

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI
BOLOGNA

SCUOLA DI SCIENZE

Corso di Laurea Magistrale in Matematica

**Aspetti Matematici Elementari
della Meccanica Quantistica**

Relatore:
Chiar.mo Prof.
Sandro Graffi

Presentata da:
Cristina Pippi

Sessione Unica
Anno Accademico 2017/2018

*“Non solo Dio gioca a dadi,
ma li getta laddove non possiamo vederli.”*

Richard Feynman

Indice

1	Il preludeo della meccanica quantistica	1
1.1	Il dualismo onda - particella	1
1.2	L'equazione di Schrödinger	9
1.2.1	L'equazione di Schrödinger per una singola particella	9
1.2.2	L'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo	13
1.2.3	L'interpretazione fisica della funzione d'onda	15
1.2.4	L'equazione di Schrödinger per un sistema di particelle	18
1.2.5	Relazione tra l'equazione di Schrödinger e la funzione Hamiltoniana classica; l'equazione di Hamilton-Jacobi	20
1.2.6	Equazione d'onda per un sistema di particelle cariche in un campo elettromagnetico classico	23
1.3	Quantizzazione dell'energia	25
1.3.1	Quantizzazione come problema agli autovalori	26
2	La Funzione d'onda	29
2.1	Pacchetti d'onda	29
2.2	L'interpretazione probabilistica della teoria delle onde di materia	34
2.3	La funzione d'onda e la quantità di moto	41
2.3.1	Quantità di moto per particelle libere	41
2.3.2	Quantità di moto delle particelle di un sistema	44
2.3.3	La funzione d'onda di un insieme di particelle	45

3	Problemi unidimensionali	49
3.1	Lo spettro di H	51
3.2	Potenziali periodici	57
4	Alcune soluzioni dell'equazione	62
4.1	La buca di potenziale infinita	62
4.2	L'oscillatore armonico	66
A	Notazione e definizioni di base	79
B	Condizioni matematiche	83
	Bibliografia	90

Elenco delle figure

1.1	$ \Psi ^2$	16
2.1	Pacchetto d'onda	30
3.1	Un esempio dello spettro di $H = -(d^2/dx^2) + U(x)$	53
3.2	Struttura a banda di $\sigma_p(H)$	60
3.3	Esempio di un potenziale periodico: il modello di Kronig-Penney.	60
4.1	Potenziale	67
4.2	Funzioni d'onda e potenziale dell'oscillatore armonico quantistico.	70

Capitolo 1

Il preludio della meccanica quantistica

1.1 Il dualismo onda - particella

Il dualismo onda-particella è il concetto fondamentale della fisica quantistica; per questa parte iniziale seguirò la trattazione di Edwin C. Kemble, “*The fundamental principles of quantum mechanics with Elementary Applications*” [1], poiché particolarmente illuminante.

Perché la luce agisce sotto certi aspetti come un insieme di corpuscoli e sotto talaltri come un fenomeno ondulatorio?

Ha questa domanda una relazione con la natura della materia, corpuscolare a livello microscopico ma continua invece a livello macroscopico?

É proprio nella ricerca della risposta a queste due domande che, come vedremo, risiede l'importanza dell'analogia ottica nella meccanica ondulatoria.

Iniziamo la nostra analisi della teoria quantistica esaminando preliminarmente le proprietà della radiazione elettromagnetica.

Il risultato del conflitto tra la teoria ondulatoria e la teoria corpuscolare della luce, che risaliva a Newton ed era stata resuscitata dall'ipotesi del fotone di Einstein, fino al 1924 era un sostanziale pareggio. Da una parte l'elettromagnetismo di Maxwell, teoria ondulatoria, dava una dimostrazione semplice e precisa dei fenomeni di interferenza, diffrazione, e dispersione; dall'altra la teoria corpuscolare rendeva conto delle leggi fondamentali dell'effetto fotoelettrico e dell'effetto Compton.

Per ottenere una teoria della luce soddisfacente, si deve formulare una descrizione del suo comportamento che ne inglobi le caratteristiche da entrambi i punti di vista. Come primo passo verso la formulazione di tale descrizione, osserviamo che una questione simile era sorta molto tempo prima in relazione alla materia: nel macroscopico essa ha proprietà descritte dal continuo; in particolare, può essere veicolo di onde sonore che agiscono come onde in un continuo. Tuttavia, nei gas a bassa densità, si considera la materia come molecolare nella struttura.

Esperimenti fatti su tali gas favoriscono l'ipotesi molecolare e sono considerati cruciali poiché la materia ad alta densità deve in ogni caso agire come un continuo. Analogamente, le proprietà corpuscolari della radiazione, se esistono, dovranno essere più evidenti se i corpuscoli sono di grande energia e pochi in numero, come nel caso di un fascio di raggi-X a bassa intensità.

D'altra parte, per ottenere una prova delle predizioni della teoria ondulatoria si deve avere una prova dell'assorbimento di una quantità di luce contenente, sulla base della teoria corpuscolare, un numero molto elevato di fotoni. Così si potrà dire che gli esperimenti di interferenza mostrano che statisticamente la luce ha le proprietà di un'onda, e senza in alcun modo confutare la sua struttura corpuscolare.

In altre parole, gli esperimenti che inizialmente erano considerati come prove contro la teoria corpuscolare, ora mostrano solo che le proprietà individuali dei corpuscoli sono diverse da quelle attese per analogia con la meccanica

classica.

Ammettiamo pertanto come postulato iniziale l'ipotesi dell'atomicità della radiazione. Come secondo postulato assumiamo, in accordo con l'esperienza, che la teoria ondulatoria dia una descrizione corretta della distribuzione media dell'intensità della radiazione negli esperimenti ordinari di interferenza e diffrazione.

Così, nel predire o descrivere i risultati degli esperimenti ottici, facciamo uso di entrambi i concetti appena citati e usiamo le relazioni tra l'energia E e l'impulso p con la frequenza ν e la lunghezza d'onda λ , data da Einstein la prima e da de Broglie la seconda:

$$E = h\nu \quad (1.1)$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (1.2)$$

dove con $h = 6.63 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{sec}$ denoto la costante di Planck.

Queste equazioni significano che la radiazione, che si assume monocromatica dal punto di vista della teoria delle onde, è costituita da pacchetti indivisibili e discreti di energia, chiamati **fotoni**, o **quanti di luce**, ognuno di energia $E = h\nu$, e impulso come definito in (1.2). Mentre nella meccanica classica tutte le grandezze possono assumere un insieme di valori continuo, la meccanica quantistica prevede solo un insieme discreto di valori multipli di un valore fondamentale non ulteriormente scomponibile (il quanto). L'esempio fondamentale è la quantizzazione dell'energia, ovvero il fatto che gli elettroni di un atomo possono trovarsi solo in certi livelli energetici (questo concetto verrà ripreso nella sezione 1.3, dedicata al modello di Bohr).

Le equazioni (1.1) e (1.2), unite alla teoria di Maxwell, non rispondono a tutte le domande riguardanti l'interazione di luce e materia, ma ciò non è nemmeno previsto se prescindiamo da una teoria, ancora da sviluppare, ri-

guardante la materia; mentre descrivono il comportamento dualistico della luce. Inoltre, i presupposti portano con loro l'ammissione tacita od esplicita che i modelli deterministici siano di scarsa utilità nel trattare il problema delle radiazioni.

Dal determinismo al probabilismo

Probabilismo e indeterminismo si inseriscono nella teoria della luce quando si presuppone che la distribuzione di corpuscoli discreti nello spazio sia calcolata per mezzo di funzioni d'onda continue. **Questo può significare soltanto che l'intensità della luce con frequenza ν in ogni piccolo volume rappresenti una misura del numero probabile di fotoni di energia $h\nu$ nel volume dato [1].**

Corrispondente a questo indeterminismo teorico, vi è un indeterminismo mentale, evidenziato ad esempio, nell'esperimento di sparpagliamento casuale dei grani su una lastra fotografica. Il test ideale per determinismo o indeterminismo sarebbe di eseguire ripetutamente lo stesso esperimento con le condizioni iniziali esattamente controllate, e quindi vedere se i risultati combaciano. Poiché ciò risulta impossibile, possiamo solo esaminare i risultati in condizioni il più simili possibile e vedere se le variazioni dalla media dei risultati sono commisurate all'incertezza sulle condizioni iniziali.

Nel caso dei fotoni, il meglio che possiamo fare è lanciare un fascio di luce parallelo attraverso una piccola apertura (Esperimento della doppia fenditura, Davisson e Germer), e permettergli di cadere su una lastra fotografica (vedremo più avanti di cosa si tratta) [6].

Da un punto di vista pratico, il campo dell'ottica è indeterministico e deve rimanere così, a meno che non venga scoperta qualche nuova modalità

di esperimento che permetta un controllo più preciso di quello attuale sul comportamento dei fotoni. Se l'unione fra teoria corpuscolare e ondulatorio-statistica delineata sopra è corretta, nessuna tale modalità di esperimento può esistere.

Il progresso nella fisica teorica subì negli anni '20 del 1900 un nuovo impulso grazie alle fondamentali ipotesi di Louis de Broglie e Werner Heisenberg. Al primo, come accennato, si deve l'intuizione che la materia possa avere in sé le caratteristiche della radiazione, combinando così le proprietà delle onde con quelle dei corpuscoli. Al secondo dobbiamo, invece, la scoperta di uno schema per l'esatta descrizione dei sistemi dinamici atomici. Entrambe le supposizioni, nonostante la loro apparente incompatibilità, ebbero un valore fondamentale, a tal punto da fondersi in un'unica teoria, quella che adesso notoriamente chiamiamo *Meccanica Quantistica*.

Come si legge nel testo di Stewen W.Hawking e Roger Penrose "*La natura dello spazio e del tempo*" [2], un'ottantina di anni fa si aprì un'estesa e famosa controversia fra Niels Bohr e Albert Einstein proprio sulle fondazioni della meccanica quantistica; Einstein si rifiutava di accettare la tesi che essa fosse una teoria definitiva, poichè la trovava insufficiente dal punto di vista filosofico, e combatté una dura battaglia contro l'interpretazione ortodossa della Scuola di Copenaghen, rappresentata dallo stesso Bohr.

Anni e anni dopo, nel 1994, seguendo la scia di questa controversia, Stephen Hawking e Roger Penrose ebbero un dibattito, punto culminante di un programma di sei mesi all'"Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences" dell'Università di Cambridge. Esso rappresentò una seria discussione su alcune fra le idee principali riguardo la natura dell'universo.

Non occorre dire che non siamo ancora giunti a una conclusione definitiva: persistono ancora incertezze e contrasti, e c'è molto su cui discutere. In un certo senso, il dibattito tra Penrose e Hawking è una continuazione di

quella controversia, con Penrose che svolge il ruolo di Einstein e Hawking quello di Bohr. Oggi i problemi sono più complessi e più vasti, ma rappresentano come in passato una combinazione di argomenti tecnici e punti di vista filosofici.

La teoria quantistica, o la sua versione più complessa nota come “teoria quantistica dei campi”, è oggi altamente sviluppata e ha tecnicamente un grande successo, benchè ci siano ancora persone scettiche per motivi filosofici, come Penrose. Anche la relatività generale, la teoria della gravità di Einstein, ha superato la prova del tempo e può vantare un successo notevole, nonostante persistano gravi problemi concernenti il ruolo delle singolarità o dei buchi neri [2].

Seguendo quanto scritto nel trattato di E. Kemble “*The fundamental principles of quantum mechanics with elementary applications*”[1], oggi accettiamo di trattare la natura dualistica della radiazione come un dato di fatto, anzichè come qualcosa ancora da spiegare o mettere a punto. Coerentemente con le ipotesi di de Broglie, consideriamo la natura della materia come dualistica, arrivando quindi a trattare materia e radiazione in modo pressochè identico; ed è proprio questa fondamentale similarità tra le proprietà della materia e quelle della radiazione a formare una delle caratteristiche più persistenti dell’odierna fisica teorica.

Chiaramente le differenze permangono, tanto che per nostra immaginazione è difficile legare questi due modi di esistenza, ma sono molto più preponderanti le analogie, tanto da permetterci di usare le osservazioni sulla radiazione come guida per la costruzione di una teoria sulla materia. Le onde meccaniche di de Broglie e Schrödinger sono il risultato di questo ragionamento, e danno un metodo per approcciarsi alla teoria generale. Storicamente la formulazione delle equazioni d’onda di Schrödinger deriva dall’idea di de Broglie che applica il principio di relatività ristretta al problema della correlazione tra onde e particelle libere.

Vediamo nel dettaglio ciò di cui abbiamo parlato finora.

Nel 1923 Louis de Broglie studiò il problema riuscendo a ricavare la lunghezza d'onda delle onde di materia associate ad ogni corpuscolo. Essa è nota oggi come **lunghezza d'onda di de Broglie**; il suo ragionamento fu sostanzialmente il seguente: la relazione di Einstein $E = h\nu$ ci dice che all'onda elettromagnetica di frequenza ν è associato un corpuscolo di energia ad essa proporzionale, avente come costante di proporzionalità quella di Planck.

D'altra parte, E/c e l'impulso \vec{p} sono, rispettivamente, le componenti temporale e spaziali di un tetravettore nello spazio di Minkowski.

De Broglie pensò quindi che la covarianza relativistica dovesse necessariamente implicare che, come all'onda veniva associato un corpuscolo di energia pari alla costante di Planck moltiplicata per la frequenza, così al corpuscolo doveva essere associata un'onda.

Per trovare la lunghezza λ dell'onda di materia osserviamo che:

$$\frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (1.3)$$

Ciò accade poichè, per definizione, la lunghezza d'onda vale la velocità dell'onda divisa per la frequenza: $\lambda = \frac{c}{\nu}$. Date le considerazioni fatte sopra su E/c e p , l'ipotesi naturale per la lunghezza è assumere $p = \frac{h}{\lambda}$.

Riassumendo:

*se ammettiamo che all'energia venga associata un'onda elettromagnetica ($E = h\nu$), allora dovremo ammettere anche che all'impulso venga associata un'onda con **lunghezza d'onda di de Broglie**:*

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.4)$$

Cioè si assume che ad **ogni particella di massa m e velocità v sia associata un'onda, detta onda di materia, di lunghezza pari a $\lambda = \frac{h}{p}$.**

L'introduzione dell'onda di materia permette anche di enunciare un criterio empirico per stabilire a che livello di microscopicità entrino in gioco i fenomeni quantistici:

quando le dimensioni dell'ambiente sono confrontabili con la lunghezza d'onda di de Broglie dell'oggetto in moto, i fenomeni quantistici non possono essere trascurati.

Dunque, il suggerimento di de Broglie era che a livello microscopico si dovesse abbandonare il concetto di particella materiale individuale, e che la materia presentasse un comportamento ondulatorio.

Ma questa intuizione aveva conferme sperimentali? Fino a che punto?

Nel 1927 due fisici americani, Clinton Davisson e Lester Germer, fecero un esperimento tramite il quale confermarono che anche le particelle possedevano comportamenti ondulatori; l'esperimento era il seguente: fasci di elettroni venivano mandati, accelerati tramite un campo elettrico, contro un cristallo dietro al quale era posto uno schermo. Osservando lo schermo si notarono fenomeni di interferenza e rifrazione simili a quelli della luce. C'è un'incertezza riguardo al punto in cui ogni singolo grano fotografico sviluppabile sarà misurato con il diametro effettivo della parte illuminata della lastra. Questa incertezza può essere diminuita riducendo l'area dell'apertura. Ma, se l'apertura è troppo piccola, la diffrazione fa sì che l'area illuminata aumenti ancora una volta e presenti quindi una barriera completa ad una riduzione dell'incertezza sperimentale. A questo punto, allora, un controllo esatto del futuro è pressoché impossibile in un esperimento del genere. Se ciò è dovuto al fatto che le condizioni iniziali per i vari fotoni non possano essere esattamente ripetute, o al fatto che le condizioni iniziali non controllino esattamente il futuro, è una domanda del tutto futile, in quanto non sottoponibile ad un esame sperimentale.

Quindi gli sperimentatori conclusero che gli elettroni avevano comportamen-

to ondulatorio, e trovarono che la lunghezza d'onda era proprio pari a quella ipotizzata da de Broglie. Quasi contemporaneamente le loro conclusioni furono confermate da G. P. Thomson, fisico inglese.

Dunque la particella può comportarsi sia come onda che come corpuscolo: è questo il dualismo onda-particella, o onda-corpuscolo.

1.2 L'equazione di Schrödinger

1.2.1 L'equazione di Schrödinger per una singola particella

Una delle applicazioni più importanti e al tempo stesso più elementari della meccanica quantistica è quella che interessa un sistema costituito semplicemente da una particella libera, ossia da una particella non sottoposta all'azione di alcuna forza.

Rifacendoci alla trattazione di Kemble [1], analizziamo ora il caso 1-dimensionale e 3-dimensionale per quanto riguarda l'equazione di Schrödinger, per poi affrontare l'equazione dipendente dal tempo.

Caso 1 - dimensionale

Quando ci si trova di fronte a sistemi microscopici si deve abbandonare il concetto classico di particella localizzata e fare riferimento all'equazione di Schrödinger che risolta fornirà l'ampiezza di probabilità di trovare una particella nello spazio considerato. Vediamo di seguito di cosa si tratta.

Nel 1925 il fisico austriaco Erwin Schrödinger, all'epoca professore all'Università di Zurigo, si pose il problema di trovare l'ampiezza, da lui denotata

con $\psi(x)$, dell'onda di materia associata al corpuscolo, avente la lunghezza d'onda di de Broglie $\lambda = \frac{h}{p}$.

L'equazione che otterremo segue da considerazioni per plausibilità e per analogia, come avviene sovente per le scoperte importanti in fisica; seguiamo il ragionamento di Schrödinger originale, per trovare la sua equazione nel caso di un punto materiale di massa m mobile sull'asse delle x .

Ipotesi:

- (1) Supponiamo che l'onda di materia sia un'onda stazionaria monocromatica di ampiezza $\psi(x)$ che si propaga in un mezzo con indice di rifrazione $n(x) = \frac{2\pi}{\lambda(x)}$;
- (2) Supponiamo che la lunghezza dell'onda sia quella di De Broglie.

Per la prima ipotesi, sappiamo dall'ottica che l'ampiezza dell'onda deve soddisfare la seguente equazione:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + n^2(x)\psi(x) = 0. \quad (1.5)$$

Inoltre, poiché si tratta di onde di materia associate a un corpuscolo di massa m che si muove sulla retta sotto l'azione di una forza di potenziale $V(x)$, la conservazione dell'energia $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ permette come sappiamo di ricavare l'impulso del corpuscolo $p = \sqrt{2m[E - V(x)]}$.

Dalle due ipotesi precedentemente fatte si ottiene:

$$n^2 = \frac{(2\pi)^2}{\lambda(x)^2} = \frac{p^2}{h^2}(2\pi)^2 = \left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 2m[E - V(x)]. \quad (1.6)$$

Sostituendo in (1.5) si ottiene

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 2m[E - V(x)]\psi(x) = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - V(x)\psi(x) + E\psi(x) = 0 \quad (1.7)$$

da cui

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.8)$$

dove si è usata l'espressione $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. L'equazione (1.8) è l'*Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo unidimensionale*.

Essa è un'equazione differenziale lineare del secondo ordine, le cui incognite sono l'ampiezza $\psi(x)$ dell'onda stazionaria monocromatica e il valore dell'energia E .

Per una particella libera, $V = 0$, l'equazione di Schrödinger per gli stati stazionari indipendente dal tempo risulta quindi

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (1.9)$$

e le soluzioni dell'equazione sono

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (1.10)$$

in cui $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; questo implica che tutti i valori di energia positivi o nulli vengano ammessi.

Caso 3 - dimensionale

Per analogia al caso unidimensionale e tenendo presente che nel caso tridimensionale :

- la lunghezza d'onda di De Broglie è definita come

$$\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$$

- per la conservazione dell'energia :

$$|\vec{p}| = \sqrt{2m[E - V(x, y, z)]}$$

- l'indice di rifrazione è

$$n(x, y, z) = \frac{2\pi}{\lambda(x, y, z)}$$

L'equazione di Schrödinger tridimensionale indipendente dal tempo sarà la seguente equazione alle derivate parziali

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(x, y, z)\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (1.11)$$

Questa è la prima forma di equazione di Schrödinger per una singola particella mobile in \mathbb{R}^3 . Poiché il parametro variabile E entra nell'equazione in modo esplicito, la (1.11) comprende davvero un'intera famiglia di equazioni differenziali per ogni tipo di funzione potenziale V . Pertanto, ci si riferisce a volte alla (1.11) come *Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo*.

L'analogo in ottica della (1.11) è

$$\nabla^2\Psi = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi = -\frac{4\pi^2 n^2}{\lambda_0}\psi \quad (1.12)$$

dove n è, come prima, l'indice di rifrazione e λ è la lunghezza d'onda nel vuoto. In questa chiave anche la (1.5) è l'analogo in ottica della (1.9).

Così si può dire che la caratteristica essenziale dell'equazione di Schrödinger è che essa rende l'indice di rifrazione per le onde di materia proporzionale in ogni punto all'impulso che la particella avrebbe in quel punto, ovvero a $\sqrt{2m[E - V]}$.

1.2.2 L'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

Seguendo l'esposizione di E. C. Kemble [1], vediamo come l'equazione (1.11) sia ben posta in quanto permette di impostare l'indagine sui valori dell'energia. Tuttavia, nel caso in cui l'energia non si conservi, abbiamo bisogno di un'equazione differenziale generale che non contenga il parametro E o il suo equivalente ν .

