

CORSO DI STRUTTURA DELLA MATERIA

Basi di algebra lineare e di meccanica quantistica

Leonardo Castellani

*Dipartimento di Scienze e Innovazione Tecnologica
Università del Piemonte Orientale,
e INFN, Sezione di Torino
Viale T. Michel 11, 15121 Alessandria, Italia*

Abstract

Si richiamano le definizioni e le principali proprietà degli spazi vettoriali complessi con prodotto scalare, e degli operatori lineari che agiscono in questi spazi. I principi della meccanica quantistica vengono poi formulati nel linguaggio dell' algebra lineare.

21 Marzo 2020

leonardo.castellani@uniupo.it

Contents

1	Dalle funzioni d' onda ai vettori ket	1
2	Spazi vettoriali complessi	1
2.1	Vettori linearmente indipendenti	1
2.2	Base	1
2.3	Operatori lineari	2
2.4	Rappresentazione matriciale di un operatore lineare	2
2.5	Somma e prodotto di operatori, commutatore	3
2.6	Operatore inverso	4
2.7	Cambio di base	4
3	Prodotto scalare	5
3.1	Base ortonormale	6
3.2	Operatore aggiunto	7
3.3	Operatore ket-bra	7
3.4	Relazione di completezza	8
3.5	Autovalori e autovettori di un operatore	8
3.6	Operatori hermitiani	9
3.7	Operatori unitari	9
3.8	Spazi vettoriali a infinite dimensioni	10
4	Le regole della meccanica quantistica	11
4.1	Regola 1: STATO FISICO	11
4.2	Regola 2: OSSERVABILI E RISULTATI DI MISURA	11
4.3	Regola 3: MISURE E PROBABILITA'	11
4.4	Regola 4: EVOLUZIONE DELLO STATO FISICO	11
5	Approfondimenti ed esempi	12
5.1	Approfondimento 1: normalizzazione del vettore di stato	12
5.2	Approfondimento 2: autovalori degeneri	13
5.3	Approfondimento 3: autovalori continui	14
5.4	Approfondimento 4: osservabili commutanti	14
6	Posizione e quantità di moto: gli operatori osservabili X e P_x	14
6.1	Autovalori e autovettori di X	15
6.2	Autovalori e autovettori di P_x	16
7	Regole di quantizzazione	16
8	Generalizzazione a più gradi di libertà	17

9	Valori medi e indeterminazione	18
9.1	Valor medio di una variabile statistica	18
9.2	Valor medio di un' osservabile in uno stato $ \psi\rangle$	19
9.3	Scarto quadratico medio: indeterminazione	19
9.4	Principio di indeterminazione	19
9.5	Evoluzione nel tempo dei valori medi	20
10	Sistemi conservativi	20
10.1	Soluzioni dell' equazione di Schrödinger	21
10.2	Costanti del moto	22
11	Limite classico della meccanica quantistica	22
12	Oscillatore armonico	24
12.1	Oscillatore armonico classico	24
12.2	Oscillatore armonico quantistico	25
12.3	Notazioni	25
12.4	Autovalori e autovettori di N	26
12.5	Autovalori e autovettori di H	27

1 Dalle funzioni d' onda ai vettori ket

Data la linearità delle equazioni di Maxwell per il campo elettromagnetico, la somma di due soluzioni è ancora una soluzione (**principio di sovrapposizione**). Il campo elettrico $\vec{E}(x, y, z, t)$ d' altra parte, può considerarsi la funzione d' onda del fotone: il suo modulo quadro è proporzionale all' intensità del campo, e quindi alla probabilità di trovare il fotone in un intorno del punto x, y, z al tempo t . E' quindi naturale aspettarsi che per le funzioni d' onda delle particelle valga il principio di sovrapposizione: una combinazione lineare di funzioni d' onda è ancora una funzione d' onda. Questa è anche una fondamentale proprietà dei **vettori**, e pertanto tratteremo le funzioni d' onda $\psi(x, y, z)$ come vettori, indicati dal simbolo $|\psi\rangle$. Alla somma di due funzioni d' onda $\psi_1(x, y, z) + \psi_2(x, y, z)$ corrisponde così la somma dei due vettori $|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$, al prodotto di un numero (complesso) c con una funzione d' onda $\psi(x, y, z)$ corrisponde il vettore $c|\psi\rangle$ etc.

Le funzioni d' onda in generale dipendono dal tempo, e quindi anche i vettori che corrispondono alle funzioni d' onda dipendono in generale dal tempo.

$$\psi(x, y, z, t) \longleftrightarrow |\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

Il linguaggio della meccanica quantistica diventa allora quello dell' **algebra lineare**. Gli stati fisici di un sistema quantistico vengono descritti da vettori, chiamati **vettori di stato** o vettori *ket*. L' insieme di questi vettori forma uno spazio vettoriale *complesso*, poiché i vettori (e le funzioni d' onda) possono essere moltiplicati per numeri complessi.

