

VI.5 I primi passi verso una nuova meccanica

INTRODUZIONE

Inizialmente avevo pensato che, per sbrigarmela con la meccanica quantistica in un corso di Fisica Generale, sarebbe bastato un solo capitolo ma non è andata così. I capitoli, abbastanza corposi, sono diventati due e probabilmente per dare conto di tutti gli sviluppi più recenti diventeranno tre.

Questo primo capitolo, nella prima parte riprende la parte introduttiva che avevo scritto quando ancora insegnavo (nel 2007). L'idea è quella di fornire un quadro di quella *fase incasinata* iniziata a fine XIX secolo e proseguita sino ai primi due decenni del XX.

Dopo che con gli sviluppi della sintesi maxwelliana dell'elettromagnetismo e con la riduzione della termodinamica classica (con le sue leggi generali piuttosto bizzarre) alla meccanica statistica, nel mondo della scienza si era pensato che, dà lì in poi, si sarebbe trattato solo di applicare l'indagine del mondo fisico a modelli che la riconducessero alle leggi generali già note.

Come sappiamo non è andata così; le nuove scoperte evidenziavano originalità della natura che mal si conciliavano con le leggi note. Per esempio, man mano che si faceva strada (con la scoperta dell'elettrone e con i lavori di Rutherford sulla esistenza di un nucleo atomico) una ipotesi di modello atomico di tipo planetario, nascevano problemi legati al fatto che le cariche elettriche in moto circolare (e dunque accelerato) avrebbero dovuto emettere onde elettromagnetiche perdendo energia e gli atomi planetari sarebbero collassati in una infinitesima frazione di secondo.

Il primo paragrafo riprende quanto già descritto nel capitolo 4 relativamente a questo procedere a tentoni ogni qual volta un nuovo esperimento portava alla scoperta di una nuova bizzarria; pian piano ci si rende conto che bisogna rovesciare il quadro teorico di riferimento e creare qualcosa che la facesse finita con le ipotesi ad hoc.

Il secondo paragrafo è dedicato alle diverse strade che vennero intraprese per arrivare alla nuova teoria: nuove regole costruite a partire solo da grandezze osservabili (Heisenberg), allargamento alla nuova meccanica di quanto era stato fatto in ottica nel passare dall'ottica geometrica all'ottica fisica facendo riferimento ad alcuni schemi teorici (i principi variazionali sviluppati in *meccanica razionale*) in modo che si potessero applicare al nuovo mondo le leggi e i formalismi matematici delle onde (Schrödinger).

Il secondo approccio si è rivelato più semplice da maneggiare e ancora oggi è quello utilizzato in tutto il mondo per presentare la MQ. Se ne occupa il III paragrafo interamente dedicato alla equazione di Schrödinger: processo euristico che ne giustifica la costruzione, forma matematica e principali caratteristiche (primi cenni agli operatori e significato della funzione di stato Ψ).

Il quarto e quinto paragrafo hanno una impostazione tecnica e riguardano la manipolazione e l'uso della equazione di Schrödinger: scomposizione in dipendenza spaziale e temporale, costruzione delle soluzioni nel caso di una buca di potenziale finita e infinita. Cercando le soluzioni nel caso della buca finita e nella successiva trattazione della barriera di potenziale avrete l'occasione di capire cosa si intendesse in fisica teorica con lo slogan *già la testa e calcolate*.

Per un verso avrete la soddisfazione di capire come salta fuori l'*effetto tunnel* (uno degli effetti sbalorditivi della MQ) e per l'altro vedrete come la costruzione delle soluzioni sia una cosa concettualmente abbastanza semplice ma operativamente complessa per il continuo *ricorso a trucchi*, cambi di variabile, costruzione grafica delle soluzioni.

L'ultimo paragrafo tratta esclusivamente dei richiami di matematica necessaria alla trattazione generale della M.Q. di cui si occupa il capitolo successivo.

La MQ, nella sua formulazione generale, ha come protagonisti gli operatori, una generalizzazione del concetto di funzione. Gli operatori (le osservabili) sono oggetti matematici che vengono costruiti in maniera che ad ogni grandezza fisica classica corrisponda un operatore quantistico e sia questo operatore a darci le conoscenze sul mondo fisico; ma, attenzione, esistono anche operatori quantistici che non hanno una grandezza fisica tradizionale corrispondente, per esempio lo spin.

Gli operatori agiscono su oggetti chiamati vettori, che operano nel campo dei numeri complessi e che sono la generalizzazione molto ampia degli ordinari vettori dello spazio a 3 dimensioni.

Tutto ciò avviene in uno spazio astratto, detto spazio di Hilbert e l'ultimo paragrafo del capitolo serve a dare al lettore gli strumenti per comprendere la struttura assiomatica della teoria quantistica di cui si occupa il capitolo 06.

Avrete capito che non è obbligatorio leggere tutto o comunque leggere tutto con lo stesso grado di attenzione relativamente ai dettagli. Tutto dipende dal grado di comprensione che vorrete raggiungere. Questo è il livello di compromesso che mi è sembrato utile e necessario.

5.1 Cosa non funziona nella meccanica quantistica semiclassica?

5.1.1 LA RICERCA DI UNA TEORIA UNITARIA

Il periodo che va dal 1900 (ipotesi di Planck sugli scambi quantizzati di energia tra radiazione e materia) al 1923 (costruzione della tavola degli elementi secondo il modello di Bohr – Sommerfeld – Pauli) è caratterizzato dalla introduzione di continue modifiche alla teoria classica in grado di mantenerne la capacità di spiegazione ed il potere di previsione, ma i fisici teorici sono ben consci della necessità di una *nuova teoria* in grado di rimettere su basi solide un *gigante che presenta piedi d'argilla*.

Come sottolinea Enrico Persico (1900–1967) uno dei padri della fisica teorica italiana, compagno di studi di Enrico Fermi, la meccanica quantistica semiclassica era insoddisfacente e provvisoria perché:

- *era incongruente dal punto di vista logico*: infatti utilizzava contemporaneamente le leggi della meccanica classica e dell'elettromagnetismo ma le contraddiceva in alcuni punti (condizioni di quantizzazione, stabilità degli stati).
- *era incompleta*: infatti non era in grado di descrivere la transizione tra gli stati quantici e di prevedere (dato lo stato di partenza) né lo stato di arrivo, né l'istante in cui avveniva la transizione; pertanto non riusciva nemmeno a prevedere la intensità della radiazione emessa.
- *era inesatta*: infatti numerosi fatti sperimentali continuavano a rimanere in disaccordo con le previsioni della teoria (larghezza delle bande nella struttura fine dei metalli alcalini, effetto Zeeman anomalo, momenti magnetici atomici); a queste anomalie si faceva fronte attraverso piccole correzioni come quella che portò a modificare il valore della quantizzazione del momento magnetico da $(l + 1) \hbar$ a $\sqrt{l(l + 1)} \hbar$.
- *era incompatibile con alcuni risultati sperimentali*: il caso più noto è quello dello spettro dell'atomo di elio (non dello ione monovalente) in cui la previsione circa le caratteristiche dello stato fondamentale (deducibile dallo spettro) era in disaccordo con la teoria di Bohr.



Tutti questi motivi indussero a considerare la teoria di Bohr Sommerfeld, anche nel periodo dei suoi maggiori successi, non tanto come espressione più o meno definitiva di una teoria fisica, quanto piuttosto come una provvisoria e parziale codificazione degli strappi da fare alla meccanica e all'elettromagnetismo classici per renderli applicabili al mondo atomico.¹

In quegli anni si stava facendo strada, proprio grazie ai lavori rigorosi di Sommerfeld e alla scuola di Bohr, una generazione di nuovi fisici teorici coscienti del fatto che si dovesse cambiare strada in maniera più o meno radicale.

Inoltre, sul piano metodologico, lo sviluppo a inizio 900 della analisi sui fondamenti logici della matematica aveva portato ad assumere le *teorie assiomatizzate* come un modello da perseguire in tutte le scienze e la *vecchia teoria quantistica* invece di fondarsi sulla assiomatizzazione assomigliava al suo esatto contrario, visto che era costruita attraverso un insie-

¹ E. Persico, Gli atomi e la loro energia, Zanichelli 1967; pag. 167

me di *regole ad hoc* introdotte per interpretare i risultati sperimentali man mano che essi si presentavano.²

Il vantaggio dell'operare con teorie assiomatiche sta nella possibilità di un controllo assoluto ed incontrovertibile degli aspetti logici della teoria (*controllabilità e consistenza*³) oltre che nella maggiore *unitarietà e compattezza*.

5.1.2 GLI ESPERIMENTI INSPIEGABILI

L'effetto Zeeman, di cui si è già accennato nel capitolo dedicato al magnetismo della materia, consiste nella capacità del campo magnetico di produrre uno sparpagliamento delle righe spettrali dei diversi elementi.

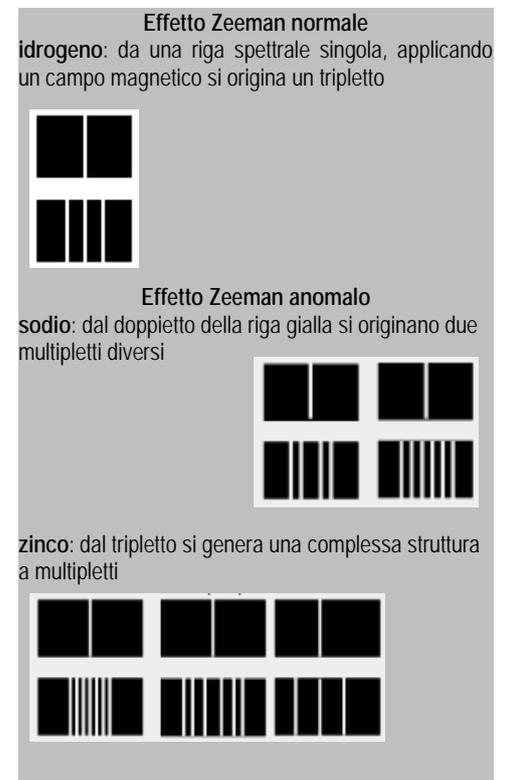
Mentre però nel caso dell'idrogeno tale sparpagliamento è perfettamente spiegabile sia classicamente (premio Nobel del 1901 a Zeeman e Lorentz) sia attraverso la *prima meccanica quantistica*, la trattazione di Bohr e Sommerfeld non riesce a dar conto del cosiddetto *effetto Zeeman anomalo*, cioè del fatto che in molti elementi invece della suddivisione in tre righe si producono dei *multipletti* che risultano inspiegabili sia nel numero sia nella dimensione dello sparpagliamento.

Quando c'è interazione tra un campo magnetico esterno e momento magnetico atomico (orbitale e di spin) si producono degli sparpagliamenti nei livelli energetici.

Tali sparpagliamenti sono all'origine della cosiddetta *struttura fine* degli spettri; ma la loro comparsa solo in determinati atomi, così come il fatto che, durante il riassetto di un atomo eccitato, non avvengano tra i livelli elettronici tutte le transizioni teoricamente possibili, non possono essere spiegate dalla meccanica quantistica della prima ora che è costretta alla continua introduzione di *regole empiriche ad hoc* (le cosiddette *regole di selezione*).

² Una teoria fisica assiomaticizzata si fonda su un insieme di *postulati* che connettono tra loro i *termini teorici* e su un insieme di *regole di corrispondenza* che servono ad ancorare tali termini teorici al mondo degli esperimenti e delle misure.

³ Il termine *consistente* è utilizzato nel linguaggio dei fisici come sinonimo di *non contraddittorio*.



5.2 La genesi della nuova meccanica quantistica

Mi scuso con il lettore se in questo paragrafo la mia abitudine a scrivere solo cose chiare dovrà fare qualche compromesso legata al fatto che, dovendo riferirmi a testi dei protagonisti, troveremo spesso riferimenti fumosi o non ben definiti. Accade ciò nei processi di costruzione delle teorie quando si procede un po' a tentoni, si sfruttano ragionamenti di tipo euristico e non è ben chiaro dove si andrà a parare.



5.2.1 LA MECCANICA DELLE MATRICI DI HEISENBERG

Werner Karl Heisenberg nacque a Würzburg in Baviera nel dicembre 1901 e morì a Monaco nel febbraio 1976. Come molti dei fisici del 900 i suoi contributi più creativi riguardano l'età giovanile. L'articolo che segna la nascita della meccanica quantistica (nella forma della *meccanica delle matrici*) è dell'estate del 1925 quando Heisenberg non aveva ancora compiuto 24 anni (due anni prima aveva ricevuto il dottorato in fisica lavorando con Sommerfeld).

Heisenberg era arrivato a Copenaghen nel 1924 per collaborare con Bohr; aveva 23 anni ed aveva già scritto una decina di articoli sulla fisica quantistica insieme a Max Born (Gottinga) e Sommerfeld (Monaco); tali articoli erano in gran parte dedicati ai due *problemi teorici aperti* di quel momento: lo spettro dell'elio e l'effetto Zeeman anomalo.

Dopo il soggiorno danese e gli ennesimi insuccessi dei tentativi di spiegare con i metodi semiclassici l'effetto Zeeman, la rottura concettuale avvenne durante una vacanza solitaria sull'isola di Helgoland nel mare del Nord; Heisenberg (affetto da una forte allergia ai pollini delle graminacee) era alla ricerca di un ambiente con aria pulita.

Egli ha raccontato la sua scoperta paragonandola all'esperienza che si ha andando in montagna in una giornata di nuvole basse con cime che emergono qua e là dalla nebbia finché dalla visione di pochi dettagli si trova improvvisamente la cima cercata.

Lo scopo della sua ricerca è espresso in maniera esemplare nella introduzione all'articolo (l'unica parte leggibile da uno studente di scuola media superiore); la riportiamo per esteso perché essa segna la rottura concettuale con gli approcci precedenti ed è considerata l'inizio di un nuovo modo di *fare fisica* noto come la *fisica degli osservabili*.

È ben noto che le regole formali usate nella teoria quantistica per calcolare grandezze osservabili (come l'energia dell'atomo di idrogeno) possono essere seriamente criticate sulla base del fatto che esse contengono, come elementi fondamentali, relazioni tra grandezze apparentemente *inosservabili in linea di principio* (cioè posizione e periodo di rivoluzione dell'elettrone).

Così queste regole mancano di un'evidente base fisica, a meno che non si voglia sperare che le grandezze finora inosservabili possano in seguito entrare a far parte del regno della determinazione sperimentale.

Questa speranza potrebbe essere giustificata se le regole suddette fossero tra loro coerenti ed applicabili ad una gamma chiaramente definita di problemi di meccanica quantistica. L'esperienza invece dimostra che, per mezzo di queste regole formali della teoria quantistica, possono essere trattati soltanto l'atomo di idrogeno ed il relativo effetto Stark.⁴

MAX BORN 1882-1970
NOBEL PRIZE IN PHYSICS - 1954



Werner Heisenberg nel 1924 a Gottinga

⁴ Modifica delle righe spettrali in presenza di campi elettrici esterni

Sorgono difficoltà fondamentali già nel problema dei "campi incrociati" (atomo di idrogeno immerso in campi elettrici e magnetici aventi diverse direzioni). Neanche la reazione degli atomi a campi variabili periodicamente può essere descritta per mezzo di queste regole. Infine, l'estensione delle regole quantistiche al trattamento di atomi con più elettroni si è dimostrata irrealizzabile.

È diventato usuale considerare il fallimento delle regole quantistiche come una deviazione dalla meccanica classica, dal momento che le regole stesse sono state derivate dalla meccanica classica.

...

In questa situazione sembra sensato rinunciare alla speranza di osservare grandezze finora inosservabili (come la posizione e il periodo dell'elettrone) e ammettere che l'accordo parziale delle regole quantistiche con l'esperienza sia più o meno fortuito. Sembra invece più ragionevole tentare di fondare una meccanica quantistica teorica, analoga alla meccanica classica, ma in cui siano presenti solo relazioni tra grandezze osservabili. (...).

Il lavoro di Heisenberg si muoveva in un ambito abbastanza ristretto e non aveva ancora la struttura di una teoria sistematica. Egli si era limitato a cercare una struttura matematica che consentisse di lavorare sulle osservabili senza dover passare attraverso concetti meccanici classici che, si cominciava a pensare, non avessero senso.

Se le energie dei fotoni emessi nelle transizioni tra stati stazionari degli atomi potevano essere ricavate da una matrice in cui fossero rappresentate le energie degli stati stazionari si poteva rinunciare alle orbite e pensare alle regole che consentissero di descrivere l'evoluzione degli elettroni da uno stato ad un altro.

Nella *Nobel Lecture* del 1954 Max Born così ricorda la vicenda: ⁵

Heisenberg bandì la rappresentazione delle orbite elettroniche con un raggio ed un periodo di rotazione definiti perché tali quantità non erano osservabili ed insistette perché la teoria fosse costruita per mezzo delle matrici quadrate che ho citato.

Invece di descrivere il moto attraverso una coordinata in funzione del tempo, $x(t)$, bisogna determinare un allineamento x_{mn} di ampiezze di transizione.

A mio parere la parte decisiva del suo lavoro sta nella domanda relativa al come determinare la regola con cui, a partire da un dato allineamento, si potesse passare a quello dei quadrati (o più in generale come si dovesse affrontare il prodotto tra due allineamenti). ⁶

Utilizzando esempi già noto e risolti come guida alla elaborazione di congetture egli riuscì a trovare tale regola e la applicò al caso degli oscillatori armonici e anarmonici. Ciò avvenne nell'estate del 1925. Heisenberg in preda ad un violento attacco di febbre da fieno chiese una licenza per recarsi al mare e mi lasciò il suo articolo da guardare nel caso lo ritenessi meritevole di pubblicazione.

L'importanza di questa idea fu immediatamente chiara in me ed io spedii il manoscritto alla *Zeitschrift für Physik* per la pubblicazione. Non riuscivo a rimuovere l'idea della moltiplicazione di Heisenberg, e dopo una settimana di congetture e tentativi, mi ricordai improvvisamente di una teoria algebrica che avevo appreso dal mio insegnante prof. Rosanes a Breslavia.

Questi allineamenti quadrati sono ben noti ai matematici e, insieme con una particolare regola per la moltiplicazione, sono dette matrici. Applicai tale regola di calcolo

⁵ Traduzione dall'inglese di Claudio Cereda

⁶ Heisenberg nel suo articolo parla genericamente di funzioni di due variabili (gli indici) e propone un prodotto $C = A \times B$ nella forma $c_{il} = \sum_j a_{ij} b_{jl}$ che corrisponde proprio alla

definizione di prodotto nel calcolo tra matrici con j che va da $-\infty$ a $+\infty$; egli non conosceva tale calcolo; pertanto i simboli da lui utilizzati non erano questi.



Le grandi università tedesche e danesi madrine della meccanica quantistica
Copenhagen, Berlino, Göttingen, Monaco



Max Born (Breslavia 1882 Göttinga 1970) ebreo, pacifista, amico di Einstein lasciò la Germania dopo essere stato privato dell'insegnamento dai nazisti nel 1933 e si trasferì a Cambridge; ricevette un premio Nobel riparatore solo negli anni 50; il suo contributo alla nascita della meccanica quantistica è pari a quello di Heisenberg e fu lui a dare la prima interpretazione statistico probabilistica delle osservabili

alle condizioni di quantizzazione di Heisenberg e scoprii che ciò corrispondeva al risultato dei termini diagonali. Fu anche facile dimostrare che tutti gli altri termini si annullavano; ed improvvisamente mi si parò dinanzi la relazione:

$$p q - q p = \frac{h}{2\pi} i$$

Ciò significa che le coordinate q e le quantità di moto p non possono essere rappresentate da numeri ma da simboli il cui prodotto dipende dall'ordine di esecuzione della moltiplicazione; esse si dicono *grandezze non commutative*.



Il risultato mi emozionò come se fossi un marinaio che, dopo un lungo viaggio, vede in lontananza la terra, e mi dispiacque che Heisenberg non fosse presente. Mi convinsi da subito che avevamo imboccato la strada giusta.⁷

Anche così si trattava in gran parte di congetture, in particolare l'annullamento dei termini esterni alla diagonale principale. Decisi di farmi aiutare dal mio allievo Pascual Jordan e, in pochi giorni di lavoro fummo in grado di dimostrare che le congetture erano corrette. L'articolo scritto congiuntamente da me e da Jordan contiene i principali elementi della meccanica quantistica inclusa la estensione alla elettrodinamica.

Segui un febbrile periodo di collaborazione tra noi tre complicato dalla assenza di Heisenberg. Ci fu un vivace scambio di lettere che, purtroppo, sono andate perdute a causa degli avvenimenti politici. Il risultato fu uno scritto a firma di tutti e tre che portava la parte formale della ricerca a conclusioni definitive.

Prima della comparsa di tale articolo avemmo però una sconvolgente sorpresa: l'uscita di un articolo di Paul Dirac sullo stesso argomento.

Dirac si ispirò ad una conferenza tenuta da Heisenberg a Cambridge e arrivò a risultati del tutto simili a quelli che avevamo ottenuto a Gottinga tranne per il fatto che egli non usò il formalismo delle matrici ma inventò un proprio formalismo basato sull'utilizzo di quantità non commutative.

La prima applicazione non banale e fisicamente importante della meccanica quantistica fu ben presto ottenuta da Wolfgang Pauli che riuscì a calcolare gli stati stazionari dell'atomo di idrogeno per mezzo della meccanica delle matrici ed ottenne risultati in completo accordo con le formule di Bohr. A questo punto ogni possibile dubbio sulla correttezza della teoria svani.

Ma il significato del formalismo che avevamo inventato continuava a non essere chiaro.

Il racconto di Born prosegue con la pubblicazione dei lavori di Schrödinger che sviluppano le idee sulle onde materiali di De Broglie e con i successivi sviluppi di cui si tratterà nei prossimi paragrafi.

5.2.2 I RAPPORTI TRA OTTICA FISICA ED OTTICA GEOMETRICA COME PREMESSA ALLA MECCANICA ONDULATORIA

La equazione di Schrödinger rappresenta il secondo pilastro da cui si origina la moderna meccanica quantistica e, a causa della maggiore intuitività, corrisponde alla formulazione ancora oggi utilizzata per avvicinarsi a tale teoria.