Ad esempio, tale equazione differenziale diventa una necessità quando abbiamo a che fare con problemi in cui l'energia potenziale dipende dal tempo esplicitamente, o nei quali l'energia del sistema non è conservata.

Necessariamente, quindi, dovrà trattarsi di un'equazione non autonoma.

Per ricavarla, procederemo nel modo seguente.

Supponiamo che i valori della funzione d'onda siano numeri complessi o, equivalentemente, coppie di numeri reali; supponiamo poi che ogni funzione d'onda ammissibile sia una combinazione lineare di funzioni monocromatiche del tipo

$$\Psi = \psi(x, y, z) e^{\frac{2\pi i E t}{h}} \quad (1.13)$$

dove $i = \sqrt{-1}$ e $\psi(x, y, z) = A(x, y, z) e^{i\varphi(x, y, z)}$, con A e φ reali.

Allora possiamo riscrivere Ψ come numero complesso tramite la formula :

$$\Psi = A \cos\left[\frac{2\pi E t}{h} - \varphi\right] - i A \sin\left[\frac{2\pi E t}{h} - \varphi\right]. \quad (1.14)$$

Nel caso di un'onda monocromatica del tipo dell'equazione (1.13), il fattore di tempo esponenziale può essere eliminato tramite la (1.11), riottenendo l'equazione stazionaria:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + [E - V(x, y, z)]\psi = 0, \quad (1.15)$$

dove ritroviamo il fattore ψ che in precedenza abbiamo chiamato **ampiezza d'onda**.

Quando abbiamo a che fare con funzioni d'onda monocromatiche, una conoscenza di ψ è equivalente ad una conoscenza della funzione completa Ψ , poiché le due funzioni hanno lo stesso valore assoluto e soddisfano la stessa equazione differenziale. Così parleremo di ψ come una *funzione d'onda monocromatica indipendente dal tempo* o, senza alcuna ambiguità, semplicemente come funzione d'onda.

Possiamo adesso eliminare la E dalla (1.11) assumendo:

$$E\Psi = -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (1.16)$$

e ottenere così l'equazione d'onda dipendente dal tempo

$$\nabla^2\Psi - \frac{8\pi^2m}{\hbar^2}V\Psi + \frac{4\pi mi}{\hbar} \frac{\partial\Psi}{\partial t} = 0. \quad (1.17)$$

Quest'ultima equazione del primo ordine in t e del secondo ordine nelle coordinate spaziali si chiama *equazione di Schrödinger dipendente dal tempo* per una singola particella. Qualsiasi combinazione lineare di soluzioni dell'equazione (1.11) avente la forma (1.13) è una soluzione di (1.17).

1.2.3 L'interpretazione fisica della funzione d'onda

Non tutte le soluzioni delle equazioni (1.15) e (1.17) sono fisicamente ammissibili, e assumiamo che tutte le soluzioni fisicamente ammissibili della (1.17) possano essere espresse come combinazione delle soluzioni dell'equazione (1.13). Questa restrizione deriva dal fatto che le onde complesse definite prima sono più facilmente maneggiabili e adeguate ai bisogni del nostro problema, che è il seguente: formulare una descrizione matematica di un determinato tipo di onde che descriveranno la meccanica classica nei casi in cui gli effetti della diffrazione diventano trascurabili. Non è richiesto che ψ sia uno scalare piuttosto che un vettore. La funzione d'onda per onde sonore, per esempio, è uno scalare, mentre le onde elettromagnetiche della teoria di Maxwell consistono in due vettori reali 3-dimensionali. Dunque in nessuno dei due casi appena detti si può formulare una singola equazione del secondo ordine alle derivate parziali come la (1.17), che riassume le proprietà di onde monocromatiche (e non) in un mezzo di propagazione. Quindi, le onde complesse introdotte prima, considerate anch'esse in un mezzo di propagazione, sono matematicamente più semplici di quelle sonore o luminose.

Seguendo l'esposizione di E. C. Kemble [1], possiamo inoltre affermare che la libertà di usare onde complesse deriva dal fatto che, mentre l'intensità di queste onde, misurata tramite $|\Psi|^2$, ha un significato fisico, cioè quello di rappresentare il numero probabile di fotoni presenti in un dato volume, Ψ risulta invece non possederlo. Segue che il complesso coniugato di una qualsiasi funzione d'onda Ψ può servire, in modo più efficace, a descrivere la stessa situazione fisica. Noi indicheremo il coniugato di un qualsiasi numero complesso con un asterisco, ovvero

$$\bar{\Psi} = \overline{\psi}(x, y, z)e^{\frac{2\pi i Et}{k}}. \quad (1.18)$$

Figura 1.1: $|\Psi|^2$

Conseguentemente $\bar{\Psi}$ soddisfa l'equazione differenziale

$$\nabla^2 \bar{\Psi} - \frac{8\pi^2 m V}{h^2} \bar{\Psi} - \frac{4\pi m i}{h} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} = 0. \quad (1.19)$$

La scelta di Ψ (piuttosto che di $\bar{\Psi}$) come funzione d'onda è puramente convenzionale, poichè si otterrebbe lo stesso risultato scegliendo l'altra.

Torniamo al significato fisico delle onde Ψ . Nel caso di onde tridimensionali assumiamo che il quadrato del valore assoluto di Ψ , in qualsiasi punto spazio-temporale x, y, z, t , sia la misura della densità di probabilità che la particella considerata si trovi nell'intorno del punto x, y, z , al tempo t (Figura 1.1).

Indichiamo con dF la probabilità che la particella sia nell'elemento di volume $dx dy dz$. Rendiamo più esplicite l'ipotesi di cui sopra assumendo che

$$dF = A|\Psi|^2 dx dy dz = A\Psi\bar{\Psi} dx dy dz, \quad (1.20)$$

dove A è una costante o una funzione del tempo. Integrando su tutto lo spazio la probabilità che la particella sia da qualche parte è pari a 1. Cioè :

$$A \int \int \int_{-\infty}^{\infty} \Psi\bar{\Psi} dx dy dz = 1 \quad (1.21)$$

Se l'integrale $\int \int \int_{\infty} \Psi \bar{\Psi} dx dy dz$ convergesse ad un valore finito, esso sarebbe uguale al reciproco di A , e allora diremmo che Ψ è una funzione a *quadrato sommabile*. Ci sono molte soluzioni dell'equazione di Schrödinger che non soddisfano questa condizione, e per esse l'ipotesi (1.21) non è applicabile.

Le soluzioni di un'equazione d'onda che non sono a quadrato sommabile sono, però, di grande interesse matematico e fisico, e giocano un ruolo fondamentale nella teoria nel suo insieme.

Le funzioni d'onda a quadrato sommabile possono essere normalizzate al fine di eliminare la costante A dalla (1.21).

Se integrando $\Psi \bar{\Psi}$ otteniamo un valore costante, per esempio g^2 , allora sarà solo necessario definire una nuova funzione d'onda

$$\Psi_1 = \frac{\Psi}{g}, \quad (1.22)$$

che sarà anch'essa una soluzione dell'equazione d'onda. Allora Ψ_1 rappresenterà la stessa situazione fisica di Ψ e inoltre soddisferà la condizione di normalizzazione

$$\int \int \int_{\infty} \Psi_1 \bar{\Psi}_1 dx dy dz = 1. \quad (1.23)$$

L'essere costante di $\int \int \int_{\infty} \Psi \bar{\Psi} dx dy dz$ nel tempo è un corollario ovvio dell'esistenza di questo integrale nel caso di funzioni d'onda monocromatiche. Nel caso più generale esso può essere provato con l'ausilio di opportune restrizioni sul comportamento di Ψ all'infinito.

1.2.4 L'equazione di Schrödinger per un sistema di particelle

Da quanto scritto nel testo di E. C. Kemble [1], le equazioni (1.11) e (1.17) possono essere generalizzate senza difficoltà al caso di un sistema di n particelle che si muovono sotto l'azione di forze conservative. Tuttavia, la generalizzazione comporta una rottura importante con l'analogia ottica: in ottica una funzione d'onda nello spazio tridimensionale può descrivere il comportamento statistico di un qualsiasi numero di fotoni (essi, apparentemente, non esercitano forze l'uno sull'altro). Deduciamo, dunque, che la stessa funzione d'onda può essere usata per descrivere il comportamento di uno o più fotoni. Nel caso dei corpuscoli, invece, dobbiamo considerare le forze che esercitano le particelle le une sulle altre. In un sistema di n particelle il moto di ognuna dipende da tutte le coordinate, dal momento che l'energia potenziale V è funzione di tutte le coordinate.

Così la funzione d'onda ψ , che descrive il comportamento di un sistema di n particelle, dipende da $3n$ coordinate e dal tempo. Essa vive, dunque, in uno spazio $(3n+1)$ -dimensionale, in cui ogni punto rappresenta una possibile configurazione dell'intero sistema in un determinato istante.

La generalizzazione delle due equazioni (1.11) e (1.17) ad un sistema di n particelle può avvenire con l'ausilio della forma appropriata del Principio di minima azione* e con un'estensione adeguata del Principio di Fermat† ad onde $3n$ -dimensionali.

*La traiettoria di una particella di massa m , energia E , energia cinetica T che si muove da un punto A ad un punto B in un campo di forze descritto in termini di un potenziale $V(r)$ è determinato dal Principio di minima azione: $\delta \int_A^B 2T dt = \delta \int_A^B \sqrt{2m[E - V(r)]} ds = 0$. t e s sono, rispettivamente, il tempo e la lunghezza del cammino lungo la traiettoria della particella. L'impulso che la particella ha in r quando l'energia è E è $p(r, E) = \sqrt{2m[E - V(r)]}$; quindi il principio può essere scritto nella forma: $\delta \int_A^B p(r, E) ds = 0$, $E = \text{costante}$ [3].

†Principio di Fermat: di tutti i possibili cammini che un raggio di luce può percorrere per andare da un punto a un altro, esso segue il cammino che richiede il tempo più breve [6].

Limitiamoci però alla sola analisi dell'equazione tridimensionale e scriviamo la (1.11) nella forma:

$$\left(\frac{1}{m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi + \frac{8\pi^2}{h^2}[E - V(x, y, z)]\Psi = 0 \quad (1.24)$$

Osserviamo che ogni coordinata è presente nell'equazione tramite il potenziale V e anche tramite il corrispondente operatore $\frac{1}{m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, $\frac{1}{m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ o $\frac{1}{m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Supponiamo di conoscere il potenziale V e di volerlo usare nell'equazione. La procedura ovvia per generalizzare la (1.24) è di aggiungere un operatore differenziale corrispondente per ogni coordinata aggiunta. Consideriamo le coordinate cartesiane ordinarie tridimensionali delle particelle come una singola successione x_1, x_2, \dots, x_{3n} e le masse corrispondenti m_1, m_2, \dots, m_{3n} , dove naturalmente le tre masse di una stessa particella sono uguali.

Vediamo allora le equazioni risultanti dalle generalizzazioni di (1.11) e (1.17):

$$\left(\sum_{k=1}^{3n} \frac{1}{m_k} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}\right)\Psi + \frac{8\pi^2}{h^2}[E - V(x_1, \dots, x_{3n})]\Psi = 0 \quad (1.25)$$

$$\left(\sum_{k=1}^{3n} \frac{1}{m_k} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}\right)\Psi - \frac{8\pi^2 V(x_1, \dots, x_{3n})}{h^2}\Psi + \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0. \quad (1.26)$$

Implicita nelle suddette estensioni delle equazioni d'onda è l'assunzione che l'energia totale del sistema di particelle sia sempre collegata al tempo dalla relazione

$$E\psi = -i\frac{h}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (1.27)$$

1.2.5 Relazione tra l'equazione di Schrödinger e la funzione Hamiltoniana classica; l'equazione di Hamilton-Jacobi

Seguendo l'esposizione di E. C. Kemble [1], vediamo come l'equazione (1.25) sia correlata, formalmente, all'Hamiltoniana classica per il sistema in esame, e possa essere dedotta tramite il seguente ragionamento.

Iniziamo impostando l'equazione per l'energia usando l'Hamiltoniana in coordinate cartesiane:

$$H(p, q) = \sum_{k=1}^{3n} \frac{p_k^2}{2m_k} + V(x_1, \dots, x_{3n}) = E. \quad (1.28)$$

Come secondo passo trasformiamo ogni addendo dell'equazione (1.28) in un operatore, tramite le sostituzioni seguenti:

$$p_k \rightarrow \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad k = 1, 2, \dots, 3n \quad (1.29)$$

$V \rightarrow$ operazione di moltiplicazione tramite V ,

$E \rightarrow$ operazione di moltiplicazione tramite E .

Infine, facciamo agire ogni membro dell'equazione su

$$\psi(x_1, \dots, x_{3n}, t) \quad (1.30)$$

ottenendo, così, un'equazione differenziale equivalente alla (1.25), espressa solitamente nella forma:

$$H\left(\frac{\partial}{\partial x_k}, x_k\right)\psi = E\psi, \quad (1.31)$$

dove $H(\partial/\partial x_k, x_k)$ corrisponde all'operatore ottenuto dall'Hamiltoniana classica tramite le sostituzioni di cui sopra. D'ora in avanti indicherò questo

operatore con il simbolo H .

Andiamo adesso a mostrare il nesso tra l'equazione di Schrödinger e l'equazione di Hamilton-Jacobi; essa ha due forme simili alle (1.25) e (1.26) e, nel caso in cui la funzione Hamiltoniana H non dipenda esplicitamente dal tempo, essa rimane costante durante qualsiasi moto naturale del sistema e verrà identificata con l'energia del sistema.

La *prima forma dell'equazione di Hamilton-Jacobi* è ottenuta dall'equazione $H(p, q) = E$ tramite la sostituzione

$$p_k \rightarrow \frac{\partial S}{\partial q_k}, \quad k = 1, 2, \dots, N,$$

in cui q_1, q_2, \dots, q_N sono coordinate generalizzate qualunque.

L'equazione differenziale non omogenea del primo ordine così ottenuta è

$$H\left(\frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_N}, q_1, \dots, q_N\right) = E, \quad (1.32)$$

e una soluzione di essa è chiamata "azione", sebbene non corrisponda alla definizione di integrale di azione del principio di minima azione data in precedenza[‡].

La *seconda forma dell'equazione di Hamilton-Jacobi* è applicabile perfino nel caso in cui H comprenda t esplicitamente e l'energia non si conservi; essa è ottenuta dall'equazione $H(p, q, t) = E$ tramite la sostituzione

$$p_k \rightarrow \frac{\partial A}{\partial q_k}, \quad k = 1, 2, \dots, N$$

e eguagliando l'espressione risultante a $-\partial A/\partial t$, cioè

$$H\left(\frac{\partial A}{\partial q_1}, \frac{\partial A}{\partial q_N}, q_1, \dots, q_N, t\right) = -\frac{\partial A}{\partial t}. \quad (1.33)$$

Ecco che troviamo il sorprendente parallelismo tra l'equazione classica e

[‡]Valore dell'integrale d'azione: $\int_A^B 2T dt$.

l'equazione d'onda

$$H\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_N}, x_1, \dots, x_N\right) \Psi = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.34)$$

L'apparente parallelismo formale tra l'equazione d'onda generale (equazione (1.34)) e la seconda forma dell'equazione di Hamilton-Jacobi (equazione (1.33)) ci fornisce le basi per provare un altro più grande parallelismo: quello tra la meccanica classica e la meccanica quantistica, nel caso in cui siamo fuori dal campo del principio di minima azione, ovvero nel caso di sistemi non conservativi in cui le forze dipendono dalla velocità, oppure sono funzioni esplicite del tempo.

Se l'operatore Hamiltoniano $H\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, q\right)$ è reale, le due scelte sono equivalenti, come indicato dalla (1.19); mentre, nel caso più generale di un operatore Hamiltoniano complesso, come quello introdotto nella (1.36), le due scelte non sono equivalenti.

Al fine di mantenere il parallelismo tra la (1.33) e la (1.34), in questi casi è necessario usare le sostituzioni $E \rightarrow -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}$, $p_k \rightarrow \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}$, oppure cambiare tutti i segni. L'impulso coniugato per t in questo nuovo insieme di coordinate è E , e siccome $+\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k}$ viene sostituito con l'impulso coniugato per x_k , si potrebbe pensare di sostituire $+\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}$ con E , ma ciò risulta errato poichè l'operatore Hamiltoniano dell'equazione Hamiltoniana (1.34) non è stato sottoposto alla trasformazione di cui sopra. E non è il coniugato di t quando le variabili indipendenti sono q_1, \dots, q_N , e noi non possiamo attuare sostituzioni che corrispondono a due diversi insiemi di variabili indipendenti all'interno della stessa equazione.

1.2.6 Equazione d'onda per un sistema di particelle cariche in un campo elettromagnetico classico

Sempre seguendo il testo di E. C. Kemble [1], parliamo adesso dell'equazione d'onda per un sistema di particelle cariche in un campo elettromagnetico classico.

Iniziamo costruendo l'appropriata funzione Hamiltoniana classica in coordinate cartesiane, per poi convertirla in un operatore come prima, al fine di usare tale operatore per ottenere un'equazione del tipo di (1.34). Se il campo esterno varia con il tempo, l'Hamiltoniana coinvolgerà esplicitamente t e avremo a che fare con un caso in cui l'energia non verrà conservata.

Consideriamo un sistema di n particelle cariche che si muovono in un campo elettromagnetico classico, con potenziale scalare $\Phi(x, y, z, t)$ e potenziale vettore $\vec{\Omega}(x, y, z, t)$. Siano $\Omega_x^{(j)}, \Omega_y^{(j)}, \Omega_z^{(j)}$ le componenti del potenziale vettore nel punto x_j, y_j, z_j dove si trova la j -esima particella. Siano, poi, m_j e e_j rispettivamente la massa e la carica della particella in considerazione.

La funzione Hamiltoniana cercata assumerà la forma

$$H(p, x, t) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{1}{2m_j} \right) \left[\left(p_x^{(j)} - \frac{e_j}{c} \Omega_x^{(j)} \right)^2 + \left(p_y^{(j)} - \frac{e_j}{c} \Omega_y^{(j)} \right)^2 + \left(p_z^{(j)} - \frac{e_j}{c} \Omega_z^{(j)} \right)^2 \right] + V(x_1, \dots, z_n) + \sum_{j=1}^n e_j \Phi^{(j)}. \quad (1.35)$$

Con V mi riferisco, come nel Capitolo 1, all'energia potenziale interna del sistema, e Φ comprende solo la parte esterna del potenziale scalare totale.

Attuando le sostituzioni $p_x^{(j)} \rightarrow \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_j}$, etc, otteniamo l'operatore Hamiltoniano desiderato

$$H\left(\frac{\partial}{\partial x}, x, t\right) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{1}{2m_j} \right) \left[\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{e_j}{c} \Omega_x^{(j)} \right)^2 + \dots \right] + V + \sum_{j=1}^n e_j \Phi^{(j)}. \quad (1.36)$$

Inserendo l'espressione precedente nella (1.34), deduciamo la seguente generalizzazione dell'equazione di Schrödinger

$$\sum_{j=1}^n \left(\frac{1}{2m_j} \right) \left[\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{e_j \Omega_x^{(j)}}{c} \right)^2 + \left(\frac{h}{2m_j} \frac{\partial}{\partial y_j} - \frac{e_j \Omega_y^{(j)}}{c} \right)^2 + \left(\frac{h}{2m_j} \frac{\partial}{\partial z_j} - \frac{e_j \Omega_z^{(j)}}{c} \right)^2 \right] \Psi + V\Psi + \sum_{j=1}^n e_j \Phi^{(j)} \Psi = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.37)$$

$\vec{\Omega}$ e Φ soddisfano la condizione di continuità

$$\operatorname{div} \vec{\Omega} + \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0,$$

allora la (1.37) assume la forma

$$\sum_{j=1}^n \frac{1}{m_j} \left[\nabla_j^2 \Psi - \frac{4\pi i e_j}{hc} \vec{\Omega}^{(j)} \cdot \nabla_j \Psi + \frac{4\pi i e_j}{hc^2} \frac{\partial \Phi^{(j)}}{\partial t} \Psi \right] - \frac{8\pi^2}{h^2} V' \Psi + \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0, \quad (1.38)$$

in cui

$$V' \equiv V + \sum_{j=1}^n \left(e_j \Phi^{(j)} + \frac{e_j^2}{2c^2 m_j} |\vec{\Omega}^{(j)}|^2 \right)$$

e

$$\vec{\Omega}^{(j)} \cdot \nabla_j \Psi \equiv \vec{\Omega}_x^{(j)}(x_j, y_j, z_j) \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} + \vec{\Omega}_y^{(j)}(x_j, y_j, z_j) \frac{\partial \Psi}{\partial y_j} + \vec{\Omega}_z^{(j)}(x_j, y_j, z_j) \frac{\partial \Psi}{\partial z_j}.$$

Nel caso di un sistema di onde piane, o di un campo elettromagnetico dato dalla sovrapposizione di queste, è sempre possibile scegliere un potenziale vettore $\vec{\Omega}$ con divergenza nulla e imporre $\Phi = 0$. Inoltre, il termine $\sum \frac{e_j^2}{2c^2 m_j} |\vec{\Omega}^{(j)}|^2$ è spesso così piccolo da poter essere trascurato.