2 Spazi vettoriali complessi

I vettori si sommano tra loro e si moltiplicano per numeri (complessi) con le usuali proprietà distributive etc. Per esempio $c(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = c|\psi_1\rangle + c|\psi_2\rangle$. Il *vettore nullo* $|0\rangle$ è definito da $|\psi\rangle + |0\rangle = |\psi\rangle$ per ogni $|\psi\rangle$ appartenente allo spazio vettoriale. In seguito indicheremo il vettore nullo semplicemente con il simbolo 0.

2.1 Vettori linearmente indipendenti

I vettori $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots |u_n\rangle$ si dicono *linearmente indipendenti* se nessuno di questi può essere espresso come combinazione lineare degli altri. Il numero massimo di vettori linearmente indipendenti in un dato spazio vettoriale V è la *dimensione* di V .

2.2 Base

Se la dimensione di V è N , una collezione di N vettori linearmente indipendenti $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots |u_N\rangle$ individua una *base* per V . Ogni vettore $|v\rangle$ di V può allora

esprimersi in un unico modo come combinazione lineare dei vettori di base

$$|v\rangle = v_1|u_1\rangle + v_2|u_2\rangle + \cdots + v_N|u_N\rangle \quad (2.1)$$

Esercizio 2.1: dimostrarlo.

I numeri (complessi) v_1, \dots, v_N sono le **componenti** del vettore $|v\rangle$ sulla base $\{|u_i\rangle\}$. Il vettore $|v\rangle$ può allora essere rappresentato dalla colonna (matrice $N \times 1$):

$$|v\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

Il vettore nullo è rappresentato da una colonna di zeri.

2.3 Operatori lineari

Un operatore A su V trasforma un vettore in un altro vettore:

$$A|v\rangle = |w\rangle \quad (2.3)$$

Un operatore *lineare* trasforma una combinazione lineare di vettori nella stessa combinazione lineare dei vettori trasformati:

$$A(\alpha|v\rangle + \beta|z\rangle) = \alpha A|v\rangle + \beta A|z\rangle \quad (2.4)$$

L'azione di un operatore lineare su un qualunque $|v\rangle$ è *determinata dalla sua azione sui vettori di base*. Infatti:

$$A|v\rangle = A(v_1|u_1\rangle + \cdots + v_N|u_N\rangle) = v_1 A|u_1\rangle + \cdots + v_N A|u_N\rangle \quad (2.5)$$

Quindi basta conoscere gli $A|u_j\rangle$ per determinare $A|v\rangle$.

2.4 Rappresentazione matriciale di un operatore lineare

Anche il vettore $A|u_j\rangle$ può essere espanso come combinazione lineare dei vettori della base:

$$A|u_j\rangle = A_{1j}|u_1\rangle + \cdots + A_{Nj}|u_N\rangle = \sum_i A_{ij}|u_i\rangle \quad (2.6)$$

I coefficienti di questa espansione individuano una matrice quadrata A_{ij} , che *rappresenta* l'operatore lineare A sulla base $\{|u_i\rangle\}$. La regola per costruire questa matrice è semplice: **le sue colonne sono formate dalle componenti dei vettori $A|u_j\rangle$** .

Esempio: in uno spazio vettoriale a 3 dimensioni, con vettori di base $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$, definiamo l'azione di un operatore lineare A tramite la sua azione sui vettori

di base come segue:

$$A|u_1\rangle = |u_1\rangle + 2|u_3\rangle \quad (2.7)$$

$$A|u_2\rangle = 4|u_1\rangle + 3i|u_2\rangle - 5|u_3\rangle \quad (2.8)$$

$$A|u_3\rangle = (1 + 2i)|u_1\rangle + 7|u_2\rangle \quad (2.9)$$

La sua matrice rappresentativa è

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 + 2i \\ 0 & 3i & 7 \\ 2 & -5 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Esercizio 2.2 : Dimostrare che le componenti del vettore $|w\rangle = A|v\rangle$ possono ottenersi applicando la matrice che rappresenta A al vettore colonna che rappresenta $|v\rangle$, cioè:

$$w_i = \sum_{j=1}^N A_{ij}v_j \quad (2.11)$$

2.5 Somma e prodotto di operatori, commutatore

Dati due operatori A e B , la loro somma $A + B$ è definita da:

$$(A + B)|v\rangle = A|v\rangle + B|v\rangle \quad (2.12)$$

La sua rappresentazione matriciale è la somma delle matrici che rappresentano A e B . L' *operatore nullo* $\mathbf{0}$ è tale che $\mathbf{0}|v\rangle = 0$ per ogni $|v\rangle$.