Erwin Schrödinger (Vienna 1887 – Vienna 1961) ha avuto nei confronti della teoria quantistica un destino simile a quello di Einstein. E' stato uno dei padri fondatori ma non è mai stato soddisfatto della interpretazione divenuta poi dominante di questa teoria.⁸



© CERN, Geneva

Max Born e Wolfgang Pauli

Born riceve il primo articolo di Heisenberg con l'idea di descrivere le particelle tramite equazioni che si basino solo su quantità osservabili; ciò richiede l'uso di una nuova matematica; sta nascendo la *fisica degli operatori e quella delle matrici*



La Banconota da 1000 scellini austriaci con la immagine di Erwin Schrödinger

⁷ Si tratta della relazione sul carattere non commutativo del prodotto di due operatori da cui si ricava, all'interno della teoria, il principio di indeterminazione di Heisenberg.

⁸ Schrödinger era uno studioso di cultura classica e di filosofia greca; il suo impegno per il rinnovamento della cultura e per l'unità del sapere si riscontra nella modernità dei

Il processo che lo portò a scrivere una equazione che consentisse di descrivere in termini ondulatori lo stato degli elettroni, cioè il tentativo di risolvere il dualismo ondulatorio corpuscolare a favore delle onde, derivava dalla convinzione che il formalismo ondulatorio fosse in grado di salvare l'approccio classico alla conoscenza del mondo microscopico.

Schrödinger prese le mosse dai lavori di De Broglie sulle onde materiali e il suo schema di ragionamento è grosso modo il seguente:

- l'ottica geometrica descrive il comportamento dei raggi di luce attraverso equazioni e leggi deducibili da un unico principio variazionale, quello di *Fermat*, secondo cui il raggio luminoso tra due punti A e B segue la traiettoria caratterizzata dal minor tempo di percorrenza: Per determinare la traiettoria del raggio luminoso basta dunque rendere minima la quantità

$$\int_A^B \delta t = \int_A^B \frac{\delta s}{v} = \frac{1}{c} \int_A^B n \delta s = \int_A^B \frac{\delta s}{\lambda v} = \frac{1}{v} \int_A^B \frac{\delta s}{\lambda} \quad (VI.5.1)$$

(dove l'integrale è esteso al cammino percorso, n indica l'indice di rifrazione, mentre v e λ sono rispettivamente la frequenza e la lunghezza d'onda della radiazione luminosa)

- a metà 800 due matematici, l'irlandese Hamilton ed il tedesco Jacobi, ripresero in esame la problematica dei principi variazionali applicati alla meccanica. Essi erano stati già utilizzati dai matematici francesi fondatori della *meccanica razionale* (in particolare da Maupertuis).

Secondo il principio di Maupertuis preso un punto materiale immerso in un campo di forza caratterizzato da una energia \mathcal{E} la traiettoria nell'andare da A a B è quella che rende minimo l'integrale

$$\int_A^B m v \delta s = \int_A^B \delta S \quad (VI.5.2)$$

dove δs rappresenta lo spostamento elementare calcolato per traiettorie possibili con le stesse posizioni iniziali e finali mentre S (detta superficie di Jacobi) rappresenta l'equazione di una superficie ortogonale alle traiettorie che prende il posto dei fronti d'onda dell'ottica geometrica.

Dal punto di vista dimensionale $m v \delta s$ è una *azione* (una grandezza fisica che corrisponde a una energia per tempo) e pertanto il principio è diventato famoso come *principio di minima azione*.

$$[m v \delta s] = [m v^2] [\delta s / v] = [\mathcal{E}][t]$$

Nella teoria di Hamilton e Jacobi, cui si ispirò De Broglie, viene stabilita una connessione formale (basata sui principi variazionali) tra le equazioni dell'ottica geometrica e le equazioni del moto dei punti materiali.

Questa connessione si basa sull'utilizzo di equazioni simili che connettono però grandezze diverse (dove in ottica compaiono l'ampiezza, la frequenza e la fase nella versione di Hamilton compaiono



La meccanica ondulatoria si origina dal tentativo di unificare la fisica tramite i **principi variazionali**: si parte tentando di descrivere le particelle con le stesse tecniche con cui si descrivono le traiettorie dell'ottica geometrica.



Hamilton e Jacobi avevano già costruito nell'800 un modello per descrivere il moto delle particelle con equazioni dedotte da principi simili a quelle delle *onde*



Maupertuis partecipò ad una famosa spedizione in Lapponia per la misura di un arco di meridiano terrestre da cui si stabilì che era corretta l'ipotesi newtoniana dello schiacciamento della terra ai poli

suoi scritti di divulgazione. Consigliamo la lettura di *Scienza e umanesimo* e di *Cos'è la vita*, ed. Sansoni e di *L'immagine del mondo*, ed. Boringhieri.

l'ampiezza, l'energia e la quantità di moto). Si viene così ad introdurre un'onda fittizia Ψ che consente di descrivere il movimento dei corpuscoli nella approssimazione dell'ottica geometrica.

5.2.3 LA RAPPRESENTAZIONE DELLE ONDE NEL CAMPO COMPLESSO

Un'onda piana monodimensionale di tipo armonico è una funzione del tipo:

$$\Psi(x,t) = A \sin(kx - \omega t + \varphi_0) \tag{VI.5.3}$$

dove A rappresenta l'ampiezza del fenomeno, $kx - \omega t + \varphi_0$ la fase costituita da tre termini (la fase iniziale φ_0 , e due termini contenenti entrambi informazioni strutturali sull'onda (la lunghezza d'onda e la frequenza) oltre che le variabili spazio-temporali.

L'onda (VI.5.3) si propaga nel verso positivo dell'asse x .

Le costanti k (numero d'onda) e ω (frequenza angolare) possono essere interpretate ragionando sulla periodicità della funzione; in effetti se ci riferiamo ad una oscillazione completa avremo che:

$$k \lambda = 2\pi \quad \omega T = 2\pi \text{ con } \lambda = v T \text{ e } \omega = 2\pi \nu \tag{VI.5.4}$$

Senza perdita di generalità e per non appesantire il calcolo supporremo che sia $\varphi_0 = 0$.

Se si passa a 3 dimensioni si considera il vettore \vec{k} (detto vettore d'onda) il cui modulo è pari al numero d'onda mentre la direzione e il verso sono quelli di propagazione dell'onda. Indicato con \vec{r} il vettore posizione l'onda viene rappresentata da:

$$\Psi(\vec{r},t) = A \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \tag{VI.5.5}$$

Un generico fenomeno oscillatorio ha però una rappresentazione più generale (combinazione lineare di seni e coseni):

$$\Psi(\vec{r},t) = A_1 \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) + A_2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \tag{VI.5.5 bis}$$

In meccanica quantistica si usa molto spesso una espressione equivalente che consente di estendere la rappresentazione al campo complesso (il campo numerico utilizzato per i vettori e le funzioni in M.Q.).



$$\Psi(\vec{r},t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \tag{VI.5.6}$$

Dove A è un numero complesso mentre la quantità $e^{i\theta}$ corrisponde alla relazione di Eulero.⁹

La equazione (VI.5.6) nel campo reale è del tutto equivalente alla (VI.5.5), come si può facilmente dimostrare per via diretta, ma è più generale.

⁹ La rappresentazione esponenziale dei numeri complessi è ampiamente utilizzata per rappresentare le onde anche quando si opera nell'insieme dei numeri reali. Ricordiamo che $e^{i\theta}$, scritto anche $\exp(i\theta)$, sulla base della relazione di Eulero, significa $\sin \theta + i \cos \theta$. Sul significato della presenza dei numeri complessi nella nuova meccanica si vedano i prossimi paragrafi. Un rapido sunto delle proprietà dei numeri complessi si trova nella appendice matematica.

A prima vista può suscitare qualche perplessità la presenza di una ampiezza espressa da un numero complesso. La apparente contraddizione si supera osservando che in M.Q. la ampiezza delle funzioni d'onda non ha significato fisico ma, ad avere significato fisico, è la quantità $|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* = A \cdot A^*$ che è sempre un numero positivo o nullo e, come vedremo, fornisce informazioni sulla probabilità di trovare la particella in una determinata regione di spazio.

Dunque le onde materiali di De Broglie su cui ci apprestiamo ad operare avranno una equazione del tipo (VI.5.6) in cui si tratterà di precisare il significato delle diverse grandezze che vi compaiono.

5.2.4 CARATTERISTICHE E APORIE NELLA TEORIA DELLE ONDE DI DE BROGLIE

La teoria di De Broglie è più complessa di quanto non venga riassunto dai manuali scolastici ed è stata costruita in stretta connessione con la teoria della relatività.

Qui ci limitiamo a richiamarne gli elementi essenziali basati sul dualismo ondulatorio corpuscolare per la radiazione (effetto fotoelettrico ed effetto Compton) che porta ad introdurre il carattere granulare della radiazione elettromagnetica.

Per i fotoni valgono le relazioni:

$$\mathcal{E} = h \nu \wedge p = \frac{h}{\lambda} \wedge k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow p = h \frac{k}{2\pi} = \hbar k \quad (VI.5.7)$$

L'elemento ondulatorio, caratteristico della radiazione, si fonda sugli esperimenti di diffrazione e di interferenza; così, quando iniziano a darsi evidenze sperimentali di fenomeni di interferenza e di diffrazione da parte di fasci di particelle, si fa strada l'idea di associare quelle particelle, dotate di energia e quantità di moto, ad *onde di materia* (od onde di fase, od onde di De Broglie).

Come scritto nella (VI.5.7) da leggere a rovescio ad una particella dotata di energia e quantità di moto si associa un'onda di frequenza e lunghezza d'onda:

$$\nu = \frac{\mathcal{E}}{h} \wedge \lambda = \frac{h}{p} \wedge \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \wedge \omega = 2\pi \nu \quad (VI.5.8)$$

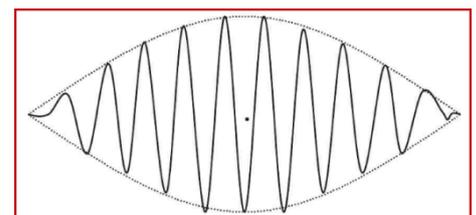


Sembra tutto facile ma rimangono aperti alcuni problemi. Il primo ha a che fare con l'uso disinvolto delle relazioni relativistiche; infatti la velocità di fase dell'onda è data da $\lambda/T = \lambda\nu$ e dunque:

$$v_f = \frac{h \mathcal{E}}{p h} = \frac{m c^2}{m v} = \frac{c^2}{v} \text{ e poich\`e la velocit\`a della particella \`e sempre minore di } c \text{ si avrebbe } v_f = \frac{c^2}{v} > \frac{c^2}{c} = c$$

le onde di De Broglie avrebbero una velocità di fase maggiore della velocità limite.

Questa contraddizione è però solo apparente perché, come mostra la teoria, la velocità di fase appartiene alla categoria delle grandezze non osservabili. Le onde si propagano sempre come pacchetti (insiemi di onde monocromatiche di frequenze prossime tra loro e con ampiezze



diverse) e ciò che si propaga, trasportando informazione ed energia, è il pacchetto d'onde.

La velocità del pacchetto d'onde è detta *velocità di gruppo* ed è determinabile come segue:

$$\frac{df}{dx} \int L$$

$$\int f(x) dx$$

$$v_g = \frac{\delta\omega}{\delta k} = \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta p} \text{ e poiché } \mathcal{E} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \frac{\delta\mathcal{E}}{\delta p} = \frac{2p}{2m} = v^{10}$$

dunque la velocità del pacchetto d'onde è pari alla velocità della particella e inoltre è sempre:

$$v_f v_g = c^2 \quad (\text{VI.5.9})$$

Si è poi posto il problema del significato di quelle onde pensando alle particelle come zone condensate di onde ma tutte quelle interpretazioni hanno dato luogo a numerose aporie basate sul fatto che quando un pacchetto d'onda si propaga tende a disperdersi.

Schrödinger e De Broglie nel corso degli anni 20 sostennero l'idea che tale onda svolgesse una specie di *funzione pilota* nei confronti della particella (un campo che guida la particella); optarono poi per una visione in cui la particella fosse una specie di *condensazione dell'onda* sperando con ciò di costruire una teoria in cui l'uso del *formalismo ondulatorio consentisse di non abbandonare l'idea di una particella dotata di una posizione e di una sua storia nello spazio tempo*.

Alla fine dovettero ripiegare sulla interpretazione proposta da Born e divenuta uno dei capisaldi della interpretazione della *scuola di Copenhagen*.

Dal punto di vista epistemologico e della riflessione sui fondamenti si è dovuto lasciare il campo ad un nuovo modo di costruire le teorie fisiche in cui il punto di partenza della teoria non sono le grandezze fisiche costruite con il metodo operativo e su di esse si cercano le correlazioni (le leggi); in questo caso il punto di partenza sarà una legge, strutturalmente indimostrabile la cui validità sarà la capacità di dar conto dei fenomeni osservabili.

Nei prossimi paragrafo vengono presentati la equazione di Schrödinger (di cui si dà il processo euristico di deduzione) e il significato della funzione $\Psi(x,y,z,t)$ *lo stato* di un sistema fisico che lo descrive integralmente e che consente di ricavare attraverso l'uso di operatori operanti nel campo complesso le diverse grandezze fisiche *osservabili*.

La pubblicazione della equazione di Schrödinger è del gennaio 1926 e questa equazione, che utilizza una simbologia e un approccio già ben noto ai fisici teorici, riscuote un immediato successo anche perché, in essa, le condizioni di quantizzazione non vengono sovrapposte alla teoria ma derivano dalla equazione stessa.

Il significato della funzione a valori complessi Ψ verrà quasi immediatamente chiarito da Born in termini di densità di probabilità e di lì a poco si dimostrerà che i tre approcci alla meccanica quantistica (quello delle

¹⁰ Nella teoria di De Broglie e in quella di Schrödinger vale la relazione classica per la energia cinetica $\mathcal{E} = \frac{p^2}{2m}$ perché si tratta di teorie non relativistiche. Il passaggio alla teoria relativistica avverrà intorno al 1930 con i lavori di Dirac.

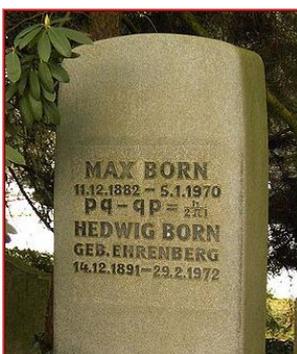


L'equazione di Schrödinger come tentativo di descrivere lo *strano comportamento* quantistico delle particelle tramite **propagazione delle onde ψ** . L'ottica geometrica sta all'ottica ondulatoria come la meccanica classica sta alla meccanica ondulatoria



Cos'è la funzione ψ ?

Le prime interpretazioni della meccanica ondulatoria puntano a vedere nell'onda una sorta di particella spalmata nello spazio; ma l'interpretazione definitiva, dovuta a Max Born, assegna a ψ solo il ruolo di funzione strumentale al calcolo di $|\psi|^2$ che misura la probabilità di trovare la particella in una determinata regione spaziale $p \propto |\psi|^2 \Delta V$



matrici di Heisenberg–Born, quello ondulatorio basato sulla ψ di Schrödinger e quello di Dirac) erano del tutto equivalenti, pur differendo negli aspetti tecnici.

Nei primi anni di affermazione della meccanica quantistica la equazione di Schrödinger svolse il ruolo prevalente perché era più intuitiva e più semplice da maneggiare e ancora oggi la incontrano gli studenti di fisica nel loro primo approccio alla meccanica quantistica.

5.2.5 CRONOLOGIA DELLA MQ DAL 1923 AL 1930

Sono 8 anni in cui la nostra visione e descrizione del mondo fisico viene completamente stravolta e ribaltata. Sono anni di grande sviluppo della fisica teorica e al termine di essi (mentre nel mondo c'è la crisi economica del '29) il corpo della meccanica quantistica è ormai completamente costruito:

- si afferma una scuola di riferimento (quella di Bohr a Copenaghen) da cui passano tutti i premi Nobel di quegli anni, che giungono da tutti i paesi europei (inclusa l'URSS) a *fare la gavetta*
- ci si prepara, negli anni 30, all'uso su grande scala della MQ per studiare atomi e molecole,
- ci si prepara alla costruzione del passo successivo (l'elettrodinamica quantistica) che farà da guida alla fisica delle particelle,
- si muovono i primi passi con un mix di teoria ed esperimento nello studio della fisica del nucleo.

1923

Ipotesi di De Broglie sulle onde materiali

Scoperta e interpretazione dell'effetto Compton: i fotoni hanno natura particellare e, nell'urto, rispettano la conservazione dell'energia e della quantità di moto

1924

Statistica di Bose Einstein che riguarda le particelle indistinguibili (prive di una loro identità) come i fotoni. Dalla statistica di Bose-Einstein è possibile dedurre la formula di Planck per lo spettro del corpo nero. L'idea di equi probabilità, di cosa si debba intendere con essa, va affidata alla esperienza. Per esempio date due scatole e due fotoni i casi possibili sono tre e non quattro perché il caso 1 a sinistra e 2 a destra è indistinguibile da 1 a destra e 2 a sinistra.

1925

George Uhlenbeck e Samuel Goudsmit postulano l'esistenza dello spin dell'elettrone

Principio di esclusione di Pauli che porta a distinguere tra bosoni e fermioni e spiega molti aspetti della costruzione della tavola periodica (due fermioni come gli elettroni non possono avere lo stesso stato quantistico)

Heisenberg, Born e Jordan sviluppano la *meccanica delle matrici*

Pauli applica con successo la meccanica delle matrici allo studio dell'atomo di idrogeno

Schrödinger durante una vacanza *romantica e trasgressiva* in Engadina getta le basi della meccanica ondulatoria

1926

Pubblicazione dell'equazione di Schrödinger e introduzione della rappresentazione della energia attraverso l'operatore Hamiltoniano

Equazione d'onda relativistica di Klein e Gordon

Statistica di Fermi Dirac che riguarda tutte le particelle con spin semi-intero e dovrà essere applicata obbligatoriamente per analizzare i comportamenti di gruppo degli elettroni (conduzione nei solidi)

Interpretazione quantomeccanica dell'effetto Stark

Versione riveduta e corretta della meccanica delle matrici

Born propone la interpretazione probabilistica della funzione d'onda di Schrödinger

Dirac durante un soggiorno a Copenaghen elabora la teoria delle trasformazioni con cui dimostra l'equivalenza di meccanica ondulatoria e meccanica delle matrici viste come teorie particolari di una teoria più generale

Von Neumann elabora la teoria assiomatica della meccanica quantistica negli spazi di Hilbert

1927

Heisenberg enuncia il principio di indeterminazione

Si afferma la interpretazione probabilistica della funzione d'onda (Born)

Prime applicazioni della MQ ai legami molecolari

Equazione di Dirac per l'elettrone quantistico relativistico

Spettro continuo del decadimento beta¹¹

Uso della equazione di Schrödinger per spiegare il legame covalente

Esperimenti di Davisson e Germer sulla diffrazione degli elettroni e conclusione sulla validità del dualismo ondulatorio corpuscolare per la materia

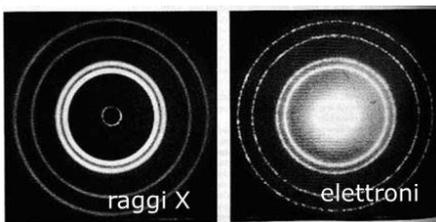
1928

Linus Pauling applica la MQ alla teoria del legame chimico e Hund studia gli orbitali molecolari

1930

Dirac pubblica i *principi della meccanica quantistica* in cui si introduce un nuovo formalismo (quello dei bra e dei ket $|\rangle$ e $\langle|$); il testo di Dirac è ancora oggi un riferimento; nel testo Dirac ipotizza l'esistenza del positrone

Pauli ipotizza la esistenza del *neutrino* per spiegare anomalie nel decadimento beta



Elettroni di opportuna energia (con λ paragonabile a quella dei raggi X, su un cristallo di nickel producono immagini di diffrazione

¹¹ si veda il capitolo 2 della parte VII

5.3 L'equazione di Schrödinger

5.3.1 PARTIAMO DAL RISULTATO FINALE

Secondo la teoria di Schrödinger, data una particella di massa m sottoposta alla azione di un campo conservativo che determina una energia potenziale $V(x,y,z,t)$ il sistema fisico viene descritto da una particolare funzione di variabile reale che prende valori nel campo complesso $\Psi(x,y,z,t)$.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi \quad (VI.5.10)$$



Equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi$$

dove il simbolo ∇^2 è definito così:

$$\nabla^2 \Psi = \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right)$$

Nel caso di sistemi complessi si passa a più particelle, aumentano le variabili, ma rimane unica la funzione di stato che descrive il sistema.

Tale funzione, in sé non ha significato fisico (non corrisponde a qualcosa di misurabile) mentre hanno significato fisico quantità che da essa si possono dedurre.

La equazione, essendo una equazione differenziale lineare del II ordine, consente di dedurre in maniera deterministica la evoluzione spazio-temporale del sistema ma, contestualmente:

- viene introdotto strutturalmente il calcolo delle probabilità (possiamo solo prevedere la probabilità nei valori assunti dalle grandezze fisiche; non perché commettiamo errori o siamo imprecisi negli esperimenti, ma per ragioni strutturali)
- quando si effettua una misurazione lo stato del sistema cambia in maniera repentina assumendo il valore corrispondente a quanto è stato misurato (a priori avevamo solo delle probabilità) e da lì in poi ricomincia un processo di natura deterministica
- esiste comunque una incompatibilità strutturale tra coppie di grandezze fisiche (tutte quelle che dimensionalmente corrispondono ad una energia per un tempo) in base alle quali il grado di indeterminazione su una è inversamente proporzionale a quello sull'altra

5.3.2 COSTRUZIONE EURISTICA DELLA EQUAZIONE

La equazione di Schrödinger, come tutte le leggi fondamentali della fisica *non si può dimostrare*; è vera perché il mondo in cui viviamo è fatto così. Al più è possibile discutere se l'apparato matematico che abbiamo utilizzato sia il più conveniente.

Non si può darne una dimostrazione ma si può seguire un percorso di costruzione che, partendo dal risultato finale cui vogliamo arrivare (la funzione d'onda) e da alcune semplici leggi fisiche di cui si assume la validità, consente di pervenire alla equazione ammettendo a priori la validità di alcune assunzioni plausibili.

Partiamo dalla onda piana di De Broglie dove il vettore d'onda \vec{k} e la frequenza angolare della particella sono state assegnate.



$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

$$\text{con } \vec{k} \cdot \vec{r} = k_x x + k_y y + k_z z$$

Se deriviamo due volte rispetto a x avremo:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = i k_x \Psi \wedge \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i k_x i k_x \Psi = -k_x^2 \Psi$$

Si ottengono relazioni analoghe derivando rispetto alle altre coordinate spaziali e si ottiene dunque (sommando):

$$\nabla^2 \Psi = \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) = -k^2 \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \tag{VI.5.11}$$

Nell'eseguire la derivata abbiamo supposto che il numero d'onda (l'impulso) sia costante.