Pertanto, l'equazione d'onda per un sistema di particelle interagente con un

campo elettromagnetico classico si riduce a

$$\sum_{j=1}^n \frac{h^2}{8\pi^2 m_j} \left[\nabla_j^2 \Psi - \frac{4\pi i e_j}{hc} \vec{\Omega}^{(j)} \cdot \nabla_j \Psi \right] - V\Psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.39)$$

1.3 Quantizzazione dell'energia

Riprendiamo il discorso aperto all'inizio di questo capitolo a proposito della quantizzazione dell'energia, in gergo la scoperta dei *livelli energetici*.

In altre parole, secondo la meccanica quantistica, l'energia di ogni emettitore o assorbitore elementare della radiazione può non assumere tutti i valori fra 0 e $+\infty$, e dunque può non essere emessa o assorbita in forma continua; può farlo anche solo in forma discreta, legata alla costante di Planck.

All'inizio del XX secolo lo studio dell'atomo aveva raggiunto un buon grado di conoscenza. Erano noti, infatti, moltissimi spettri di emissione di luce proveniente dagli atomi. Una delle prime osservazioni interessanti avvenne nel 1884 quando J. J. Balmer, fisico svizzero, osservò che alcune righe dello spettro di emissione dell'idrogeno non erano continue, ma discrete: la distanza fra l' n -esima riga e la $(n + 1)$ -esima era proporzionale a $\frac{1}{n^3}$.

Rimaneva, però, il problema di come spiegare queste osservazioni secondo la teoria elettromagnetica dell'emissione e dell'assorbimento della luce.

Verso la fine del XIX secolo le prove sperimentali di H. R. Hertz e A. Righi[§] avevano confermato la natura elettromagnetica della radiazione luminosa prevista da Maxwell e successivamente si arrivò a capire che la comprensione dell'emissione e assorbimento dell'energia radiante doveva essere ricondotta a comprendere il medesimo fenomeno a livello del singolo atomo, conseguenza

[§]Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894), fisico del XIX secolo, scoprì e generò le onde elettromagnetiche (onde Hertziane) confermando la teoria elettromagnetica di Maxwell. Augusto Righi (1850-1920), Professore all'Università di Bologna dal 1889, provò sperimentalmente che le onde elettromagnetiche Hertziane mostravano i medesimi fenomeni di interferenza e di diffrazione delle onde luminose.

naturale della scoperta della materia come aggregato di una moltitudine di atomi identici.

Fu l'esperienza di Franck e Hertz del 1914 (essi osservarono direttamente il fenomeno della quantizzazione che avveniva secondo la condizione delle frequenze di Bohr[¶]) a segnare la prima conferma sperimentale dell'esistenza dei quanti di energia. Da quel momento in poi il fenomeno della quantizzazione dell'energia non fu più messo in discussione.

1.3.1 Quantizzazione come problema agli autovalori

Nel suo lavoro del 27 Gennaio 1926, intitolato “*Quantisierung als Eigenwertproblem*” [4], Schrödinger esordiva così :

“In questa comunicazione posso anzitutto mostrare nel caso piu semplice dell' atomo di idrogeno (non relativistico e imperturbato) che la consueta prescrizione di quantizzazione si puo sostituire con un altro requisito, nel quale non si parla di numeri interi. Invece l'interezza compare nello stesso modo naturale, come l'interezza del numero dei nodi di una corda musicale oscillante. La nuova interpretazione è passibile di generalizzazione e, come credo, giunge assai in profondo nella vera essenza delle prescrizioni quantiche”.

(Cit. Schrödinger)

Perché intitolò il suo lavoro “*Quantizzazione come problema agli autovalori*”?

Il motivo è che la sua equazione riesce a spiegare il fenomeno della quantizzazione identificando i livelli di energia discreti come autovalori dell'endomorfismo lineare generato in modo naturale dalla sua equazione.

Partiamo infatti dalla sua equazione, considerata per semplicità nel caso unidimensionale

[¶]Condizione sulle frequenze di Bohr: un elettrone che salta dall'orbita n_1 all'orbita n_2 , con $n_1 > n_2 \Rightarrow E_{n_1} > E_{n_2}$ emette radiazione elettromagnetica sotto forma di un fotone di energia $h\nu = E_{n_1} - E_{n_2}$; può invece risalire dall'orbita n_2 all'orbita n_1 se assorbe radiazione elettromagnetica sotto forma di un fotone della medesima energia.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (1.40)$$

e osserviamo che il membro a sinistra dell'equazione costituisce l'azione dell'operatore lineare H sulla funzione $\psi(x)$, dove, formalmente:

$$H := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (1.41)$$

H è l'operatore differenziale visto nella sezione 1.2.5, detto operatore Hamiltoniano, che facciamo agire, per semplicità, sul dominio $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, il quale altro non è che l'insieme delle funzioni indefinitamente derivabili che tendono a zero all'infinito assieme alle loro derivate più velocemente di ogni potenza inversa di $|x|$.

Se $\psi(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, H agisce così

$$\psi(x) \mapsto H\psi := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \quad (1.42)$$

e si vede subito quanto segue:

- H lascia $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ invariato, cioè $H\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R})$, se $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$; H è dunque un endomorfismo di $\mathcal{S}(\mathbb{R})$
- H agisce linearmente, cioè: se $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, e $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$, $V(\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2) = \alpha_1V\psi_1 + \alpha_2V\psi_2$, e, per la linearità di qualunque derivazione:

$$H(\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2) = \alpha_1H\psi_1 + \alpha_2H\psi_2 \quad (1.43)$$

Quindi possiamo riscrivere l'equazione di Schrödinger nel modo seguente:

$$H\psi = E\psi \quad (1.44)$$

e reinterpretarla affermando di cercare quei particolari vettori in $L^2(\mathbb{R})$ tali che su di essi H agisca come la moltiplicazione per un numero, e questa non

è altro che la definizione di autovalore e autovettore dell'algebra lineare.

Pertanto, la (1.44) altro non è che un'equazione agli autovalori per un operatore differenziale lineare. Si dimostra, inoltre, che per certe classi di potenziali $V(x)$ essa è risolubile solo per un insieme discreto di valori di E e si ritroverà, così, il fenomeno della quantizzazione dell'energia.

Capitolo 2

La Funzione d'onda

2.1 Pacchetti d'onda

Arrivati a questo punto, e secondo quanto si può leggere nel testo “*The fundamental principles of quantum mechanics with Elementary Applications*” [1], dobbiamo fare un passo indietro per poter proseguire con il parallelismo tra la meccanica newtoniana e la meccanica delle onde, già ipotizzato nell'impostazione dell'equazione di Schrödinger all'inizio della trattazione, e introdurre la teoria dei pacchetti d'onda, al fine di formulare un'interpretazione probabilistica più completa sulle onde Ψ e definire una relazione tra il moto di un corpo su grande scala e le onde di materia corrispondenti.

Come nella sottosezione 1.2.3, postuliamo che l'intensità delle onde di materia associate a una qualunque particella in qualsiasi punto x, y, z, t misuri la probabilità che la particella si trovi nelle vicinanze di x, y, z all'istante t . Allora, la particella dovrà essere associata a un disturbo dell'onda piana che si muove con essa lungo un cammino definito. Questi disturbi sono noti come **pacchetti d'onda** (Figura 2.1), perché possono essere analizzati come sovrapposizioni di infinite onde monocromatiche piane che coinvolgono una ristretta gamma di lunghezze d'onda.

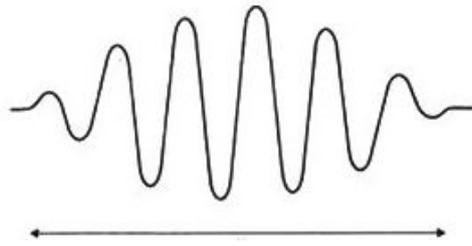


Figura 2.1: Pacchetto d'onda

Le ipotesi essenziali da richiedere a un disturbo d'onda in modo tale che esso costituisca un pacchetto d'onda sono:

- che esso occupi un volume ristretto
- che si muova ad una velocità definita
- che si muova in una direzione definita.

In una certa misura, questi requisiti risultano reciprocamente contraddittori: ad esempio, nel caso di un gruppo infinito di onde piane, la direzione del moto è perfettamente definita, ma il disturbo non è affatto localizzato.

Possiamo indurre una localizzazione parziale consentendo al raggio di incidere su un diaframma assorbente dotato di un'apertura che assumiamo essere circolare di raggio r . Questa localizzazione, tuttavia, è accompagnata da effetti di diffrazione che minano la definizione dell'onda.

Se il fascio iniziale è monocromatico e incide perpendicolarmente sul diaframma e se, inoltre, il raggio r è grande rispetto alla lunghezza d'onda, gli effetti della diffrazione saranno minimi; dunque, la direzione del moto rimarrà abbastanza definita. Nel caso ottico questo fenomeno è chiamato *propagazione rettilinea della luce*.

In alternativa, possiamo attuare una riduzione graduale di r , migliorando così la localizzazione del fascio nel piano del diaframma. Qui gli effetti della diffrazione si faranno sempre più importanti, fino ad arrivare al caso limite in cui r è molto più piccolo della lunghezza d'onda e in cui il fascio assume la forma di un pacchetto d'onda senza una direzione del moto precisa.

Allo stesso modo, possiamo localizzare il pacchetto d'onda longitudinalmente, se lo riduciamo a lunghezza d'onda finita. Se il pacchetto d'onda è monocromatico e abbastanza lungo da includere molte onde, allora viaggerà con una velocità abbastanza precisa anche in un mezzo di dispersione. La velocità della testa e della coda di un tale sistema finito non è, tuttavia, la stessa delle creste d'onda (**velocità di fase**), a meno che non siamo in presenza di un mezzo non dispersivo. La velocità del gruppo di onde nel suo insieme è chiamata **velocità di gruppo**, che altro non è che la velocità con cui si propagano le variazioni nella forma dell'ampiezza dell'onda nello spazio, essa si distingue dalla velocità di fase e dalla velocità delle onde singole.

Tuttavia, se il pacchetto è così piccolo da contenere un numero esiguo di onde, il gruppo non resta unito, ma si estende longitudinalmente procedendo come se fosse composto da elementi diversi che viaggiano a velocità diverse. Di conseguenza il secondo tipo di localizzazione di un disturbo dell'onda non deve essere effettuato troppo lontano, altrimenti sarà in conflitto con il primo requisito per un pacchetto d'onda, cioè quello riguardante il volume.

Rifacendoci a quanto scritto nel testo di Edwin C. Kemble [1], possiamo ideare disturbi dell'onda appropriati per un mezzo di dispersione che soddisfi tutti e tre i requisiti per un pacchetto d'onda, e un tale disturbo avrà necessariamente una lunghezza d'onda e una direzione del moto ben definite. **Inoltre, osserviamo che la mancanza di precisione nelle definizioni di posizione, lunghezza d'onda e direzione del moto di tali pacchetti deve essere correlata a una corrispondente mancanza di precisione nella posizione, quantità di moto e direzione del movimento del fotone o del corpuscolo associato alla materia.**

Quindi, la velocità classica e l'orbita della particella devono essere identificate con la velocità e con l'orbita del baricentro del pacchetto d'onda. Ecco così che la meccanica classica deve, infine, essere considerata un caso limite della meccanica dei pacchetti d'onda di materia.

Ne consegue che l'analogia tra il principio del tempo minimo (Principio di Fermat) e quello di minima azione mostra che l'orbita e la velocità orbitale di una particella su larga scala nella meccanica newtoniana sono identiche all'orbita e alla velocità orbitale di un pacchetto d'onda in un problema d'onda opportunamente definito.

Per fare uso della suddetta analogia dovremmo mostrare che:

(a) i pacchetti d'onda viaggiano lungo i raggi dell'ottica geometrica

(b) la velocità del pacchetto è uguale a quella della particella meccanica corrispondente.

Noi assumeremo, senza dimostrarla, la proposizione (a), e baseremo la nostra discussione riguardo la proposizione (b) sulla formula per la velocità di gruppo di un pacchetto finito di onde in un mezzo di dispersione omogeneo.

Denotando la lunghezza d'onda media (o interna) del gruppo (o pacchetto) con $\bar{\lambda}$ e la velocità di fase con w , l'espressione per la velocità di gruppo v_g è

$$v_g = w(\bar{\lambda}) - \bar{\lambda} \left(\frac{\partial w}{\partial \lambda} \right)_{\lambda=\bar{\lambda}}.$$

Usando la relazione tra lunghezza d'onda λ , frequenza ν e velocità di fase possiamo convertire velocemente l'espressione precedente in una forma più compatta,

$$\frac{1}{v_g} = \left[\frac{\partial}{\partial \nu} \left(\frac{1}{\lambda} \right) \right]_{\lambda=\bar{\lambda}}, \quad (2.1)$$

dove la differenziazione viene eseguita con ν, x, y, z che agiscono come variabili indipendenti.

Se l'energia e la lunghezza d'onda della particella sono collegate dalla relazione

$$\frac{C}{\lambda} = \frac{C\nu}{w} = p(E, x, y, z) = \sqrt{2m[E - V(x, y, z)]},$$

dove C è una qualsiasi funzione di ν , $p(E, x, y, z)$ è l'*impulso locale classico*^{*}, e ν , a sua volta, è una funzione di E ; se la velocità di gruppo viene identificata con la velocità v della particella, le due equazioni precedenti ci daranno

$$\frac{1}{v} = \frac{\partial}{\partial \nu} \left(\frac{p}{C} \right).$$

Siccome p è funzione di E, x, y, z , e le coordinate spaziali sono indipendenti da ν

$$\frac{1}{v} = -\frac{p}{C^2} \frac{dC}{d\nu} + \frac{1}{C} \frac{\partial p}{\partial E} \frac{dE}{d\nu}.$$

Ma

$$\frac{\partial p}{\partial E} = \frac{m}{p} = \frac{1}{v};$$

quindi

$$\frac{dE}{d\nu} - C = \frac{pv}{C} \frac{dC}{d\nu}. \quad (2.2)$$

Il prodotto pv dipende da x, y e z , ma il primo membro dell'equazione (2.2) è indipendente da queste variabili; quindi $dC/d\nu$ deve essere necessariamente nullo. C è una costante, e l'equazione (2.2) si riduce a

$$\frac{dE}{d\nu} = C = p\lambda. \quad (2.3)$$

La relazione lineare tra energia e frequenza così derivata suggerisce l'ipotesi che la relazione (1.1) ($E = h\nu$) di Einstein valga per la materia tanto quanto per la radiazione. Se assumiamo la validità della (1.1) per la materia, allora l'equazione (2.3) richiede che la relazione (1.2) si applichi anche alla materia.

La relazione così ottenuta tra l'impulso locale classico di una particella e la lunghezza delle onde di materia associate è stata prima suggerita da de Broglie (Eq. (1.2)), e poi confermata dagli esperimenti di diffrazione degli elettroni di Davisson e Germer.

^{*}Così chiamato al fine di distinguerlo dall'impulso (vero) della meccanica quantistica.

2.2 L'interpretazione probabilistica della teoria delle onde di materia

È importante notare che introducendo un vettore $\vec{\sigma}$, avente come modulo il numero d'onda angolare σ e come direzione e verso quelli della propagazione dell'onda, possiamo convertire l'equazione (1.2) nella forma vettoriale

$$\vec{p} = h\vec{\sigma}. \quad (2.4)$$

Chiameremo questo vettore $\vec{\sigma}$, relativo ad un'onda, come **vettore d'onda**, e chiameremo σ_x , σ_y e σ_z le sue componenti.

2.2 L'interpretazione probabilistica della teoria delle onde di materia

Avvalendoci del testo di E. C. Kemble [1] e del lavoro di E. Schrödinger [7], usiamo le conclusioni a cui siamo giunti nel Capitolo 1 e le precisazioni appena fatte al fine di approfondire l'interpretazione probabilistica della teoria. A tal proposito riprendiamo e riformuliamo le supposizioni fisiche fatte finora.

- Nella materia, così come nella radiazione, si combinano le proprietà delle onde con quelle dei corpuscoli della fisica classica. Possiamo riferirci alla materia come corpuscolare, a condizione che le leggi classiche del moto vengano sostituite con altre a carattere probabilistico e pensate per una *funzione d'onda* avente proprietà affini alle onde dell'ottica classica.
- Se nella meccanica classica lo *stato* di un sistema è definito dai valori delle coordinate e dei momenti di tutte le particelle coinvolte, nella teoria quantistica la descrizione dello stato del sistema più esatta possibile ci viene fornita dalla funzione d'onda ψ delle coordinate e del tempo, che determina la probabilità delle diverse posizioni e configurazioni per ogni valore del parametro t . Quindi diremo che sistemi caratterizzati

2.2 L'interpretazione probabilistica della teoria delle onde di materia 85

dalla stessa Ψ saranno in uno *stato soggettivo* comune; lo stato *oggettivo* o *vero* non ha, invece, ancora una definizione operativa.

Nel caso in cui la probabilità di avere valori molto grandi delle coordinate è sufficientemente piccola, Ψ è a quadrato sommabile e può essere normalizzata secondo la condizione

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 dx_1 dy_1 dz_1 = 1.$$

In questo caso la quantità $|\Psi|^2 dx_1 dy_1 dz_1$ viene interpretata come la probabilità del gruppo di configurazioni reciprocamente adiacenti associate all'elemento di volume $dx_1 dy_1 dz_1$ nello spazio di configurazione.

- Il moto dei corpi descritto dalla meccanica classica trova il suo corrispondente nel moto di pacchetti d'onda adeguati o funzioni ψ localizzate, composte da sovrapposizioni di onde elementari monocromatiche, generalmente piane e con una piccola gamma di frequenze.
- L'energia portata da ogni onda monocromatica e la frequenza dell'onda associata sono legate dalla formula di Einstein (1.1)

$$E = h\nu.$$

- L'impulso di una singola particella e il vettore d'onda $\vec{\sigma}$ sono legati dalla formula

$$\vec{p} = h\vec{\sigma}.$$

Questa relazione può essere estesa al caso di un sistema di n particelle, con \vec{p} e $\vec{\sigma}$ vettori $3n$ -dimensionali.

- Le funzioni d'onda che descrivono il comportamento di un sistema isolato di particelle che si muovono sotto l'azione di forze conservative sono soluzioni dell'equazione d'onda di Schrödinger dipendente dal tempo ((1.26)).

2.2 L'interpretazione probabilistica della teoria delle onde di materia 86

Analizziamo le sei ipotesi sopra elencate, cominciando dalle prime tre.

Le leggi probabilistiche e le probabilità di configurazione a cui ci riferiamo in questi postulati hanno come presupposto la possibilità di effettuare un numero elevato di esperimenti, nei quali vengono osservate le varie configurazioni e le altre proprietà del sistema. Infatti, dire che la probabilità di una configurazione A è α non significa nulla, a meno che non sia possibile effettuare un gran numero di prove per stabilirlo.

Se ciò è possibile, cioè se posso attuare tanti esperimenti quanti necessari, l'affermazione appena fatta significa che il numero di casi in cui abbiamo la configurazione A , rispetto ai casi possibili, è α . Una singola osservazione non può mai essere la prova di una legge probabilistica, ecco perchè molte leggi hanno senso solo se risultanti da un numero sufficientemente elevato di osservazioni.

Inoltre, se la probabilità di una configurazione è funzione del tempo, come abbiamo supposto, le osservazioni e le prove fatte per testarne la probabilità non possono essere svolte su un unico sistema, ma sarà necessario un insieme di sistemi indipendenti osservati nei tempi corrispondenti. Infatti, quando anche la probabilità non dipenda dal tempo, è necessario avere un insieme di sistemi indipendenti, poichè un'osservazione coinvolge il sistema osservato e il meccanismo osservante, che inevitabilmente vanno a modificare il comportamento futuro del sistema in esame.

I sistemi con i quali di solito abbiamo a che fare sono isolati o si muovono sotto l'azione di forze conosciute, che non comprendono quelle coinvolte per l'osservazione; allora la prima osservazione compiuta sul sistema ne modificherà, inevitabilmente, lo stato soggettivo in cui si trova. Questo ci porta a ricorrere all'uso degli insiemi microcanonici[†], al fine di verificare le predizioni delle nostre funzioni d'onda.

[†]In meccanica statistica, l'insieme microcanonico, è un insieme statistico che descrive i sistemi isolati, cioè quei sistemi che hanno un valore definito di energia, volume e numero di particelle

2.2 L'interpretazione probabilistica della teoria delle onde di materia 87

Quando siamo di fronte ad un tale insieme, possiamo dire che lo stato è definito e oggettivo, e la sua reazione agli esperimenti effettuati dipenderà soltanto dalla natura di essi e non dall'osservatore. Se la sua storia passata è stata tale da fornire il massimo delle informazioni riguardo al futuro, allora quella stessa storia determina una funzione d'onda che predice i risultati statistici di eventuali esperimenti futuri sull'insieme, tale da poter essere considerata per definire lo stato del sistema.

Infatti, quando un sistema fisico fa parte di un insieme microcanonico ed è dotato di una precisa funzione d'onda, possiamo dire che esso si trova in uno stato definito proprio da essa. Più in generale, lo stato del sistema può essere identificato con quello dell'insieme microcanonico di sistemi identici predisposti in modo che le storie passate (in $t = 0$) di tutti i costituenti dell'insieme siano le stesse, in modo che possano condizionare il comportamento futuro come se fossero il sistema originale.

La conoscenza della storia di un sistema prima di un certo istante è soggettiva, e potrà essere diversa per osservatori diversi dello stesso sistema. Per esempio, se due osservatori X e Y , con diversi dati storici, provano a predisporre il sistema al fine di comporre un insieme microcanonico formato da sistemi nello stesso stato, essi attueranno operazioni diverse, generando così tipi diversi di insiemi microcanonici. Poi, se saranno dei buoni fisici, potranno dedurre dai propri dati una funzione d'onda definita che descrive lo stato del sistema dal proprio punto di vista e predire correttamente il comportamento dell'insieme microcanonico relativo.