Dati due operatori A e B , il loro *prodotto* AB è definito come segue

$$AB|v\rangle \equiv A(B|v\rangle) \quad (2.13)$$

cioè si applica prima B a $|v\rangle$ e al vettore risultante si applica A . L' *operatore identità* I è definito da $I|v\rangle = |v\rangle$ per ogni $|v\rangle$, e soddisfa $AI = IA = A$.

Esercizio 2.3 : La matrice che rappresenta I è la matrice diagonale con elementi sulla diagonale tutti uguali a 1.

Esercizio 2.4 : La matrice che rappresenta AB viene ottenuta moltiplicando (prodotto righe per colonne) la matrice che rappresenta A per la matrice che rappresenta B .

Due operatori A e B sono uguali se la loro azione su tutti i vettori è uguale (o equivalentemente se la loro differenza è l'operatore nullo).

In genere gli operatori non commutano, cioè $AB \neq BA$, come si può capire bene considerando la loro rappresentazione matriciale (il prodotto di matrici in genere non commuta). La differenza tra AB e BA viene chiamata *commutatore* e indicata come segue:

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad (2.14)$$

Nota: dalla definizione di sopra seguono immediatamente le proprietà:

$$[A, B] = -[B, A] \quad \text{antisimmetria} \quad (2.15)$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad \text{derivazione} \quad (2.16)$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad \text{derivazione} \quad (2.17)$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \quad \text{identita' di Jacobi} \quad (2.18)$$

La seconda proprietà si chiama proprietà di derivazione perchè A agisce come la derivata su un prodotto, e analogamente per la terza proprietà.

2.6 Operatore inverso

L'operatore *inverso* A^{-1} è definito da

$$A^{-1}A = AA^{-1} = I \quad (2.19)$$

La matrice che lo rappresenta è quindi l'inversa della matrice che rappresenta A . Questa esiste solo se il suo determinante è diverso da zero, e si ha:

$$A_{ij}^{-1} = \frac{Cof(A)_{ji}}{det(A)} \quad (2.20)$$

dove $Cof(A)_{ij}$ è il determinante della sottomatrice di A ottenuta togliendo la i -esima riga e la j -esima colonna, moltiplicato per $(-1)^{i+j}$. La matrice $Cof(A)$ viene anche detta matrice dei *cofattori* di A .

2.7 Cambio di base

La rappresentazione matriciale di vettori e operatori *dipende dalla scelta della base*. Un vettore $|v\rangle$ ha componenti v_i rispetto a una base $\{|u_i\rangle\}$, e componenti v'_i rispetto a un'altra base $\{|u'_i\rangle\}$:

$$|v\rangle = \sum_i v_i |u_i\rangle = \sum_i v'_i |u'_i\rangle \quad (2.21)$$

Che relazione intercorre tra v_i e v'_i ? Questa è determinata dalla relazione tra le basi $\{|u_i\rangle\}$ e $\{|u'_i\rangle\}$. La base $\{|u_i\rangle\}$ può sempre esprimersi in termini di combinazioni lineari di elementi della base $\{|u'_i\rangle\}$, e queste combinazioni definiscono un operatore (o matrice) di cambiamento di base S tale che

$$|u_i\rangle = \sum_k S_{ki} |u'_k\rangle = S |u'_i\rangle \quad (2.22)$$

$$\implies |u'_i\rangle = \sum_k S_{ki}^{-1} |u_k\rangle = S^{-1} |u_i\rangle \quad (2.23)$$

Sostituendo questa espressione per $|u_i\rangle$ in (2.21) si trova

$$|v\rangle = \sum_i v_i \sum_k S_{ki} |u'_k\rangle = \sum_k \sum_i S_{ki} v_i |u'_k\rangle \implies v'_k = \sum_i S_{ki} v_i \quad (2.24)$$

Analogamente possiamo chiederci come cambia la matrice che rappresenta un operatore lineare A se si cambia la base. Usando (2.23), (2.6) e (2.22) si trova

$$A|u'_j\rangle = \sum_k S_{kj}^{-1} A|u_k\rangle = \sum_k \sum_l S_{kj}^{-1} A_{lk} |u_l\rangle = \sum_k \sum_l \sum_i S_{kj}^{-1} A_{lk} S_{il} |u'_i\rangle \quad (2.25)$$

e quindi sulla nuova base $\{|u'_k\rangle\}$ l'operatore A è rappresentato dalla matrice

$$A'_{ij} = \sum_k \sum_l S_{kj}^{-1} A_{lk} S_{il} \implies A' = SAS^{-1} \quad (2.26)$$

(nella seconda eguaglianza A , A' e S sono matrici).