Deriviamo ora rispetto all'altra coordinata, il tempo supponendo che anche ω sia costante:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i \omega \Psi = -i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} \Psi = -i \frac{p^2}{2m \hbar} \Psi \tag{VI.5.12}$$

Ma dal confronto di queste due equazioni segue che:

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \frac{\hbar^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \text{ e dunque:}$$

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \tag{VI.5.13}$$

La equazione ottenuta non contiene più riferimenti al particolare moto della particella e noi assumiamo (postuliamo) che essa valga, qualsiasi sia il moto della particella nello spazio libero (equazione di Schrödinger in assenza di campi di forza).

Osserviamo ulteriormente che abbiamo ottenuto due relazioni che si riveleranno utili quando inizieremo a ragionare di operatori. Precisamente:

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{E} \Psi \wedge \nabla \Psi = i \vec{k} \Psi \text{ da cui si ottiene: }^{13}$$

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{E} \Psi \wedge -i \hbar \nabla \Psi = \vec{p} \Psi \tag{VI.5.14}$$

La equazione (VI.5.14) ci dice anche che la espressione operatoriale:

$i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$ ha le dimensioni di una energia e dunque questo elemento ci induce a passare dal moto della particella in assenza di forze (sola energia cinetica) a quello in presenza di un campo di forze conservativo rappresentato da una energia potenziale $V(x, y, z, t)$ ¹⁴ semplicemente assumen-

¹² Si osservi la comodità dovuta alla rappresentazione esponenziale delle onde e l'utilizzo delle diverse relazioni di De Broglie

¹³ Ricordiamo che il gradiente di una funzione α indicato dal simbolo $\nabla \alpha$ vale

$$\nabla \alpha = \frac{\partial \alpha}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \alpha}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial \alpha}{\partial z} \vec{k}$$

¹⁴ Nei testi di meccanica quantistica si usa indicare la energia potenziale con V anziché con U e ci atterremo a tale consuetudine

do la energia potenziale come termine aggiuntivo; si arriva così alla equazione

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi \quad (\text{VI.5.10})$$

che avevamo indicato in premessa.

Attenzione: avendo aggiunto il termine potenziale la equazione della onda piana di De Broglie da cui eravamo partiti, in generale non è più soluzione della equazione.

5.3.3 CONSIDERAZIONI SULLE CARATTERISTICHE DELLA EQUAZIONE

La equazione è del primo ordine rispetto al tempo; ciò significa che se si assegna Ψ ad un istante dato in tutto lo spazio (condizione iniziale) la equazione consente di determinarne l'evoluzione temporale per ogni istante successivo.

Essa è lineare ed omogenea rispetto a Ψ e ciò significa che nella nuova teoria vale il principio di sovrapposizione e dunque presi due numeri complessi C_1 e C_2 qualsiasi, se Ψ_1 e Ψ_2 sono due soluzioni della equazione anche la combinazione lineare lo è. La cosa ha parecchie conseguenze sul piano pratico, come si vedrà.

Apparentemente non si è fatto un grande progresso: il modulo quadro della funzione d'onda ci dà informazioni sulla dislocazione spaziale della particella. Ma non è così perché, come vedremo tra breve la funzione d'onda è in grado di fornire informazioni sui valori attesi di qualsiasi altra grandezza fisica. In altri termini si tratta di una vera e propria funzione di stato nel senso più ampio del termine.

5.3.4 LA EQUAZIONE DEGLI STATI STAZIONARI

La equazione di Schrödinger, a prima vista appare complicata per quanto riguarda la ricerca delle soluzioni ma, per nostra fortuna, in contesti in cui la energia potenziale dipende solo dalla posizione spaziale e non dal tempo, può essere spezzata in due termini (l'uno temporale e l'altro spaziale).

Supponiamo dunque che:

$$V = V(\vec{r}) \text{ e che } i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{E} \Psi$$

cioè che l'operatore legato alla derivata temporale sia legato direttamente alla energia. Ipotizziamo ulteriormente che la soluzione della equazione di Schrödinger possa essere scritta come prodotto di due funzioni, un termine stazionario non dipendente dal tempo e un termine esclusivamente temporale.¹⁵

Sia dunque:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \chi(t) \quad (\text{VI.5.15})$$

Equazione degli stati stazionari ●

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \chi(t)$$

¹⁵ La giustificazione di questa ipotesi avviene a posteriori scoprendo che soddisfa la equazione.

Sostituiamo $i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{E} \Psi$ nella (VI.5.10) e teniamo conto della (VI.5.15); avremo che:

$$\mathcal{E} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi \Rightarrow$$

$$\mathcal{E} \varphi(\vec{r}) \chi(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \chi(t) \nabla^2 \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \chi(t) \Rightarrow$$

$$\mathcal{E} \varphi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \tag{VI.5.16}$$

Per determinare $\chi(t)$ usiamo la (VI.5.14):

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{E} \Psi \Rightarrow i \hbar \varphi(\vec{r}) \chi'(t) = \mathcal{E} \varphi(\vec{r}) \chi(t) \Rightarrow^{16}$$

$$i \hbar \chi'(t) = \mathcal{E} \chi(t) \Rightarrow$$

$$\chi'(t) = -i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} \chi(t)$$

si tratta di una equazione differenziale del primo ordine che ammette come soluzione la funzione esponenziale a meno di una costante moltiplicativa che qui viene ignorata visto che nella soluzione generale si terrà conto del principio di sovrapposizione. Avremo dunque:

$$\chi(t) = e^{-i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t} \text{ e dunque:}$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t} \varphi(\vec{r}) \tag{VI.5.17}$$

con $\varphi(\vec{r})$ soluzione della equazione differenziale degli stati stazionari data dalla (VI.5.16) che solitamente viene scritta in una forma più compatta introducendo un nuovo operatore \hat{H} detto operatore hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \tag{VI.5.18}$$

$$\mathcal{E} \varphi(\vec{r}) = \hat{H} \varphi(\vec{r}) \tag{VI.5.19}^{17}$$

La funzione $\varphi(\vec{r})$ e con essa l'equazione degli stati stazionari sono molto importanti perché, ogni qualvolta si deve calcolare il valore atteso di una qualsiasi grandezza fisica si deve calcolare $\Psi(\vec{r}, t) \cdot \Psi^*(\vec{r}, t)$ e si ha che:

$$\Psi(\vec{r}, t) \cdot \Psi^*(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t) \cdot \varphi^*(\vec{r}, t) \tag{VI.5.20}$$

perché:

$$e^{-i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t} \cdot e^{i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t} = e^0 = 1$$

¹⁶ Sia qui, sia nel passaggio precedente, vengono trascurate le soluzioni banali nulle.

¹⁷ Attenzione, quella al II membro non è una moltiplicazione

Equazione degli stati stazionari 
 $\mathcal{E} \varphi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r})$

Equazione degli stati stazionari 
 $\chi(t) = e^{-i \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t}$

Operatore hamiltoniano
 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$



5.3.5 UNA DIGRESSIONE SUGLI OPERATORI E SULLE EQUAZIONI AGLI AUTOVALORI

La introduzione dell'operatore hamiltoniano \hat{H} , ma anche le due equazioni scritte in precedenza, su energia e quantità di moto,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{E} \Psi \quad \wedge \quad -i\hbar \nabla \Psi = \vec{p} \Psi$$

costringono ad anticipare alcuni elementi caratteristici della meccanica quantistica il cui *regno* è lo spazio vettoriale di Hilbert, lo spazio entro cui operano le funzioni di stato.

Un operatore altro non è che una regola che associa univocamente ad un elemento (vettore) dello spazio di Hilbert un altro elemento dello spazio medesimo. Se indichiamo con \hat{A} un generico operatore e con φ un generico vettore dello spazio sarà in astratto $\hat{A} \varphi = \varphi'$.

Quando accade che $\varphi' = \lambda \varphi$ dove λ è un numero (reale o complesso) cioè l'operatore produce un vettore proporzionale a quello originario:

$$\hat{A} \varphi = \lambda \varphi \tag{VI.5.21}$$

si parla di *equazione agli autovalori* e si dice che: λ è un autovalore dell'operatore mentre φ è detto *autovettore* (o anche autofunzione o autostato) dell'operatore.¹⁸

In meccanica quantistica si usano dei particolari operatori (detti *hermitiani*) che vengono associati ad una grandezza fisica A classica e gli autovalori dell'operatore risultano sempre essere numeri reali e rappresentano tutti e soli i possibili valori che può assumere quella grandezza.

Così $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \hat{\mathcal{E}}$

risulterà essere l'operatore della energia mentre



$-i\hbar \nabla = \hat{\vec{p}}$

risulterà essere l'operatore che fornisce la quantità di moto

Mentre la (5.18) e la (5.19) sono equazioni agli autovalori.

5.3.6 IL SIGNIFICATO DELLA FUNZIONE Ψ

Dopo aver determinato la equazione dell'onda associata ad una particella la prima domanda da farsi è quale sia il significato della funzione Ψ e della equazione che la determina.

Trattandosi di una funzione a valori complessi essa non può rappresentare una grandezza fisica e, d'altra parte, il fatto che abbia valori complessi è ciò che ci garantisce che per somma si possano produrre effetti di tipo interferenziale quali quelli che si osservano negli esperimenti tipo doppia fenditura effettuati con fasci di elettroni. La scelta di operare nel

¹⁸ Il termine autovettore è stato tradotto dalla parola tedesca *Eigenvektor*, coniata da David Hilbert. *Eigen* significa "proprio", "caratteristico".

Analogamente il prefisso auto- (usato in italiano) è preso dal greco *autós* con significato "di sé stesso". Il vettore, tramite l'equazione viene rinvio a sé stesso.

equazione agli autovalori $\hat{A} \varphi = \lambda \varphi$

Operatore energia e operatore quantità di moto

campo complesso è stata in qualche modo dovuta per rispecchiare, con un formalismo matematico adeguato il comportamento della natura

Nel caso della luce la intensità luminosa è proporzionale al modulo quadro della ampiezza della oscillazione e fu dunque naturale pensare di far riferimento a $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$.

Dopo aver scartato, a causa delle aporie cui conducevano, l'idea che questo termine rappresentasse la densità di materia o la densità di carica, Max Born, pochi mesi dopo la formulazione della equazione, avanzò

l'ipotesi che $|\Psi(\vec{r},t)|^2$ rappresentasse una densità di probabilità; per la precisione la probabilità per unità di volume di trovare la particella nella posizione \vec{r} al tempo t.

Naturalmente poiché la probabilità di trovare la particella nell'intero spazio vale 1 occorrerà preventivamente procedere alla *normalizzazione* della funzione d'onda andando a calcolare:

Normalizzazione della funzione d'onda

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r},t)|^2 d\mathcal{Q} \tag{VI.5.22}$$

e fattorizzando si ha la rappresentazione della funzione $\Psi(\vec{r},t)$ con probabilità unitaria sull'intero spazio:

$$\Psi(\vec{r},t) \rightarrow \frac{1}{N} \Psi(\vec{r},t) \tag{VI.5.23}$$

Vanno fatte alcune considerazioni di tipo qualitativo sulla funzione $\Psi(\vec{r},t)$.

- Affinché l'integrale sia calcolabile la funzione si deve sicuramente annullare all'infinito (condizione necessaria ma non sufficiente)
- Affinché possa essere rispettato il carattere di granularità della particella occorre che la funzione d'onda risulti concentrata nello spazio intorno alla particella anche se, in presenza di un potenziale, hanno luogo degli sparpagliamenti più o meno estesi che, come vedremo producono fenomeni non osservabili nella fisica classica.

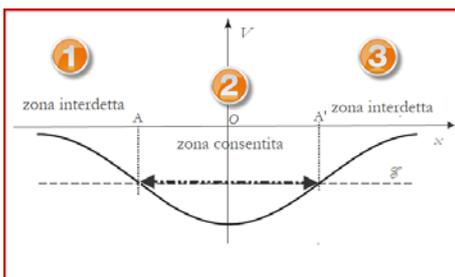
5.3.7 CONSIDERAZIONI SEMI-QUALITATIVE SULLA RISOLUBILITÀ DELLA EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

L'immagine qui a lato rappresenta una particella di energia \mathcal{E} immersa in un potenziale che presenta una buca e che, classicamente, obbliga la particella a muoversi tra A e A'. Tali punti sono chiamati solitamente *punti di ritorno*.

La zona consentita è la ② per la quale la quantità $V - \mathcal{E} < 0$

Vediamo cosa accade in ambito quantistico. Consideriamo la equazione degli stati stazionari in un contesto monodimensionale; la (VI.5.16) si scrive:

$$\mathcal{E} \varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) \Leftrightarrow$$



$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} - V) \varphi(x) = 0 \quad (VI.5.24)$$

Si tratta di una equazione differenziale del tipo:

$$y'' + \alpha y = 0 \quad (VI.5.25)$$

Tali equazioni, se facciamo la ipotesi semplificativa che α sia costante, ammettono come soluzione una combinazione lineare di termini esponenziali del tipo:

$$y = C_1 e^{-\sqrt{-\alpha}x} + C_2 e^{\sqrt{-\alpha}x} \quad (VI.5.26)$$

e a seconda che α sia positivo o negativo (energia maggiore o minore di quella potenziale) si producono soluzioni di tipo oscillatorio o esponenziale in senso stretto; infatti:

- $\alpha > 0 \Leftrightarrow \mathcal{E} > V \Rightarrow \sqrt{-\alpha} = \sqrt{\alpha} \sqrt{-1} = i\sqrt{\alpha} \quad (VI.5.27)$
e dunque, ricordando la relazione di Eulero le soluzioni sono di tipo oscillatorio
- $\alpha < 0 \Leftrightarrow \mathcal{E} < V \Rightarrow \sqrt{-\alpha}$ reale positivo $(VI.5.28)$
e dunque in questo caso abbiamo una combinazione lineare di esponenziali reali

Se osserviamo la (VI.5.24) vediamo che possiamo svolgere qualche considerazione sulla concavità della funzione di stato, infatti il segno di φ'' determina l'andamento della concavità della funzione.

Supponiamo dapprima che sia $V - \mathcal{E} > 0$ (zone ① e ③) e osserviamo che in quel caso φ'' e φ sono concordi (se φ è positiva concavità verso l'alto; se φ è negativa concavità verso il basso).

Nelle zone di tipo ② in cui $V - \mathcal{E} < 0$ accade il contrario ovvero la funzione tende ad avvicinarsi all'asse delle ascisse.

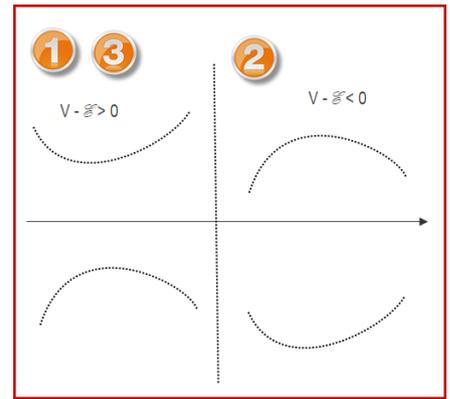
Vediamo ora come tutto ciò determini gli strani effetti previsti dalla meccanica quantistica e cioè:

- valore di energia minima diverso dal minimo del potenziale,
- quantizzazione della energia,
- presenza della particella nelle zone che dovrebbero esserle interdette).

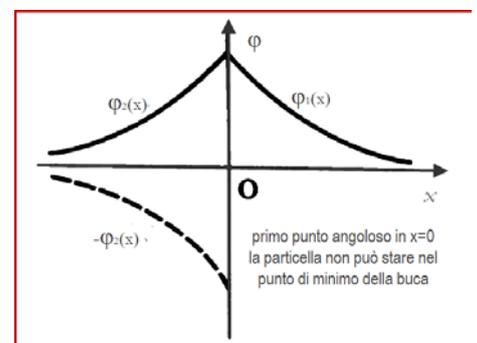
Supponiamo inizialmente di avere valori di energia negativa e aumentiamola sino ad arrivare al punto di minimo della energia potenziale.

All'infinito le φ si devono annullare e dunque per $x \rightarrow -\infty$ deve essere $C_2=0$ mentre per $x \rightarrow +\infty$ deve essere $C_1=0$. La funzione φ presenta un punto angoloso proprio per $x=0$ e dunque per le condizioni di regolarità richieste dalla teoria quella posizione stabile della particella (punto di minima energia) non è consentita.

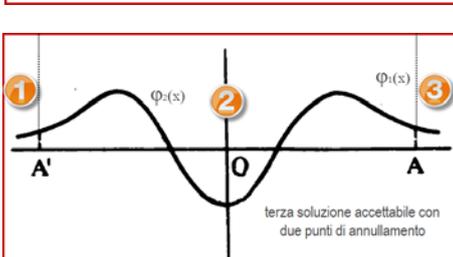
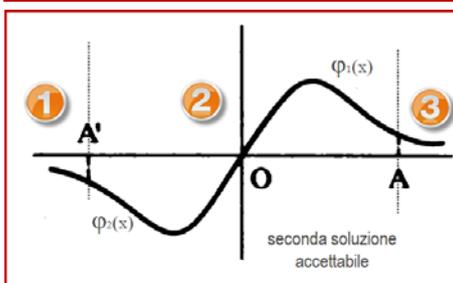
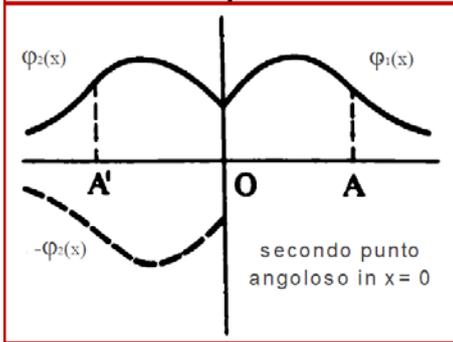
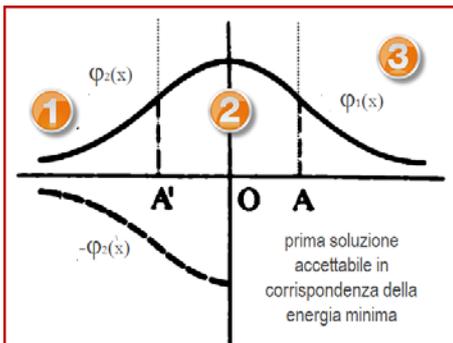
Nella immagine qui a lato sono rappresentate anche le $\varphi < 0$ (per ottenerle basta cambiare segno al coefficiente della combinazione lineare)



Il segno di $V - E$ determina la concavità di ψ



¹⁹ Lo si può verificare direttamente derivando due volte la funzione $y = C e^{mx}$ e ricordando poi che la soluzione generale nelle equazioni lineari è sempre data dalla combinazione lineare



che, come vedremo a breve, giocano un ruolo importante nel garantire il raccordo.

Incominciamo ora a far crescere il valore della energia; tra i due punti di non ritorno la concavità di φ risulta verso il basso e i punti di non ritorno sono pertanto punti di flesso. Al crescere della energia la spigolosità nel punto di raccordo diminuisce progressivamente finché i due rami presentano tangente orizzontale in corrispondenza di un valore \mathcal{E}_1 .

Per quel valore di energia (detto *energia di punto zero*) la soluzione φ data dal raccordo tra φ_1 e φ_2 è ammissibile, corrisponde ad una autofunzione della energia mentre \mathcal{E}_1 è il corrispondente autovalore. In meccanica quantistica non possono esistere particelle spazialmente definite e a riposo nel punto di minimo del potenziale (come avviene in fisica classica) in accordo con il principio di indeterminazione di Heisenberg.

Se ora si prosegue nell'aumentare l'energia mentre i due punti A e A' si allontanano prosegue l'aumento di curvatura delle due funzioni φ e si ha la formazione di un nuovo punto angoloso.

Continuando a far aumentare la energia la spigolosità aumenta mentre la ordinata del punto angoloso diminuisce; ma in compenso giunge in soccorso la funzione $-\varphi_2(x)$ che si può raccordare a $\varphi_1(x)$ in $x=0$ creando un nuovo punto di flesso e una soluzione accettabile caratterizzata da un punto di annullamento della funzione di stato.

Si prosegue allo stesso modo al crescere della energia mentre i punti di non ritorno si allontanano, il numero di zeri della n-esima soluzione è $n-1$ mentre i livelli energetici si fanno sempre più ravvicinati.

La probabilità di trovare la particella al di fuori della zona ② rimane piccola ma diversa da zero.

Quando l'energia \mathcal{E} diventa positiva entriamo nel dominio di validità della (VI.5.27) le soluzioni sono combinazioni lineari di seni e coseni per le quali è accettabile solo la parte reale. La funzione d'onda ha carattere oscillatorio tra meno e più infinito e lo spettro degli autovalori è di tipo continuo.

5.4 Equazione di Schrödinger stazionaria in contesti semplici

5.4.1 PREMESSA

Come abbiamo visto nel paragrafo precedente l'equazione di Schrödinger richiede di specificare in anticipo le condizioni di regolarità delle funzioni e le condizioni al contorno (raccordo tra le funzioni nei punti in cui si hanno bruschi cambiamenti nel potenziale).

Per quanto riguarda le condizioni di regolarità si richiede che la funzione e le derivate prime siano continue (limitatezza, assenza di salti e di punti angolosi).

In queste condizioni, come abbiamo già osservato, valgono le seguenti conclusioni che ritroveremo negli esempi svolti:

- Se l'energia $\mathcal{E} < 0$ l'equazione presenta soluzioni solo per valori discreti mentre la probabilità di trovare la particella si annulla all'infinito. La particella si trova in uno stato legato. La soluzione è disponibile in forma esatta nel caso di potenziali semplici mentre richiede metodi approssimati nella maggioranza dei casi.
- Se l'energia $\mathcal{E} > 0$ l'equazione presenta uno spettro continuo di soluzioni e le autofunzioni non si annullano all'infinito. La particella si trova in uno stato non legato.