In generale, comunque, un esperimento basato su un singolo sistema non può né provare né confutare una qualsiasi funzione d'onda associata ad esso; ovvero, non c'è un modo generale per far sì che un terzo osservatore possa provare che uno dei due osservatori abbia torto e l'altro ragione.

Ecco perchè è meglio usare il termine "soggettivo" nel correlare una funzione d'onda ad un sistema specifico.

Rimane il fatto che, idealmente, le predizioni della meccanica quantistica do-

2.2 L'interpretazione probabilistica della teoria delle onde di materia

vrebbero essere testate da una serie di osservazioni su un insieme adeguato di sistemi completamente indipendenti, ognuno nella propria scatola o laboratorio.

Riportiamo adesso la nostra attenzione al quarto dei postulati precedenti, che possiamo interpretare in due modi alternativi.

Siccome la frequenza ν non assume un unico valore per le funzioni d'onda, interpreteremo l'equazione (1.1) come indicatrice di indeterminatezza per quanto riguarda l'energia di una particella associata a un pacchetto d'onda; oppure possiamo considerare il valore di ν che appare in questa equazione come valore medio per la funzione d'onda nel suo complesso. Noi sceglieremo la prima delle due alternative poichè più logica e naturale, in quanto stiamo cercando di costruire una teoria meccanica che corrisponde alla teoria dualistica della radiazione, e poichè è noto che i fotoni di un dato sistema di onde possano avere una varietà di energie. Inoltre la prima delle due affermazioni è più logica, poichè può essere provata come conseguenza del secondo postulato in relazione a una definizione sperimentale di energia cinetica.

Vediamo meglio di cosa si tratta.

Consideriamo una funzione d'onda data dalla somma di due disturbi Ψ_1 e Ψ_2 , ognuno dei quali forma uno specifico pacchetto d'onda con frequenza e direzione del moto definite. Nel caso ottico un tale disturbo può essere ottenuto sperimentalmente consentendo a un fascio di luce monocromatica di cadere su di un'apertura chiusa tramite un otturatore. Aprendo e chiudendo momentaneamente il foro, si forma un pacchetto principale che può essere suddiviso in due parti aventi lunghezze d'onda e direzioni del moto diverse. Se ad un disturbo di questo tipo è associata una particella, che sia un elettrone o un fotone, il secondo postulato all'inizio del capitolo richiede che la particella abbia una certa probabilità di muoversi con il primo pacchetto, e una complementare di muoversi secondo il pacchetto. Se un esperimento ci ha mostrato che la particella si muove con il pacchetto Ψ_1 , allora le as-

2.2 L'interpretazione probabilistica della teoria delle onde di materia

assegnare una certa energia ed un certo impulso, mentre se si trova in Ψ_2 , dovremo assegnarle una energia e un impulso diversi.

Quindi, in questo caso, la correlazione di energia e impulso con la funzione d'onda porta ad un risultato assurdo; e, dal momento che tra questo caso e quello di un pacchetto d'onda classico non c'è una differenza netta, concludiamo che valori unici di energia ed impulso non andrebbero assegnati a nessun pacchetto d'onda. D'altronde sappiamo, sempre tramite esperimento, che nel caso ottico un tale pacchetto contiene una vasta gamma di energie e impulsi possibili. Se il pacchetto si crea con un'apertura e un otturatore come descritto sopra, la diffrazione farà divergere la radiazione di una quantità che varia in modo inversamente proporzionale rispetto alla dimensione del foro. Se l'intensità è grande e l'apertura è piccola rispetto alla lunghezza d'onda, i fotoni procederanno in tutte le direzioni trasportando con sé gli impulsi diretti lungo il raggio vettore che ha origine nella fessura.

Allo stesso tempo, l'interruzione del fascio iniziale tramite la chiusura applicata distruggerà il suo carattere monocromatico e farà in modo che i fotoni si disperdano. Gli esperimenti di diffrazione che coinvolgono intensità molto basse mostrano che la distribuzione di energia sul modello è indipendente dall'intensità stessa; ne deduciamo che, se l'intensità della radiazione del pacchetto è così bassa che solo uno o due fotoni riescono a passare attraverso l'apertura, la probabilità relativa di ogni energia e direzione del moto è la stessa del caso in cui l'intensità sia molto alta.

La discussione di cui sopra conduce naturalmente a un'estensione del quinto postulato, cioè quello che relaziona l'impulso locale classico

$$\sqrt{2m[E - V(x, y, z)]}$$

con il numero d'onda locale $\sigma = 1/\lambda = \nu/w(x, y, z, \nu)$. Questi concetti sono applicabili, grosso modo, soltanto alle particelle classiche e alle onde monocromatiche. Nel caso di un insieme di particelle di diverse energie, il concetto di impulso locale classico diventa non ben definito, mentre quello di numero

2.2 L'interpretazione probabilistica della teoria delle onde di materia

d'onda locale diventa indefinito quando applicato a un pacchetto che rappresenta un tale insieme.

Per chiarire meglio le idee sostituiamo l'idea di impulso misurato con quella di impulso classico locale, e i concetti di numero d'onda sinusoidale e lunghezza d'onda con quelli di numero d'onda locale e lunghezza d'onda. Quindi ne deduciamo che un sistema di onde in una dimensione ha una lunghezza d'onda definita se, e solo se, è strettamente sinusoidale.

Allo stesso modo, diremo che un sistema di onde in tre dimensioni avrà un vettore d'onda definito $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ solo se esso assume la forma di un'onda sinusoidale piana del tipo

$$\psi = F(t)e^{2\pi i(x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z)}.$$

Siccome i pacchetti d'onda sono generalmente rappresentabili dagli integrali di Fourier[‡], possiamo considerarli come composti da onde con un'infinità di lunghezze d'onda e numeri d'onda, così come un'infinità di frequenze.

Nel caso limite di un insieme di particelle pesanti e tale che l'incertezza su posizione, energia e impulso sia minimizzata, il valore dell'impulso ottenuto tramite la misurazione converge al valore dell'impulso classico locale che corrisponde alla posizione media e all'energia delle particelle dell'insieme.

Allo stesso modo, le lunghezze d'onda e i numeri d'onda dei pacchetti d'onda che rappresentano un insieme di questo tipo convergono alla lunghezza d'onda locale per la frequenza media del pacchetto misurata nel centro di esso. Quindi ne deduciamo che in questo caso particolare possiamo usare l'equazione

$$\vec{p} = h\vec{\sigma}$$

[‡]Teorema di Inversione di Fourier: Sia $f(t)$ funzione complessa di t , le cui parti reale ed immaginaria soddisfano le condizioni di Dirichlet[§] in qualsiasi intervallo finito e che dà luogo all'integrale $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(t)|dt$. Allora l'integrale $g(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{2\pi ixt} dt$ esiste e implica che $f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)e^{-2\pi ixt} dx$. $g(x)$ è la cosiddetta *Trasformata di Fourier* di $f(t)$.

per correlare i valori dell'impulso trovati con gli esperimenti e quelli del vettore d'onda ottenuto tramite l'analisi di Fourier.

Nel paragrafo seguente proveremo che, se diamo una buona definizione sperimentale di impulso misurato, allora possiamo usare la stessa equazione anche in questo caso.

2.3 La funzione d'onda e la quantità di moto

2.3.1 Quantità di moto per particelle libere

Da ciò che si può leggere nel testo “*The fundamental principles of quantum mechanics with Elementary Applications*” [1] e da quanto ampiamente detto in precedenza, la nostra conoscenza riguardo lo stato di un sistema è data da una funzione $\Psi(x, t)$ che determina la probabilità delle varie configurazioni come funzione del tempo, e che descrive il comportamento probabilistico di un insieme di sistemi tutti uguali, indipendenti, e nello stesso stato.

Inoltre, abbiamo visto che essi hanno una molteplicità di posizioni possibili, e quindi di conseguenza dobbiamo pensarli come aventi una molteplicità di quantità di moto possibili.

Come possiamo determinare, a partire dalla funzione d'onda di un insieme di atomi o particelle, quali siano le probabilità delle varie quantità di moto possibili?

La risposta a questa domanda deve essere in linea con la procedura sperimentale e, di conseguenza, avere le sue basi nella definizione sperimentale di quantità di moto. Qualsiasi procedura accettata diventa allora la definizione “operativa” di quantità di moto per la meccanica quantistica, e deve armonizzarsi con la definizione classica nel caso limite di un pacchetto d'onda ben definito; la misura sarà, allora, fattibile anche nei casi laddove la meccanica classica è inapplicabile.

I metodi classici che abbiamo a disposizione per la misurazione della quan-

tità di moto sono molteplici. Fra questi i più importanti sono il metodo di deflessione magnetica, che comporta una misurazione separata della carica della particella, e il metodo elementare per misurare direttamente la velocità e moltiplicarla per la massa, trovata separatamente. Il fatto che queste misurazioni non si completino in una sola operazione è una caratteristica condivisa da ogni altro metodo. Inoltre, la massa e la carica sono parametri che ritroviamo nella costruzione dell'equazione di Schrödinger, e pertanto misurarli separatamente sarebbe stato comunque necessario.

Qui attueremo la misurazione diretta della velocità, poichè più adatta al nostro scopo, partendo dalla formula

$$\vec{p} = m \vec{v}. \quad (2.5)$$

Per misurare direttamente la velocità \vec{v} è necessario applicare la formula classica della velocità media

$$\vec{v} = \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{t_2 - t_1}. \quad (2.6)$$

Se la particella in esame è libera, cioè soggetta ad un potenziale costante (ovvero quello in cui si considera una particella non soggetta a forze), la velocità media può essere identificata con la velocità istantanea e, utilizzando le (2.5) e (2.6), è possibile ridurre il problema della misurazione della quantità di moto a quello di effettuare due misurazioni successive della posizione. Durante questo processo si riscontra una difficoltà, in quanto ogni misura di posizione comporta un cambiamento non prevedibile delle quantità di moto.

Normalmente la posizione viene determinata per mezzo di radiazioni, attraverso un microscopio, un telescopio o un sistema a fessura, e dipende dal tipo di fenomeno di collisione (diffusione o riflessione dei fotoni). Lo studio degli elettroni di rinculo prodotti dall'effetto Compton mostra che in tale collisione il sistema subisce un cambiamento di quantità di moto dell'ordine di h/λ per ciascun fotone diffuso. Questo cambiamento può essere ridotto

usando radiazioni di bassa intensità e grande lunghezza d'onda, ma sfortunatamente la diffrazione della radiazione causa un'incertezza nella misurazione della posizione che non può essere portata al di sotto del valore dell'ordine di grandezza della lunghezza d'onda λ . Dunque, avremo che la perturbazione della quantità di moto sarà direttamente proporzionale alla precisione dell'osservazione, e non potrà essere trascurata nella determinazione della posizione di un sistema atomico.

Quindi, il problema riscontrato sarà da ricondurre al cambiamento di quantità di moto nella prima misurazione della posizione; allora, dobbiamo fare in modo che l'oggetto della misurazione sia la quantità di moto nell'istante precedente al tempo t_1 in cui la misurazione ha inizio.

D'altro canto, il risultato della perturbazione iniziale è che la quantità di moto effettivamente misurata differisce da quella che desideriamo misurare di una quantità Δp , il cui valore assoluto è dell'ordine di $h/\Delta r$, dove Δr è il valore assoluto dell'incertezza in \vec{r}_1 .

Fortunatamente, però, se la particella si trova in uno spazio illimitato senza campo, come abbiamo assunto, possiamo avere un'osservazione iniziale approssimativa e ottenere valori di \vec{v} molto precisi, consentendo all'intervallo di tempo $t_2 - t_1$ di essere molto grande.

Infatti, se iniziamo con un insieme di particelle la cui posizione iniziale è già stata grezzamente misurata e l'intervallo $t_2 - t_1$ è stato reso grande abbastanza, l'accuratezza delle osservazioni della quantità di moto può andare oltre qualsiasi limite possibile.

Attualmente intendiamo che l'insieme delle nostre particelle sia descritto da una funzione d'onda Ψ che può essere normalizzata, cosicché interpreteremo $|\Psi|^2 dr$ come la probabilità di trovarsi in un punto del volume dr . Questo è solo un piccolo passo in avanti per richiedere che la nostra funzione si avvicini allo zero abbastanza rapidamente all'infinito in modo tale da permettere agli integrali che ci danno il valore medio di ciascuna delle coordinate x, y, z e gli errori $[(x - \bar{x})^2]^{(1/2)}$, $[(y - \bar{y})^2]^{(1/2)}$, $[(z - \bar{z})^2]^{(1/2)}$ di esistere.

Se la funzione d'onda è di questo tipo, essa determinerà la posizione iniziale della particella con un certo grado di approssimazione e possiamo dedurre che questa posizione sarà determinata con lo stesso grado di approssimazione della procedura sperimentale attuata per predisporre le particelle che compongono l'insieme. Ovviamente un gruppo di particelle identiche nel medesimo stato e aventi come funzione d'onda Ψ può essere preparato solo se esiste una procedura sperimentale che assicuri che nessuna particella che non abbia la giusta funzione d'onda possa entrare a farne parte. Questa procedura costituirebbe, quindi, una misura approssimativa della posizione fatta prima della misurazione stessa della quantità di moto.

Sarà ora evidente che nel caso di un insieme di particelle identiche preparate in modo da avere una posizione iniziale approssimativamente nota e che possano muoversi in uno spazio illimitato senza campo, le equazioni (2.5) e (2.6) offrano il punto di partenza per le misurazioni delle quantità di moto.

2.3.2 Quantità di moto delle particelle di un sistema

Infine, occupiamoci del calcolo delle quantità di moto delle particelle di un sistema che si muove sotto l'azione di un potenziale V .

Per semplicità considereremo il caso di un sistema composto soltanto da due particelle (l'estensione al caso di n particelle sarà naturale), e assumeremo che, ad un certo istante arbitrario t_0 , il potenziale e le forze fra le particelle siano nulli. Dopo un lungo periodo di tempo, osserveremo le posizioni di entrambe le particelle e calcoleremo le quantità di moto come prima. Per tutti i valori di t più grandi di t_0 la funzione d'onda $\Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t)$ soddisferà l'equazione

$$\frac{1}{\mu_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) \Psi + \frac{1}{\mu_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) \Psi + \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0. \quad (2.7)$$

Ogni soluzione a quadrato sommabile della (2.7) può essere espressa nella forma

$$\Psi = \frac{1}{h^3} \int \cdots \int_{\infty} G(\alpha_1 \cdots \gamma_2) e^{-\frac{2\pi i E(t-t_0)}{h}} e^{\frac{2\pi i}{h}(x_1 \alpha_1 + \cdots + z_2 \gamma_2)} d\alpha_1 \cdots d\gamma_2,$$

dove $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ e $\alpha_2, \beta_2, \gamma_2$ sono le componenti delle quantità di moto della particelle 1 e 2, rispettivamente, mentre

$$E = \frac{\alpha_1^2 + \beta_1^2 + \gamma_1^2}{2\mu_1} + \frac{\alpha_2^2 + \beta_2^2 + \gamma_2^2}{2\mu_2}.$$

Per valori grandi di $t - t_0$ possiamo provare che

$$\Psi \cong \left[\frac{\mu_1}{2h(t-t_0)} \right]^{3/2} \left[\frac{\mu_2}{2h(t-t_0)} \right]^{3/2} 8iG \left(\frac{\mu_1 x_1}{h(t-t_0)}, \frac{\mu_1 y_1}{h(t-t_0)}, \cdots \right) \times e^{\frac{\pi i}{h(t-t_0)} [\mu_1(x_1^2 + y_1^2 + z_1^2) + \mu_2(x_2^2 + y_2^2 + z_2^2)]}.$$

Di conseguenza, la probabilità che la quantità di moto appartenga al range $d\alpha_1 d\beta_1 d\gamma_1 d\alpha_2 d\beta_2 d\gamma_2$ è

$$dW = G\bar{G}d\alpha_1 \cdots d\gamma_2 = \Phi\bar{\Phi}d\alpha_1 \cdots d\gamma_2,$$

con

$$\Phi = G e^{-\frac{2\pi i E(t-t_0)}{h}}.$$

Se volessimo ottenere la probabilità $d\alpha_1$ non dovremmo far altro che integrare dW rispetto a tutte le altre variabili.

2.3.3 La funzione d'onda di un insieme di particelle

Seguendo la trattazione di E. C. Kemble [1], concludiamo la discussione riguardante la quantità di moto misurata e fissiamo i seguenti concetti:

- La quantità di moto viene definita tramite un esperimento (in accordo con la concezione classica) e, secondo questa definizione, il momento

viene determinato tramite la misurazione della massa e due osservazioni della posizione in uno spazio senza campo e distanti nel tempo.[¶]

- Il comportamento nel tempo di un insieme di particelle nello stesso stato soggettivo iniziale è determinato dalla funzione d'onda Ψ che segue l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo (1.26). Abbiamo calcolato la probabilità dei vari valori delle quantità di moto e, nel caso di una particella libera, abbiamo osservato che la probabilità della quantità di moto è indipendente dal tempo.
- Per quanto riguarda le relazioni tra il momento misurato e il momento locale classico, vediamo che nel caso limite di un pacchetto d'onda ben definito al quale è applicabile la meccanica classica, i valori medi e più probabili del momento misurato devono essere identificati tra loro e con il momento locale nel centro del pacchetto.

Come possiamo determinare la funzione d'onda di un insieme e fino a che punto possiamo farlo sperimentalmente?

Per rispondere a questa domanda dobbiamo notare che per preparare un insieme di sistemi in uno stato soggettivo preciso si deve necessariamente iniziare con un assemblaggio naturale le cui parti sono distribuite in molti di questi stati, e che lo sottoporrà ad un processo che eliminerà tutti i sistemi che non sono, grossomodo, in un solo stato soggettivo. In tali casi, il metodo con cui si prepara l'insieme definisce sperimentalmente lo stato, e spesso, tramite la teoria elementare, è possibile determinarne la funzione d'onda.

Quindi, un qualsiasi schema classico per preparare un fascio di elettroni con un'energia definita è uno schema per preparare un assemblaggio le cui funzioni d'onda hanno tutte la stessa frequenza.

[¶]Introduco un intervallo di tempo più grande poichè le osservazioni riguardo le posizioni sono inesatte, ovvero: un'osservazione posizionale consiste in una coppia di valori di coordinate spaziali e di tempo, nelle quali può esserci grande incertezza. Queste incertezze su tempo e posizione vengono rese irrilevanti proprio dall'introduzione dell'intervallo di tempo più grande.

Un fascio di elettroni che ha origine in un punto O sarà associato a funzioni d'onda che hanno la forma di onde sferiche. Se bloccassimo tutti gli elettroni del fascio, eccetto quelli nell'intorno di un punto P distante da O , il resto dell'insieme sarebbe composto da elettroni i cui stati sarebbero caratterizzati da funzioni Ψ , nonchè pacchetti d'onda con le normali parallele al raggio \vec{OP} .

Supponiamo, per esempio, di voler riproporre un semplice esperimento di diffrazione. Possiamo accelerare gli elettroni tramite una differenza di potenziale V , che parte da uno stato iniziale la cui energia termica è piccola rispetto a V . Dopo aver fatto passare gli elettroni attraverso un'apertura iniziale A , possiamo proiettarli contro un diaframma B , contenente una o più aperture S ; nei dintorni di S la funzione d'onda Ψ degli elettroni incidenti su B avrà la forma di un'onda monocromatica piana.

Per determinare la forma esatta della funzione d'onda degli elettroni che escono da S è necessario che l'interazione tra il sistema dell'onda incidente e il diaframma B venga trattata come un problema di meccanica quantistica. Probabilmente, sarebbe sufficiente adottare la procedura usuale della teoria della diffrazione ottica, e cioè assumere che, per gli elettroni uscenti, nel piano di B , Ψ scompaia nel diaframma e assuma mano a mano lo stesso valore in ogni punto dell'apertura, come se il diaframma non ci fosse. Il processo tramite il quale, da un insieme naturale di elettroni, scegliamo un sottoinsieme di elettroni aventi la stessa funzione d'onda, può essere paragonato a quello di predisporre un fascio o un pacchetto di radiazione coerente.^{||} La fase di una funzione d'onda non è mai determinata e infatti possiamo sempre considerare un insieme come un aggregato di sottoinsiemi con funzioni Ψ che differiscono in fase ma che sono le stesse.

Finora abbiamo assunto che la funzione d'onda di un insieme di particelle in uno stato soggettivo definito sia determinata, ipoteticamente, dal metodo di

^{||}In ottica si chiama *coerenza* (o coerenza di fase) la proprietà di un'onda elettromagnetica di mantenere una certa relazione di fase con se stessa durante la sua propagazione. Questo concetto è stato generalizzato a tutti i fenomeni ondulatori dall'acustica alla meccanica quantistica.

preparazione dello stato. Inoltre, è possibile che per un tale insieme, $|\Psi(x, t)|^2$ sia determinato tramite ripetute osservazioni di posizione su sistemi appartenenti all'insieme, con l'uso di radiazioni ad alta frequenza. Certamente ognuna di queste osservazioni può alterare sia l'energia che il momento del sistema in osservazione e così escluderlo dall'insieme originale di partenza. Ad ogni modo, se tutte le parti di questo insieme fossero nello stesso stato, la rimozione di una selezione casuale di sistemi non ne altererebbe lo stato o la funzione d'onda.