Nota : le proprietà di una matrice che sono indipendenti dalla scelta della base sono proprietà *intrinseche*, cioè *proprietà dell'operatore* rappresentato da A . Per esempio il determinante e la traccia di una matrice non cambiano sotto cambio di base: si può allora parlare di *determinante e traccia di un operatore*. Ricordiamo che $\det(AB) = \det(A)\det(B)$ e $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$, che implica anche $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA) = \text{Tr}(CAB)$.

Esercizio : dimostrare che il determinante e la traccia di una matrice non dipendono dalla base scelta.

Ricordiamo che la traccia di una matrice A è definita da $\sum_i A_{ii}$.

3 Prodotto scalare

Nello spazio vettoriale complesso della meccanica quantistica si definisce un prodotto scalare tra due vettori $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$:

$$(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \in \mathbb{C} \quad (3.1)$$

che soddisfa alle seguenti proprietà:

$$(|\psi\rangle, |\phi\rangle) = (|\phi\rangle, |\psi\rangle)^* \quad (3.2)$$

$$(|\psi\rangle, c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle) = c_1(|\psi\rangle, |\phi_1\rangle) + c_2(|\psi\rangle, |\phi_2\rangle) \quad (3.3)$$

$$(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle, |\phi\rangle) = c_1^*(|\psi_1\rangle, |\phi\rangle) + c_2^*(|\psi_2\rangle, |\phi\rangle) \quad (3.4)$$

$$(|\psi\rangle, |\psi\rangle) \geq 0 \quad (= 0 \text{ se e solo se } |\psi\rangle = 0) \quad (3.5)$$

La prima generalizza la commutatività dell'usuale prodotto scalare in spazi vettoriali reali alla *-commutatività (lo scambio dei vettori produce una coniugazione) in spazi vettoriali complessi. La seconda esprime la linearità del prodotto scalare nel suo secondo argomento, e usando la prima proprietà si dimostra la terza (*-linearità del prodotto scalare nel primo argomento). Dalla prima proprietà si deduce che il prodotto scalare di un vettore con se stesso, $(|v\rangle, |v\rangle)$, è reale, e anche ≥ 0 per la quarta proprietà. La *norma* $\|v\|$ del vettore $|v\rangle$ è definita da:

$$\|v\| \equiv \sqrt{(|v\rangle, |v\rangle)} \quad (3.6)$$

e generalizza la nozione di “lunghezza” ai vettori complessi. In particolare la norma è nulla solo per il vettore nullo. Due vettori si dicono *ortogonali* se il loro prodotto scalare è nullo.

In termini delle funzioni d'onda corrispondenti, il prodotto scalare viene definito dall'integrale su tutto il volume dello spazio:

$$(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, y, z) \phi(x, y, z) dx dy dz \quad (3.7)$$

E' semplice verificare che soddisfa alle quattro proprietà di sopra.

Nelle notazioni dei fisici il prodotto scalare tra $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ viene usualmente indicato con

$$\langle\psi|\phi\rangle \quad (3.8)$$

(notazione “bra-ket” di Dirac). Nel seguito useremo entrambe le notazioni $(,)$ e $\langle | \rangle$, a seconda della convenienza grafica.

Possiamo definire una applicazione lineare dai vettori ai numeri complessi, associata a un vettore $|\psi\rangle$, e che denotiamo con il simbolo

$$\langle\psi| \quad (3.9)$$

Questo simbolo prende il nome di **bra**, ed è un' applicazione che agisce su ogni vettore $|\phi\rangle$ semplicemente dando come risultato il numero complesso $\langle\psi|\phi\rangle$. Quindi possiamo considerare il simbolo $\langle\psi|\phi\rangle$ sia come prodotto scalare tra due vettori ket $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$, sia come azione del bra $\langle\psi|$ sul vettore $|\phi\rangle$. Le applicazioni che portano vettori in numeri si chiamano anche *funzionali*. Possono sommarsi e moltiplicarsi per numeri complessi e quindi possono considerarsi vettori, di uno spazio vettoriale chiamato *spazio duale*.

3.1 Base ortonormale

Il prodotto scalare permette di costruire basi ortonormali $\{|u_i\rangle\}$, i cui elementi siano tutti di norma = 1 e ortogonali tra loro:

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} \quad (3.10)$$

con $\delta_{ij} = 0$ per $i \neq j$ e $\delta_{ij} = 1$ per $i = j$.