5.4.2 BUCA DI POTENZIALE INFINITA ²⁰

Nel caso ipotizzato in cui il potenziale non dipenda dal tempo abbiamo:

$\Psi(x,t) = e^{-i\frac{\mathcal{E}}{\hbar}t} \varphi(x)$ mentre $\varphi(x)$ è soluzione di:

$$\mathcal{E} \varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + V(x) \varphi(x) \Rightarrow$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} - V) \varphi = 0$$

Ci limitiamo a studiare la regione $|x| < a$ perché all'esterno sarà $\varphi(x) = 0$

e per comodità di rappresentazione, essendo $\frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E} \geq 0$, poniamo:

$$\frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E} = \alpha^2$$

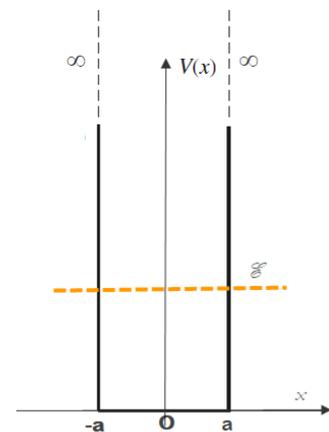
A questo punto l'equazione di Schrödinger si scrive:

$$\varphi'' + \alpha^2 \varphi = 0 \tag{VI.5.29}$$

e la generica soluzione è:

$$\varphi = A \sin(\alpha x) + B \cos(\alpha x) \tag{VI.5.30}$$

Poiché sulle pareti $x = \pm a$ la funzione si annulla dovrà essere:



²⁰ Per gli esempi di questo capitolo si è fatto riferimento a tre testi:

G. Aruldas – Quantum Mechanics – PHI Learning

A. Messiah – Quantum Mechanics – Dover

R. Scherrer – Quantum Mechanics – World Scientific

D. Sivuchin – Corso di fisica generale v. 5 Fisica atomica - MIR

$$0 = -A \sin(\alpha a) + B \cos(\alpha a) \wedge 0 = A \sin(\alpha a) + B \cos(\alpha a)$$

Da cui si ottiene:

$$2B \cos(\alpha a) = 0 \wedge 2A \sin(\alpha a) = 0$$

Scartiamo le soluzioni banali $A = 0$ e $B = 0$ che determinerebbero l'annullamento di φ e otteniamo due tipologie di soluzioni per $A=0 \wedge B \neq 0$ oppure $A \neq 0 \wedge B=0$

$\cos(\alpha a) = 0 \vee \sin(\alpha a) = 0$ da cui si hanno due possibilità

$$\alpha a = n \pi/2 \text{ per } n = 1, 3, 5, \dots$$

$$\alpha a = n\pi/2 \text{ per } n = 2, 4, 6, \dots$$

nel primo caso da $\alpha = n\pi/2a$ otteniamo $\frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E} = \frac{n^2\pi^2}{4a^2}$ e dunque:

$$\mathcal{E}_n = \frac{n^2\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \text{ Con } n = 1, 3, 5, \dots \tag{VI.5.31}$$

mentre

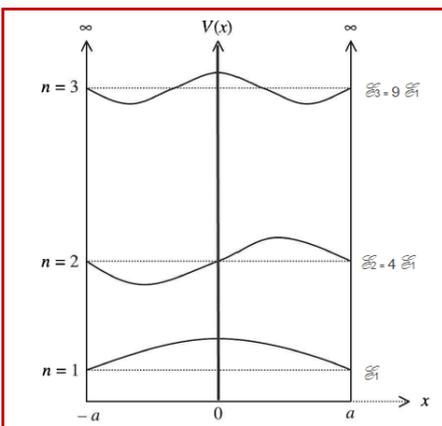
$$\varphi_n = B \cos(\alpha x) = B \cos\left(\frac{n\pi}{2a} x\right) \tag{VI.5.31bis}$$

nel secondo caso da $\alpha = n\pi/2a$ otteniamo $\frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E} = \frac{n^2\pi^2}{4a^2}$ e dunque:

$$\mathcal{E}_n = \frac{n^2\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \text{ con } n = 2, 4, 6, \dots \tag{VI.5.32}$$

mentre

$$\varphi_n = A \sin(\alpha x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{2a} x\right) \tag{VI.5.32bis}$$



le funzioni d'onda per la buca rettangolare infinita vanno come il coseno per n dispari e come il seno per n pari mentre i valori energetici crescono come n^2

Riassumendo l'energia della particella è quantizzata con valore

$\mathcal{E}_n = \frac{n^2\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$ $n = 1, 2, \dots$ mentre le corrispondenti funzioni hanno come

argomento $\frac{n\pi}{2a} x$ e vanno come il seno per n pari e come il coseno per n dispari.

Per normalizzare basta calcolare:

$$\int_{-a}^a A^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = A^2 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{a}{\pi} \sin^2 z dz \text{ ma:}$$

$$\int \sin^2 z dz = \frac{1}{2} \int (1 - \cos 2z) dz = \frac{1}{2} [z - \frac{1}{2} \sin(2z)]$$

$$\int_{-a}^a A^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{a A^2}{\pi} \frac{1}{2} [2\pi - 0] = a A^2$$

Per la condizione di normalizzazione $aA^2 = 1$ da cui $A = \frac{1}{\sqrt{a}}$

Analogamente si trova che $B = \frac{1}{\sqrt{a}}$ e dunque le onde hanno tutte la stessa ampiezza

$$A = B = \frac{1}{\sqrt{a}} \tag{VI.5.33}$$

Si osservi che tutte le energie quantizzate sono multiple del valore:

$$\mathcal{E}_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8 ma^2} \tag{VI.5.33}$$

che corrisponde alla *energia minima* della particella. Come si è già osservato nel paragrafo precedente l'esistenza di un valore minimo > 0 è legata alle previsioni del principio di indeterminazione di Heisenberg.

Posto una indeterminazione spaziale dell'ordine di a si ricava una indeterminazione su p dell'ordine di $\hbar/2a$ e dunque una indeterminazione energetica $p^2/2m$ pari a $\frac{(\hbar/2a)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8ma^2}$

Nel prossimo esempio cercheremo di capire cosa accade quando la buca di potenziale presenta un valore finito.

Secondo la meccanica classica la particella rimane confinata nella buca se $\mathcal{E} < V$ e risulta libera per $\mathcal{E} > V$. Vedremo invece che esiste una probabilità diversa da zero che per $\mathcal{E} < V$ la particella si trovi all'esterno della buca.

5.4.3 BUCA DI POTENZIALE FINITA

Ci aspettiamo comportamenti differenti delle funzioni d'onda nella zona ② interna alla buca (dove per $\mathcal{E} > V_0$ il comportamento sarà simile a quello già ritrovato con la buca infinita) mentre nelle zone ① e ③ si osserveranno le diversità quantistiche.

5.4.3.1 Energia negativa (dentro la buca)

La nostra buca presenta potenziale:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ V_0 & -a < x < a \\ 0 & x > a \end{cases} \tag{VI.5.34}$$

La equazione degli stati stazionari si scrive:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} - V) \varphi = 0 \text{ con la quantità tra parentesi positiva}$$

per semplificare i conti poniamo allora:

zona ②

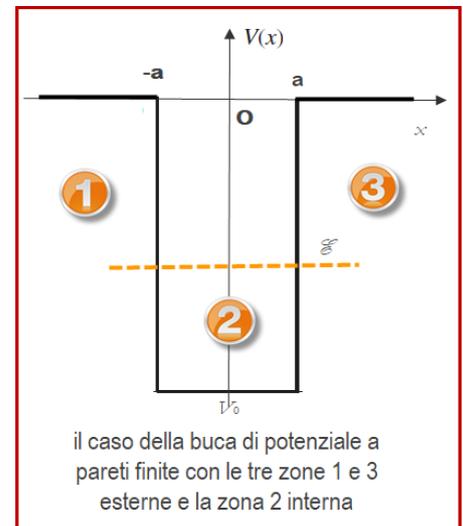
$$0 < \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} - V_0) = \kappa^2 \wedge \varphi''(x) + \kappa^2 \varphi(x) = 0 \tag{VI.5.35}$$

la soluzione generale della (VI.5.35) è del tipo:

$$\varphi = A \cos(\kappa x) + B \sin(\kappa x)$$

zone ① e ③

$$\alpha^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E} \wedge \varphi''(x) - \alpha^2 \varphi(x) = 0 \tag{VI.5.36}$$



La (VI.5.36) ha soluzioni di tipo esponenziale $e^{\pm\alpha x}$ che tenendo conto della condizione di annullamento all'infinito diventa:

$$\varphi = D e^{\alpha x} \text{ per } x < -a \vee \varphi = C e^{-\alpha x} \text{ per } x > a \quad (\text{VI.5.37})$$

Per ragioni di simmetria dovrà essere $|C| = |D|$ e dunque $C = \pm D$

Inoltre le condizioni di regolarità sui punti di frontiera richiedono che

$$\varphi(-a^-) = \varphi(-a^+) \text{ e } \varphi'(-a^-) = \varphi'(-a^+) \quad (\text{VI.5.38})$$

Calcoliamo pertanto le funzioni derivata:

$$\text{se } \varphi = A \cos(\kappa x) + B \sin(\kappa x) \Rightarrow \varphi' = -\kappa A \sin(\kappa x) + \kappa B \cos(\kappa x)$$

$$\text{se } \varphi = D e^{\alpha x} \text{ per } x < -a \vee \varphi = C e^{-\alpha x} \text{ per } x > a \Rightarrow$$

$$\varphi' = \alpha D e^{\alpha x} \vee \varphi' = -\alpha C e^{-\alpha x}$$

Imponiamo le condizioni di regolarità in $x = -a$

$$\begin{cases} D e^{-\alpha a} = A \cos(\kappa a) - B \sin(\kappa a) \\ \alpha D e^{-\alpha a} = \kappa A \sin(\kappa a) + \kappa B \cos(\kappa a) \end{cases} \quad (\text{VI.5.39})$$

e per $x = a$

$$\begin{cases} C e^{-\alpha a} = A \cos(\kappa a) + B \sin(\kappa a) \\ -\alpha C e^{-\alpha a} = -\kappa A \sin(\kappa a) + \kappa B \cos(\kappa a) \end{cases} \quad (\text{VI.5.40})$$

Operando per somma e sottrazione si ha

$$\begin{cases} (D+C)e^{-\alpha a} = 2A \cos(\kappa a) \wedge (D-C)e^{-\alpha a} = -2B \sin(\kappa a) \\ \alpha(D-C) e^{-\alpha a} = 2\kappa B \cos(\kappa a) \wedge \alpha(D+C) e^{-\alpha a} = 2\kappa A \sin(\kappa a) \end{cases} \quad (\text{VI.5.41})$$

Introduciamo ora le due condizioni $C=D$ e $C=-D$

Nel primo caso:

$$\begin{cases} 2C e^{-\alpha a} = 2A \cos(\kappa a) \\ 2C \alpha e^{-\alpha a} = 2\kappa A \sin(\kappa a) \end{cases} \quad (\text{VI.5.42})$$

E facendo il rapporto

$$\kappa \tan(\kappa a) = \alpha \quad (\text{VI.5.43})$$

Nel secondo caso si ha analogamente:

$$\kappa \cotg(\kappa a) = -\alpha \quad (\text{VI.5.44})$$

Queste condizioni non possono essere soddisfatte simultaneamente poiché facendo il prodotto delle due si ottiene $k^2 = -\alpha^2$ assurdo perché k^2 e α^2 sono reali positivi (si veda la definizione). E dunque le due equazioni daranno luogo a classi di soluzioni diverse.

La soluzione con tutti i coefficienti A, B, C, D nulli non ha alcun significato fisico (corrisponde all'annullamento di φ).

A questo punto, con riferimento alle soluzioni, avremo due classi:

quelle simmetriche rispetto all'asse φ (funzioni pari) e funzioni simmetriche rispetto all'origine (funzioni dispari).

In tal modo, tutte le soluzioni possibili si dividono in due classi:

- soluzioni con funzione d'onda pari in cui $A \neq 0, B = 0, C = D$
- soluzioni con funzione d'onda dispari in cui $A = 0, B \neq 0, C = -D$.

La determinazione delle soluzioni si fa per via grafica sfruttando il fatto che κ^2 e α^2 in base alle definizioni hanno una correlazione semplice; si opera un cambio di variabili per semplificare la trattazione della soluzione:

$$\beta = \alpha \kappa \quad \gamma = \alpha \alpha \tag{VI.5.45}$$

$$\beta^2 + \gamma^2 = a^2(\kappa^2 + \alpha^2) = a^2 \frac{2m}{\hbar^2} [(\mathcal{E} - V_0) - \mathcal{E}] = -V_0 a^2 \frac{2m}{\hbar^2}$$

si tratta di una famiglia di circonferenze di raggio variabile al variare della profondità della buca;

$$\beta^2 + \gamma^2 = r^2 \text{ con } r^2 = -V_0 a^2 \frac{2m}{\hbar^2} \tag{VI.5.46}$$

Ciò che determina il valore del raggio, che incide sulle soluzioni, è il prodotto $V_0 a^2$ ovvero la profondità della buca ma anche la sua larghezza.

$$\kappa \tan(\kappa a) = \alpha \Leftrightarrow \kappa a \tan(\kappa a) = \alpha a \Leftrightarrow$$

$$\beta \tan \beta = \gamma \tag{VI.5.46bis}$$

Basta ora considerare due assi cartesiani β e γ e rappresentare le due famiglie di funzioni; le soluzioni saranno in corrispondenza dei punti di intersezione.

Nella immagine sono state rappresentate in tratteggio anche le curve della (VI.5.44).

Per n dispari si trovano β_1, β_3, \dots sulle curve della tangente e β_2, β_4, \dots sulle curve della cotangente

Poiché $\gamma^2 = a^2 \alpha^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E}$ per ogni valore di γ del grafico possiamo trovare il corrispondente valore di energia

$$\mathcal{E}_n = -\gamma_n^2 \frac{\hbar^2}{2m} \tag{VI.5.47}$$

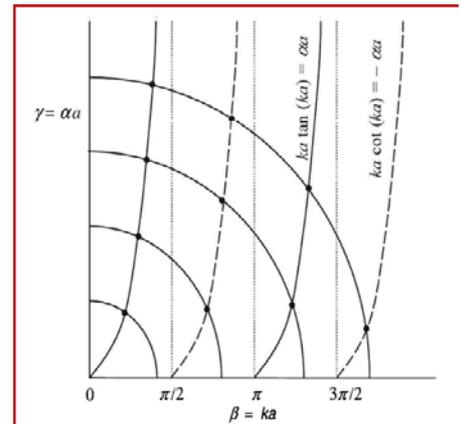
Dalla figura si evince che si ha una sola soluzione quando il raggio è minore di $\pi/2$, due soluzioni quando è tra $\pi/2$ e π , se ne hanno tre tra π e $3/2 \pi$ e così via.

Le soluzioni, simili a quelle della buca infinita, presentano accanto ai termini sinusoidali l'effetto di quelli esponenziali per il raccordo a zero all'infinito.

Esiste una probabilità diversa da zero di trovare la particella fuori dalla buca.

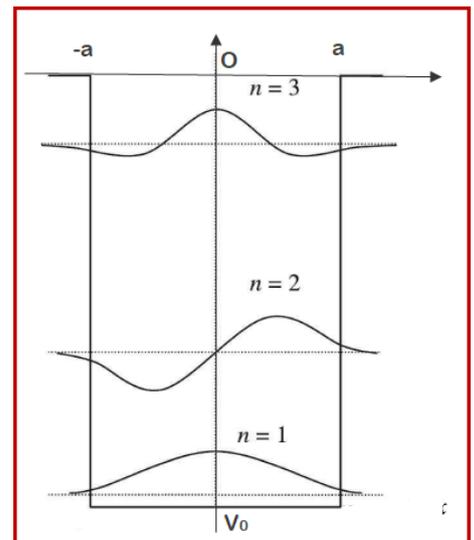
5.4.3.2 Energia positiva (fuori dalla buca)

Le soluzioni sono di tipo sinusoidale e lo spettro delle soluzioni è continuo; ovvero la particella può stare ovunque. e contro intuitivi



determinazione grafica approssimata delle soluzioni per una particella in una buca rettangolare di estensione finita al crescere della profondità della buca il numero di soluzioni cresce

Determinazione grafica delle soluzioni



Autofunzioni per la buca rettangolare finita

5.5 Barriera di potenziale ed effetto tunnel

Dedichiamo un intero paragrafo a questo fenomeno per due ragioni: si tratta di uno dei comportamenti bizzarri e contro intuitivi previsti dalla MQ, il fenomeno trova numerose conferme ed applicazioni.

In parte lo abbiamo già visto ragionando di buche di potenziale ma qui lo studieremo in dettaglio.²¹

Quando una particella di massa m ed energia \mathcal{E} incontra in $x=0$ un campo di forza descritto da una energia potenziale $V(x)$ che si estende da 0 a l allora il *coefficiente di trasmissione* (probabilità di attraversare la barriera) risulta pari a:

$$T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^l \sqrt{2m(V - \mathcal{E})} dx\right) \quad \text{☀} \quad (\text{VI.5.48})$$

Coefficiente di trasmissione per una barriera di potenziale di dimensioni finite

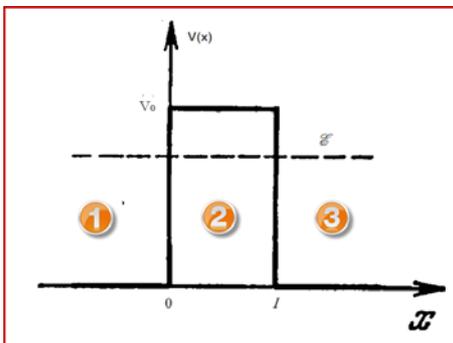
Nel caso particolare di una barriera rettangolare di estensione l e altezza V_0 la relazione si semplifica e diventa;

$$T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} l \sqrt{2m(V - \mathcal{E})}\right) \quad \text{☀} \quad (\text{VI.5.49})$$

Su questa relazione eseguiremo qualche calcolo numerico a scopo illustrativo.

Secondo la fisica classica una particella che viaggia da sinistra verso destra può seguire due comportamenti a seconda del suo valore di energia:

- Se $\mathcal{E} > V_0$ giunta in $x = 0$ diminuisce la sua velocità cambiando la sua energia cinetica da \mathcal{E} a $\mathcal{E} - V_0$ e la riacquista quando entra nella regione ③.
- Se $\mathcal{E} < V_0$ giunta in $x = 0$ la particella rimbalza e torna indietro con la medesima energia cinetica. Le regioni ② e ③ le risultano inaccessibili.



Barriera di potenziale con larghezza ed altezza di dimensioni finite

In meccanica quantistica le cose vanno diversamente: esiste una probabilità diversa da zero che la particella entri nella regione ② e possa addirittura fuoriuscire e arrivare alla zona ③. Il fenomeno fisico più importante basato su questo comportamento è il decadimento α (vedi capitolo 0702) ma problematiche dello stesso genere si verificano nella fisica dei semiconduttori.

5.5.1 CASO IN CUI SIA $\mathcal{E} < V_0$

Nella regione ① e ③ si ha:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E} \varphi = 0$$

Mentre nella regione ② si ha:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} - V_0) \varphi = 0 \text{ con } \mathcal{E} - V_0 < 0$$

²¹ I testi di meccanica quantistica ne trattano con maggiore o minore dettaglio e, in ogni caso, sono necessarie pagine di conti. Poiché il nostro è però un testo di fisica generale si è scelto di seguire la impostazione di un testo che, senza fare eccessivi sconti, arriva a dedurre la legge di riferimento.

I.V. Savel'yev – General Physics vol. 3 - MIR

In base a quanto abbiamo già visto nel paragrafo precedente nelle regioni ① e ③ si hanno soluzioni esponenziali ad esponente complesso; posto

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m \mathcal{E}}}{\hbar} \quad (\text{VI.5.50})$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m (V_0 - \mathcal{E})}}{\hbar} \quad (\text{VI.5.51})$$

Le soluzioni generali della equazione di Schrödinger sono del tipo:

$$\varphi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x} \text{ in } \textcircled{1} \quad (\text{VI.5.52})$$

$$\varphi_3 = A_3 e^{i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x} \text{ in } \textcircled{3}$$

$$\varphi_2 = A_2 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x} \text{ in } \textcircled{2} \quad (\text{VI.5.53})$$

Nella prima equazione delle (VI.5.52) i due termini rappresentano onde che si propagano nel verso positivo e negativo dell'asse x e cioè l'onda incidente e l'onda riflessa.²²

Nella seconda equazione sarà presente solo l'onda che ha attraversato la barriera e non ci sarà riflessione e dunque sarà $B_3 = 0$

Possiamo ora applicare le condizioni al contorno (continuità della funzione e della derivata prima).

$$\varphi'_1 = A_1 i \alpha e^{i\alpha x} - B_1 i \alpha e^{-i\alpha x} \text{ in } \textcircled{1} \quad (\text{VI.5.52 bis})$$

$$\varphi'_3 = A_3 i \alpha e^{i\alpha x} \text{ in } \textcircled{3}$$

$$\varphi'_2 = A_2 \kappa e^{\kappa x} - B_2 \kappa e^{-\kappa x} \text{ in } \textcircled{2} \quad (\text{VI.5.53 bis})$$

sostituiamo

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \Leftrightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$\varphi_3(l) = \varphi_2(l) \Leftrightarrow A_3 e^{i\alpha l} = A_2 e^{\kappa l} + B_2 e^{-\kappa l}$$

$$\varphi'_1(0) = \varphi'_2(0) \Leftrightarrow A_1 i \alpha - B_1 i \alpha = A_2 \kappa - B_2 \kappa$$

$$\varphi'_3(l) = \varphi'_2(l) \Leftrightarrow A_3 i \alpha e^{i\alpha l} = A_2 \kappa e^{\kappa l} - B_2 \kappa e^{-\kappa l}$$

e otteniamo un sistema di 4 equazioni:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ A_3 e^{i\alpha l} = A_2 e^{\kappa l} + B_2 e^{-\kappa l} \\ A_1 i \alpha - B_1 i \alpha = A_2 \kappa - B_2 \kappa \\ A_3 i \alpha e^{i\alpha l} = A_2 \kappa e^{\kappa l} - B_2 \kappa e^{-\kappa l} \end{cases} \quad (\text{VI.5.54})$$

Introduciamo delle variabili di appoggio che consentono di eliminare una delle costanti e uno dei due parametri:

$$b_1 = \frac{B_1}{A_1} \quad b_2 = \frac{B_2}{A_1} \quad a_2 = \frac{A_2}{A_1} \quad a_3 = \frac{A_3}{A_1} \quad n = \frac{\kappa}{\alpha}$$

e così il sistema (VI.5.54) si trasforma in:

$$\begin{cases} 1 + b_1 = a_2 + b_2 \\ a_3 e^{i\alpha l} = a_2 e^{\kappa l} + b_2 e^{-\kappa l} \\ i - i b_1 = a_2 n - b_2 n \\ a_3 i e^{i\alpha l} = a_2 n e^{\kappa l} - b_2 n e^{-\kappa l} \end{cases} \quad (\text{VI.5.54 bis})$$

²² Stiamo usando le equazioni stazionarie dunque non si vede la esplicitazione del tempo.