Segue che, per un insieme casuale, $|\Psi(x, t)|^2$ è un osservabile e ne deduciamo che anche $\partial|\Psi(x, t)|^2/\partial t$ lo è. Inoltre, E. Feenberg** ha mostrato che i valori di $|\Psi|^2$ e $\partial|\Psi|^2/\partial t$, per un qualsiasi istante di tempo t , determinano Ψ stessa, a meno di un fattore di fase costante arbitrario.

Quindi, a parte il fattore di fase, possiamo dire che in linea di principio $\Psi(x, t)$ può essere determinata da semplici osservazioni sulla posizione.

**Eugene Feenberg (1906-1977) era un fisico americano che contribuì alla fisica quantistica e alla meccanica nucleare.

Capitolo 3

Problemi unidimensionali

Che ogni atomo abbia un insieme caratteristico di livelli energetici discreti e degli stati stazionari associati, è un fatto empirico ben noto. Le diverse energie di questi stati determinano le frequenze delle linee dello spettro elettromagnetico, e le cosiddette *probabilità di transizione* per i “salti” da un livello all’altro determinano le intensità.

Forse, uno tra i compiti più importanti della meccanica quantistica è anche quello di localizzare questi livelli e valutare le probabilità di transizione da uno all’altro su base puramente teorica [1].

Continuiamo il nostro lavoro seguendo la trattazione di Alberto Galindo e Pedro Pascual nel loro lavoro “*Quantum Mechanics I*” [3]; dal momento che abbiamo già identificato e parlato di energia e frequenza, sarà chiaro che lo stato di un atomo avente energia definita sarà dato da una soluzione monocromatica della corrispondente equazione di Schrödinger (di cui abbiamo ampiamente parlato nel Capitolo 1).

Torniamo a considerare l’equazione di Schrödinger indipendente dal tempo unidimensionale (equazione (1.8)), per una particella di massa m sotto

l'azione del potenziale $V(x)$:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0, \quad (3.1)$$

dove E è l'energia della particella. Affinchè il problema agli autovalori definito dalla (3.1) sia ben definito è necessario che $V(x)$ soddisfi particolari condizioni matematiche.*

Sotto queste condizioni si può provare che, di tutte le soluzioni della (3.1), solo le ψ polinomialmente limitate e tali che esse e la loro derivata siano assolutamente continue sono viste come autofunzioni dell'operatore autoaggiunto e, quindi, appaiono nella sua decomposizione spettrale †.

In generale, abbiamo dei problemi in cui $V(x)$ non soddisfa le condizioni da noi stabilite; per esempio vi sono delle regioni in cui $V(x)$ è infinito (barriere di potenziale infinite, argomento che verrà sviluppato all'interno del Capitolo 4), oppure può accadere che $V(x)$ ammetta nella sua espressione qualche funzione delta di Dirac. In casi come questi la funzione d'onda $\psi(x)$ è ancora continua, mentre sarà difficile trovarne la derivata in quei punti in cui il potenziale subisce dei salti infiniti.

Allora, per esempio, se $V(x) = \infty$ per $x \leq a$, basterà considerare il problema come un caso limite di un altro identico in cui, però, $V(x) = V_0$ per $x \leq a$ e, alla fine, calcolare il limite $V_0 \rightarrow \infty$.

Tenendo presente la limitatezza di $\psi(x)$ nella regione in cui $x \leq a$, sarà necessario, come vedremo, avere $\psi(x) = 0$ per $V_0 \rightarrow \infty$. Nel caso in cui $U(x) = g\delta(x - y) + U_1(x)$, dove U_1 è regolare in un intorno di $x = 0$, l'integrazione formale della (3.1) ci porta alla seguente:

$$\left[\frac{d\psi}{dx}\right]_{a+\eta} - \left[\frac{d\psi}{dx}\right]_{a-\eta} = \psi(a) \int_{a-\eta}^{a+\eta} dx U(x) + o(\eta), \quad (3.2)$$

*All'interno dell'Appendice B viene riportato un riepilogo delle condizioni su $V(x)$.

†Vedere Appendice A per la terminologia.

e quindi la differenza tra la derivata sinistra e la derivata destra nel punto $x = a$ è $g\psi(a)$.

Al fine di discutere le proprietà generali dello spettro di H nella (3.1), assumiamo che $U(x)$ sia una funzione continua a tratti su \mathbb{R} , e inoltre usiamo la seguente notazione:

$$U_0 \equiv \inf U(x), \quad U_{\pm} \equiv \lim_{x \rightarrow \pm\infty} U(x). \quad (3.3)$$

Assumendo che esistano, i limiti U_{\pm} possono essere finiti od infiniti. Quando uno di essi è finito, assumeremo che $U(x)$ tenda ad esso più velocemente di $1/x$, o meglio che per $x \rightarrow \pm\infty$, $U(x) = U_{\pm} + B|x|^{-s_{\pm}}$, con B costante e $s_{\pm} > 1$. Quando uno dei limiti U_{\pm} è infinito e positivo, non vi sono restrizioni su come esso cresca; ma se esso è infinito e negativo, per non dover imporre all'estremo corrispondente condizioni al contorno prive di giustificazione fisica, imponiamo la condizione $U(x) \geq -ax^2 - b$, dove $a, b > 0$, per ogni x . Sotto queste condizioni $H \equiv -d^2/dx^2 + U(x)$ è essenzialmente autoaggiunto[‡] su $\mathbb{C}_0^{\infty}(\mathbb{R})$.

3.1 Lo spettro di H

Rifacendoci all'esposizione di A. Galindo e P. Pascual [3], assumiamo che $U_- \leq U_+$, e iniziamo analizzando il comportamento asintotico delle soluzioni della (3.1) in alcuni casi fondamentali.

1. $\varepsilon > U_+$, con U_+ finito.

Introduciamo la funzione $h(x)$ tramite la relazione

$$\psi(x) = e^{\left[\pm ik_+ x + \int_a^x dx h(x)\right]}, \quad (3.4)$$

[‡]Per questa e altre terminologie specifiche si rimanda all'Appendice A.

dove $k_+ \equiv |\varepsilon - U_+|^{1/2}$ e a è una costante arbitraria. Per valori abbastanza grandi di x , $h(x)$ soddisfa l'equazione

$$h'(x) \pm 2ik_+h(x) + h^2(x) - \frac{B}{x^{s_+}} = 0, \quad (3.5)$$

dalla quale asintoticamente $h(x) \sim \text{cost} \times x^{-s_+}$. Dal momento che abbiamo assunto $s_+ \geq 1$, l'integrale della (3.4) ha una costante come limite asintotico. Dunque, in questo caso, esistono coppie di soluzioni indipendenti che si comportano asintoticamente come

$$e^{\pm ik_+x}, \quad x \rightarrow +\infty, \quad \varepsilon > U_+ \text{ finito}, \quad e^{\pm ik_-x}, \quad x \rightarrow -\infty, \quad \varepsilon > U_- \text{ finito}, \quad (3.6)$$

dove $k_{\pm} \equiv |\varepsilon - U_{\pm}|^{1/2}$.

Tramite la differenziazione della (3.4) si può concludere che le derivate delle soluzioni si comportano come le derivate delle loro forme asintotiche.

2. $\varepsilon < U_+ < \infty$.

Con un ragionamento analogo al caso precedente, mostriamo che $\psi(x)$ tende asintoticamente a una combinazione lineare di

$$e^{\pm k_+x}, \quad x \rightarrow +\infty, \quad \varepsilon < U_+ < \infty. \quad (3.7)$$

Quando $x \rightarrow -\infty$ e $\varepsilon > U_-$, con U_- finito, il comportamento asintotico sarà ancora una combinazione di quelle date in (3.6). Vale lo stesso per il caso opposto

$$e^{\pm k_-x}, \quad x \rightarrow -\infty, \quad \varepsilon < U_- < \infty. \quad (3.8)$$

3. $U(x) \rightarrow \infty$ per $x \rightarrow +\infty$ o $-\infty$.

Dallo studio asintotico della (3.1) vediamo come essa abbia due soluzioni linearmente indipendenti, che chiamiamo ψ_1 e ψ_2 , il cui compor-

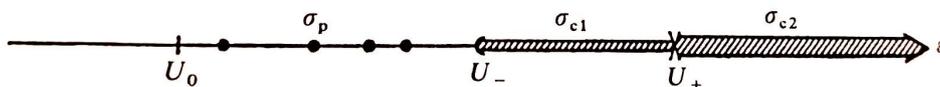


Figura 3.1: Un esempio dello spettro di $H = -(d^2/dx^2) + U(x)$

tamento asintotico è

$$\psi_{1,2}(x) \sim \frac{1}{\sqrt{k(x)}} e^{\pm \int_{x_0}^x dx' k(x')}, \quad k(x) \equiv |U(x) - \varepsilon|^{1/2}. \quad (3.9)$$

In modo simile

$$\psi'_{1,2}(x) \sim \pm \sqrt{k(x)} e^{\pm \int_{x_0}^x dx' k(x')}. \quad (3.10)$$

4. $U(x) \rightarrow -\infty$ per $x \rightarrow +\infty$ o $-\infty$.

Consideriamo su U e U' le stesse condizioni imposte nel caso precedente e usiamo la stessa notazione; avremo

$$\psi_{1,2}(x) \sim \frac{1}{\sqrt{k(x)}} e^{\pm i \int_{x_0}^x dx' k(x')}, \quad (3.11)$$

$$\psi'_{1,2}(x) \sim i \sqrt{k(x)} e^{\pm i \int_{x_0}^x dx' k(x')}. \quad (3.12)$$

Date le informazioni sopra, possiamo facilmente dimostrare che lo spettro di H , che chiamiamo $\sigma(H)$, avrà la forma tipica mostrata in Figura 4.1. Lo spettro puntuale $\sigma_p(H)$ giace nell'intervallo $(U_0, U_-]$, e può essere vuoto. Lo spettro continuo $\sigma_c(H)$ vive nell'intervallo (U_-, ∞) .

Essendo U reale, si nota che la fase arbitraria della funzione d'onda nel caso non degenerare (cioè in σ_{c1}) può sempre essere scelta in modo tale che la funzione d'onda sia reale: basti osservare che, se $\psi(x)$ è una soluzione ammissibile della (3.1), allora lo sarà anche $\overline{\psi(x)}$, poichè sia ε che U sono reali.

I valori di ε che appartengono a σ_p corrispondono agli stati legati; essi sono non degeneri e le funzioni d'onda corrispondenti possono diventare reali.

Come abbiamo detto prima, l'insieme σ_p può essere vuoto, e questo accade, per esempio, quando il potenziale $U(x) \geq \min(U_+, U_-)$, $\forall x$.

In altri casi, per esempio in quello dell'oscillatore armonico (questo argomento verrà ripreso nella sezione 4.2, dedicata proprio all'oscillatore armonico), avremo infiniti stati legati.

Il limite minimo per il valore $\inf \sigma(p^2/2M + V)$, dato da V_0 , non è quello migliore possibile; quando $V \in L^1(\mathbb{R})$, possiamo ottenere una stima preferibile tramite la disuguaglianza

$$\inf \sigma(p^2/2M + V) \geq -M\|V\|_1^2/2\hbar^2. \quad (3.13)$$

Trovare il numero di stati legati tramite un potenziale dato è un problema di particolare interesse, sul quale si possono fare una serie di considerazioni.

In primo luogo, si nota subito che se $U(x) \rightarrow \infty$ per $|x| \rightarrow \infty$, allora lo spettro di energia è discreto e, invece, il numero di stati legati N è infinito. Supponiamo che $U_+ > U_-$, con U_- finito. Tramite le ipotesi fatte nella sezione precedente U_0 è finito e per qualche $\varepsilon > 0$, $|x|^{1+\varepsilon}(U_- - U(x)) \rightarrow 0$, per $x \rightarrow -\infty$. Si dimostra che N è sempre finito quando $U(x) \geq U_- - 1/4x^2$, $\forall x \leq a_-$, mentre nel caso in cui esista un $\alpha_- \geq 1/4$ per il quale $U(x) \leq U_- - \alpha_-/x^2$ per $x \leq a_-$, allora N è infinito. (Otteniamo una conclusione analoga anche nel caso in cui U_+ e U_- si cambiano di ruolo).

Nel caso in cui i due limiti U_+ e U_- sono uguali e finiti, N sarà finito finché $U(x) \geq U_{\pm} - 1/4x^2$ se $|x| \geq a$, infinito se $U(x) \leq U_{\pm} - \alpha/x^2$, per $\alpha > 1/4$, in un intorno di uno (o entrambi) gli estremi $\pm\infty$.

Se N è finito, è interessante conoscere alcuni limiti al suo valore. Da una parte, c'è una grande differenza tra una e due dimensioni, e dall'altra fra dimensioni più grandi di due.

Per quanto riguarda i casi di una o due dimensioni, qualsiasi potenziale attrattivo (ovvero $V(x) \leq 0$) che tende a zero per grandi distanze, ha degli

stati legati. Inoltre, grazie ai risultati di Barry M. Simon [§], quando siamo in una dimensione abbiamo che ogni $V(x)$ che soddisfa

$$\int_{\mathbb{R}} dx (1 + x^2) |V(x)| < \infty, \quad V \not\equiv 0, \quad (3.14)$$

possiede alcuni stati legati con energia negativa se e solo se racchiude un'area non positiva

$$\int_{\mathbb{R}} dx V(x) \leq 0. \quad (3.15)$$

Se $U(x)$ è simmetrico (cioè $U(x) = U(-x)$), attrattivo (cioè $U(x) \leq U_-$) e monotono nella regione $x > 0$, si dimostra che

$$N < 1 + \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |U(x) - U_{\pm}|^{1/2}. \quad (3.16)$$

In questo caso esistono anche limiti inferiori per N che però non possono essere espressi semplicemente come il precedente. Il limite (3.16) indica che N aumenta come la radice quadrata della profondità del potenziale quando quest'ultimo tende ad infinito. Sotto le condizioni precedenti, e con la richiesta aggiuntiva che $|U(x)|x^2$ sia integrabile su tutto \mathbb{R} , possiamo provare che la crescita di N è una funzione universale del potenziale dato da

$$N \sim \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |U(x)|^{1/2} \quad (3.17)$$

quando questo integrale è finito.

Questa espressione è conosciuta come stima semiclassica, poichè lasciare che la profondità del potenziale aumenti indefinitamente equivale al limite $\hbar \rightarrow 0$. Essa rispecchia l'idea del modello di Bohr-Sommerfeld, cioè che ci sia uno stato legato per ogni insieme di area $h (= 2\pi\hbar)$ nella regione $\{(x, p) : p^2/2M + V(x) \leq 0\}$. Quindi, se θ è una funzione a gradinata,

[§]Barry Martin Simon (1946) è un fisico matematico americano, noto per i suoi contributi prolifici in teoria spettrale, analisi funzionale e meccanica quantistica non relativistica (in particolare gli operatori di Schrödinger).

avremo

$$N \sim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx dp \theta[-(p^2/2M + V(x))], \quad (3.18)$$

che coincide con la precedente (3.17).

Quando $U(x)$ è attrattivo e simmetrico, ed ha un numero k di regioni monotone lungo l'asse reale, allora

$$N < k - 1 + \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |U(x) - U_{\pm}|^{1/2}. \quad (3.19)$$

Un altro interessante limite è il seguente:

$$N \leq 1 + \int_{-\infty}^{+\infty} dx |xU_-(x)|, \quad (3.20)$$

dove $U_-(x) \equiv \min(U(x), 0)$.

Una stima del numero di stati legati è

$$N \simeq \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int dx \sqrt{\min(U_+, U_-) - U(x)}, \quad (3.21)$$

dove l'integrale si estende alla regione nella quale il radicando è positivo. (Questa equazione è una conseguenza immediata del metodo WKB, che però non verrà trattato in questa tesi [¶]).

Un'importante proprietà degli stati legati è collegata al numero dei loro nodi (o zeri). A tal proposito si può dimostrare il seguente teorema:

[¶]In meccanica quantistica l'*approssimazione WKB* è un'approssimazione semiclassica nella quale si impone che la funzione d'onda sia scritta in forma esponenziale, e tale esponente viene sviluppato in serie di potenze della costante di Planck. Il metodo prende il nome dai fisici G. Wentzel, H. A. Kramers e L. Brillouin, che lo svilupparono nel 1926.

Teorema 3.1.1. *Teorema di Sturm: se $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_n, \dots$ sono le funzioni d'onda degli stati legati con energie $\epsilon_0 < \epsilon_1 < \dots < \epsilon_n < \dots$, allora ψ_n ha n nodi: tra due nodi consecutivi di ψ_n , c'è un nodo di ψ_{n-1} , e inoltre ψ_{n+r} ha almeno uno zero per tutti gli $r \geq 1$. Lo stato ψ_0 è chiamato **stato fondamentale**, ed è lo stato con l'energia più bassa; ψ_1, ψ_2, \dots sono gli **stati eccitati**.*

3.2 Potenziali periodici

‖ Per la maggioranza dei potenziali, in generale, lo spettro continuo riempie la semiretta destra e lo spettro discreto si trova alla sua sinistra (vediamo l'esempio in Figura 3.1). Tuttavia, esiste una classe di potenziali di grande rilevanza dal punto di vista fisico i quali, però, non condividono le stesse caratteristiche; per trattarli seguiamo il testo di A. Galindo e P. Pascual [3]. Tali potenziali prendono il nome di *potenziali periodici*:

$$U(x + a) = U(x), \quad (3.22)$$

la cui struttura si ripete, con periodo a .

Questi potenziali rivestono grande importanza per la fisica dello stato solido; in questo lavoro ci limiteremo a studiare quelli di tipo unidimensionale, sufficienti comunque a mostrarne le caratteristiche principali, seguendo il testo di A. Galindo e P. Pascual [3].

Assumiamo che $U(x) \in L^2(0, a)$. Il primo fatto da sottolineare è che, in questo caso, non vi sono stati legati: $\sigma_p(H) = \emptyset$.

Per determinare lo spettro continuo $\sigma_c(H)$, dobbiamo basare il nostro ragionamento sul seguente criterio: A meno di energie in un insieme di misura nulla, $\varepsilon \in \sigma_c(H)$ se e solo se una soluzione non banale della (3.1) è polino-

‖Per la terminologia di questa parte vedere Appendice A.

mialmente limitata.

Stabiliamo come condizioni iniziali $\psi(0)$ e $\psi'(0)$, e sia $\psi(x)$ la soluzione della (3.1) con queste condizioni al contorno. I valori $\psi(a)$ e $\psi'(a)$ sono combinazioni lineari delle condizioni iniziali

$$\begin{pmatrix} \psi(a) \\ \psi'(a) \end{pmatrix} = B(\varepsilon) \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

La matrice $B(\varepsilon)$ dipende generalmente dalla scelta del punto iniziale, che in questo caso è $x = 0$. L'invarianza per traslazioni di passo a della (3.22) implica che

$$\begin{pmatrix} \psi(na) \\ \psi'(na) \end{pmatrix} = B(\varepsilon)^n \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

e quindi la limitatezza o meno di $\psi(x)$ dipende dagli autovalori della matrice $B(\varepsilon)$. Scegliamo delle condizioni iniziali che diagonalizzino $B(\varepsilon)$:

$$B(\varepsilon) \begin{pmatrix} \psi_i(0) \\ \psi'_i(0) \end{pmatrix} = \lambda_i(\varepsilon) \begin{pmatrix} \psi_i(0) \\ \psi'_i(0) \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

La (3.24) insieme alla (3.25) ci conduce alla relazione

$$\psi_i(x + na) = (\lambda_i(\varepsilon))^n \psi_i(x). \quad (3.26)$$

Quindi, se $|\lambda_i(\varepsilon)| \neq 1$, allora $\psi_i(x)$ cresce in modo esponenziale. Di conseguenza, tale ε non appartiene allo spettro continuo. Solo nel caso in cui $|\lambda_i(\varepsilon)| = 1$, $\psi_i(\varepsilon)$ è polinomialmente limitata, e quindi $\varepsilon \in \sigma_c(H)$. Quindi, in questo caso, scrivendo $\lambda_1(\varepsilon) = e^{ika}$ e $\lambda_2(\varepsilon) = e^{-ika}$, con k reale **, avremo che esistono due soluzioni linearmente indipendenti ψ_1 e ψ_2 , tali che

$$\psi_1(x - a) = e^{-ika} \psi_1(x), \quad \psi_2(x - a) = e^{ika} \psi_2(x). \quad (3.27)$$

** λ_1 e λ_2 sono gli autovalori di norma unitaria degli operatori di traslazione.

Se $\varphi_1(x) \equiv e^{-ikx}\psi_1(x)$ e $\varphi_2(x) \equiv e^{ikx}\psi_2(x)$, allora risulta

$$\varphi(x - a) = \varphi_i(x), \quad (3.28)$$

$$\psi_1(x) = e^{ikx}\varphi_1(x), \quad (3.29)$$

$$\psi_2(x) = e^{-ikx}\varphi_2(x). \quad (3.30)$$

(La prima delle tre espressioni è conosciuta come Teorema di Bloch ^{††}, mentre le altre rappresentano il Teorema di Floquet, secondo il quale ci sono due soluzioni indipendenti della (3.1), e che sono onde piane la cui struttura viene modulata nello spazio da una funzione periodica).