Usando una base ortonormale $\{|u_i\rangle\}$, la componente v_i del vettore $|v\rangle$ può ottenersi dal prodotto scalare:

$$v_i = \langle u_i | v \rangle \quad (3.11)$$

e la matrice rappresentativa di un operatore lineare A diventa uguale a :

$$A_{ij} = (|u_i\rangle, A|u_j\rangle) = \langle u_i | A | u_j \rangle \quad (3.12)$$

Inoltre il prodotto scalare di due vettori può esprimersi in termini delle loro componenti:

$$\langle v|w\rangle = \sum_i v_i^* w_i \quad (3.13)$$

come si dimostra facilmente sostituendo nel prodotto scalare le espressioni $|v\rangle = \sum_j v_j |u_j\rangle$ e $|w\rangle = \sum_k w_k |u_k\rangle$ e usando le relazioni di ortonormalità (3.10) degli elementi di base $|u_i\rangle$. Notiamo che l'equazione di sopra può anche scriversi come:

$$\langle v|w\rangle = \sum_i \langle v|u_i\rangle \langle u_i|w\rangle \quad (3.14)$$

3.2 Operatore aggiunto

Dato un operatore A , si definisce il suo *aggiunto* A^\dagger come segue:

$$(|\psi\rangle, A|\phi\rangle) \equiv (A^\dagger|\psi\rangle, |\phi\rangle) \quad (3.15)$$

$\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle$. Su una base ortonormale la sua matrice rappresentativa soddisfa:

$$A_{ij}^\dagger = A_{ji}^* \quad (3.16)$$

ed è quindi la **trasposta coniugata**. Infatti

$$A_{ij}^\dagger = (|u_i\rangle, A^\dagger|u_j\rangle) = (A|u_i\rangle, |u_j\rangle) = (|u_j\rangle, A|u_i\rangle)^* = A_{ji}^* \quad (3.17)$$

Osservazione 1: dalla definizione di operatore aggiunto segue che $(iA)^\dagger = -iA^\dagger$.

Osservazione 2: $(A^\dagger)^\dagger = A$, cioè l'aggiunto dell'aggiunto di A coincide con A .

Osservazione 3: qual è il bra corrispondente al vettore $A|\psi\rangle$? Per definizione di bra, la sua azione su qualsiasi vettore ket $|\phi\rangle$ è uguale al prodotto scalare $(A|\psi\rangle, |\phi\rangle) = (|\psi\rangle, A^\dagger|\phi\rangle) = \langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle$. Si può allora usare la notazione

$$\langle\psi|A^\dagger \quad (3.18)$$

per indicare il bra corrispondente a $A|\psi\rangle$.

3.3 Operatore ket-bra

Particolari operatori lineari sono gli operatori di tipo **ket-bra**

$$|\psi\rangle\langle\phi| \quad (3.19)$$

che sono definiti dalla loro azione su un qualunque vettore $|\chi\rangle$:

$$(|\psi\rangle\langle\phi|)|\chi\rangle \equiv |\psi\rangle\langle\phi|\chi\rangle \quad (3.20)$$

Trasformano quindi il vettore $|\chi\rangle$ nel vettore $|\psi\rangle$ moltiplicato per il numero $\langle\phi|\chi\rangle$. Sono operatori lineari perchè il prodotto scalare è lineare nel suo secondo argomento.

Tra gli operatori ket-bra ci sono i **proiettori**, definiti da

$$|\psi\rangle\langle\psi| \quad (3.21)$$

Proiettano un qualsiasi vettore $|\chi\rangle$ sul vettore $|\psi\rangle$.

3.4 Relazione di completezza

Consideriamo l'espansione di un vettore $|v\rangle$ sugli elementi di una base ortonormale $\{|u_i\rangle\}$:

$$|v\rangle = \sum_i v_i |u_i\rangle \quad (3.22)$$

Ricordando che $v_i = \langle u_i | v \rangle$ possiamo scrivere

$$|v\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | v \rangle \quad (3.23)$$

equazione che deve valere per ogni $|v\rangle$. Ma il termine di destra può considerarsi il risultato dell'applicazione dell'operatore $(\sum_i |u_i\rangle \langle u_i|)$ sul vettore $|v\rangle$. Ne consegue che questo operatore, che consiste nella somma dei proiettori sugli elementi di base, deve essere l'identità:

$$\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = I \quad (3.24)$$

Questa importante relazione prende il nome di **relazione di completezza**.

3.5 Autovalori e autovettori di un operatore

Un vettore $|a\rangle$ è un *autovettore* di un operatore A , corrispondente all'autovalore a , se soddisfa all'equazione (equazione agli autovalori per l'operatore A):

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (3.25)$$

Si esclude il caso banale $|a\rangle = 0$. Gli autovettori di A vengono trasformati da A in vettori ad essi proporzionali, e la costante di proporzionalità prende il nome di *autovalore*. Per semplicità si usa indicare l'autovettore corrispondente a un autovalore a con la notazione $|a\rangle$. Il problema di trovare tutti gli autovalori e autovettori di un operatore è detto *problema spettrale*¹. In genere è un problema difficile. Gli autovalori si trovano risolvendo per a l'equazione²

$$\det(A - aI) = 0 \quad (3.26)$$

e una volta trovate le soluzioni a di questa equazione (di grado uguale alla dimensione dello spazio vettoriale) si sostituiscono nell'equazione $A|a\rangle = a|a\rangle$. Per ogni autovalore a , questa diventa un sistema lineare per le componenti dell'autovettore incognito $|a\rangle$ corrispondente, di facile risoluzione. La parte difficile del procedimento è la prima, cioè trovare gli autovalori.

