesto?oldid=47226 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Spinori, particelle identiche, simmetrie interne/-Particelle identiche** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Spinori%2C_particelle_identiche%2C_simmetrie_interne/Particelle_identiche?oldid=47228 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Spinori, particelle identiche, simmetrie interne/-Distribuzioni di Fermi-Dirac e Bose-Einstein** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Spinori%2C_particelle_identiche%2C_simmetrie_interne/Distribuzioni_di_Fermi-Dirac_e_Bose-Einstein?oldid=47230 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Spinori, particelle identiche, simmetrie interne/I-sospin** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Spinori%2C_particelle_identiche%2C_simmetrie_interne/Isospin?oldid=47232 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Spinori, particelle identiche, simmetrie interne/-Simmetrie interne** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Spinori%2C_particelle_identiche%2C_simmetrie_interne/Simmetrie_interne?oldid=48667 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Thomas Bino



- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria delle perturbazioni/Rottura spontanea della simmetria** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_delle_perturbazioni/Rottura_spontanea_della_simmetria?oldid=47239 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria delle perturbazioni/Teoria delle perturbazioni al primo ordine** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_delle_perturbazioni/Teoria_delle_perturbazioni_al_primo_ordine?oldid=52545 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan, Axis96, Thomas Bino e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria delle perturbazioni/Teoria delle perturbazioni al secondo ordine** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_delle_perturbazioni/Teoria_delle_perturbazioni_al_secondo_ordine?oldid=52563 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Bernardo
- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria delle perturbazioni/Teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_delle_perturbazioni/Teoria_delle_perturbazioni_dipendente_dal_tempo?oldid=48673 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Thomas Bino
- **Corso:Meccanica Quantistica/Teoria delle perturbazioni/Radiazione monocromatica e regola d'oro di Fermi** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Teoria_delle_perturbazioni/Radiazione_monocromatica_e_regola_d'oro_di_Fermi?oldid=48770 *Contributori:* Mapelli Dario, Dan e Thomas Bino
- **Corso:Meccanica Quantistica/Appendice: tabelle e formulari/Tabella delle costanti fondamentali in meccanica quantistica** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Appendice%3A_tabelle_e_formulari/Tabella_delle_costanti_fondamentali_in_mecchanica_quantistica?oldid=47252 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Appendice: tabelle e formulari/Lista delle grandezze in funzione delle costanti fondamentali** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Appendice%3A_tabelle_e_formulari/Lista_delle_grandezze_in_funzione_delle_costanti_fondamentali?oldid=47254 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Appendice: tabelle e formulari/Armoniche sferiche** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Appendice%3A_tabelle_e_formulari/Armoniche_sferiche?oldid=47256 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan
- **Corso:Meccanica Quantistica/Appendice: tabelle e formulari/Formulario generale** *Fonte:* https://it.wikitolearn.org/Corso%3AMeccanica_Quantistica/Appendice%3A_tabelle_e_formulari/Formulario_generale?oldid=47258 *Contributori:* Mapelli Dario e Dan

12.2 Immagini

- **File:Figura3.1MQWIT.svg** *Fonte:* <http://it.wikitolearn.org/images/it/e/e2/Figura3.1MQWIT.svg> *Licenza:* ? *Contributori:* ? *Artista originale:* ?
- **File:Figura3.2MQWIT.svg** *Fonte:* <http://it.wikitolearn.org/images/it/4/44/Figura3.2MQWIT.svg> *Licenza:* ? *Contributori:* ? *Artista originale:* ?
- **File:Figura3.3MQWIT.svg** *Fonte:* <http://it.wikitolearn.org/images/it/8/84/Figura3.3MQWIT.svg> *Licenza:* ? *Contributori:* ? *Artista originale:* ?
- **File:Figura4.1MQWIT.svg** *Fonte:* <http://it.wikitolearn.org/images/it/f/fb/Figura4.1MQWIT.svg> *Licenza:* ? *Contributori:* ? *Artista originale:* ?
- **File:Figura4.2MQWIT.svg** *Fonte:* <http://it.wikitolearn.org/images/it/f/f6/Figura4.2MQWIT.svg> *Licenza:* ? *Contributori:* ? *Artista originale:* ?
- **File:Figura4.3MQWIT.svg** *Fonte:* <http://it.wikitolearn.org/images/it/6/66/Figura4.3MQWIT.svg> *Licenza:* ? *Contributori:* ? *Artista originale:* ?
- **File:Figura4.4MQWIT.svg** *Fonte:* <http://it.wikitolearn.org/images/it/7/79/Figura4.4MQWIT.svg> *Licenza:* ? *Contributori:* ? *Artista originale:* ?
- **File:Figura4.5MQWIT.svg** *Fonte:* <http://it.wikitolearn.org/images/it/d/de/Figura4.5MQWIT.svg> *Licenza:* ? *Contributori:* ? *Artista originale:* ?
- **File:Figura4.6bisMQWIT.svg** *Fonte:* <http://it.wikitolearn.org/images/it/7/73/Figura4.6bisMQWIT.svg> *Licenza:* ? *Contributori:* ? *Artista originale:* ?
- **File:Figura4.7MQWIT.svg** *Fonte:* <http://it.wikitolearn.org/images/it/5/59/Figura4.7MQWIT.svg> *Licenza:* ? *Contributori:* ? *Artista originale:* ?



12.3 Licenza dell'opera

- [Project:Copyright Creative Commons Attribution Share Alike 3.0 & GNU FDL]
- [Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0](#)