Dal momento che l'equazione secolare per $B(\varepsilon)$ è

$$\lambda^2 - [\text{Tr}\{B(\varepsilon)\}]\lambda + 1 = 0, \quad (3.31)$$

e $\text{Tr}\{B(\varepsilon)\}$ è reale per ε reale, allora $\varepsilon \in \sigma_c(H)$ se e solo se $[\text{Tr}\{B(\varepsilon)\}]^2 \leq 4$. Siccome $B(\varepsilon)$ è una funzione analitica di ε , la disuguaglianza stretta è soddisfatta per l'insieme dtdo dall'unione di intervalli aperti disgiunti, i cui estremi soddisfano $\text{Tr}\{B(\varepsilon)\} = \pm 2$. Ne consegue che lo spettro ha una *struttura a banda*, cioè avente intervalli ad energie permesse (zone di stabilità), separati da intervalli ad energie proibite (zone di instabilità), come possiamo vedere in Figura 3.2.

Questa struttura è quello che otteniamo sempre quando abbiamo $U(x) \neq \text{cost}$, sebbene in alcuni casi possa verificarsi che alcune delle zone proibite scompaiano. L'ampiezza delle zone proibite, infatti, tende a zero al tendere di ε ad infinito, caso in cui lo spettro assomiglia a quello dell'energia cinetica.

^{††}Se scriviamo la $\varphi(x)$ nella forma $\varphi(x) \equiv e^{ikx}\psi_k(x)$, la $\psi_k(x)$ deve essere un funzione periodica di x con passo a : $\psi_k(x+a) = \psi_k(x)$. Questo risultato è noto come Teorema di Bloch. Esso mostra la presenza di soluzioni che si presentano come onde piane, le soluzioni per particelle libere, modificate da un'ampiezza che riflette le proprietà di periodicità del potenziale.

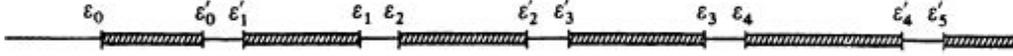
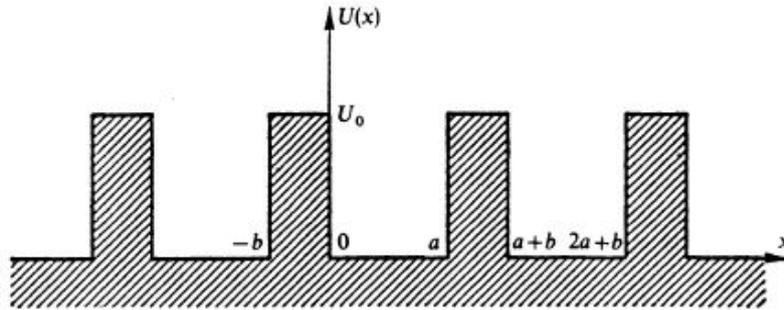
Figura 3.2: Struttura a banda di $\sigma_p(H)$.

Figura 3.3: Esempio di un potenziale periodico: il modello di Kronig-Penney.

Sempre seguendo il testo di A. Galindo e P. Pascual [3], illustriamo queste idee servendoci di un potenziale periodico noto, il *modello di Kronig-Penney* (Figura 3.3), di periodo $(a + b)$.

Iniziamo determinando $\text{Tr}\{B(\varepsilon)\}$. Siccome $U(x) \geq 0$, sarà sufficiente considerare $\varepsilon > 0$. date le condizioni iniziali $\psi(0) = 1$ e $\psi'(0) = 0$, nell'intervallo $(0, a)$ la funzione d'onda è $\cos \alpha x$, con $\alpha \equiv \sqrt{\varepsilon}$; nella regione $(a, a + b)$, essa sarà data da una combinazione lineare di $\sin \beta(x - a)$, e $\cos \beta(x - a)$, con $\beta \equiv \sqrt{\varepsilon - U_0}$. Nella seconda regione essa diventa

$$\psi(x) = -\frac{\alpha}{\beta} \sin \alpha a \sin \beta(x - a) + \cos \alpha a \cos \beta(x - a), \quad (3.32)$$

e dunque, dalla (3.24):

$$B_{11} = -\frac{\alpha}{\beta} \sin \alpha a \sin \beta b + \cos \alpha a \cos \beta b. \quad (3.33)$$

Allo stesso modo, prendendo la funzione $(1/\alpha) \sin \alpha x$ nell'intervallo $(0, a)$, si ottiene

$$B_{22} = \cos \alpha a \cos \beta b - \frac{\beta}{\alpha} \sin \alpha a \sin \beta b. \quad (3.34)$$

Quindi $\text{Tr}\{B(\varepsilon)\} = 2 \cos \alpha a \cos \beta b - \left[\frac{\alpha}{\beta} + \frac{\beta}{\alpha}\right] \sin \alpha a \sin \beta b$. I valori permessi per ε devono soddisfare $[\text{Tr}\{B(\varepsilon)\}]^2 \leq 4$, e per tali energie vi sono due soluzioni linearmente indipendenti della (3.1) del tipo di Bloch (3.28), dove $e^{\pm ik(a+b)}$ sono le radici dell'equazione secolare per $B(\varepsilon)$ (3.31).

Capitolo 4

Alcune soluzioni dell'equazione

Schrödinger fu capace di risolvere esattamente la sua equazione, nel senso che calcolò esplicitamente tutti i livelli energetici e tutte le corrispondenti autofunzioni, nei seguenti due casi:

- Oscillatore armonico: $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$
- Atomo di idrogeno: $V(\vec{x}) = -\frac{Ze^2}{|\vec{x}|}$

Riportiamo qui, per il suo grande interesse, le soluzioni per l'oscillatore armonico; le facciamo però precedere dal calcolo esplicito di un ulteriore caso dove si possono calcolare esplicitamente i livelli energetici e le corrispondenti autofunzioni, e cioè il sistema noto come *buca di potenziale di altezza infinita*.

4.1 La buca di potenziale infinita

Risolvere un sistema in meccanica quantistica, in questo caso, significa trovare gli autostati dell'operatore hamiltoniano ed i corrispondenti autovalori dell'energia.

In meccanica quantistica si intende per buca infinita di potenziale un potenziale unidimensionale che prende solo due valori, 0 e $+\infty$, in corrispondenza

di una suddivisione dell'asse reale in tre intervalli.

Consideriamo una particella che si muove su una semiretta sotto l'azione di un potenziale che si dice *buca di potenziale infinita* se è dato dalla funzione $V(x)$ definita nel modo seguente:

$$\begin{cases} V(x) = 0 & |x| \leq L \\ V(x) \neq 0 & |x| > L \end{cases} \quad (4.1)$$

Il potenziale divide la retta in tre regioni: la prima per $x < -L$, la seconda per $-L \leq x \leq L$ e la terza per $x > L$. Trattiamo, dunque, il problema in ognuna delle tre zone, e poi raccordiamo le soluzioni in corrispondenza dei punti di frontiera.

Sulla falsa riga di quello visto nella sottosezione 1.3.4, definiamo ora il seguente operatore lineare in $L^2(-L, L)$:

$$L := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad \text{dove} \quad D(L) := \{u \in \mathbb{C}^2[-L, L] : u(-L) = u(L) = 0\} \quad (4.2)$$

Si vede subito che $Lu \in C[-L, L] \subset L^2[-L, L]$.

• **Risolviamo ora il problema spettrale $Lu = Eu$**

Poniamo $\alpha^2 := \frac{2mE}{\hbar^2}$. Allora la forma esplicita dell'equazione $Lu = Eu$ è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u''(x) = Eu(x) \quad (4.3)$$

ed essa può essere riscritta nel modo seguente:

$$u''(x) + \alpha^2 u(x) = 0. \quad (4.4)$$

Risolvendo si ha:

$$u(x) = c_1 e^{i\alpha x} + c_2 e^{-i\alpha x}. \quad (4.5)$$

Imponiamo ora alla soluzione di soddisfare le condizioni al bordo viste prima, cioè $u(-L) = u(L) = 0$. Sostituendo alla soluzione trovata L e $-L$, si ricavano le seguenti equazioni:

$$\begin{cases} c_1 e^{i\alpha L} + c_2 e^{-i\alpha L} = 0 \\ c_1 e^{-i\alpha L} + c_2 e^{i\alpha L} = 0 \end{cases} \quad (4.6)$$

Otteniamo così un sistema lineare omogeneo nelle incognite c_1, c_2 che avrà soluzioni non banali se e solo se il suo determinante è nullo:

$$\Delta(\alpha, L) := \det \begin{pmatrix} e^{i\alpha L} & e^{-i\alpha L} \\ e^{-i\alpha L} & e^{i\alpha L} \end{pmatrix} = e^{2i\alpha L} - e^{-2i\alpha L} = 0 \quad (4.7)$$

Tenendo conto delle formule di Eulero

$$\begin{cases} e^{it} = \cos t + i \sin t \\ e^{-it} = \cos t - i \sin t \end{cases} \quad (4.8)$$

risulta:

$$\Delta(\alpha, L) = 2i \sin(2\alpha L) = 0 \iff 2\alpha L = k\pi \quad (4.9)$$

con $k \in \mathbb{Z} - \{0\}$ (il valore $k = 0$ è da scartare perché ad esso corrisponderebbe un autovettore identicamente nullo).

Quindi:

$$\alpha^2 = \frac{(k\pi)^2}{4L^2} \implies \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{(4\pi)^2}{4L^2} \quad (4.10)$$

da cui i valori quantizzati dell'energia

$$E_k = \frac{k^2 \pi^2 \hbar^2}{8mL^2} = \gamma(m, L, \hbar) k^2, \quad \text{con } k \in \mathbb{N} \quad \gamma(m, L, \hbar) := \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mL^2} \quad (4.11)$$

Poichè in questo caso la velocità è la radice quadrata dell'energia si ricava:

$$v_k = \sqrt{E_k} = \sqrt{c} |k|. \quad (4.12)$$

L'interpretazione fisica sarà la seguente: **i soli valori della velocità che la particella può assumere sono quelli proporzionali ai numeri naturali.**

• *Ricaviamo ora le autofunzioni.*

Risolviamo il sistema omogeneo precedente. Poniamo $c_1 = c$. Tenendo conto che $2\alpha L = k\pi \iff \alpha L = \frac{k\pi}{2}$, con $k \in \mathbb{Z}$, e usando la prima equazione del sistema, troviamo:

$$c_2 = -ce^{2i\alpha L} = -ce^{ik\pi} \quad (4.13)$$

La soluzione cercata sarà dunque

$$u_k(x) = c(e^{i\frac{k\pi x}{2L}} - e^{ik\pi} e^{-i\frac{k\pi x}{2L}}) = c(e^{i\frac{k\pi x}{2L}} - (-1)^k e^{-i\frac{k\pi x}{2L}}) \quad (4.14)$$

e pertanto:

$$\begin{cases} u_k(x) = 2c \cos(\frac{k\pi}{2L}x), & k \text{ dispari} \\ u_k(x) = 2c \sin(\frac{k\pi}{2L}x), & k \text{ pari} \end{cases} \quad (4.15)$$

E' possibile calcolare il valore della costante c imponendo la condizione di normalizzazione seguente:

$$\|u_k\|_{L^2(-L,L)}^2 = c_k^2 \int_{-L}^L |u_k(x)|^2 dx = 1 \quad (4.16)$$

Calcolando l'integrale si trova:

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{2L}} \quad (4.17)$$

Inoltre è facile verificare la relazione di ortogonalità

$$\langle u_k(x), u_m(x) \rangle = 0, \quad k \neq m \quad (4.18)$$

Si può dimostrare che i vettori ortonormali $\{u_k\}$ costituiscono una base nello spazio di Hilbert degli stati quantistici $L^2(-L, L)$.

Dunque ogni stato quantistico $\psi \in L^2(-L, L)$ può essere scritto come combinazione lineare infinita di stati di energia fissati:

$$\psi = \sum_{k=1}^{\infty} \psi_k u_k \quad (4.19)$$

con $\psi_k := \langle \psi, u_k \rangle$.

4.2 L'oscillatore armonico

L'oscillatore armonico, o oscillatore lineare, è un sistema meccanico particolarmente importante e, senza dubbio, di tutti i potenziali unidimensionali, risulta quello fondamentale. Infatti, in diversi campi della fisica, le piccole oscillazioni che il sistema compie attorno ad una posizione di equilibrio stabile, se sollecitato da una piccola perturbazione, risultano essere proprio oscillazioni armoniche. Cosa intendiamo con ciò?

Seguendo il testo di A. Galindo e P. Pascual [3], diremo che una particella ha moto armonico quando è soggetta ad una forza di richiamo proporzionale allo spostamento rispetto alla posizione di equilibrio ($x = 0$). La forza è

$$F = -Kx, \quad (4.20)$$

dove K è una costante di forza, per cui il suo potenziale è:

$$V = \frac{1}{2}Kx^2. \quad (4.21)$$

(Figura 4.1)

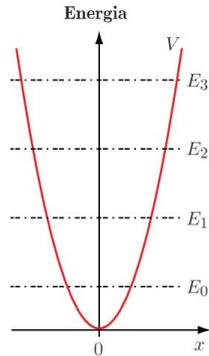


Figura 4.1: Potenziale

Esempi concreti in cui abbiamo oscillazioni armoniche attorno a posizioni di equilibrio stabile sono: le vibrazioni degli atomi in una molecola, le vibrazioni degli ioni in un reticolo cristallino, le oscillazioni del campo elettromagnetico della luce o delle onde radio, del quarzo negli orologi al quarzo, ecc..

Ci occupiamo qui della descrizione dell'oscillatore armonico in meccanica quantistica, limitandoci al caso più semplice, cioè quello unidimensionale.

L'Hamiltoniana in questione è

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}Kx^2, \quad (4.22)$$

il cui spettro ha solo una parte discreta ed è formato da un insieme infinito di valori nell'intervallo $(0, \infty)$ (essi sono gli autovalori E_n che calcoleremo successivamente).

Per convenienza di notazione, introduciamo le quantità

$$\omega \equiv \sqrt{K/m}, \quad \alpha \equiv \sqrt{M\omega/\hbar}, \quad \xi \equiv \alpha x, \quad \varepsilon \equiv 2E/\hbar\omega,$$

e l'operatore Hamiltoniano diventa

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} \left[-\frac{d}{d\xi^2} + \xi^2 \right]. \quad (4.23)$$

Data la grande importanza dell'oscillatore armonico, esso è stato ampiamente studiato. Principalmente, esistono due modi di risolvere questo problema; tralasciando il metodo algebrico *, ci soffermeremo esclusivamente sul metodo più comune, ovvero quello analitico, per risolvere l'equazione di Schrödinger.

Metodo Analitico. Cercheremo gli stati legati ψ dell'equazione di Schrödinger

$$-\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \xi^2\psi(\xi) = \varepsilon\psi(\xi). \quad (4.28)$$

Come si può facilmente verificare, siccome la parte dominante del comportamento asintotico di ψ data dalla (3.9) è $e^{-\xi^2/2}$, è conveniente operare un cambio di variabili, ponendo

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2}u(\xi),$$

*Brevemente, esso si basa esclusivamente sull'algebra di particolari operatori P e X . Definiamo gli operatori $a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)$, $a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)$, $N \equiv a^\dagger a$ (N è chiamato *operatore numero*.) Notiamo facilmente che N è un operatore autoaggiunto e definito positivo, e otteniamo immediatamente le seguenti relazioni di commutazione

$$[a, a^\dagger] = I, \quad [N, a] = -a, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (4.24)$$

In termini di questi nuovi operatori, l'Hamiltoniana (4.23) può essere scritta come

$$H = \hbar\omega\left[a^\dagger a + \frac{1}{2}\right] = \hbar\omega\left[N + \frac{1}{2}\right]. \quad (4.25)$$

Rimangono da trovare gli stati del sistema e i valori dell'energia. Ma gli autovalori di N sono anche quelli di H , per cui le energie degli autostati dell'oscillatore armonico sono quantizzate e valgono $(N + \frac{1}{2})\hbar\omega$, e gli autostati dell'energia sono gli autostati dell'operatore numero. [...] Infine, dalle (4.24), troviamo che le espressioni degli operatori posizione e quantità di moto (X e P) sono relazionate ad a , *operatore di distruzione*, e a^\dagger , *operatore di creazione*, come segue:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha X + iP/\hbar\alpha), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha X - iP/\hbar\alpha), \quad (4.26)$$

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a^\dagger + a), \quad P = \frac{i\alpha\hbar}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a). \quad (4.27)$$

e, conseguentemente, l'equazione da studiare risulterà

$$\frac{d^2u(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{du(\xi)}{d\xi} + (\varepsilon - 1)u(\xi) = 0. \quad (4.29)$$

Data la parità definita di u , sarà sufficiente studiare la regione $\xi \geq 0$, e tramite il cambiamento di variabili $y = \xi^2$, la (4.29) si trasforma nella seguente equazione ipergeometrica confluyente [†]:

$$y \frac{d^2v(y)}{dy^2} + \left(\frac{1}{2} - y\right) \frac{dv(y)}{dy} - \frac{1}{4}(1 - \varepsilon)v(y) = 0, \quad (4.30)$$

dove $v(y) \equiv u(\xi)$. Confrontando la (4.30) con un'equazione di Kummer generica, vediamo che la soluzione generale è

$$v(y) = Am \left(\frac{1 - \varepsilon}{4}, \frac{1}{2}, y \right) + By^{1/2} m \left(\frac{3 - \varepsilon}{4}, \frac{3}{2}, y \right), \quad (4.31)$$

dove A e B sono costanti di integrazione.

In generale la funzione $v(y)$ ha un comportamento asintotico del tipo $e^y = e^{\xi^2}$ e $\psi(x)$ non può essere normalizzata. Si deduce che $\varepsilon = 2n + 1$, e quindi gli **autovalori** E_n saranno

$$E_n(\hbar\omega) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.32)$$

ovvero le energie possibili per l'oscillatore armonico sono quantizzate.

Sostituendo gli ε nella (4.29) si nota che questa equazione è soddisfatta dai cosiddetti *polinomi di Hermite* $H_n(\xi)$ (definiti come: $H_n(x) \equiv (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$). $H_n(\xi)$ è di grado n in ξ , ha n nodi, ed è pari o dispari a seconda che n sia pari o dispari. Poichè $e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ non ha nodi ed è pari, allora anche l'intera

[†]Un'equazione ipergeometrica confluyente (o equazione di Kummer) è un'equazione differenziale lineare del secondo ordine, della forma $[z \frac{d^2}{dz^2} + (b - z) \frac{d}{dz} - a]w(z) = 0$, con a e b costanti complesse, con $b \neq -n$ (n intero non negativo). Una prima soluzione di essa è del tipo $M(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!}$. Una seconda soluzione è $U(a, b, z) = \frac{\pi}{\sin \pi b} \left[\frac{M(a, b, z)}{\Gamma(1+a-b)\Gamma(b)} - z^{1-b} \frac{M(1+a-b, 2-b, z)}{\Gamma(a)\Gamma(2-b)} \right]$ [3].

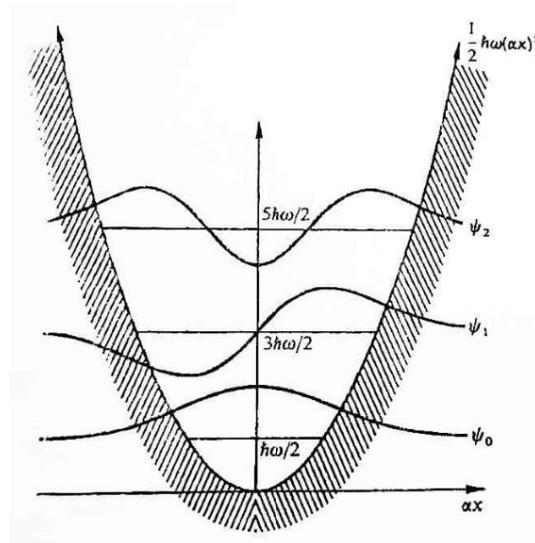


Figura 4.2: Funzioni d'onda e potenziale dell'oscillatore armonico quantistico.

autofunzione corrispondente all'autovalore dell'energia E_n , nonché

$$\psi_n(\xi) = H_n(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.33)$$

avrà n nodi e la stessa parità di n .

I polinomi di Hermite di ordine più basso sono

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi. \quad (4.34)$$

Lo spettro dell'energia dato dalla (4.32) si avvicina molto a quello postulato da Planck[‡], $E_n = n\hbar\omega$, il quale può essere ottenuto usando la condizione di quantizzazione di Sommerfeld.[§] In entrambi i casi i livelli di energia sono equidistanti, con separazione $\hbar\omega$, ma le origini sono differenti, poichè la (4.32) conduce all'energia di punto zero (in un sistema quantistico è il più basso livello energetico possibile) $\hbar\omega/2$, come richiesto dal principio di inde-

[‡]Max Planck (1858-1947) è stato un fisico tedesco, iniziatore della fisica quantistica e premio Nobel per la Fisica.

[§]Nel caso dell'oscillatore armonico la condizione di quantizzazione $J(E) = nh$ implica che i valori quantizzati dell'energia (livelli energetici) sono $E_n = n\hbar\omega$, con $n = 1, 2, \dots$

terminazione.

Come si può facilmente verificare, per piccoli n ($n \sim 1$), la differenza tra il comportamento classico e quantistico dell'oscillatore armonico è evidente. Per convincerci di ciò, seguendo la trattazione di A. Galindo e P. Pascual [3] considereremo un assemblaggio di oscillatori armonici dotati di egual massa e frequenza, e tutti aventi la stessa energia E .