A un particolare autovalore a possono corrispondere più autovettori linearmente indipendenti. Il numero g di questi autovettori si dice *degenerazione* dell'autovalore a , e gli autovettori vengono denotati da:

$$|a, \alpha\rangle, \quad \alpha = 1, \dots, g \quad (3.27)$$

¹e l'insieme degli autovalori di A è detto *spettro* di A .

²Dimostrazione: dalla (3.25) si ha $(A - aI)|a\rangle = 0$ con $|a\rangle \neq 0$. Se esistesse l'inverso dell'operatore $A - aI$ si potrebbe applicarlo all'equazione di sopra, ottenendo $(A - aI)^{-1}(A - aI)|a\rangle = |a\rangle = 0$, contrariamente all'ipotesi $|a\rangle \neq 0$. Quindi $A - aI$ non deve essere invertibile $\Rightarrow \det(A - aI) = 0$.

Un importante teorema stabilisce che se A è un operatore **normale** (definito come un operatore che commuta col suo aggiunto, $[A, A^\dagger] = 0$), A ammette N autovettori ortonormali $|a_i\rangle$, con $N =$ dimensione dello spazio vettoriale. Quindi questi autovettori formano una base ortonormale $\{|a_i\rangle\}$. Inoltre la degenerazione di a_i è data dalla *molteplicità* della radice a_i del polinomio caratteristico $\det(A - aI)$.

Se si rappresenta l'operatore su questa base, si ottiene una matrice diagonale, con elementi della diagonale uguali agli autovalori a_i :

$$A_{ij} = \langle a_i | A | a_j \rangle = \langle a_i | a_j | a_j \rangle = a_j \langle a_i | a_j \rangle = a_j \delta_{ij} \quad (3.28)$$

Una matrice A corrispondente ad un operatore normale (si chiama allora matrice normale) può quindi essere *diagonalizzata*, nel senso che si può sempre trovare una matrice S di cambiamento di base, che collega la base di partenza alla nuova base formata dagli autovettori della matrice, tale che $A' = SAS^{-1}$ sia diagonale, cf. (2.26).

3.6 Operatori hermitiani

Gli operatori hermitiani sono definiti da

$$A^\dagger = A \quad (3.29)$$

In questo caso la matrice rappresentativa di A (chiamata anch'essa matrice hermitiana) coincide con la sua trasposta complessa coniugata, cf. (3.16). Gli operatori hermitiani sono anche normali (ogni operatore commuta con se stesso), e quindi possono essere rappresentati sulla base dei loro autovettori con matrici diagonali che soddisfano $A^\dagger = A$, il che implica che tutti gli autovalori (elementi della diagonale) sono *reali*. Pertanto abbiamo dimostrato che *gli operatori hermitiani hanno tutti gli autovalori reali*, e per questa importante proprietà giocano un ruolo fondamentale nel formalismo della meccanica quantistica. Dalla definizione di operatore aggiunto e dalla proprietà di *-commutazione del prodotto scalare, segue che un operatore A è hermitiano se e solo se

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (|w\rangle, A|v\rangle)^* \quad \forall |v\rangle, |w\rangle \quad (3.30)$$

Gli operatori *antihermitiani* sono definiti da $A^\dagger = -A$. Se A è hermitiano, iA è antihermitiano e viceversa.

Nota : se A e B sono hermitiani, il loro commutatore $[A, B]$ è antihermitiano.

3.7 Operatori unitari

Gli operatori unitari sono definiti da

$$A^\dagger = A^{-1} \quad (3.31)$$

Anche questi operatori sono normali, e quindi ammettono N autovettori ortonormali.

Esercizio : dimostrare che gli autovalori degli operatori unitari sono tutti numeri complessi di modulo 1.

Se operiamo con un operatore unitario U su tutti i vettori dello spazio, i prodotti scalari tra vettori rimangono invariati. Infatti, se $|v'\rangle = U|v\rangle$, $|w'\rangle = U|w\rangle$,

$$(|v'\rangle, |w'\rangle) = (U|v\rangle, U|w\rangle) = (U^\dagger U|v\rangle, |w\rangle) = (|v\rangle, |w\rangle) \quad (3.32)$$

In meccanica quantistica tutte le predizioni della teoria vengono espresse tramite prodotti scalari, e si capisce allora l'importanza degli operatori unitari nella formulazione delle simmetrie dei sistemi fisici.