Il coefficiente di riflessione da parte della barriera sarà il rapporto delle intensità (modulo delle ampiezze al quadrato) e rappresenta la probabilità che la particella venga riflessa dalla barriera:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = |b_1|^2 \quad (VI.5.55)$$

Analogamente si definisce il coefficiente di trasmissione:

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = |a_3|^2 \quad (VI.5.55)$$

Poiché ci interessa l'effetto tunnel ci concentreremo sulla determinazione di T (d'altra parte $R+T = 1$).

Osservando la presenza delle variabili nelle 4 equazioni opereremo sulla I e III e su II e IV

Moltiplichiamo la I per i e sommiamo:

$$2i = a_2(n+i) + b_2(i-n)$$

Moltiplichiamo la II per i e sottraiamo:

$$0 = a_2 e^{\kappa l} + b_2 e^{-\kappa l} - a_2 n e^{\kappa l} + b_2 n e^{-\kappa l} \Leftrightarrow a_2 e^{\kappa l} (1-n) + b_2 e^{-\kappa l} (1+n) = 0$$

$$\begin{cases} a_2(n+i) + b_2(i-n) = 2i \\ a_2 e^{\kappa l} (1-n) + b_2 e^{-\kappa l} (1+n) = 0 \end{cases}$$

Si risolve il sistema e si trova:

$$a_2 = \frac{2i(n+i)e^{-\kappa l}}{(n+i)^2 e^{-\kappa l} - (n-i)^2 e^{\kappa l}} \wedge b_2 = \frac{2i(n-i)e^{\kappa l}}{(n+i)^2 e^{-\kappa l} - (n-i)^2 e^{\kappa l}} \quad (VI.5.56)$$

Per sostituzione nella seconda equazione del sistema 5.54 si ottiene;

$$a_3 = \frac{4ni}{(n+i)^2 e^{-\kappa l} - (n-i)^2 e^{\kappa l}} \cdot e^{-i\alpha l} \quad (VI.5.57)$$

la quantità $\kappa l = \frac{\sqrt{2m(V_0 - \mathcal{E})}}{\hbar} l$ solitamente è molto maggiore di 1 e pertanto $e^{\kappa l} \gg e^{-\kappa l}$ mentre $(n+i)^2$ e $(n-i)^2$ hanno circa lo stesso modulo; tutto ciò ci consente di trascurare $(n+i)^2 e^{-\kappa l}$ rispetto a $(n-i)^2 e^{\kappa l}$ e dunque potremo scrivere che:

$$a_3 \approx \frac{-4ni e^{-i\alpha l}}{(n-i)^2 e^{\kappa l}} \quad (VI.5.58)$$

Dalla (VI.5.55) possiamo dunque calcolare il coefficiente di trasmissione:

$$T = |a_3|^2 = \frac{16n^2 e^{2\kappa l}}{n^2 + 1} \text{ con } n = \frac{\kappa}{\alpha} \text{ dunque:}$$

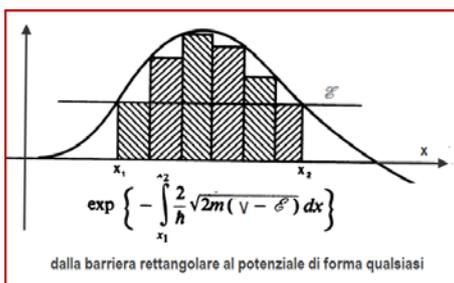
$$n^2 = \left(\frac{\kappa}{\alpha}\right)^2 = \frac{V_0 - \mathcal{E}}{\mathcal{E}} = \frac{V_0}{\mathcal{E}} - 1$$

tenendo conto di ciò possiamo affermare che $\frac{n^2}{n^2+1} = \frac{V_0 - \mathcal{E}}{V_0}$ e concludere che:

$$T = 16 \frac{V_0 - \mathcal{E}}{V_0} e^{-2\kappa l} = 16 \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{V_0}\right) e^{-2\kappa l}$$

Spesso si dà una stima media ponendo: $16 \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{V_0}\right) \approx 1$ da cui

$$T \approx e^{-2\kappa l} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} l \sqrt{2m(V_0 - \mathcal{E})}\right)$$

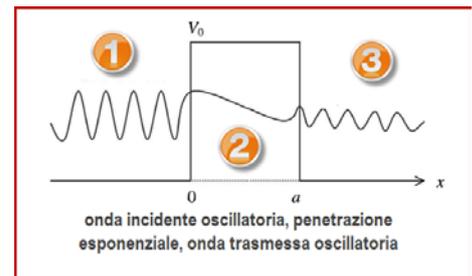




Nel caso in cui la barriera non sia di tipo rettangolare basta scomporla in una sequenza di barriere rettangolari e così facendo si arriva alla equazione (VI.5.49).

Riassumendo:

- Zona ① funzione d'onda di tipo oscillatorio con presenza della onda incidente e di un'onda riflessa
- Zona ② presenza della sola onda trasmessa di tipo esponenziale
- Zona ③ funzione d'onda di tipo oscillatorio



Visualizzazione grafica delle soluzioni

5.5.2 CASO IN CUI SIA $\mathcal{E} > V_0$

In questo caso

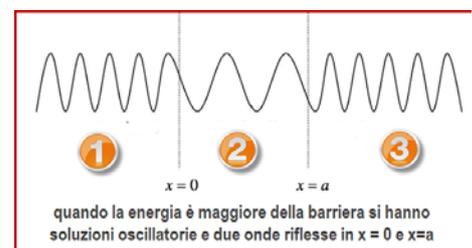
$$\varphi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x} \text{ in } \textcircled{1}$$

$$\varphi_3 = A_3 e^{i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x} \text{ in } \textcircled{3}$$

$$\varphi_2 = A_2 e^{i\beta x} + B_2 e^{-i\beta x} \text{ in } \textcircled{2}$$

$$\text{con } \alpha = \frac{\sqrt{2m\mathcal{E}}}{\hbar} \text{ e } \beta = \frac{\sqrt{2m(\mathcal{E} - V_0)}}{\hbar}$$

e dunque si producono soluzioni di tipo oscillatorio e la presenza di due onde riflesse alle superfici di separazione



5.5.3 TUNNEL È UN TERMINE IMPROPRIO

Nel maneggiare effetti paradossali come la possibilità che una particella superi una barriera di potenziale *classicamente improponibile* bisogna tener conto che *non esiste alcun tunnel entro il quale la particella passa* indenne.

La particella è descritta dal suo stato inteso come un tutto e dunque non ha senso andare a lavorare sulle singole parti della funzione d'onda.

Il legame tra i coefficienti di trasmissione e riflessione per le particelle e per le onde ha natura probabilistica e quando si vuole indagare un singolo aspetto del reale (dove sta la particella nel tunnel?) si entra nel regno delle quantità non osservabili dove domina il principio di indeterminazione.

Tutto ciò che accade è che, in una certa percentuale di casi, dipendenti in maniera cruciale dalla altezza della barriera e dal suo spessore si ritrovino delle particelle dove classicamente non si sarebbero dovuto trovare. Il paragrafo VII.2.4 contiene una dettagliata discussione del decadimento alfa e delle ragioni per cui le particelle α , per effetto tunnel riescano a superare la barriera di potenziale dovuta alla azione congiunta delle attrazioni tra nucleoni e della repulsione coulombiana tra i protoni.

5.5.4 ESEMPI DI EFFETTO TUNNEL

5.5.4.1 Particella α nel nucleo atomico

Una particella α di massa $m = 6.64 \times 10^{-27}$ kg è interna ad un nucleo di dimensione tipica $r = 1.4 \times 10^{-15}$ m e presenta una energia di 2 MeV. La barriera di potenziale dovuta alla interazione nucleare è di circa 4 MeV.

Determinare la probabilità che la particella riesca ad uscire dal nucleo.



La quantità $16 \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{V_0}\right) = 16(1 - 1/2) = 8$ mentre:

$$\sqrt{2m(V_0 - \mathcal{E})} = \sqrt{2 \times 6.64 \times 10^{-27} (4-2) \times 10^6 \times 1.6 \times 10^{-19}} = 6.52 \times 10^{-20} \text{ kg m/s}$$

$$\frac{2r}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - \mathcal{E})} = \frac{2.8 \times 10^{-15} \text{ m}}{1.05 \times 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s}} \times 6.52 \times 10^{-20} \text{ kg m/s} = 3.48$$

E dunque: $T = 16 \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{V_0}\right) \text{Exp}\left(-\frac{2r}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - \mathcal{E})}\right) = 8 e^{-3.48} = 0.246$



5.5.4.2 Barriera di potenziale parabolica



Utilizzando la equazione (5.48) determinare la probabilità che una particella di massa m ed energia \mathcal{E} possa attraversare una barriera di potenziale $V(x) = V_0(1-x^2/a^2)$ dimostrare in particolare che il valore di T risulta essere:

$$\text{exp}\left[-\frac{\pi}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{V_0}} (V_0 - \mathcal{E})\right]$$



Nel caso considerato $T = \text{Exp}\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{2m(V - \mathcal{E})} dx\right)$ dove $V = V_0(1-x^2/a^2)$ e dunque dobbiamo preventivamente determinare le coordinate dei due punti di non ritorno.

$$V_0(1-x^2/a^2) = \mathcal{E} \text{ da cui si ha } x = \pm a \sqrt{1 - \frac{\mathcal{E}}{V_0}}$$

Data la simmetria conviene integrare tra 0 e $x_B = a \sqrt{1 - \frac{\mathcal{E}}{V_0}}$ e dunque:

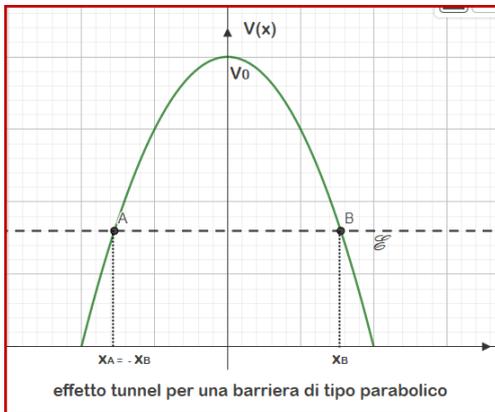
$$T = \text{Exp}\left(-\frac{4}{\hbar} \int_0^{x_B} \sqrt{2m(V - \mathcal{E})} dx\right) = \text{Exp}\left\{-\frac{4}{\hbar} \int_0^{x_B} \sqrt{2m \left[V_0 \left(1 - \frac{x^2}{a^2} - \frac{\mathcal{E}}{V_0}\right)\right]} dx\right\}$$

Per calcolare questo integrale conviene fare qualche sostituzione di variabile che ci porti ad integrali noti (quello della semicirconferenza che porta a funzioni goniometriche)

A questo scopo poiché $x_B = a \sqrt{1 - \frac{\mathcal{E}}{V_0}}$ avremo:

$$T = \text{Exp}\left\{-\frac{4}{\hbar} \int_0^{x_B} \sqrt{2m V_0} \sqrt{\frac{x_B^2}{a^2} - \frac{x^2}{a^2}} dx\right\} = \text{Exp}\left\{-\frac{4}{a \hbar} \sqrt{2m V_0} \int_0^{x_B} \sqrt{x_B^2 - x^2} dx\right\}$$

La funzione da integrare è una semicirconferenza centrata nell'origine e di raggio x_B e l'integrale riguarda l'area del primo quadrante pari a



$$\frac{1}{4} \pi x_B^2 = \frac{1}{4} \pi a^2 \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{V_0}\right)$$

Pertanto non occorre nemmeno calcolare l'integrale indefinito (che si fa per sostituzione passando alle funzioni goniometriche) e si scrive direttamente il risultato:

$$\begin{aligned} \Gamma &= \text{Exp} \left\{ -\frac{4}{a \hbar} \sqrt{2m V_0} x_B^2 \pi/4 \right\} = \text{Exp} \left\{ -\frac{4}{a \hbar} \sqrt{2m V_0} a^2 \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{V_0}\right) \pi/4 \right\} \\ &= \\ &= \text{Exp} \left\{ -\frac{\pi a}{\hbar} \sqrt{2m V_0} \left(1 - \frac{\mathcal{E}}{V_0}\right) \right\} \end{aligned}$$

5.6 L'oscillatore armonico

L'oscillatore armonico nello sviluppo storico della fisica ha una presenza costante perché diversi modelli di spiegazione di fenomeni fisici in termodinamica, in ottica e persino nella nascente teoria atomica ipotizzavano la presenza di forze elastiche.

Per lo studio delle caratteristiche fisiche dell'oscillatore armonico classico si rinvia ai capitoli della IV parte: 0401 e 0402.

In meccanica quantistica l'oscillatore armonico è definito come la accoppiata tra una particella di massa m che si muove lungo l'asse x : e una energia potenziale

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2$$

Tale energia potenziale, classicamente, è dovuta alla azione di una forza elastica di richiamo:

$$F_x = -k x$$

Data la energia \mathcal{E} della particella, essa si muove di moto armonico (legge sinusoidale) tra i due punti di ritorno con una fase che dipende dalle condizioni iniziali ed una ampiezza determinata dal valore della energia mentre la frequenza angolare di oscillazione è:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Quando si passa in ambito quantistico occorre fare alcune precisazioni:

- occorre limitare la estensione della parabola per evitare problemi di ∞ che impedirebbero la normalizzazione delle funzioni di stato.
- occorre precisare che, anche se si rappresentano spesso le energie quantizzate e quella potenziale su uno stesso diagramma, si tratta solo di una rappresentazione visuale perché esse non possono mai essere date esattamente nello stesso istante (principio di indeterminazione).

La equazione di Schrödinger per l'oscillatore armonico risulta essere:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} + \frac{1}{2} k x^2) \phi = 0 \tag{VI.5.59}$$

o equivalentemente

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{E} + \frac{1}{2} \omega^2 m x^2) \phi = 0 \tag{VI.5.59}$$

La soluzione di questa equazione richiede tecniche di analisi funzionale e ci limitiamo pertanto a fornire i risultati:

Gli autovalori della energia hanno uno spettro discreto:

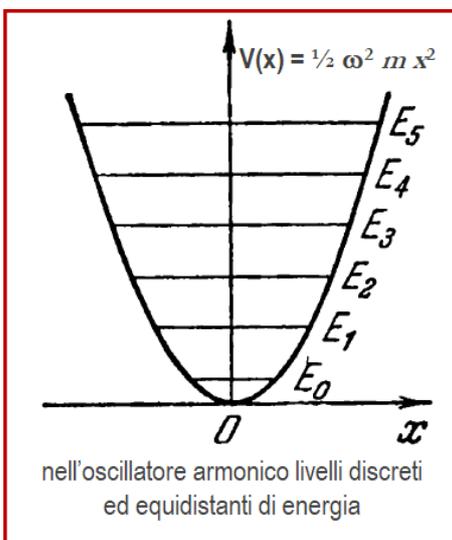
$$\mathcal{E}_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{VI.5.60}$$

Mentre il livello energetico fondamentale vale:

$$\mathcal{E}_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \tag{VI.5.61}$$

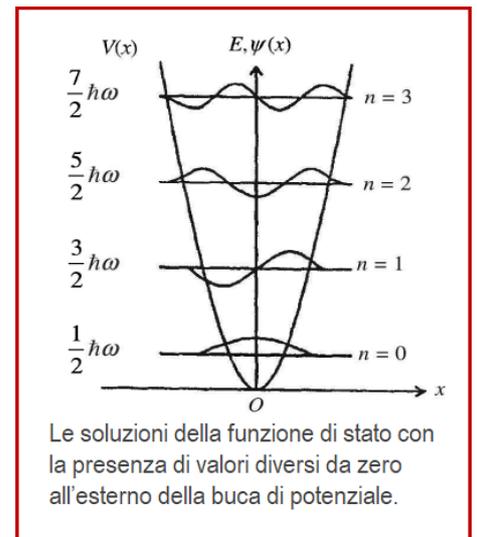
La esistenza di un livello di energia vibrazionale minimo da parte degli atomi si evidenzia osservando che i cristalli, anche a temperature prossime allo zero assoluto, conservano la capacità di produrre *scattering* con fasci luminosi.

L'argomento della esistenza di minimi energetici diversi da zero è sviluppato nella parte finale del capitolo dedicato al principio di indeterminazione.



Sempre attraverso calcoli di MQ si arriva a stabilire che in un oscillatore armonico non sono ammessi salti quantici qualsiasi tra livelli ma sono ammessi solo quelli per cui $\Delta n = \pm 1$ il che ha permesso di dare una spiegazione delle *regole di selezione* che, a suo tempo, erano state introdotte da Bohr come ipotesi ad hoc.

Trova inoltre una spiegazione l'ipotesi sugli scambi energetici tra la radiazione elettromagnetica e le pareti in una cavità pari ad $h\nu$ che Planck aveva avanzato per dar conto della legge sullo spettro del corpo nero.



5.7 La matematica necessaria per la M.Q.

5.7.1 GLI SPAZI VETTORIALI LINEARI A 3 DIMENSIONI

Lo studente medio di liceo scientifico ha già dimestichezza con l'ordinario spazio vettoriale a tre dimensioni (somma di vettori, moltiplicazione per uno scalare, prodotto scalare, versori, componenti di un vettore).

Ci apprestiamo ad una prima generalizzazione rimanendo nel campo reale, per poi passare al campo complesso e agli spazi vettoriali nel campo complesso.

5.7.1.1 I vettori come terne ordinate di numeri reali

Nell'ordinario spazio a 3 dimensioni, detto \mathfrak{R}^3 , i vettori sono terne ordinate di numeri reali $\vec{v} \equiv (v_1, v_2, v_3)$ che solitamente si scrivono utilizzando i 3 versori $\vec{e}_1 = \vec{i} \equiv (1, 0, 0)$, $\vec{e}_2 = \vec{j} \equiv (0, 1, 0)$, $\vec{e}_3 = \vec{k} \equiv (0, 0, 1)$ con la notazione:

$$\vec{v} = v_1 \vec{e}_1 + v_2 \vec{e}_2 + v_3 \vec{e}_3 = \sum_{i=1}^3 v_i \vec{e}_i \quad (\text{VI.5.62})$$

5.7.1.2 Il prodotto scalare, la norma e la normalizzazione

Una operazione importante in \mathfrak{R}^3 è il prodotto scalare definito così:

$$(\vec{u}, \vec{v}) = \vec{u} \cdot \vec{v} = \sum_{i=1}^3 u_i v_i \quad (\text{VI.5.63})$$

Si chiama norma o modulo di un vettore la radice del prodotto scalare del vettore per se stesso:

$$\|\vec{u}\| = \sqrt{(\vec{u}, \vec{u})} = \sqrt{\sum_{i=1}^3 u_i^2} \quad (\text{VI.5.64})$$

I vettori di norma unitaria sono detti *normali*, i vettori con prodotto scalare nullo sono detti *ortogonali*.

E' definita anche l'operazione di moltiplicazione tra uno scalare e un vettore eseguita attraverso la ordinaria moltiplicazione per le componenti:

$$\alpha \vec{v} \equiv (\alpha v_1, \alpha v_2, \alpha v_3) \quad (\text{VI.5.65})$$

Supponiamo che β sia la norma di un vettore \vec{v} , $\beta = \|\vec{v}\|$ allora il vettore:

$$\vec{u} = \frac{1}{\beta} \vec{v} \text{ è un vettore normalizzato parallelo a quello originale.}$$

Due o più vettori si dicono *ortonormali* se sono ortogonali e hanno norma unitaria. I vettori ortonormali giocano un ruolo importante nella rappresentazione di un generico vettore e lo sono in \mathfrak{R}^3 i tre versori $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$

Anche se siamo abituati a pensare ai tre versori classici come alla terna ortonormale per antonomasia si tenga presente che quella non è l'unica

terna ortonormale; per la precisione ce ne sono infinite. Lo vedremo più oltre negli esercizi.

Per non appesantire non elenchiamo le proprietà algebriche che riguardano le diverse operazioni sin qui definite anche perché esse saranno richiamate come assiomi nella trattazione generale degli spazi lineari.

5.7.2 LA GENERALIZZAZIONE A N DIMENSIONI

5.7.2.1 da \mathfrak{R}^3 a \mathfrak{R}^n

Nel caso di \mathfrak{R}^n la generalizzazione è immediata. Il vettore, invece che da una terna, è costituito da una ennupla ordinata di numeri reali. Si considera un insieme $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n$ di vettori ortonormali e si generalizzano le definizioni precedenti:

- espressione di un vettore attraverso la base:

$$\vec{v} = \sum_{i=1}^n v_i \vec{e}_i \tag{VI.5.66}$$

- prodotto scalare

$$(\vec{u}, \vec{v}) = \sum_{i=1}^n u_i v_i \tag{VI.5.67}$$

- componenti di un vettore

$$v_i = (\vec{v}, \vec{e}_i)$$

- norma al quadrato

$$\|\vec{u}\|^2 = (\vec{u}, \vec{u}) = \sum_{i=1}^n u_i^2 \tag{VI.5.64 bis}$$

5.7.2.2 da \mathfrak{R}^n a \mathcal{C}^n

Se lo spazio viene definito nel campo complesso l'unico cambiamento riguarda la definizione del prodotto scalare:

$$(\vec{u}, \vec{v}) = \sum_{i=1}^n u_i^* v_i \tag{VI.5.67}$$

Dove come d'abitudine si è indicato con u_i^* il complesso coniugato di u_i . Osserviamo che la norma è sempre un numero reale positivo perché nel campo complesso $zz^* = (a+ib)(a-ib) = a^2+b^2 \geq 0$ sempre e questo spiega la introduzione di z^* nella definizione del prodotto scalare. Poiché la norma viene fatta discendere dal prodotto scalare bisogna fare in modo che $(\vec{u}, \vec{u}) \geq 0$.

D'ora in avanti indicheremo i vettori del nostro spazio, anziché con la freccina, con una notazione, dovuta a Dirac, e che è diventata lo standard in MQ e che rimanda ad una nozione di vettore più generale di quella a cui siamo abituati; il generico vettore sarà indicato con $|u\rangle$ e sarà chiamato *ket u*.

Questa bizzarra terminologia deriva dal fatto che (nel prodotto scalare e in altri contesti) si usano anche i vettori *bra* $\langle u|$ e il prodotto scalare si fa tra un bra e un ket utilizzando al posto di $\langle | \rangle$ la scrittura più compatta $\langle | \rangle$ *bracket* che in inglese significa proprio parentesi.