La *densità di probabilità classica* di trovare un oscillatore armonico a distanza x dall'origine, che chiameremo $\mathcal{P}_{cl}(x)$, è

$$\mathcal{P}_{cl}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}, \quad A = (2E/m\omega^2)^{1/2}, \quad (4.35)$$

dove $|x| \leq A$, e A è l'ampiezza delle oscillazioni.

L'equazione (4.35) sta ad indicare che $\mathcal{P}_{cl}(x)$ risulta inversamente proporzionale alla velocità dell'oscillatore nel punto x . D'altro canto, la *densità di probabilità quantistica* $\mathcal{P}_{MQ}(x)$ per lo stato ψ_n , di energia E_n , è $|\psi_n(x)|^2$, e uno sguardo alla Figura 4.2 sarà sufficiente per convincerci che, se $n \sim 1$, quest'ultima densità di probabilità è sensibilmente differente da \mathcal{P}_{cl} , per la stessa energia. Ad ogni modo, se $n \gg 1$, il principio di corrispondenza annulla queste differenze [¶].

Un'applicazione elementare della variante del Teorema del viriale in meccanica quantistica ^{||} indica che, per l'oscillatore armonico nel suo stato ψ_n accade che

$$\langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega/2, \quad (4.36)$$

e quindi

$$\langle P^2 \rangle_n = (n + \frac{1}{2})m\hbar\omega = mE_n \quad (4.37)$$

[¶]Il Principio di corrispondenza afferma che i risultati della meccanica quantistica devono ridursi a quelli della meccanica classica nelle situazioni in cui l'interpretazione classica può essere considerata valida. Fu enunciato dal fisico danese Niels Bohr all'inizio del XX secolo.

^{||} $\langle K \rangle_\Psi = \frac{n}{2} \langle V \rangle_\Psi$, con K energia cinetica e V potenziale, che è una funzione omogenea di grado n . [3]

e

$$\langle X^2 \rangle_n = (n + \frac{1}{2})\hbar/m\omega = E_n/m\omega^2, \quad (4.38)$$

che coincidono con le espressioni della meccanica classica.

Questo risultato, che per il principio di corrispondenza è previsto per $n \gg 1$, per l'oscillatore armonico è soddisfatto per ogni n . Dato che $\langle P \rangle_0 = \langle T \rangle_0 = \frac{\hbar}{2}$, si ha che

$$\Delta_0 X \cdot \Delta_0 P = \frac{\hbar}{2}. \quad (4.39)$$

Dunque, lo stato fondamentale sarà un pacchetto d'onde che minimizza le incertezze sugli operatori.

Infine, tramite la trasformazione di Fourier di $\psi_n(x)$, possiamo ottenere le funzioni d'onda $\hat{\psi}_n(p)$ degli stati legati nella rappresentazione della quantità di moto. Tuttavia, non dobbiamo farlo esplicitamente, ma sarà sufficiente notare che queste funzioni $\hat{\psi}_n(p)$ abbiano la stessa struttura di $\psi_n(x)$, date l'invarianza dell'Hamiltoniana (4.22) e le regole canoniche di commutazione tra X e P tramite le trasformazioni $X \rightarrow P/m\omega$ e $P \rightarrow -M\omega X$. Ciò ci assicura che

$$\hat{\psi}_n(p) = \frac{c_n}{\sqrt{m\omega}} \psi_n(p/m\omega), \quad (4.40)$$

dove $|c_n| = 1$, poichè $\hat{\psi}_n(p)$ deve avere norma unitaria.

Per concludere questa breve esposizione sull'oscillatore armonico, seguendo il testo di A. Galindo e P. Pascual [3], discuteremo la sua evoluzione temporale nella cosiddetta *immagine di Heisenberg* **, e presenteremo una famiglia di stati, chiamati *stati coerenti*, i quali giocano un ruolo molto im-

**L'immagine di Heisenberg, o rappresentazione di Heisenberg, è una formulazione (in gran parte dovuta a Werner Heisenberg nel 1925) della meccanica quantistica in cui gli operatori incorporano una dipendenza dal tempo, mentre i vettori di stato sono indipendenti dal tempo. Essa è equivalente all'immagine di Schrödinger, in cui gli operatori sono costanti, e gli stati si evolvono nel tempo. Le due immagini differiscono solo per un cambiamento di base rispetto alla dipendenza dal tempo. L'immagine di Heisenberg è la formulazione della meccanica delle matrici in una base arbitraria, in cui l'Hamiltoniana non è necessariamente diagonale.

portante all'interno del contesto dell'ottica quantistica. ^{††}

1) Immagine di Heisenberg. Consideriamo il problema dell'oscillatore armonico all'interno dell'immagine di Heisenberg. Dato che tutti gli operatori che useremo sono assunti in questa rappresentazione, omettiamo la notazione H che lo denota. Dall'espressione per H , tenendo a mente che le regole di commutazione (4.24) si mantengono anche sotto un cambio di rappresentazione, otteniamo

$$[a(t), H] = \hbar\omega a(t), \quad [a^\dagger(t), H] = -\hbar\omega a^\dagger(t). \quad (4.41)$$

Quindi, le equazioni di evoluzione temporale ($i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \frac{\partial A_H(t)}{\partial t}$, [3]) per gli operatori di creazione e distruzione diventano

$$i \frac{da(t)}{dt} = \omega a(t), \quad i \frac{da^\dagger(t)}{dt} = -\omega a^\dagger(t), \quad (4.42)$$

e, dunque,

$$a(t) = a(0)e^{-i\omega t}, \quad a^\dagger(t) = a^\dagger(0)e^{i\omega t}. \quad (4.43)$$

Dalle equazioni (4.26) e (4.27), otteniamo quindi

$$X(t) = X(0) \cos \omega t + \frac{P(0)}{m\omega} \sin \omega t, \quad P(t) = P(0) \cos \omega t - m\omega X(0) \sin \omega t, \quad (4.44)$$

identiche alle espressioni classiche

$$\langle X \rangle = \langle X \rangle_0 \cos \omega(t-t_0) + \frac{\langle P \rangle_0}{m\omega} \sin \omega(t-t_0), \quad \langle P \rangle = \langle P \rangle_0 \cos \omega(t-t_0) - m\omega \langle X \rangle_0 \sin \omega(t-t_0).$$

2) Stati Coerenti. Ciò che abbiamo appena ricavato è il fatto che, per un pacchetto d'onda che segue le leggi della dinamica dell'oscillatore armonico

^{††}La coerenza quantistica era già stata nominata all'interno di questo lavoro, nella sezione 2.2.3.

co, i valori principali degli operatori posizione e quantità di moto obbediscono alle equazioni classiche del moto.

In generale, tuttavia, la forma del pacchetto d'onda cambia nel tempo. Esiste però una speciale classe di stati non stazionari la cui forma non cambia nel corso del tempo, ovvero un tipo di stato dell'oscillatore armonico quantistico la cui dinamica assomiglia molto al comportamento oscillatorio di un oscillatore armonico classico; questi stati sono di grande interesse negli studi quantistici di coerenza ottica, vediamone alcune proprietà rilevanti.

Formalmente, gli *stati coerenti* sono gli autostati dell'operatore a :

$$a |\underline{z}\rangle = z |\underline{z}\rangle, \quad (4.45)$$

dove z è un numero complesso. Questi stati coerenti $|\underline{z}\rangle$ si possono esprimere come combinazione lineare di $|n\rangle$ stati:

$$|\underline{z}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (4.46)$$

Sostituendo questa espressione nella (4.45) e tramite appropriate considerazioni deduciamo che $c_n = z c_{n-1}$, e che quindi $c_n = z^n c_0$.

Pertanto, gli stati $|\underline{z}\rangle$ saranno

$$|\underline{z}\rangle = e^{(-\frac{1}{2}|z|^2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (4.47)$$

permettendoci di affermare che $\sigma_p(a) = \mathbb{C}$ ^{‡‡}.

Una forma equivalente alla (4.47), cioè un altro modo di esprimere uno stato coerente è

$$|\underline{z}\rangle = e^{(-\frac{1}{2}|z|^2)} e^{(za^\dagger)|0\rangle}, \quad (4.48)$$

^{‡‡}Vedi Appendice A.

dove $|0\rangle$ rappresenta lo stato fondamentale.

Riscrivendo la quantità $za^\dagger = z(a^\dagger - a) + za$ nella (4.48), e usando le (4.26) e (4.27), si ottiene

$$|z\rangle = e^{\left[-\frac{1}{2}(|z|^2 - z^2)\right]} e^{\left[-\frac{i\sqrt{2}zP}{\alpha\hbar}\right]} |0\rangle. \quad (4.49)$$

L'operatore che appare nella (4.49) formalmente corrisponde a $V_{z\sqrt{2}/\alpha}$, definito come $V_\beta = e^{-i\beta P/\hbar}$, dove β è una costante reale arbitraria. Dal momento che z è complesso, questo operatore non è unitario se $\text{Im } z \neq 0$; ma siccome la funzione d'onda $|0\rangle$ è gaussiana, la serie di potenze di V converge quando agisce su questo stato, e produce la traslazione di $\psi_0(x)$ tramite la quantità $z\sqrt{2}/\alpha$, con il risultato

$$\psi_z(x) \equiv \langle x|\underline{z}\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{\left[-\frac{1}{2}(|z|^2 - z^2)\right]} \times e^{\left[-\frac{1}{2}(\alpha x - 2^{1/2}z)^2\right]}. \quad (4.50)$$

Per cercare le incertezze sugli operatori posizione e quantità di moto per gli stati $|\underline{z}\rangle$, seguendo il testo di A. Galindo e P. Pascual [3] si può procedere nel modo seguente: A partire dall'equazione (4.45), notiamo che $\langle \underline{z}|a|\underline{z}\rangle = z$, così come $\langle \underline{z}|a^\dagger|\underline{z}\rangle = z^*$ e $\langle \underline{z}|a^2|\underline{z}\rangle = z^2$, $\langle \underline{z}|a^{\dagger 2}|\underline{z}\rangle = z^{*2}$, e $\langle \underline{z}|a^\dagger a|\underline{z}\rangle = |z|^2$; inoltre, grazie alle regole di commutazione solite abbiamo $\langle \underline{z}|aa^\dagger|\underline{z}\rangle = 1 + |z|^2$. Servendoci delle (4.26) e (4.27) otteniamo

$$\langle \underline{z}|X|\underline{z}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(z^* + z), \quad \langle \underline{z}|P|\underline{z}\rangle = \frac{i\alpha\hbar}{\sqrt{2}}(z^* - z), \quad (4.51)$$

$$\langle \underline{z}|X^2|\underline{z}\rangle - \langle \underline{z}|X|\underline{z}\rangle^2 = \frac{1}{2\alpha^2}, \quad \langle \underline{z}|P^2|\underline{z}\rangle - \langle \underline{z}|P|\underline{z}\rangle^2 = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2}, \quad (4.52)$$

e dunque $\Delta_z X = 1/\sqrt{2}\alpha$, e $\Delta_z P = \alpha\hbar/\sqrt{2}$, e ciò conferma il fatto che il pacchetto d'onda $\langle x|\underline{z}\rangle$ minimizza le incertezze degli operatori.

Se lo stato $|z, t\rangle \equiv |\underline{z}\rangle$ è preparato all'istante $t = 0$, la sua evoluzione

temporale sarà data da

$$|\underline{z}, t\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\underline{z}\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t(n+1/2)} |n\rangle, \quad (4.53)$$

cosicchè

$$|\underline{z}, t\rangle = e^{-i\omega t/2} |\underline{ze^{-i\omega t}}\rangle, \quad (4.54)$$

che ci permette di affermare che la coerenza di questi stati si mantiene anche con l'evolvere del tempo. Inoltre, si mostra facilmente che l'Hamiltoniana più generale $H(t)$ sotto cui ogni stato coerente si mantiene come tale è

$$H(t) = H + f_1(t)X + f_2(t)P + g(t), \quad (4.55)$$

dove H è l'hamiltoniana dell'oscillatore armonico dell'equazione (4.22), e f_1 , f_2 e g sono funzioni reali arbitrarie del tempo.

Dalle espressioni (4.51), (4.52) e (4.54)

$$\langle \underline{z}, t | X | \underline{z}, t \rangle = \langle \underline{z} | X | \underline{z} \rangle \cos \omega t + \frac{\langle \underline{z} | P | \underline{z} \rangle}{M\omega} \sin \omega t, \quad (4.56)$$

$$\langle \underline{z}, t | P | \underline{z}, t \rangle = \langle \underline{z} | P | \underline{z} \rangle \cos \omega t - M\omega \langle \underline{z} | X | \underline{z} \rangle \sin \omega t, \quad (4.57)$$

e quindi i valori medi degli operatori posizione e quantità di moto nello stato $|\underline{z}, t\rangle$ oscillano come un sistema classico.

La funzione d'onda corrispondente allo stato $|\underline{z}, t\rangle$ è

$$\Psi_z(x; t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-i\omega t/2} e^{[-\frac{1}{2}(|z|^2 - z^2 e^{-2i\omega t})]} \times e^{[-\frac{1}{2}(\alpha x - 2^{1/2} z e^{-i\omega t})^2]}. \quad (4.58)$$

A partire da questa espressione, e usando le (4.51), (4.52), (4.56) e (4.57), un semplice calcolo ci permette di scrivere

$$|\Psi_z(x; t)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{(-\alpha^2 [x - \langle \underline{z}, t | X | \underline{z}, t \rangle]^2)}, \quad (4.59)$$

e ciò sta a significare che la densità di probabilità del pacchetto d'onda è invariante nel tempo, relativamente al centro del pacchetto $\langle z, t | X | z, t \rangle$, che oscilla in accordo con le leggi della meccanica classica.

È interessante notare che gli stati coerenti non minimizzano solo le incertezze rispetto alla posizione e alla quantità di moto, ma anche quelle su energia e tempo. Infatti, il calcolo precedente implica

$$\langle z | H | z \rangle = (|z|^2 + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad \langle z | H^2 | z \rangle = (|z|^4 + 2|z|^2 + \frac{1}{4})\hbar^2\omega^2, \quad (4.60)$$

e quindi l'incertezza sull'energia è $\Delta_z H = \hbar\omega|z|$. D'altra parte, l'ampiezza del pacchetto d'onda è $\Delta_z X = 1/\sqrt{2}\alpha$, e il suo centro, nel moto oscillatorio, ha una velocità massima $v = (\sqrt{2}\alpha\hbar/M)|z|$, come possiamo dedurre dalle (4.56) e (4.57). Se la velocità massima viene raggiunta all'istante t_0 , è chiaro che il tempo caratteristico $\tau_{|z, t_0}(X) + \hbar/2\Delta_z H$, cosicché $|z, t_0\rangle$ è minimale rispetto alla coppia energia-tempo, come avevamo anticipato.

Infine, elenchiamo alcune proprietà matematiche degli stati coerenti:

1. Due stati coerenti $|z_1\rangle$ e $|z_2\rangle$ si sovrappongono sempre, dalla (4.47) si ha

$$\langle z_1 | z_2 \rangle = e^{[-\frac{1}{2}|z_2 - z_1|^2 + i\text{Im}(z_2^* z_1)]} \neq 0 \quad (4.61)$$
2. Gli stati coerenti $|z\rangle$ sono funzioni continue di z . Infatti, a partire dalla (4.61), vediamo facilmente che $\| |z_1\rangle - |z_2\rangle \|$ tende a 0 quando $z_2 \rightarrow z_1$.
3. Nello spazio delle funzioni analitiche $f(z)$ della forma

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{n!} z^n \quad (4.62)$$

con $\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 < \infty$, possiamo introdurre un prodotto scalare

$$(f, g) \equiv \frac{1}{\pi} \int_{\mathcal{R}^2} d^2z f^*(z) g(z) e^{-|z|^2}, \quad (4.63)$$

dove $d^2z \equiv dxdy$, dando a questo spazio la struttura di spazio di Hilbert. Si nota che se $|\psi\rangle$ è uno stato dell'oscillatore armonico, e noi definiamo $\psi(z^*) \equiv \langle \underline{z} | \psi \rangle$, allora

$$\psi(z) = e^{-|z|^2/2} f_\psi(z), \quad f_\psi(z) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \langle n | \psi \rangle, \quad (4.64)$$

dove $f_\psi(z)$ appartiene al particolare spazio di Hilbert. La corrispondenza $|\underline{z}\rangle \rightarrow f_\psi(z)$ stabilisce un isomorfismo tra lo spazio di Hilbert degli stati dell'oscillatore armonico e quello del nuovo spazio. In particolare,

$$|n\rangle \rightarrow \frac{z^n}{\sqrt{n!}}. \quad (4.65)$$

4. Sotto questo isomorfismo, gli operatori di creazione e distruzione a^\dagger e a agiscono come segue:

$$a : f(z) \rightarrow \frac{df(z)}{dz}, \quad a^\dagger f(z) \rightarrow zf(z). \quad (4.66)$$

5. Tenendo presente questo isomorfismo, è chiaro che $\{|\underline{z}\rangle\}$ è una base, sebbene non ortogonale. Dal fatto che $f(z)$ sono funzioni analitiche segue che anche ogni insieme $\{|\underline{z}_\alpha\rangle\}$ con un numero finito di punti d'accumulazione è una base. Inoltre, si può provare che ogni insieme finito $\{|\underline{z}_\alpha\rangle\}$ sia linearmente indipendente e che, per esempio,

$$\int_{\mathbb{R}^2} d^2z z^p |\underline{z}\rangle = 0 \quad (4.67)$$

per $p = 1, 2, \dots$

Appendice A

Notazione e definizioni di base

* Useremo \mathcal{H} per denotare uno *spazio di Hilbert complesso e separabile* con un prodotto scalare $\langle \cdot, \cdot \rangle$ e una norma associata $\|\cdot\|$. L'insieme degli operatori lineari definiti su \mathcal{H} sarà denotato con $A(\mathcal{H})$.

Se $A : D(A) (\subset \mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{H}$ è un operatore lineare definito nel sottospazio $D(A)$, diremo che $D(A)$ è il suo dominio e $R(A) \equiv AD(A)$ è l'immagine di $D(A)$ tramite A .

Dati A e $\lambda \in \mathbb{C}$, diremo che λ appartiene all'*insieme risolvente* $\rho(A)$ se $\overline{R(\lambda I - A)} = \mathcal{H}$, $(\lambda I - A)^{-1} \equiv R_\lambda(A)$ esiste (*operatore risolvente per A in λ*) ed è limitato. L'insieme $\rho(A)$ è aperto.

Definizione Il complementare di $\rho(A)$, ovvero $\mathbb{C} - \rho(A) \equiv \sigma(A)$, è chiuso ed è chiamato lo *spettro* di A .

Definizione I punti di $\sigma(A)$ possono essere classificati come segue:

- $\sigma_c(A)$ (spettro *continuo*): $\lambda \in \sigma_c(A)$ se $\overline{R(\lambda I - A)} = \mathcal{H}$, e $R_\lambda(A)$ esiste e non è limitato.
- $\sigma_r(A)$ (spettro *residuo*): $\lambda \in \sigma_r(A)$ se $\overline{R(\lambda I - A)} \neq \mathcal{H}$, e $R_\lambda(A)$ esiste.

*Per l'Appendice A seguiamo il testo [3].

- $\sigma_p(A)$ (spettro *puntuale*): $R_\lambda(A)$ non esiste. Allora $(A - \lambda I)\psi = 0$ ha una soluzione non banale ψ ; λ è chiamata *autovalore* di A e ψ *autovettore*.

$\sigma_c, \sigma_r, \sigma_p$ sono a due a due disgiunti e $\sigma(A) = \sigma_c(A) \cup \sigma_r(A) \cup \sigma_p(A)$.

Adesso chiariamo il significato di *operatore aggiunto* e, per farlo, avremo bisogno di definire preliminarmente il suo dominio.

Definizione Dato A si definisce il dominio dell'*operatore aggiunto* A^\dagger come $D(A^\dagger) := \{\vartheta \in \mathcal{H} : \exists \eta \in \mathcal{H} : \langle A\zeta, \vartheta \rangle = \langle \zeta, \eta \rangle \forall \zeta \in D(A)\}$, e A^\dagger come $A^\dagger \vartheta = \eta$ ($D(A)$ è denso $\Rightarrow \exists! \eta$).

Definizione A è detto *simmetrico* o *Hermitiano* se $A \subset A^{\dagger, \dagger}$.

Definizione Diremo che A è *autoaggiunto* quando $A = A^\dagger$.

Teorema A.0.1. Teorema Spettrale: Dato un operatore autoaggiunto A in \mathcal{H} , esiste una partizione (finita o infinita numerabile)

$$\mathbb{R} = \cup_1^N B_i, \quad N \geq \aleph_0$$

di \mathbb{R} negli insiemi di Borel B_i e una misura di Borel μ^\ddagger non negativa tale che A sia equivalente all'operatore A' , in

$$\mathcal{H}' \equiv \underbrace{\oplus_{n=1}^N [L^2(B_n, d\mu) \oplus \cdots \oplus L^2(B_n, d\mu)]}_{n \text{ addendi}}, \quad (\text{A.1})$$

[†]Diremo che $A \subseteq B$ se date $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ e $B : D(B) \rightarrow \mathcal{H}$, allora $D(A) \subseteq D(B)$ e $B|_{D(A)} = A$.

[‡]Un *insieme di Borel* è un generico insieme contenuto nella σ -algebra di Borel. Una *misura di Borel* è una misura definita su una σ -algebra di Borel.

con dominio

$$D(A') \equiv \{(f_1, (f_{21}, f_{22}), \dots) \in \mathcal{H}' : \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^n \int_{B_n} x^2 |f_{ni}(x)| d\mu < \infty\}. \quad (\text{A.2})$$

Questa realizzazione, o *rappresentazione spettrale di A* è unica, nel senso che dati altri B'_1, \dots, B'_N insiemi di Borel, e un'altra μ' , allora $\mu \simeq \mu'$ §, $N = N'$, $eB'_i = B_i$, quasi ovunque rispetto a μ . Questo determina A , a meno di equivalenze.