3.8 Spazi vettoriali a infinite dimensioni

In generale lo spazio vettoriale delle funzioni d'onda per un sistema fisico quantistico ha infinite dimensioni. A seconda del sistema, questa infinità può essere discreta (come ad esempio per l'oscillatore armonico e per l'atomo di idrogeno), o continua (come per una particella libera).

Le somme nei prodotti scalari diventano allora somme su un numero infinito di termini (o integrali), e sarà necessario assicurarsi della loro convergenza.

4 Le regole della meccanica quantistica

4.1 Regola 1: STATO FISICO

Lo stato fisico di un sistema quantistico è completamente descritto da un **vettore** $|\psi\rangle$ in uno spazio vettoriale con prodotto scalare.

4.2 Regola 2: OSSERVABILI E RISULTATI DI MISURA

Le grandezze fisiche sono descritte da **osservabili**, definiti come *operatori hermitiani con autovettori che formano una base dello spazio vettoriale*.

4.3 Regola 3: MISURE E PROBABILITA'

i) I possibili **risultati di una misura** di una grandezza fisica sono gli **autovalori** dell'operatore osservabile corrispondente. Questi sono *numeri reali* poichè gli operatori osservabili sono hermitiani.

ii) La **probabilità** $p(a_i)$ di ottenere l' i -esimo autovalore a_i di un osservabile A come risultato di una misura di A , in un sistema fisico che si trovi dello stato $|\psi\rangle$, è data da

$$p(a_i) = |\langle a_i | \psi \rangle|^2 \quad (4.1)$$

dove $|a_i\rangle$ è l'autovettore corrispondente all'autovalore a_i .

iii) lo stato $|\psi\rangle$, dopo una misura che ha dato per risultato a_i , diventa $|a_i\rangle$ (\rightarrow **collasso** del vettore di stato dovuto alla misura)

4.4 Regola 4: EVOLUZIONE DELLO STATO FISICO

Lo stato fisico soddisfa all'equazione di Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (4.2)$$

dove H è l'operatore **Hamiltoniano**, osservabile corrispondente all'*energia* del sistema fisico. I suoi autovalori sono i possibili risultati di una misura di energia.

Dato lo stato $|\psi(0)\rangle$ a tempo $t = 0$, l'equazione di Schrödinger, un'equazione differenziale al primo ordine nella derivata temporale, permette di determinare lo stato $|\psi(t)\rangle$ per ogni t .

NOTA: la derivata di un vettore è definita nel modo usuale:

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\psi(t + \Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\Delta t} \quad (4.3)$$

E' immediato verificare che con questa definizione la derivata di un vettore ha per componenti le derivate delle componenti del vettore.

5 Approfondimenti ed esempi

5.1 Approfondimento 1: normalizzazione del vettore di stato

Se espandiamo $|\psi\rangle$ su una base di autovettori di A :

$$|\psi\rangle = c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle + \dots \quad (5.1)$$

dalla **Regola 3** si trova

$$p(a_1) = |c_1|^2, \quad p(a_2) = |c_2|^2, \quad \dots \quad (5.2)$$

—> i moduli quadri dei coefficienti dell' espansione forniscono le probabilità di ottenere gli autovalori corrispondenti in una misura di A . Notiamo che tutte queste probabilità devono sommarsi a 1, e questa somma è anche data dal quadrato della norma del vettore $|\psi\rangle$:

$$\langle\psi|\psi\rangle = |c_1|^2 + |c_2|^2 + \dots = 1 \quad (5.3)$$

Quindi l' interpretazione probabilistica dei coefficienti c_i (le componenti del vettore di stato $|\psi\rangle$ sulla base $\{|a_i\rangle\}$) richiede la normalizzazione dei vettori di stato

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad (5.4)$$

In termini della funzione d'onda $\psi(x, y, z, t)$ associata al vettore $|\psi\rangle$ la condizione di normalizzazione prende la forma:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz = 1 \quad (5.5)$$

Nota 1 : se il sistema si trova in un autostato $|a_i\rangle$ di A , una misura di A dà per risultato a_i con probabilità 1. Solo in questo caso vi è **certezza** nel risultato della misura di A .

Nota 2 : Dato uno stato qualsiasi $|\phi\rangle$ (non normalizzato) , si ottiene uno stato $|\phi'\rangle$ normalizzato dividendo $|\phi\rangle$ per la sua norma:

$$|\phi'\rangle \equiv \frac{|\phi\rangle}{\sqrt{\langle\phi|\phi\rangle}} \implies \langle\phi'|\phi'\rangle = 1 \quad (5.6)$$

Nota 3 : uno stato fisico $|\psi\rangle$ è sempre definito a meno di un fattore di fase $e^{i\theta}$. E' facile verificare che tutte le probabilità calcolate con $|\psi\rangle$ coincidono con quelle calcolate con $e^{i\theta}|\psi\rangle$.