5.7.3 PRINCIPALI PROPRIETÀ DELLE OPERAZIONI IN \mathcal{C}^N

5.7.3.1 chiusura delle due operazioni di somma e moltiplicazione per uno scalare

$\forall |u\rangle, \forall |v\rangle \Rightarrow |u\rangle + |v\rangle$ è un vettore

$\forall |u\rangle$ e $\forall \alpha, \alpha \in \mathcal{C} \Rightarrow \alpha |u\rangle$ è un vettore

5.7.3.2 proprietà distributive

$$(\alpha + \beta) |u\rangle = \alpha |u\rangle + \beta |u\rangle$$

$$\alpha (|u\rangle + |v\rangle) = \alpha |u\rangle + \alpha |v\rangle$$

5.7.3.3 commutatività e associatività

Le due operazioni di somma tra vettori e di moltiplicazione tra uno scalare e un vettore sono sia associative sia commutative

5.7.3.4 vettore nullo e vettore inverso

Nello spazio vettoriale esiste ed è unico un vettore, detto vettore nullo (o elemento neutro rispetto alla somma) tale che:

$$\forall |u\rangle + |0\rangle = |u\rangle$$

Nello spazio vettoriale, per ogni vettore $|u\rangle$ esiste ed è unico un vettore $|u'\rangle$ tale che $|u\rangle + |u'\rangle = |0\rangle$

5.7.3.5 definizione di indipendenza lineare e dimensione dello spazio

Data una ennupla di vettori $|u_1\rangle + |u_2\rangle + \dots + |u_n\rangle$ si consideri la loro

combinazione lineare: $\alpha_1 |u_1\rangle + \alpha_2 |u_2\rangle + \dots + \alpha_n |u_n\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |u_i\rangle$.

Presi n vettori essi si dicono **linearmente dipendenti** se esiste almeno un coppia $(\alpha_j, \alpha_k) \neq (0, 0)$ tale che

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i |u_i\rangle = |0\rangle \quad (\text{VI.5.68})$$

teorema

Data una ennupla di vettori linearmente dipendenti, almeno uno di essi si può scrivere come combinazione lineare degli altri.

dimostrazione

Consideriamo il vettore $|u_j\rangle$ e isoliamolo dagli altri:

$$-\alpha_j |u_j\rangle = \sum_{i \neq j} \alpha_i |u_i\rangle \text{ e poiché } \alpha_j \neq 0 \Rightarrow |u_j\rangle = - \sum_{i \neq j} \frac{\alpha_i}{\alpha_j} |u_i\rangle \text{ e poiché esiste}$$

anche un secondo coefficiente $\alpha_k \neq 0$ potremo scrivere

$$|u_i\rangle = \sum_{i \neq j} \beta_i |u_i\rangle \tag{VI.5.69}$$

dove i β_i non sono tutti nulli.

Se tale situazione non si verifica, ovvero se la equazione (5.68) è verificata solo per coefficienti identicamente nulli, si dice che gli n vettori sono **linearmente indipendenti**.

5.7.3.6 Condizioni per la indipendenza lineare

Quando i vettori sono espressi attraverso le loro componenti,

$$|u_i\rangle = (u_{i1}, u_{i2}, \dots, u_{in}) \text{ con } i = 1, 2, \dots, n$$

la equazione (5.68) si trasforma nel sistema lineare omogeneo:

$$\begin{cases} \alpha_1 u_{11} + \alpha_2 u_{21} + \dots + \alpha_n u_{n1} = 0 \\ \dots \\ \alpha_1 u_{1n} + \alpha_2 u_{2n} + \dots + \alpha_n u_{nn} = 0 \end{cases} \tag{VI.5.70}$$

e dunque per stabilire la indipendenza lineare si è ricondotti a risolvere un sistema lineare omogeneo di n equazioni in n incognite e bisogna imporre che tale sistema abbia come unica soluzione quella identicamente nulla.

Teorema

EN affinché n vettori siano linearmente indipendenti è che, se si in-

dica con $U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_{n1} & u_{n2} & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}$ la matrice formata dai coefficienti della
 enupla sia $\det U = 0$ (VI.5.71)

5.7.3.7 Dimensioni di uno spazio e basi

Se uno spazio vettoriale possiede una enupla di vettori linearmente indipendenti mentre qualsiasi insieme di $n+1$ vettori è linearmente dipendente allora si dice che lo **spazio vettoriale ha n dimensioni**.

Con la enupla di vettori linearmente indipendenti si può rappresentare qualsiasi altro vettore dello spazio; basta scrivere la combinazione lineare degli $n+1$ vettori linearmente dipendenti ottenuti aggiungendo $|v\rangle$ (che esiste per ipotesi) e dalla combinazione lineare che dà il vettore nullo ricavare $|v\rangle$ come nella (VI.5.69).

La dimostrazione che la rappresentazione è unica si fa per assurdo (basta supporre che esistano due rappresentazioni e si vede che in quel caso i vettori sono linearmente dipendenti).

5.7.3.8 Definizione assiomatica del Prodotto Scalare

Negli spazi vettoriali più generali (in cui i vettori non vengono definiti come enuple di numeri reali o complessi, ma vengono definiti indirettamente come enti che godono di determinate proprietà) il prodotto scalare viene definito in maniera assiomatica come segue²³

Il *prodotto scalare* (detto anche *prodotto interno*), indicato come $\langle u | v \rangle$ viene definito astrattamente come una corrispondenza che associa ad una

²³ Negli spazi vettoriali definiti tramite enuple di numeri, che sono però solo un tipo particolare di spazio vettoriale, e in cui si è data la (5.67) come definizione, le proprietà che stiamo per enunciare non sono assiomi ma teoremi.

coppia ordinata di vettori un numero complesso che gode delle seguenti proprietà:

- a. anti simmetria
 $\langle u | v \rangle = \langle v | u \rangle^*$
 - b. Prodotto scalare di un vettore per sé stesso
 $\langle u | u \rangle \geq 0 \wedge [\langle u | u \rangle = 0 \Leftrightarrow |u\rangle = |0\rangle]$
 - c. Additività
 $\langle u | (|v\rangle + |w\rangle) = \langle u | |v\rangle + \langle u | |w\rangle$
 - d. Omogeneità
 $\langle w | \alpha v \rangle = \alpha \langle w | v \rangle \wedge \langle \alpha w | v \rangle = \alpha^* \langle w | v \rangle$
- 
- 
- (VI.5.72)

5.7.3.9 Conseguenze degli assiomi

Da a) deriva che $\langle u | u \rangle$ è un numero reale e dunque la richiesta b) è ben posta.

Da a), c) e d) derivano due importanti proprietà riguardanti le combinazioni lineari di vettori a destra e a sinistra:



$$\begin{aligned} \langle w | \alpha u + \beta v \rangle &= \alpha \langle w | u \rangle + \beta \langle w | v \rangle \\ \langle \alpha u + \beta v | w \rangle &= \alpha^* \langle u | w \rangle + \beta^* \langle v | w \rangle \end{aligned}$$


(VI.5.73)

5.7.3.10 Norma e ortogonalità

Si chiama **Modulo o norma** di un vettore la radice quadrata del prodotto scalare di un vettore per sé stesso. tramite prodotto scalare (il prodotto scalare definisce la norma al quadrato)

$$\| |u\rangle \| =_{\text{def}} \sqrt{\langle u | u \rangle} \tag{VI.5.74}$$

La norma corrisponde alla generalizzazione del concetto di lunghezza di un vettore e sempre tramite il prodotto scalare viene definita la ortogonalità tra due vettori.

Si dimostra utilizzando le proprietà che $\langle u | 0 \rangle = 0$

5.7.3.11 Le componenti di un vettore rispetto ad una data base

Si chiama **base ortonormale** di uno spazio vettoriale a n dimensioni una ennupla di vettori ortogonali e di norma unitaria.

Dati n vettori linearmente indipendenti che di per sé, già costituiscono una base, esiste una tecnica per costruire, a partire da essi una base ortonormale (lo si vedrà con un esempio).

Osserviamo che il prodotto scalare tra due generici elementi di una base ortonormale

$$\langle e_j | e_i \rangle = \delta_{ji} \tag{VI.5.75}$$

Consideriamo dunque una base ortonormale $\{ |e_i\rangle \}$ e vediamo come sia possibile ottenere, attraverso la base, la rappresentazione di un vettore qualsiasi, ovvero posto:

²⁴ Il simbolo δ_{ji} detto delta di Kronecker vale 1 quando gli indici sono uguali e 0 i quando sono diversi

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^n u_i |e_i\rangle$$

come si possano ottenere le componenti del vettore secondo quella base.

Allo scopo facciamo il prodotto scalare tra un generico elemento della base $|e_j\rangle$ e il vettore $|u\rangle$

$$\langle e_j | u \rangle = \langle e_j | \sum_{i=1}^n u_i | e_i \rangle = \sum_{i=1}^n u_i \langle e_j | e_i \rangle = \sum_{i=1}^n u_i \delta_{ji} = u_j$$

Dunque i coefficienti della rappresentazione di un vettore attraverso una base ortonormale, cioè quelle che chiamiamo le *componenti del vettore*, altro non sono che il prodotto scalare tra il vettore della base e il vettore dato.

$$u_j = \langle e_j | u \rangle \tag{VI.5.76}$$

e dunque un vettore può sempre essere scritto attraverso le sue componenti come:

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^n \langle e_i | u \rangle |e_i\rangle \tag{VI.5.77}$$

5.7.3.12 Espressione del prodotto scalare attraverso le componenti

Il prodotto scalare si esprime in maniera semplice quando sono note le componenti dei due vettori rispetto ad una medesima base ortonormale:

Siano dunque:

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^n u_i |e_i\rangle \quad e \quad |v\rangle = \sum_{i=1}^n v_i |e_i\rangle$$

$$\langle v | u \rangle = \sum_{i=1}^n v_i \langle e_i | \sum_{j=1}^n u_j | e_j \rangle = \sum_{i,j=1}^n v_i^* u_j \langle e_i | e_j \rangle = \sum_{i=1}^n v_i^* u_i$$

$$\langle v | u \rangle = \sum_{i=1}^n v_i^* u_i \tag{VI.5.78}$$



5.7.4 ESERCIZI DI CALCOLO VETTORIALE

5.7.4.1 calcoli nel campo complesso

1. Scrivere in forma goniometrica il numero complesso $z = -2 + 3i$



Un numero complesso $a+ib$ ha sempre una rappresentazione goniometrica (modulo e angolo) e anche una rappresentazione esponenziale tramite la relazione di Eulero

$|z| = \sqrt{4 + 9} = \sqrt{13}$ basta ora mettere in evidenza il modulo e si ha:

$$z = \sqrt{13} (-2/\sqrt{13} + 3/\sqrt{13}i)$$

²⁵ Quella che solitamente è la definizione di prodotto scalare, nella impostazione assiomatica diventa un teorema.

Si osservi che $\theta = \arctan(-3/2) + \pi$ perché siamo nel II quadrante

$$z = \sqrt{13} (\cos\theta + i \sin\theta)$$

In notazione esponenziale $z = \sqrt{13} e^{i\theta}$

☺

2. Scrivere in forma algebrica il numero complesso $z = 3(\cos\theta + i \sin\theta)$ sapendo che θ si trova nel III quadrante e che $\tan\theta = 6/5$

☹

$$\cos\theta = -\frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2\theta}} = -\frac{1}{\sqrt{1 + 36/25}} = -\frac{5}{\sqrt{61}} \text{ mentre}$$

$$\sin\theta = \cos\theta \tan\theta = -\frac{6}{\sqrt{61}}$$

$$\text{pertanto: } z = -\frac{15}{\sqrt{61}} - i \frac{18}{\sqrt{61}}$$

☺

3. Calcolare $\frac{z_1}{z_2}$ essendo $z_1 = 2 - 3i$ e $z_2 = 1 + 2i$

☹²⁶

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{z_1 \overline{z_2}}{|z_2|^2} = \frac{(2 - 3i)(1 - 2i)}{5} = 1/5[(2 - 6) + i(-3 - 4)] = -\frac{4}{5} - i \frac{7}{5}$$

☺

4. Calcolare $\sqrt[3]{2 - 2i}$ scrivendo il risultato in forma goniometrica

☹

Nel campo dei numeri complessi la estrazione di radice è sempre possibile, non è univoca e il numero di radici è pari all'indice della radice.

Usiamo la rappresentazione goniometrica:

$$z = 2 - 2i \text{ sta nel IV quadrante e } \theta = \arctan(-1) = -\pi/4;$$

$$\text{pertanto } z = \sqrt{8} [\cos(-\pi/4) + i \sin(-\pi/4)]$$

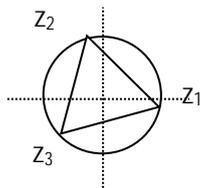
dobbiamo ora scrivere dei numeri complessi che elevati alla terza potenza producano z .

$$\text{Il modulo di tali numeri è } \sqrt[3]{\sqrt{8}} = \sqrt[3]{\sqrt{2^3}} = 2^{3/6} = \sqrt{2}$$

Dobbiamo ora trovare un numero β tale che $\alpha = 3\beta + 2k\pi$ e dunque

$$\beta = \frac{1}{3}\alpha + \frac{2}{3}k\pi$$

Nel nostro caso $\frac{1}{3}\alpha = -\frac{\pi}{12}$ e dunque le radici si troveranno ai vertici di un triangolo equilatero di raggio $\sqrt{2}$ a partire da anomalia $\theta' = -\pi/12$; esse saranno dunque espresse dalla formula:



Le radici cubiche si trovano ai vertici di un triangolo equilatero inscritto in una circonferenza di raggio che dipende dal modulo e opportuna anomalia

²⁶ Il coniugato z^* di un numero complesso z può anche essere indicato con \overline{z}

$$\sqrt[3]{2-2i} = \sqrt{2} [\cos(-\pi/12 + k 2/3 \pi) + i \sin(-\pi/12 + k 2/3 \pi)] \text{ con } k = 0, 1, 2$$



5. Risolvere attraverso un cambio di variabile l'equazione $\left(\frac{1+x}{x}\right)^3 - 1 = 0$.

Il risultato va scritto con x espresso in forma algebrica



Posto $\frac{1+x}{x} = z$ si ha la semplice equazione $z^3 = 1$ che corrisponde a tre numeri complessi di modulo unitario e poste ai vertici di un triangolo equilatero come in figura.

$$\text{Si ha pertanto: } z_1 = 1 \quad z_2 = -1/2 + \frac{\sqrt{3}}{2}i \quad z_3 = -1/2 - \frac{\sqrt{3}}{2}i$$

Dobbiamo ora esprimere il risultato in x e ciò richiede di invertire la sostituzione di variabile:

$$\frac{1+x}{x} = z \Leftrightarrow \frac{1}{x} = z - 1 \Leftrightarrow x = \frac{1}{z-1} \text{ con la condizione } z \neq 1$$

Pertanto la prima soluzione $z_1 = 1$ non è accettabile mentre si ha per le altre:

$$x_2 = \frac{1}{-1/2 + i\sqrt{3}/2 - 1} = \frac{2}{-3 + i\sqrt{3}} = \frac{1}{6}(-3 - i\sqrt{3})$$

e analogamente (non occorre rifare i conti)

$$x_3 = \frac{1}{-1/2 - i\sqrt{3}/2 - 1} = \frac{1}{6}(-3 + i\sqrt{3})$$



6. Se $|z| = 1$. Calcolare $1/z$ ed utilizzare il tutto per calcolare (con la formula di De Moivre) la seguente espressione: $z^m + 1/z^m$



Se il modulo è unitario si ha $z = \cos \alpha + i \sin \alpha$ e pertanto $1/z = \frac{\overline{z}}{|z|^2}$

$$= \cos \alpha - i \sin \alpha$$

$$z^m + 1/z^m = \cos m\alpha + i \sin m\alpha + \cos m\alpha - i \sin m\alpha = 2 \cos m\alpha$$



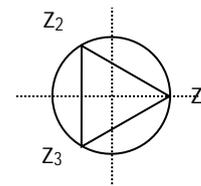
7. Sia $z = \frac{1+ki}{1-ki}$ con $k \in \mathbb{R}$. Semplificare la espressione e, tenendo presenti delle note identità goniometriche, spiegare perché $|z| = 1$ e quale sia il significato di k.



Se si calcola il rapporto attraverso la moltiplicazione per l'inverso si ha:

$$z = (1 + ki) \frac{1 - ki}{1 + k^2} = \frac{1 - k^2 + 2ki}{1 + k^2} = \cos t + i \sin t \text{ in base alle formule parametriche.}$$

Dunque il modulo vale 1 e $t = \tan^{-1}(k)$



8. Risolvere l'equazione di II grado a coefficienti complessi

$$z^2 + (i + 1)z - 10 + 11i = 0.$$

Per evitare calcoli onerosi sui radicali si consiglia di calcolare $\sqrt{\Delta}$ in forma algebrica e cioè imponendo che il suo quadrato faccia Δ



$$\Delta = (i + 1)^2 - 4(11i - 10) = 2i + 40 - 44i = 40 - 42i$$

Posto $\sqrt{\Delta} = a + ib$ dovrà essere $(a + ib)^2 = 40 - 42i$ e svolgendo i calcoli si ottiene: $\begin{cases} a^2 - b^2 = 40 \\ 2ab = -42 \end{cases}$

Si tratta di un sistema di 4° grado da risolvere per sostituzione e che porta ad una equazione biquadratica:

$$\begin{cases} a = -\frac{21}{b} \\ b^4 + 40b^2 - 21 = 0 \end{cases} \quad \text{e cioè } b = \pm 3 \text{ e } a = -(\pm 7)$$

Le due radici di Δ sono pertanto: $-7 + 3i$ e $+7 - 3i$

Le soluzioni della equazione risultano dunque:

$$z_1 = \frac{-(i+1) + (-7+3i)}{2} = -4 + i \qquad z_2 = \frac{-(i+1) + (7-3i)}{2} = 3 - 2i$$



5.7.4.2 Dipendenza e indipendenza lineare

1. Si considerino in \mathfrak{R}^3 i tre vettori $\vec{e}_1 \equiv (1,1,1)$, $\vec{e}_2 \equiv (1,1,-1)$, $\vec{e}_3 \equiv (1,-1,1)$. Dimostrare che i 3 vettori sono linearmente indipendenti e pertanto possono essere usati come base facendo vedere che la equazione vettoriale $\alpha \vec{e}_1 + \beta \vec{e}_2 + \gamma \vec{e}_3 = \vec{0}$ è verificata solo per la soluzione banale $\alpha = 0$, $\beta = 0$, $\gamma = 0$

Quindi determinare le coordinate u_1, u_2, u_3 del vettore $\vec{u} \equiv (2,3,-1)$ nella nuova base $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$



La equazione $\alpha \vec{e}_1 + \beta \vec{e}_2 + \gamma \vec{e}_3 = \vec{0}$

corrisponde al sistema omogeneo $\begin{cases} \alpha + \beta + \gamma = 0 \\ \alpha + \beta - \gamma = 0 \\ \alpha - \beta + \gamma = 0 \end{cases}$

e tale sistema sarà determinato (soluzione banale 0,0,0) se e solo il determinante della matrice dei coefficienti non si annulla.

$$|\Lambda| = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & -1 \\ 2 & -2 & 1 \end{vmatrix} = -4$$

Dunque il sistema possiede solo la soluzione banale e (in base alla definizione) i vettori sono linearmente indipendenti.

Per trovare le componenti di $\vec{u} \equiv (2,3,-1)$ basta scrivere il vettore nelle due basi e poi utilizzare il prodotto scalare con i tre versori $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$

$$u_1 \vec{e}_1 + u_2 \vec{e}_2 + u_3 \vec{e}_3 = 2 \vec{i} + 3 \vec{j} - 1 \vec{k}$$

Moltiplicando per \vec{i} si ha:

$$u_1 \vec{e}_1 \cdot \vec{i} + u_2 \vec{e}_2 \cdot \vec{i} + u_3 \vec{e}_3 \cdot \vec{i} = 2 \text{ e così via per } \vec{j}, \vec{k}$$

Così si arriva al sistema:
$$\begin{cases} u_1 + u_2 + u_3 = 2 \\ u_1 + u_2 - u_3 = 3 \\ u_1 - u_2 + u_3 = -1 \end{cases}$$

Il determinante della matrice dei coefficienti è già stato determinato.

Poiché il sistema viene risolto con il metodo di Cramer occorre procedere al calcolo dei tre determinanti delle matrici ottenute sostituendo la colonna con quella dei termini noti:

$$|A_1| = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 3 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \end{vmatrix} = 2(-3 + 1) = -4$$

$$|A_2| = \begin{vmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{vmatrix} = -2(2 + 1) = -6$$

$$|A_3| = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 3 \\ 1 & -1 & -1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 3 \\ 2 & -1 & -1 \end{vmatrix} = 2(3 - 2) = 2$$

applicando il teorema di Cramer avremo allora:

$$u_1 = \frac{|A_1|}{|A|} = 1 \quad u_2 = \frac{|A_2|}{|A|} = 3/2 \quad u_3 = \frac{|A_3|}{|A|} = -1/2$$



2. Si considerino in \mathfrak{R}^3 i tre vettori $\vec{e}_1 \equiv (1, 2, -1)$, $\vec{e}_2 \equiv (3, 6, -3)$, $\vec{e}_3 \equiv (4, 8, -4)$. Stabilire se sono o meno linearmente dipendenti.



I tre vettori non sono indipendenti perché vale la relazione:

$$\vec{e}_2 = 3 \vec{e}_1 \text{ e } \vec{e}_1 + \vec{e}_2 = \vec{e}_3$$

In effetti se si calcola il determinante della matrice dei coefficienti

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 3 & 6 & -3 \\ 4 & 8 & -4 \end{vmatrix} = 1(-24+24) - 2(-12+12) - 1(24-24) = 0 \text{ segno che la combi-}$$

nazione lineare dei tre vettori ammette soluzioni non identicamente nulle e dunque esistono relazioni tra loro. In questo caso le relazioni erano assolutamente evidenti e le abbiamo citate in premessa.



3. Siano dati i vettori ket $|u\rangle = \{2i-3, i+1.6\}$ e $|v\rangle = \{3i-1, i-1, 1\}$ calcolare il prodotto scalare: $\langle v|u\rangle$



Ricordarsi della (VI.5.74)

$$\langle v|u\rangle = (-3i-1)(2i-3) + (-i-1)(i+1.6) = 6 + 9i - 2i + 3 + 1 - 1.6i - i - 1.6 = 8.4 - 4.4i$$



5.7.5 VETTORI, MATRICI ED OPERATORI

Consideriamo uno spazio vettoriale a n dimensioni e una sua base costituita da vettori ortonormali $\vec{i}_1, \vec{i}_2, \dots, \vec{i}_n$.