Definizione Per ogni insieme di Borel B avente funzione caratteristica χ_B , $\chi_B(A)$ è una proiezione ortogonale che denoteremo con $E_A(B)$, o più semplicemente con $E(B)$. L'associazione $B \rightarrow E(B)$ definisce la *misura spettrale* associata ad A , e $E(B)$ è chiamata *proiezione spettrale* di A associata a B . La famiglia E determina univocamente A tramite

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE_{\lambda}, \quad (\text{A.3})$$

dove $E_{\lambda} \equiv E((-\infty, \lambda])$.

Dato un operatore autoaggiunto A , sappiamo che $\sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \subset \mathbb{R}$. Inoltre, λ reale $\in \sigma(A) \Leftrightarrow E_{\lambda}$ non è costante in alcun intorno di λ : $E_{\lambda+\epsilon} - E_{\lambda-\epsilon} \neq 0, \forall \epsilon > 0$, e λ reale $\in \sigma_p(A) \Leftrightarrow E_{\lambda} \neq E_{\lambda-0}$, cioè se E_{μ} è discontinuo in $\mu = \lambda$.

Se noi rimuovessimo la *parte puntuale* $\mu_{p.p} \equiv \sum_{\lambda} \mu(\{\lambda\})\delta_{\lambda}$ da μ , dove $\delta_{\lambda} : B \rightarrow 0(1)$ se $\lambda \notin B$ ($\lambda \in B$), avremmo $\mu_c = \mu - \mu_{p.p}$, dove μ_c è anch'essa una misura ed è detta *parte continua*, ovvero non ha punti puri (cioè quelli tali che $\mu_c(\{\lambda\}) = 0, \forall \lambda$). A sua volta, possiamo decomporre μ_c in una parte *assolutamente continua* $\mu_{a.c.}$ e in una parte $\mu_{c.s.}$ *continua singolare*.

§Il simbolo \simeq sta ad indicare che la misura alla sua sinistra e quella alla sua destra hanno gli stessi insiemi di misura nulla.

Riassumendo, abbiamo $\mu = \mu_{p.p.} + \mu_{s.c.} + \mu_{a.c.}$, e di conseguenza

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{p.p.} \oplus \mathcal{H}_{c.s.} \oplus \mathcal{H}_{a.c.}, \quad (\text{A.4})$$

e

$$A_{p.p.} \equiv A|_{\mathcal{H}_{p.p.}} \quad A_{c.s.} \equiv A|_{\mathcal{H}_{c.s.}} \quad A_{a.c.} \equiv A|_{\mathcal{H}_{a.c.}}, \quad (\text{A.5})$$

sono tutti operatori autoaggiunti, con le misure associate $\mu_{p.p.}$, $\mu_{c.s.}$ e $\mu_{a.c.}$.

Definiamo poi $\sigma_{p.p.}(A) \equiv \sigma(A_{p.p.})$, $\sigma_{c.s.}(A) \equiv \sigma(A_{c.s.})$, $\sigma_{a.c.}(A) \equiv \sigma(A_{a.c.})$, e osserviamo che $\sigma = \sigma_{p.p.} \cup \sigma_{c.s.} \cup \sigma_{a.c.}$.

Un'altra decomposizione comune dello spettro di A è la seguente:

$\sigma_{disc}(A) \cup \sigma_{ess}$, dove σ_{disc} è lo spettro *discreto*, cioè

$\sigma_{disc}(A) \equiv \{\lambda \in \sigma_p(A) : \lambda \text{ ha molteplicità finita ed è isolato in } \sigma(A)\}$

e $\sigma_{ess}(A)$ è lo spettro *essenziale* definito come $\sigma_{ess}(A) \equiv \sigma(A) - \sigma_{disc}(A)$.

Appendice B

Condizioni matematiche

In questa Appendice raccogliamo alcune nozioni matematiche riguardanti le Hamiltoniane unidimensionali in $L^2(I)$, dove $I = (a, b) \subset \mathbb{R}$, associate all'operatore differenziale

$$\tau \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}V(x). \quad (\text{B.1})$$

Per semplicità porremo $U(x) \equiv -\frac{2m}{\hbar^2}V(x)$.

L'operatore differenziale τ della (B.1) può essere studiato in tre diverse circostanze, a seconda che I sia finito, semi-finito, oppure tutto \mathbb{R} .

D'ora in poi assumeremo che $U \in L^1_{loc}(I)$, ovvero $U \in L^1(\alpha, \beta)$, $\forall \alpha, \beta$ tali che $a < \alpha < \beta < b$.

Sia τ_1 l'operatore differenziale (B.1) il cui dominio $D(\tau_1)$ contiene le funzioni $\psi(x)$ definite in I , tali che ψ, ψ' siano assolutamente continue in ogni sottointervallo compatto di (a, b) , $\psi, \tau_1(\psi) \in L^2(I)$. In modo analogo, τ_0 indica la chiusura di τ_1 , ovvero l'insieme $\{\psi \in D(\tau_1) : \text{supp } \psi \text{ è compatto in } I\}$.

Allora gli indici di difetto di τ_0^* soddisfano la disuguaglianza sottostante

*Dato un operatore simmetrico τ_0 e un numero λ , il numero cardinale $d_\lambda(A) \equiv \dim[\mathcal{H} \ominus \mathcal{R}(\lambda\mathcal{I} - A)]$ è costante. I numeri cardinali $d_\pm \equiv d_{\pm i}(A)$ sono chiamati *indici di difetto* di τ_0 . Allora risulta che $d_\pm(A) = \dim\{\varphi \in \mathcal{H} : A^\dagger = \pm i\varphi\}$, dove con A^\dagger intendiamo un operatore aggiunto [3].

(poichè τ è del secondo ordine):

$$d(\tau_0) \equiv d_+(\tau_0) = d_-(\tau_0) \leq 2. \quad (\text{B.2})$$

L'operatore Hamiltoniano H deve essere un'estensione autoaggiunta di τ_0^\dagger . Quindi, esso sarà considerato una restrizione simmetrica di τ_1 , avente il dominio ottenuto da $D(\tau_1)$ tramite l'imposizione delle **condizioni al contorno** necessarie quando $d(\tau_0) = 0$; ciò spiega perchè è importante calcolare questo indice di difetto:

1. se τ è *regolare* (I finito, $U \in L^2(I)$), $d(\tau_0) = 2$;
2. se a è un *estremo regolare* (a finito, $U \in L^1(\alpha, \beta)$, $\beta < b$), accade uno dei due seguenti casi

$$\begin{cases} d(\tau_0) = 1 \\ d(\tau_0) = 2 \end{cases}$$

(Vale lo stesso per b estremo regolare);

3. se $c \in I$, e τ_0^-, τ_0^+ sono i τ_0 associati a τ in (a, c) , (c, b) rispettivamente:

$$d(\tau_0) = d(\tau_0^-) + d(\tau_0^+) - 2. \quad (\text{B.3})$$

Nel primo caso, imponendo le condizioni al contorno “disaccoppiate”

$$\begin{cases} \cos \alpha \psi(a) + \sin \alpha \psi'(a) = 0 \\ \cos \beta \psi(b) + \sin \beta \psi'(b) = 0 \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

(α, β numeri reali arbitrari) per restringere $D(\tau_0)$, otteniamo una famiglia di estensioni autoaggiunte di τ_0 . In particolare, la scelta $\alpha = \beta = 0$ fornisce l'estensione di Friedrichs di τ_0^\dagger , che è semilimitata.

[†]Quando $A = A^\dagger$ diremo che A è *autoaggiunto* [3].

[‡]L'*estensione di Friedrichs* è un'estensione autoaggiunta A_F caratterizzata dalla restrizione di A^\dagger all'insieme $\mathcal{H}_A \cap D(A^\dagger)$ [3].

Nel caso in cui $d(\tau_0) = 1$, ogni estensione autoaggiunta di τ_0 sarà determinata da

$$\cos \alpha \psi(a) + \sin \alpha \psi'(a) = 0, \quad (\alpha \text{ numero reale arbitrario}). \quad (\text{B.5})$$

Una volta scelta un'estensione autoaggiunta di τ_0 , lo *spettro essenziale* è indipendente dall'estensione e lo chiameremo $\sigma_{ess}(\tau_0)$. Se lo spettro è assolutamente continuo lo denoteremo con $\sigma_{a.c.}(\tau_0)$. Inoltre, usando la notazione del terzo caso:

$$\sigma_{ess}(\tau_0) = \sigma_{ess}(\tau_0^-) \cup \sigma_{ess}(\tau_0^+), \quad \sigma_{a.c.}(\tau_0) = \sigma_{a.c.}(\tau_0^-) \cup \sigma_{a.c.}(\tau_0^+), \quad (\text{B.6})$$

dove $H_{a.c.} \simeq (H^-)_{a.c.} \oplus (H^+)_{a.c.}$, intendendo con H, H^+, H^- le estensioni autoaggiunte di $\tau_0, \tau_0^+, \tau_0^-$, rispettivamente.

Le relazioni (B.3) e (B.6) ci mostrano come ottenere informazioni riguardo al caso $I = \mathbb{R}$, a partire dai risultati su \mathbb{R}_\pm .

Di seguito formuliamo alcuni risultati riguardo le proprietà spettrali delle estensioni autoaggiunte di τ_0 per i tre casi citati sopra e per il caso $I = \mathbb{R}$:

1) Caso regolare

Ogni estensione autoaggiunta H di τ_0 è semilimitata, e $\sigma(H) = \sigma_{disc}(H)$. Se le condizioni al contorno che definiscono H sono disaccoppiate (B.4), allora $\sigma(H)$ sarà semplice, e se $\epsilon_0 < \epsilon_1 < \dots$ sono i punti di $\sigma(H)$ e $\psi_0, \psi_1 \dots$ le autofunzioni corrispondenti, allora essi soddisfano il teorema di Sturm. [§]

2) Caso semi-infinito, estremo regolare

Fissiamo $I = \mathbb{R}_+$. Sia H un'estensione autoaggiunta di τ_0 , e distinguiamo i vari comportamenti di $U(x)$ quando $x \rightarrow \infty$:

2.1) se $U = a + U_1$, con $U_1 \in L^1_\delta(\mathbb{R}_+)$ e $\delta \geq 0$.

Allora:

[§]Teorema 3.1.1, Capitolo 3.

$d(\tau_0) = 1$, H è semilimitata, $\sigma(H)$ è semplice, e
 $\sigma_{ess}(H) = \sigma_{a.c.}(H) = [a, \infty)$.

2.2) se $U \in C^2(x_0, \infty)$; U' , U'' non cambiano segno all'interno di
 (x_0, ∞) e $U' = O(|U|^\alpha)$, $0 < \alpha < 3/2$, $x \rightarrow \infty$.

Allora:

2.2.1) $U(x) \rightarrow \infty$, $x \rightarrow \infty \Rightarrow d(\tau_0) = 1$, H è semilimitata, $\sigma(H)$ è
semplice, e $\sigma_{ess}(H) = \emptyset$.

2.2.2) $U(x) \rightarrow -\infty$, $x \rightarrow \infty$, l'integrale di $|U|^{-1/2}$ su tutto \mathbb{R} è
finito $\Rightarrow d(\tau_0) = 1$, $\sigma(H)$ è semplice e $\sigma(H) = \sigma_c(H) = \mathbb{R}$.

Nella decomposizione spettrale di H ¶ troviamo una parte continua.
Le autofunzioni generalizzate $\psi_\lambda(x)$, con $\lambda \in \sigma(H)$, soddisfano l'equa-
zione differenziale $(\tau - \lambda)\psi(x) = 0$, e la condizione al contorno (B.5)
associata a H . Inoltre, come funzione di x , $\psi_\lambda(x)$ è polinomialmente
limitata^{||} per quasi tutti i λ (rispetto alla misura spettrale μ di H).

L'espansione di una funzione $f \in L^2(\mathbb{R}_+)$ nei termini ψ_λ (in analo-
gia all'espansione in serie di Fourier con seni e coseni) è data dalla
seguente forma:

definiamo i coefficienti della decomposizione

$$\tilde{f}(\lambda) \equiv \lim_{J_n \rightarrow \mathbb{R}_+} \int_{J_n} dx \psi_\lambda^*(x) f(x), \quad (\text{B.7})$$

dove J_n è una successione crescente di insiemi compatti. Tale limite
esiste in senso stretto rispetto a $L^2(\sigma(H), d\mu)$, e

$$f(x) = \lim_{A \rightarrow \infty} \int_{[-A, A] \cap \sigma(H)} d\sigma(\lambda) \tilde{f}(\lambda) \psi_\lambda(x), \quad (\text{B.8})$$

¶Vedere Appendice A per la terminologia.

^{||}Si dice che una funzione $f(n)$ è *polinomialmente limitata* se $f(n) = O(n^k)$ per qualche
costante k .

dove anche il limite in $L^2(\mathbb{R}_+)$ è in senso stretto, e σ è una misura equivalente a μ .

Nel caso 2.2.1), la (B.8) si riduce a una somma ordinaria sopra le autofunzioni $\psi_{\lambda_j}(x)$ di H . Nel caso 2.1) e $\delta > 1$ possiamo provare che $\sigma_{c.s}(H) = \emptyset$, $\psi_\lambda \in L^\infty(\mathbb{R}_+)$ quasi ovunque in $[a, +\infty)$, e possiamo normalizzare ψ_λ cosicchè

$$f(x) = \sum_{\lambda_j \in \sigma_p(H)} \langle \psi_{\lambda_j} | f \rangle \psi_{\lambda_j}(x) + \lim_{A \rightarrow \infty} \int_a^A d\lambda \tilde{f}(\lambda) \psi_\lambda(x). \quad ** \quad (B.9)$$

Questi ψ_{λ_j} , con $\lambda_j \in \sigma_p(H)$ e $\lambda_j < \lambda^* \equiv \inf \{ \lambda : \lambda \in \sigma_{ess}(H) \}$ soddisfanno il Teorema di Sturm^{††}, e ne abbiamo in numero finito nel caso 2.1) se

$$\underline{\lim} x^2(U(x) - \lambda^*) > -\frac{1}{4}, \quad x \rightarrow \infty$$

e in numero infinito se

$$\overline{\lim} x^2(U(x) - \lambda^*) < -\frac{1}{4}, \quad x \rightarrow \infty.$$

3) Caso semi-infinito, estremo non regolare

Avvaliamoci della notazione usata finora e assumiamo che il comportamento di $U(x)$ quando $x \rightarrow \infty$ sia della forma 2.1), 2.2.1) o 2.2.2). Non avendo la regolarità nell'origine, limitiamo la nostra considerazione al caso in cui

$$U(x) \geq -\frac{\alpha}{x^2}, \quad \alpha < \frac{1}{4}, \quad x \rightarrow 0, \quad (B.10)$$

**Se $\langle \psi_1 |, \langle \psi_2 | \in \mathcal{H}$ spazio di Hilbert, il loro prodotto scalare sarà indicato con $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$, lineare a destra

$$\langle \psi_2 | \alpha \psi + \beta \psi' \rangle = \alpha \langle \psi_2 | \psi \rangle + \beta \langle \psi_2 | \psi' \rangle$$

e antilineare a sinistra

$$\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle^*,$$

dove α e β sono numeri complessi arbitrari.

Il simbolo $\langle \psi |$ è chiamato *bra*, ed è associato a *ket* $|\psi\rangle$; la notazione bra-ket, o *formalismo di Dirac*, fu introdotta da Paul A. M. Dirac nel 1930 [3].

††Teorema 3.1.1, Capitolo 3.

distinguendo le due possibilità

$$\underline{\lim}_{x \rightarrow 0} x^2 U(x) \geq \frac{3}{4} \quad (\text{B.11})$$

e

$$\overline{\lim}_{x \rightarrow 0} |x^2 U(x)| < \frac{3}{4}. \quad (\text{B.12})$$

Allora, nella prima delle due alternative, $d(\tau_0) = 0$, cioè $H = \tau_0$; nella seconda avremo $d(\tau_0) = 1$ e sarà necessario imporre una condizione al contorno al fine di determinare H , ed essa sarà associata all'estremo finito.

Nel primo caso, $\forall \psi \in D(H)$, $\lim_{x \rightarrow 0} \psi(x) \equiv \psi(0) = 0$ esiste; nel secondo caso dobbiamo scegliere la condizione $\psi(0) = 0$, che è l'unica adatta al caso.

Si può vedere che

2.1) + (B.10) $\Rightarrow H$ semilimitato, $\sigma(H)$ semplice,

$\sigma_{ess}(H) = \sigma_{a.c.}(H) = [a, \infty)$.

2.2.1) + (B.10) $\Rightarrow H$ semilimitato, $\sigma(H)$ semplice, $\sigma_{ess}(H) = \emptyset$

2.2.2) + (B.10) $\Rightarrow \sigma(H)$ semplice, $\sigma(H) = \sigma_c(H) = \mathbb{R}$.

La decomposizione spettrale di H è analoga a quella vista nel caso 2). Le funzioni $\psi_\lambda(x)$ (quasi ovunque polinomialmente limitate rispetto a μ come funzione di x) devono soddisfare la condizione al contorno in $x = 0$ nel caso in cui (B.12) sia soddisfatta, e sceglieremo $\psi_\lambda(0) = 0$; invece, se siamo nel caso (B.11), non sarà necessario imporre la condizione al contorno.

Ad ogni modo, siccome lo spettro essenziale di τ_0 nell'intervallo $(0, a)$, con $a < \infty$, è vuoto, ψ_λ dovrà appartenere a $L^2(0, a)$ e dunque essa sarà la soluzione di $(\tau - \lambda)\psi = 0$ che soddisfa $\psi_\lambda(0) = 0$.

Infine, anche in questo caso, il Teorema di Sturm è ancora valido.

4) Caso $I = \mathbb{R}$

In questo caso, ad ogni estremo $x \rightarrow \pm\infty$ siamo in uno dei casi 2.1), 2.2.1) o 2.2.2). Con l'ausilio delle relazioni (B.3) e (B.6) arriviamo alle seguenti conclusioni; per esempio:

$2.1)_\infty + 2.1)_{-\infty} \Rightarrow d(\tau_0) = 0$, H è semilimitato, $\sigma_{ess}(H) = \sigma_{a.c}(H) = [\min(a_-, a_+), \infty)$, $\sigma_p(H)$ è semplice, $(\min(a_-, a_+), \max(a_-, a_+))$ ha molteplicità 1, $(\max(a_-, a_+), \infty)$ ha molteplicità 2;

$2.1)_\infty + 2.2.1)_{-\infty} \Rightarrow d(\tau_0) = 0$, H è semilimitato, $\sigma(H)$ è semplice, $\sigma_{ess}(H) = \sigma_{a.c}(H) = [a_+, \infty)$;

indicando con a_\pm i valori di $U(x)$ per $x \rightarrow \pm\infty$.

Nella decomposizione spettrale dobbiamo prendere due soluzioni $\psi_{\lambda,1}$, $\psi_{\lambda,2}$ di $(\tau - \lambda)\psi = 0$, con λ di molteplicità 2, e in (B.8) σ diventa una matrice quadrata di dimensione 2. Quando la molteplicità di λ è 1, ψ_λ sarà una funzione L^2 agli estremi $\pm\infty$, tale che un intorno di λ non contenga nessun punto dello spettro essenziale di τ_0 ristretto a \mathbb{R}_\pm rispettivamente. Quindi, se $a_- < a_+$ nel caso $2.1)_\infty + 2.1)_{-\infty}$ ψ_λ deve appartenere a $L^2(\mathbb{R}_+)$, con $\lambda \in (a_-, a_+)$. Infine, vale il teorema di Sturm, così come entrambi i criteri (B.11) e (B.12), nel senso che nel caso $2.1)_\infty + 2.1)_{-\infty}$ è garantita la finitezza del numero di autovalori quando (B.11) è soddisfatta in qualsiasi estremo in cui abbiamo $U(x) \rightarrow \lambda^*$, mentre affinché sia soddisfatto (B.12) è sufficiente che in uno degli estremi il numero di $\lambda_j \in \sigma_p(H)$, con $\lambda_j < \lambda^*$, sia infinito. Quando un estremo è del tipo 2.1) e l'altro è del tipo 2.2.1) il criterio viene applicato all'estremo 2.1).

Bibliografia

- [1] Edwin C. Kemble: *The fundamental principles of quantum mechanics with Elementary Applications*. McGraw-Hill Book Company, New York and London (1937).
- [2] Stephen W. Hawking, Roger Penrose: *La natura dello spazio e del tempo*. BUR, Milano (2015).
- [3] Alberto Galindo, Pedro Pascual: *Quantum Mechanics I*. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (1990).
- [4] Erwin Schrödinger: *Quantisierung als Eigenwertproblem*, Annalen der Physik, Vol. 79, pp. 361-376 (1926).
- [5] Christiaan Huygens: *Traité de la Lumière*. Dunod, Parigi (2005)-Ristampa dell'edizione originale del 1690.
- [6] Richard P. Feynman, Robert B. Leighton e Matthew L. Sands: *The Feynman Lectures on Physics*, Vol.3. Basic Books, New York (2011).
- [7] Erwin Schrödinger: *La situazione attuale nella meccanica quantistica [1935]*. Traduzione italiana. Sicania, Messina (2012).