Un generico vettore \vec{v} avrà componenti v_1, v_2, \dots, v_n che si ottengono attraverso la proiezione di \vec{v} sui versori eseguita attraverso il prodotto scalare. In base alle relazioni 5.76-77-78 si ha:

$$v_i = (\vec{i}_i, \vec{v}) \quad \vec{v} = \sum_{i=1}^n v_i \vec{i}_i \quad (\vec{u}, \vec{v}) = \sum_{i=1}^n u_i^* v_i$$

5.7.5.1 L'operatore lineare nel calcolo matriciale

Un operatore lineare è una matrice in grado di trasformare un vettore in un altro attraverso il classico prodotto righe per colonne. Indicheremo gli operatori con l'accento circonflesso sopra una lettera maiuscola:

$$\vec{u} = \hat{A} \vec{v} \tag{VI.5.79}$$



$$\hat{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \quad \vec{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_n \end{bmatrix}$$

$$\vec{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \dots \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_n \end{bmatrix}$$

$$\text{con } u_r = \sum_{i=1}^n A_{ri} v_i$$

5.7.5.2 Il prodotto tra operatori

Il prodotto tra operatori è inteso come applicazione successiva di due operatori l'uno dopo l'altro e, per convenzione di scrittura quello che viene eseguito per primo è quello più interno. In simboli:

$$\vec{u} = \hat{A} \vec{v} \wedge \vec{w} = \hat{B} \vec{u} \text{ si scrive } \vec{w} = \hat{B} \hat{A} \vec{v} = \hat{C} \vec{v} \tag{V.5.80}$$

Si dimostra attraverso le proprietà delle sommatorie che il prodotto tra operatori viene a corrispondere al prodotto matriciale e cioè se:



$$\hat{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \text{ e } \hat{B} = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{n1} & B_{n2} & \dots & B_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\hat{B} \hat{A} = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{n1} & B_{n2} & \dots & B_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{n1} & C_{n2} & \dots & C_{nn} \end{bmatrix}$$

Allora:

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} B_{kj} \quad (VI.5.81)$$

Il prodotto matriciale si può svolgere non solo su matrici quadrate ma anche su matrici rettangolari a condizione che il numero di colonne della I sia pari al numero di righe della seconda $A_{(m,n)} \cdot B_{(n,p)} = C_{(m,p)}$. In quel caso le matrici si dicono *conformabili*.²⁷

Ricordiamo che il calcolo matriciale è fortemente connesso al calcolo dei determinanti e questo a sua volta lo è con la risoluzione dei sistemi lineari di equazioni.

Così come in un sistema lineare una equazione può essere sostituita da una combinazione lineare tra essa e le altre, con riferimento al calcolo dei determinanti, una matrice può sempre essere sostituita da una equivalente che ne semplifichi il calcolo.

5.7.5.3 Gli elementi neutri rispetto alla somma e al prodotto – la matrice inversa

Nel calcolo matriciale giocano un ruolo importante i due elementi neutri rispetto alla somma e rispetto al prodotto.

Si tratta nel primo caso della matrice nulla, che indicheremo con $\hat{0}$, i cui elementi sono tutti 0.

Nel secondo caso la matrice $\hat{1}$ è quella per la quale:

$$\hat{A}\hat{1} = \hat{1}\hat{A} = \hat{A} \quad (VI.5.82)$$

Si vede immediatamente, in base alla definizione di prodotto tra matrici, che:

$$\hat{1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (VI.5.83)$$

Il generico elemento della matrice identità²⁸ è il delta di Kronecker δ_{ij} .

Una matrice che sulla diagonali principale presenta elementi tutti uguali è detta *matrice diagonale*.

Nella risoluzione dei sistemi e nella teoria degli operatori gioca un ruolo importante la *matrice inversa*.

La matrice inversa A^{-1} è quella matrice per la quale vale:

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{1} \quad (VI.5.84)$$

La matrice inversa è importante perché consente di invertire le equazioni matriciali. Infatti se:

$$\vec{u} = \hat{A}\vec{v} \Leftrightarrow \hat{A}^{-1}\vec{u} = \hat{A}^{-1}\hat{A}\vec{v} = \hat{1}\vec{v} = \vec{v} \text{ e dunque:}$$

²⁷ Non essendo questo un corso di algebra lineare, molto risultati vengono richiamati senza dover dimostrare ogni affermazione

²⁸ Nella teoria generale degli operatori è detto operatore unità da non confondere con gli operatori unitari di cui si dirà nel seguito.

$$\vec{v} = \hat{A}^{-1}\vec{u}$$

Un sistema lineare di n equazioni in n incognite può essere rappresentato in forma matriciale come

$$\hat{A}\vec{x} = \vec{b} \tag{VI.5.85}$$

Dove il vettore \vec{b} è il vettore i cui elementi sono i termini noti delle n equazioni. Nota la matrice inversa il sistema risulta risolto:

$$\vec{x} = \hat{A}^{-1}\vec{b} \tag{VI.5.86}$$

5.7.5.4 Determinazione della matrice inversa

Un teorema di algebra lineare (di cui non diamo la dimostrazione) afferma che la matrice inversa si trova attraverso i seguenti passi:



- Si calcola il determinante di \hat{A} indicato solitamente come $|\hat{A}|$ e, se esso è diverso da zero, il sistema è univocamente determinato (in caso contrario le n equazioni non sono indipendenti e si hanno ∞ soluzioni);
- Si calcola la matrice \hat{C} i cui elementi sono i minori complementari di ogni elemento della matrice originaria;²⁹
- Si costruisce \hat{C}^T la matrice trasposta di \hat{C} i cui elementi si ottengono dalla relazione $C_{ij}^T = C_{ji}$ cioè invertendo le righe e le colonne (gli elementi si scambiano in una simmetria rispetto alla diagonale principale)
- $\hat{A}^{-1} = \frac{\hat{C}^T}{|\hat{A}|}$

5.7.5.5 Esempi di calcolo matriciale

1. Sia $\hat{A} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ -3 & 1 \end{bmatrix}$ e $\hat{B} = \begin{bmatrix} 1 & 5 & 3 \\ 2 & 7 & -4 \end{bmatrix}$ calcolare $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ e $\hat{D} = \hat{B}\hat{A}$



Si esegue il calcolo righe per colonne

$$\hat{C} = \begin{bmatrix} 4 \cdot 1 + 2 \cdot 2 & 4 \cdot 5 + 2 \cdot 7 & 4 \cdot 3 + 2 \cdot (-4) \\ (-3) \cdot 1 + 1 \cdot 2 & -3 \cdot 5 + 1 \cdot 7 & -3 \cdot 3 + 1 \cdot (-4) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 & 34 & 4 \\ -1 & -8 & -13 \end{bmatrix}$$

\hat{D} non è calcolabile perché le matrici $B(2,3)$ e $A(2,2)$ non sono conformabili.



2. Sia $\hat{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 3 & -1 & 0 \\ 0 & 5 & 1 \end{bmatrix}$ e $\hat{B} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 3 & -1 & 0 \end{bmatrix}$ calcolare $\hat{A}\hat{B}$, $\hat{B}\hat{A}$, $\hat{A} + \hat{B}$, \hat{A}^2



Da svolgere come esercizio

3. Le matrici con cui Wolfgang Pauli ha introdotto lo spin sono:

²⁹ Il minore complementare del generico elemento a_{ij} è il determinante della matrice che si ottiene eliminando la i-esima riga e la j-esima colonna e antepoendo il segno meno quando l'elemento a_{ij} è di posto dispari cioè $i+j$ è un numero dispari

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{B} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{C} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{dimostrare che } \hat{A}^2 = \hat{B}^2 = \hat{C}^2 = \hat{1},$$

Dimostrare inoltre che il commutatore $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 2i\hat{C}$

☹

$$\hat{A}^2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \cdot 0 + 1 \cdot 1 & 0 \cdot 1 + 1 \cdot 0 \\ 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 & 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{B}^2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \cdot 0 - i \cdot i & 0 \cdot (-i) + (-i) \cdot 0 \\ i \cdot 0 + 0 \cdot i & i \cdot (-i) + 0 \cdot 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i^2 & 0 \\ 0 & -i^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Eccetera

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} &= \begin{bmatrix} 0 \cdot 0 + 1 \cdot i & 0 \cdot (-i) + 1 \cdot 0 \\ 1 \cdot 0 + 0 \cdot (i) & 1 \cdot (-i) + 0 \cdot 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \cdot 0 - i \cdot 1 & 0 \cdot 1 - i \cdot 0 \\ i \cdot 0 + 0 \cdot 1 & i \cdot 1 + 0 \cdot 0 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{bmatrix} = 2i \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = 2i\hat{C} \end{aligned}$$

☺

4. Stranezze del calcolo matriciale:

$$\text{siano } \hat{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{bmatrix} \quad \hat{B} = \begin{bmatrix} 10 & 4 \\ -5 & -2 \end{bmatrix} \quad \hat{C} = \begin{bmatrix} 7 & 6 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \quad \hat{D} = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ 7 & 5 \end{bmatrix}$$

osservare che: a) $\hat{A}\hat{B}$ è la matrice nulla ma non lo sono né \hat{A} né \hat{B} (non vale il teorema di annullamento del prodotto) b) $\hat{A}\hat{C} = \hat{A}\hat{D}$ ma $\hat{C} \neq \hat{D}$ e $\hat{A} \neq \hat{0}$

☹

$$\hat{A}\hat{B} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 10 & 4 \\ -5 & -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \cdot 10 + 2 \cdot (-5) & 1 \cdot 4 + 2 \cdot (-2) \\ 3 \cdot 10 + 6 \cdot (-5) & 3 \cdot 4 + 6 \cdot (-2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{A}\hat{C} = \begin{bmatrix} 1 \cdot 7 + 2 \cdot 2 & 1 \cdot 6 + 2 \cdot 3 \\ 3 \cdot 7 + 6 \cdot 2 & 3 \cdot 6 + 6 \cdot 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 & 12 \\ 33 & 36 \end{bmatrix}$$

$$\hat{A}\hat{D} = \begin{bmatrix} 1 \cdot (-3) + 2 \cdot 7 & 1 \cdot 2 + 2 \cdot 5 \\ 3 \cdot (-3) + 6 \cdot 7 & 3 \cdot 2 + 6 \cdot 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 & 12 \\ 33 & 36 \end{bmatrix}$$

D'altra parte se $\hat{A}\hat{C} = \hat{A}\hat{D} \Rightarrow \hat{A}\hat{C} - \hat{A}\hat{D} = \hat{0} \Rightarrow \hat{A}(\hat{C} - \hat{D}) = \hat{0}$ ma per il punto precedente non segue che $\hat{C} - \hat{D} = \hat{0}$

☺

$$5. \quad \text{Data la matrice } \hat{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 4 & 0 & -1 \\ 4 & -2 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{determinare la matrice inversa}$$

☹

Calcoliamo $|\hat{A}|$ utilizzando l'ultima riga che ha un elemento pari a 0

$$|\hat{A}| = 4 \begin{vmatrix} -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} - (-2) \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 4 & -1 \end{vmatrix} = 4 + 10 = 14 \neq 0 \quad \text{dunque la matrice è invertibile}$$

Calcoliamo ora riga per riga i 9 cofattori

$$\begin{aligned}
 \text{I riga} &+ \begin{vmatrix} 0 & -1 \\ -2 & 0 \end{vmatrix} = -2 & - \begin{vmatrix} 4 & -1 \\ 4 & 0 \end{vmatrix} = -4 & + \begin{vmatrix} 4 & 0 \\ 4 & -2 \end{vmatrix} = -8 \\
 \text{II riga} &- \begin{vmatrix} -1 & 1 \\ -2 & 0 \end{vmatrix} = -2 & + \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 0 \end{vmatrix} = -4 & - \begin{vmatrix} 0 & -4 \\ -2 & 0 \end{vmatrix} = 8 \\
 \text{III riga} &+ \begin{vmatrix} -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} = 1 & - \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 4 & -1 \end{vmatrix} = 5 & + \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 4 & 0 \end{vmatrix} = 4
 \end{aligned}$$

La matrice dei minori complementari è: $\hat{C} = \begin{bmatrix} -2 & -4 & -8 \\ -2 & -4 & -8 \\ 1 & 5 & 4 \end{bmatrix}$ e la sua trasposta è:

$$\hat{C}^T = \begin{bmatrix} -2 & -2 & 1 \\ -4 & -4 & 5 \\ -8 & -8 & 4 \end{bmatrix}$$

pertanto $\hat{A}^{-1} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} -2 & -2 & 1 \\ -4 & -4 & 5 \\ -8 & -8 & 4 \end{bmatrix}$

verificare come esercizio di controllo che $\hat{A} \hat{A}^{-1} = \hat{I}$



5.7.6 CALCOLO MATRICIALE ED EQUAZIONI AGLI AUTOVALORI

In M.Q, una delle richieste della teoria assiomatica, che vedremo più oltre, è che l'operatore considerato sia *hermitiano* o *auto aggiunto* e tutto ciò nel caso di operatori realizzati attraverso le matrici equivale a chiedere che la matrice sia simmetrica nello scambio righe colonne, cioè che sia:

$$A_{rs} = A_{sr} \tag{VI.5.87}$$

La ragione della richiesta sta in un importante teorema che afferma quanto segue:



in uno spazio a n dimensioni se un operatore è *hermitiano* presenta n autovalori reali a ciascuno dei quali corrisponde un solo autovettore. Gli n autovettori sono tra loro ortogonali e dunque possono essere usati per costruire una base ortonormale per lo spazio vettoriale generato da quell'operatore.³⁰

In generale applicando la trasformazione definita dalla matrice, un vettore si trasforma in un altro generico ma per alcuni vettori può accadere che il vettore figlio sia parallelo al vettore padre cioè che sia:

$$\vec{u} = \hat{A} \vec{v} = a \vec{v} \text{ con } a \text{ reale} \tag{VI.5.88}$$

³⁰ Le proprietà generali degli operatori hermitiani saranno analizzate più oltre perché non riguardano solo la rappresentazione matriciale degli operatori per ora basti dire che nella rappresentazione matriciale in \mathcal{R}^n viene richiesto che la matrice sia simmetrica

In tal caso, come abbiamo già detto, si dice che \vec{v} è un *autovettore* di \hat{A} e il corrispondente a viene detto *autovalore*.

Poiché se \vec{v} è un autovettore lo è pure qualsiasi vettore proporzionale ad esso si sceglie come autovettore rappresentativo quello di norma unitaria, cioè quello per il quale: $\vec{v} \cdot \vec{v} = 1$.

Poiché la ricerca degli autovalori gioca un ruolo importante nella MQ, esemplifichiamo in un caso a tre dimensioni.

5.7.6.1 Calcolo di autovalori e autovettori di una matrice simmetrica

1. Data la matrice simmetrica $\hat{A} = \begin{bmatrix} 1 & -4 & 2 \\ -4 & 1 & -2 \\ 2 & -2 & -2 \end{bmatrix}$ determinare in \mathcal{R}^3 gli au-

tovalori e i corrispondenti autovettori; quindi esaminarne le caratteristiche



La equazione agli autovalori viene scritta:

$$\hat{A}\vec{x} = \lambda\vec{x} \Leftrightarrow \hat{A}\vec{x} - \lambda\vec{x} = \hat{0} \Leftrightarrow \hat{A}\vec{x} - \lambda\hat{1}\vec{x} = \hat{0} \Leftrightarrow (\hat{A} - \lambda\hat{1})\vec{x} = \hat{0}$$

Dunque il problema si riduce a determinare le soluzioni, non identicamente nulle, di un sistema lineare omogeneo di matrice:

$$\hat{A} - \lambda\hat{1}$$

$$\hat{S} = \hat{A} - \lambda\hat{1} = \begin{bmatrix} 1-\lambda & -4 & 2 \\ -4 & 1-\lambda & -2 \\ 2 & -2 & -2-\lambda \end{bmatrix}$$

e ciò richiede che il determinante della matrice sia nullo

$$|\hat{S}| = \begin{vmatrix} 1-\lambda & -4 & 2 \\ -4 & 1-\lambda & -2 \\ 2 & -2 & -2-\lambda \end{vmatrix} =$$

$$\begin{aligned} &= (1 - \lambda)(1 - \lambda)(-2 - \lambda) - 4[-4(2+\lambda)+4] + 2[8 - 2(1-\lambda)] = \\ &= (1 - \lambda)(-2-\lambda+2\lambda+\lambda^2 - 4) + 4(4\lambda+12)+2(6+2\lambda) = \\ &= (1 - \lambda)(\lambda+\lambda^2 - 6) + 20(\lambda+3) = (1 - \lambda)(\lambda+3)(\lambda-2)) + 20(\lambda+3) = \\ &= (\lambda+3)(\lambda-2 - \lambda^2+2\lambda+20) = (\lambda+3)(-\lambda^2+3\lambda+18) = -(\lambda+3)(\lambda^2-3\lambda-18) = \\ &= -(\lambda+3)(\lambda+3)(\lambda-6) \end{aligned}$$

$$|\hat{S}| = 0 \Leftrightarrow \lambda = -3 \vee \lambda = 6$$

inoltre l'autovalore -3 corrisponde ad una radice doppia del *polinomio caratteristico*. Ne vedremo il significato quando cercheremo gli autovettori.

Per procedere alla loro ricerca basta sostituire il valore di λ nel sistema lineare omogeneo $(\hat{A} - \lambda\hat{1})\vec{x} = \hat{0}$ e si ottiene:

caso $\lambda = 6$

$$\begin{bmatrix} -5 & -4 & 2 \\ -4 & -5 & -2 \\ 2 & -2 & -8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} -5x_1 - 4x_2 + 2x_3 = 0 \\ -4x_1 - 5x_2 - 2x_3 = 0 \\ 2x_1 - 2x_2 - 8x_3 = 0 \end{cases}$$

Poiché il determinante è zero sappiamo già che le 3 equazioni non sono indipendenti e dunque che c'è una variabile libera.

Se sommiamo le prime due si ottiene $x_1 = -x_2$ e poi dalla prima $x_3 = \frac{1}{2} x_1$

Pertanto l'autovettore \vec{x}_6 ha espressione $\begin{bmatrix} s \\ -s \\ \frac{1}{2}s \end{bmatrix}$

La norma al quadrato $\|\vec{x}_6\|^2 = s^2 + s^2 + \frac{1}{4} s^2 = \frac{9}{4} s^2$. Basta dividere per la norma $\frac{3}{2} s$ e si ottiene l'autovettore normalizzato:

$$\vec{x}_6 = \begin{bmatrix} 2/3 \\ -2/3 \\ 1/3 \end{bmatrix}$$

caso $\lambda = -3$

Poiché -3 corrisponde ad una radice doppia del polinomio aspettiamoci qualche particolarità: in effetti vedremo che in questo caso gli autovettori appartengono ad un intero piano ortogonale al vettore \vec{x}_6 e dunque sarà nostra cura sceglierne all'interno una coppia ortogonale tra loro in modo di costituire una base per l'operatore \hat{S}

$$\begin{bmatrix} 4 & -4 & 2 \\ -4 & 4 & -2 \\ 2 & -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} 4x_1 - 4x_2 + 2x_3 = 0 \\ -4x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 0 \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 0 \end{cases}$$

Si vede subito che le tre equazioni sono l'una multipla dell'altra e dunque le soluzioni sono quelle della equazione:

$2x_1 - 2x_2 + x_3 = 0$; si tratta della equazione di un piano con $x_3 = 2x_2 - 2x_1$, prendiamo un primo vettore

$$\vec{x}_{-3} = \begin{bmatrix} s \\ -s \\ -4s \end{bmatrix} \text{ La norma al quadrato } \|\vec{x}_{-3}\|^2 = s^2 + s^2 + 16s^2 = 18s^2.$$

Basta dividere per la norma $3\sqrt{2} s$ e si ottiene l'autovettore normalizzato:

$$\vec{x}_{-3} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{6} \\ -\frac{\sqrt{2}}{6} \\ -2\frac{\sqrt{2}}{3} \end{bmatrix} \text{ prendiamo ora un secondo vettore del piano, per}$$

esempio

$$\vec{x}'_{-3} = \begin{bmatrix} s \\ s \\ 0 \end{bmatrix}$$

La norma al quadrato $\|\vec{x}'_{-3}\|^2 = s^2 + s^2 = 2s^2$. Basta dividere per la norma $\sqrt{2}s$ e si ottiene l'autovettore normalizzato:

$$\vec{x}'_{-3} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{bmatrix}$$

☺

5.7.7 GLI OPERATORI NEGLI SPAZI VETTORIALI LINEARI

5.7.7.1 una precisazione riguardante il prodotto scalare e gli operatori

Sino ad ora abbiamo considerato una categoria particolare di operatori, quelli che si originano dall'uso delle matrici; facciamo ora un ulteriore passo in avanti considerando uno spazio vettoriale i cui protagonisti siano delle entità astratte (che saranno particolarizzate di volta in volta) e a cui chiediamo solamente che per esse siano state assegnate le operazioni di addizione, di moltiplicazione per uno scalare (in generale appartenente al campo complesso) e un prodotto interno; chiediamo inoltre che tali operazioni godano delle proprietà che abbiamo via via individuato.

Indicheremo i vettori con la notazione ket $|u\rangle$, il prodotto scalare come accostamento di un bra e di un ket $\langle v|u\rangle$ e gli operatori con una lettera maiuscola con accento circonflesso \hat{A} .

Gli operatori possono agire sia su un bra, sia su un ket ma nel primo caso il simbolo andrà scritto a destra e nel secondo caso a sinistra come segue:

- $\langle v|\hat{A}$ produce univocamente un bra
- $\hat{A}|v\rangle$ produce univocamente un ket
- $\langle v|\hat{A}|u\rangle$ rappresenta un prodotto scalare tra il trasformato di $|u\rangle$ e $\langle v|$
- $\langle v|\hat{A}|u\rangle$ rappresenta un prodotto scalare tra il trasformato di $\langle v|$ e $|u\rangle$

A proposito dei bra e dei ket giova fare una precisazione: si tratta di due spazi distinti che sono posti in corrispondenza per dare un senso al prodotto scalare e alle sue proprietà, infatti come abbiamo già visto (VI.5.73) il prodotto scalare è lineare a destra e antilineare a sinistra:

$$\langle v|\alpha w + \beta z\rangle = \alpha \langle v|w\rangle + \beta \langle v|z\rangle \text{ lineare}$$

$$\langle \alpha w + \beta z|v\rangle = \alpha^* \langle w|v\rangle + \beta^* \langle z|v\rangle \text{ antilineare}$$

e dunque la corrispondenza tra i bra e i ket è la seguente:

$$|u\rangle = \alpha |w\rangle + \beta |z\rangle \Leftrightarrow \langle u| = \alpha^* \langle w| + \beta^* \langle z| \quad (\text{VI.5.89})$$

Supponiamo ora che il nostro spazio sia caratterizzato da una base $|i\rangle$ non necessariamente ortonormale e consideriamo due generici vettori $|u\rangle$ e $|v\rangle$ sarà allora:

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^n u_i |i\rangle \quad |v\rangle = \sum_{i=1}^n v_i |i\rangle$$

$$\langle u | v \rangle = \sum_{i=1}^n \left[\sum_{j=1}^n u_i^* v_j \langle i | j \rangle \right] \tag{VI.5.90}$$

e naturalmente se la base è ortonormale la relazione si semplifica nella relazione ben nota:

$$\langle u | v \rangle = \sum_{i=1}^n u_i^* v_i$$

5.7.7.2 La disuguaglianza di Schwartz

Negli spazi lineari normati vale una importante disuguaglianza che corrisponde alla generalizzazione di quanto era già noto per i vettori degli spazi euclidei (il prodotto scalare è più corto del prodotto delle lunghezze dei vettori che lo generano).



Si tratta della **disuguaglianza di Schwartz** ³¹secondo cui:

teorema

$$0 \leq |\langle u | v \rangle|^2 \leq \langle u | u \rangle \langle v | v \rangle \tag{VI.5.91}$$

O utilizzando il simbolo di norma

$$|\langle u | v \rangle| \leq \|u\| \|v\| \tag{VI.5.91 bis}$$

dimostrazione

Consideriamo la espressione ausiliaria $|u-\alpha v\rangle$ dove α è un numero complesso qualsiasi e facciamo il prodotto scalare di $|u-\alpha v\rangle$ con se stessa, tale prodotto è sicuramente positivo o nullo per una proprietà del prodotto scalare:

$$\begin{aligned} 0 \leq \langle u-\alpha v | u-\alpha v \rangle &= \langle u-\alpha v | u \rangle - \langle u-\alpha v | \alpha v \rangle = \\ &= \langle u | u \rangle - \alpha^* \langle v | u \rangle - \langle u | \alpha v \rangle + |\alpha|^2 \langle v | v \rangle = \\ &= \langle u | u \rangle - \alpha^* \langle u | v \rangle - \alpha \langle u | v \rangle + |\alpha|^2 \langle v | v \rangle \end{aligned} \tag{1}$$

Sia ora $\alpha = \langle v | u \rangle / \langle v | v \rangle$ e sostituiamo nella (1)

$$0 \leq \langle u | u \rangle - \langle v | u \rangle \langle v | u \rangle^* / \langle v | v \rangle - \langle u | v \rangle \langle v | u \rangle / \langle v | v \rangle + \langle v | v \rangle |\langle v | u \rangle|^2 / \langle v | v \rangle^2 \Leftrightarrow$$

$$0 \leq \|u\|^2 - |\langle v | u \rangle|^2 / \|v\|^2 - |\langle v | u \rangle|^2 / \|v\|^2 + |\langle v | u \rangle|^2 / \|v\|^2 \Leftrightarrow$$

$$0 \leq \|u\|^2 - |\langle v | u \rangle|^2 / \|v\|^2 \Leftrightarrow$$

$$0 \leq \|u\|^2 \|v\|^2 - |\langle v | u \rangle|^2$$

Abbiamo ottenuto quanto richiesto

³¹ Nello spazio di Hilbert la disuguaglianza di Schwartz serve a garantire che se i vettori dello spazio sono dotati di norma allora si può definire correttamente il prodotto scalare.

5.7.7.3 Gli operatori - definizioni

Dato uno spazio vettoriale lineare un operatore lineare è semplicemente una legge di qualsiasi tipo che applicata ad un vettore dello spazio ne fa corrispondere un altro rispettando i principi di linearità (il trasformato di una combinazione lineare è la combinazione lineare dei trasformati).

Come abbiamo già fatto con le matrici indicheremo gli operatori tramite un accento circonflesso che sovrasta il simbolo e scriveremo (per la linearità):

$$\hat{A} | \alpha u + \beta v \rangle := \alpha \hat{A} | u \rangle + \beta \hat{A} | v \rangle \quad (\text{VI.5.92})$$

La addizione e il prodotto tra operatori sono definiti tramite la somma dei vettori e tramite la applicazione successiva (agisce per primo quello più interno).

$$\hat{C} | \rangle = (\hat{A} + \hat{B}) | \rangle := \hat{A} | \rangle + \hat{B} | \rangle \quad (\text{VI.5.93})$$

$$(\hat{A}\hat{B}) | \rangle := \hat{A}(\hat{B} | \rangle) \quad (\text{VI.5.93 bis})$$

Per alcuni operatori (hermitiani), per i quali nel prodotto scalare è indifferente il fatto che l'operatore agisca sul bra o sul ket, è ammessa la seguente notazione di scrittura:

$$\{ \langle u | \hat{A} \rangle | v \rangle = \langle u | \{ \hat{A} | v \rangle \} = \langle u | \hat{A} | v \rangle \quad (\text{VI.5.94})$$

Ricordiamo, come già visto per le matrici che in genere gli operatori non commutano come vediamo nell'esempio che segue.

5.7.8 ALCUNI OPERATORI PARTICOLARI E LE LORO PROPRIETÀ

Una caratteristica importante che riguarda gli operatori in generale e che abbiamo già visto all'opera nelle matrici è la *non commutatività del prodotto*. Si tratta di una questione molto importante perché, come vedremo nel prossimo capitolo, il principio di indeterminazione deriva proprio dalla non commutatività di taluni operatori.

5.7.8.1 Esempio di non commutatività tra operatori

Consideriamo nell'insieme delle funzioni derivabili di variabile reale i due operatori \hat{X} (moltiplicazione per x) e \hat{D} (derivata prima rispetto a x).

$$\hat{X} \hat{D} f(x) = x \frac{df(x)}{dx}$$

$$\hat{D} \hat{X} f(x) = \frac{d}{dx} (x f(x)) = f(x) + x \frac{df(x)}{dx} = \hat{1} f(x) + x \frac{df(x)}{dx} =$$

$$= \hat{1} f(x) + \hat{X} \hat{D} f(x) = (\hat{1} + \hat{X} \hat{D}) f(x)$$

Dunque i due operatori non commutano e il loro commutatore vale:

$$[\hat{X}, \hat{D}] = \hat{X} \hat{D} - \hat{D} \hat{X} = -\hat{1}$$

5.7.8.2 L'operatore inverso

E' quello che ripristina lo stato di partenza e ovviamente, visto che in generale non c'è commutatività, definiremo sia un inverso destro sia un inverso sinistro.

Si dimostra che, quando esistono entrambi gli inversi, essi sono uguali e allora si parla genericamente di inverso e si scrive

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{1} \tag{VI.5.95}$$

Si dimostra direttamente (ci provi il lettore) che l'inverso di un prodotto è pari al prodotto commutato degli inversi e cioè:

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1} \tag{VI.5.96}$$

5.7.8.3 L'operatore aggiunto ³²

L'operatore aggiunto, indicato da una † posta come apice, è quell'operatore che nel prodotto scalare scambia il vettore su cui si opera.



$$(\vec{u}, \hat{A}^\dagger \vec{v}) := (\hat{A} \vec{u}, \vec{v}) \tag{VI.5.97}$$

Ricordando che il prodotto scalare è anti commutativo avremo che:

$$(\vec{u}, \hat{A}^\dagger \vec{v}) = (\vec{v}, \hat{A} \vec{u})^*$$

È immediato verificare che :

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \tag{VI.5.98}$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \tag{VI.5.99}$$

L'operatore aggiunto è molto importante in MQ e per questa ragione si riassume come operare con esso.

Quando si ha una espressione operatoriale contenente operatori e numeri complessi e si vuole creare il corrispondente aggiunto bisogna svolgere queste operazioni:

- Invertire l'ordine dei fattori
- Sostituire tutte le costanti con il valore complesso coniugato
- Sostituire i ket con il corrispondente bra e viceversa
- Sostituire tutti gli operatori con i loro aggiunti

Come si deve intendere la scrittura $\langle u | \hat{A} | v \rangle$?



Alla luce della definizione di operatore aggiunto essa va intesa in uno qualsiasi dei due seguenti modi equivalenti:

$$\langle u | \hat{A} | v \rangle = \langle u | \hat{A} v \rangle = \langle \hat{A}^\dagger u | v \rangle$$



Supponiamo che sia $|u'\rangle = \hat{A}|u\rangle$ dimostrare che $\langle u'| = \langle u|\hat{A}^\dagger$



Dobbiamo dimostrare che per ogni v sia $\langle u' | v \rangle = \langle u | \hat{A}^\dagger | v \rangle$

³² per non appesantire la scrittura che rischierebbe di essere poco comprensibile, torniamo temporaneamente ad indicare i vettori con la freccina

$$\langle u | \hat{A}^\dagger | v \rangle = \langle v | \hat{A} | u \rangle^* = \langle v | u' \rangle^* = \langle u' | v \rangle$$



5.7.8.4 Gli operatori hermitiani

Gli operatori hermitiani sono i *principali protagonisti della meccanica quantistica* e sono quella particolare categoria di operatori per i quali l'aggiunto è uguale all'operatore di partenza:

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \tag{VI.5.100}$$

Quindi per gli operatori hermitiani cessano le difficoltà interpretative nell'uso di bra e ket e si può scrivere: $\langle u | \hat{A} | v \rangle$ essendo indifferente quale sia il vettore su cui agisce l'operatore, mentre se si invertono i vettori del prodotto si passa al coniugato.

$$\langle u | \hat{A} | v \rangle = \langle v | \hat{A} | u \rangle^* \tag{VI.5.101}$$

In virtù della definizione sono anche detti *operatori autoaggiunti*.

Quando invece accade che

$$\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$$

si dice che l'operatore è anti-hermitiano

Teorema

Gli autovalori di un operatore hermitiano sono reali. Gli autovettori corrispondenti ad autovalori diversi sono tra loro ortogonali.



Tutto ciò fa sì che in uno spazio vettoriale operatoriale se un operatore è hermitiano, si possa costruire una base ortonormale dello spazio risolvendo la corrispondente equazione agli autovalori.

Dimostrazione

Indichiamo con \hat{H} un operatore hermitiano; l'equazione agli autovalori si scrive:

$$\hat{H} | v \rangle = \alpha | v \rangle$$

pertanto: $\langle v | \hat{H} | v \rangle = \langle v | \alpha v \rangle = \alpha \langle v | v \rangle$

se consideriamo l'aggiunto, che in questo caso è ancora \hat{H} avremo che

$$\langle v | \hat{H} | v \rangle = \langle v | \hat{H}^\dagger | v \rangle = \langle v | \hat{H} | v \rangle^* = \langle v | \alpha v \rangle^* = \alpha^* \langle v | v \rangle$$

Dal confronto delle due equazioni, essendo il prodotto scalare di un vettore con se stesso diverso da zero, segue che

$$\alpha^* = \alpha$$

ovvero gli autovalori sono reali.

Consideriamo ora due autovalori α e β distinti.

$$\hat{H} | v \rangle = \alpha | v \rangle \text{ e } \hat{H} | u \rangle = \beta | u \rangle$$

Poiché \hat{H} è hermitiano:

$$\langle u | \hat{H} | v \rangle = \langle v | \hat{H} | u \rangle^* \Leftrightarrow \langle u | \alpha v \rangle = \langle v | \beta u \rangle^* \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \langle u | \alpha v \rangle = \langle \beta u | v \rangle \Leftrightarrow$$

$$\alpha \langle u | \alpha v \rangle = \beta^* \langle u | v \rangle$$

Ma sappiamo già che gli autovalori sono reali e dunque $\beta^* = \beta$

Ne consegue che

$$(\alpha - \beta) \langle u | v \rangle = 0$$

e poiché per ipotesi $\alpha \neq \beta$ ne segue che

$$\langle u | v \rangle = 0$$

ovvero gli autovettori sono ortogonali.

5.7.8.5 Esercizio sugli operatori hermitiani

Dimostrare che la somma $\hat{A} = \hat{B} + \hat{B}^\dagger$ di un operatore con il suo aggiunto è un operatore hermitiano



Dobbiamo mostrare che $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$

$$\hat{A}^\dagger = (\hat{B} + \hat{B}^\dagger)^\dagger = \hat{B}^\dagger + (\hat{B}^\dagger)^\dagger = \hat{B}^\dagger + \hat{B} = \hat{B} + \hat{B}^\dagger = \hat{A}$$

Osserviamo di passaggio che

$$i(\hat{B} + \hat{B}^\dagger)$$

è anti hermitiano perché quando si calcola l'aggiunto tutte le costanti numeriche si trasformano nel coniugato e dunque invece di \hat{A} si ottiene $-\hat{A}$



5.7.8.6 Gli operatori unitari

Gli operatori unitari, da non confondere con l'operatore identità $\hat{1}$, sono operatori caratterizzati dalla seguente proprietà *l'aggiunto si comporta come l'inverso* ovvero:

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1} \tag{VI.5.102}$$

Teorema

Gli operatori unitari quando vengono applicati ad un operatore hermitiano conservano tale caratteristica attraverso la trasformazione:

$$(\hat{U} \hat{A} \hat{U}^{-1})^\dagger = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^{-1} \tag{VI.5.103}$$

Non si dà la dimostrazione; si tratta di operatori utilizzati soprattutto nella rappresentazione matriciale durante la costruzione della matrice diagonale che ha elementi tutti nulli e ha gli autovalori sulla diagonale principale.

5.7.8.7 Gli operatori di proiezione

L'operatore di proiezione è un operatore di questa forma (ket bra, anziché bra ket):

$$\hat{P} = |u\rangle \langle v| \tag{VI.5.103}$$

Vediamo a cosa serve. Supponiamo di applicare il ket $|u\rangle$ a destra; si ottiene:

$$|u\rangle\langle v|u\rangle \tag{VI.5.104}$$

E poiché $\langle v|u\rangle$ rappresenta la proiezione di $|v\rangle$ su $|u\rangle$ la (VI.5.104) rappresenta un vettore diretto come $|u\rangle$ ma che è moltiplicato per un numero il cui valore è la proiezione.

Di qui il nome *operatore di proiezione*.

Naturalmente si può fare anche la operazione duale moltiplicando a sinistra per un bra.

Per gli operatori di proiezione vale una interessante proprietà relativa all'aggiunto:

$$(|u\rangle\langle v|)^\dagger = |v\rangle\langle u| \tag{VI.5.105}$$

L'operatore di proiezione mette a nudo appieno il suo ruolo quando lo si applica ad uno dei vettori della base ortonormale $|i\rangle$.

Infatti:

Teorema

$$\sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i| = \sum_{i=1}^n \hat{P}_i = \hat{1} \tag{VI.5.106}$$

dimostrazione

Se scriviamo $|v\rangle$ attraverso le sue componenti:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n v_i |i\rangle \text{ dove } v_i = \langle v|i\rangle$$

e dunque

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n \langle v|i\rangle |i\rangle = |v\rangle \sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i|$$

pertanto resta dimostrata la tesi:

$$\sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i| = \hat{1} = \sum_{i=1}^n \hat{P}_i$$

L'operatore di proiezione relativo ad un elemento della base gode della proprietà già vista per un vettore qualsiasi e cioè.

$$\hat{P}_i |u\rangle = |i\rangle\langle u|i\rangle \tag{VI.5.107}$$

5.7.8.8 Il valore atteso di un operatore

In meccanica quantistica capita spesso di dover valutare il valore atteso o valor medio di un operatore con riferimento alla funzione di stato Ψ ³³

³³ Si ricordi che ad ogni operatore viene associata una grandezza fisica misurabile. L'argomento sarà ripreso nella assiomatica



$$\langle \hat{A} \rangle =_{\text{def}} \frac{\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \tag{VI.5.108}$$

E naturalmente se il vettore di stato è stato normalizzato

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \tag{VI.5.108 bis}$$

5.7.9 L'IMPORTANZA DELLA COMMUTATIVITÀ

Il motivo per cui ci si è soffermati sul fatto che il prodotto tra operatori in generale non è commutativo risiede in un teorema che riguarda gli autovettori degli operatori il cui commutatore è nullo.

Due osservabili si dicono *compatibili* (e la cosa avrà ripercussioni sulla misurabilità simultanea) se i corrispondenti operatori possiedono un insieme di autovettori in comune.

Se due operatori hanno gli autovettori in comune vuol dire che non ci saranno limiti nella possibilità di effettuare una misurazione simultanea delle corrispondenti grandezze come vedremo nel postulato 5 della MQ.

D'altra parte se non hanno autovettori in comune aspettiamoci qualche problema in termini di limitazione quando si cerca di effettuare una misura simultanea.

Teorema



Condizione necessaria e sufficiente affinché due operatori commutino è che abbiano un insieme di autovettori in comune.

Dimostrazione

Supponiamo che due operatori \hat{A} e \hat{B} abbiano in comune l'insieme $\{|\varphi_i\rangle\}$ di autovettori.

$$\text{Sia dunque } \hat{A}|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle \text{ e } \hat{B}|\varphi_i\rangle = \mu_i|\varphi_i\rangle \quad \Rightarrow$$

$$\hat{A}\hat{B}|\varphi_i\rangle = \hat{A}(\mu_i|\varphi_i\rangle) = \mu_i\hat{A}|\varphi_i\rangle = \mu_i\lambda_i|\varphi_i\rangle \quad \Rightarrow$$

$$\hat{B}\hat{A}|\varphi_i\rangle = \hat{B}(\lambda_i|\varphi_i\rangle) = \lambda_i\hat{B}|\varphi_i\rangle = \lambda_i\mu_i|\varphi_i\rangle$$

E dunque i due operatori commutano.

Si lascia per esercizio la dimostrazione del carattere necessario dell'enunciato.

Il *commutatore di due operatori hermitiani* $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ viene indicato con il simbolo $[\hat{A}, \hat{B}]$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{VI.5.109}$$

La quantità $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ è detta *anti commutatore* ed è indicata con il simbolo

$$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \tag{VI.5.110}$$

5.7.10 LO SPAZIO DI HILBERT

Lo spazio di Hilbert è uno spazio vettoriale lineare nel quale si richiede che i vettori siano costituiti da funzioni complesse di variabile reale.

Inizialmente (sistema costituito da una singola particella) si considera una sola variabile spaziale e un intervallo finito, ma poi si generalizza su

sistemi descritti da n variabili (come si fa negli studi di meccanica analitica e le variabili saranno definite su $]-\infty, +\infty[$

La base vettoriale è data da un sistema ortonormale di infinite funzioni dove la ortonormalità viene indotta dalla definizione di prodotto scalare definito come segue:

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x)g(x)dx \tag{VI.5.111}$$



tutto ciò implica che tali funzioni siano modulo quadro integrabili per poter dar loro un senso fisico e si possa poi procedere alla loro normalizzazione.

Infatti:

$$\| | f \rangle \|^2 = \langle f | f \rangle = \int_a^b f^*(x)f(x)dx = \int_a^b | f(x) |^2 dx \tag{VI.5.112}$$

Se le funzioni sono modulo quadro integrabili per la disuguaglianza di Schwartz è possibile definire il prodotto scalare tra due vettori qualsiasi.

5.7.11 ESERCIZI SUGLI OPERATORI NELLO SPAZIO DI HILBERT

5.7.11.1 Dimostrare che l'operatore $\hat{A} = i \frac{d}{dx}$ è hermitiano.

Indicando con f e g due funzioni modulo quadro integrabili e, tenuto conto della definizione di prodotto scalare, dovrà essere

$$(f, \hat{A}g) = (\hat{A}f, g)$$

$$(f, \hat{A}g) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^* i \frac{d}{dx} g dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f^* i dg = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[i f^* g - i \int_{+\infty}^{-\infty} f^* g dx \right]$$

il primo termine si annulla per le condizioni di integrabilità dello spazio di Hilbert

$$(f, \hat{A}g) = \left[-i \int_{+\infty}^{-\infty} f^* g dx \right]_{+\infty}^{-\infty} = \left[-i \int_{+\infty}^{-\infty} \frac{d}{dx} f^* g dx \right]_{+\infty}^{-\infty} = \left[\int_{+\infty}^{-\infty} \left(i \frac{d}{dx} f \right)^* g dx \right]_{+\infty}^{-\infty} = (\hat{A}f, g)$$

Procedendo allo stesso modo si dimostra che l'operatore $\frac{d^2}{dx^2}$ che compare nella espressione della hamiltoniana è hermitiano.

5.7.11.2 Se \hat{A} e \hat{B} sono due operatori hermitiani dimostrare che $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ è hermitiano mentre $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ non lo è

Poiché \hat{A} e \hat{B} sono hermitiani

$$\langle f | \hat{A}g \rangle = \int f^* \hat{A}g dx = \int \hat{A}^\dagger f^* g dx = \int \hat{A} f^* g dx$$

e analogamente per \hat{B}

³⁴ Integrando per parti

$$\begin{aligned}
 \langle f | \hat{B}g \rangle &= \int \hat{B}f^* g \, dx \\
 \int f^* (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})g \, dx &= \int f^* (\hat{A}\hat{B})g \, dx + \int f^* (\hat{B}\hat{A})g \, dx = \\
 &= \int (\hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger) f^* g \, dx + \int (\hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger) f^* g \, dx = \\
 &= \int (\hat{B}\hat{A}) f^* g \, dx + \int (\hat{A}\hat{B}) f^* g \, dx = \\
 &= \int (\hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}) f^* g \, dx \quad \text{c.v.d}
 \end{aligned}$$

Per il caso della differenza si procede analogamente ma si arriva al risultato opposto..

In maniera analoga si dimostra che se \hat{A} e \hat{B} sono hermitiani lo è anche l'operatore $i[\hat{A}, \hat{B}]$ e che la condizione per cui $\hat{A}\hat{B}$ lo sia è che i due operatori commutino

5.7.11.3 Dimostrare che il prodotto scalare tra un vettore e il trasformato del commutatore è un numero complesso completamente immaginario mentre quello con l'anti commutatore è puramente reale.

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi \rangle &= \langle \psi | (\hat{A}\hat{B})\psi \rangle - \langle \psi | (\hat{B}\hat{A})\psi \rangle = \\
 &= \langle \psi \hat{A} | \hat{B}\psi \rangle - \langle \psi \hat{B} | \hat{A}\psi \rangle = \\
 &= \langle \psi \hat{A} | \hat{B}\psi \rangle - \langle \psi \hat{A} | \hat{B}\psi \rangle^*
 \end{aligned}$$

e la differenza tra un numero complesso e il suo coniugato è puramente immaginaria.

Con la stessa tecnica si dimostra la seconda parte di questo teorema che incontreremo nella deduzione generale del principio di indeterminazione.