5.2 Approfondimento 2: autovalori degeneri

Allo stesso autovalore a_i possono in genere corrispondere più autovettori $|a_i, \alpha\rangle$ indipendenti, numerati da un indice addizionale $\alpha = 1, \dots, g$, dove g è il numero di autovettori indipendenti (detto *degenerazione* dell' autovalore a_i). Questi autovettori generano un sottospazio vettoriale. Infatti loro combinazioni lineari sono ancora autovettori con lo stesso autovalore a_i . Si possono allora trovare g autovettori $|a_i, \alpha\rangle$ *ortonormali* corrispondenti all' autovalore a_i , e in seguito gli $|a_i, \alpha\rangle$ saranno sempre considerati ortonormali.

1) Quale di questi autovettori va usato nella Regola 3 ? La risposta è : tutti gli autovettori $|a_i, \alpha\rangle$ corrispondenti a a_i entrano in gioco in modo democratico:

$$p(a_i) = |\langle\psi|a_i, 1\rangle|^2 + |\langle\psi|a_i, 2\rangle|^2 + \dots + |\langle\psi|a_i, g\rangle|^2 \quad (5.7)$$

2) In quale stato collassa $|\psi\rangle$ dopo una misura in cui si ottiene l' autovalore degenero a_i ? Anche qui la risposta coinvolge tutti gli autovettori $|a_i, \alpha\rangle$:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \langle a_i, 1|\psi\rangle|a_i, 1\rangle + \langle a_i, 2|\psi\rangle|a_i, 2\rangle + \dots + \langle a_i, g|\psi\rangle|a_i, g\rangle \quad (5.8)$$

Questa operazione corrisponde a proiettare il vettore $|\psi\rangle$ sul sottospazio vettoriale sotteso dagli autovettori $|a_i, \alpha\rangle$. Il vettore risultante non risulta però normalizzato, e quindi *va diviso per la sua norma*.

Esempio : Se il sistema si trova nello stato

$$|\psi\rangle = c_1|a_1\rangle + c_{2,1}|a_2, 1\rangle + c_{2,2}|a_2, 2\rangle \quad (5.9)$$

dove a_1 è autovalore nondegenere mentre a_2 è degenero, per la regola di sopra le probabilità di ottenere a_i come risultati di una misura dell' osservabile A sono:

$$p(a_1) = |c_1|^2, \quad p(a_2) = |c_{2,1}|^2 + |c_{2,2}|^2 \quad (5.10)$$

Se si ottiene a_1 , lo stato fisico collassa in $|a_1\rangle$, se si ottiene a_2 , lo stato diventa invece:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \frac{c_{2,1}|a_2, 1\rangle + c_{2,2}|a_2, 2\rangle}{\sqrt{|c_{2,1}|^2 + |c_{2,2}|^2}} \quad (5.11)$$

cioè $|\psi\rangle$ viene proiettato sul sottospazio generato da $|a_2, 1\rangle$ e $|a_2, 2\rangle$. Il denominatore serve a normalizzare lo stato.

Nota: Il proiettore sul sottospazio generato dai vettori ortonormali $|a_i, \alpha\rangle$ è dato da:

$$P_{a_i} = \sum_{\alpha} |a_i, \alpha\rangle\langle a_i, \alpha| \quad (5.12)$$

Usando questo proiettore, si può esprimere la probabilità $p(a_i)$ e il collasso dello stato dopo la misura:

$$p(a_i) = \langle\psi|P_{a_i}|\psi\rangle, \quad |\psi\rangle \longrightarrow \frac{P_{a_i}|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_{a_i}|\psi\rangle}} \quad (5.13)$$

Questa è la formula generale per la Regola 3, che vale in tutti i casi (autovalore nondegenere o degenere).

5.3 Approfondimento 3: autovalori continui

Non tutte le osservabili hanno autovalori a_i numerati da un indice discreto. Per esempio (vedi la prossima sezione) le osservabili di posizione e quantità di moto hanno autovalori continui. Per un' osservabile A con autovalori continui, la Regola 3, ii) si modifica come segue:

In un sistema fisico che si trovi dello stato $|\psi\rangle$, la probabilità di ottenere, in una misura di A , un autovalore compreso nell' intervallo $[a, a + da]$ è data da

$$p(a)da = |\langle a|\psi\rangle|^2 da \quad (5.14)$$

dove $|a\rangle$ è l' autovettore corrispondente all' autovalore a . La quantità $p(a)$ è chiamata *densità di probabilità*. La somma di tutte le probabilità diventa un integrale che deve essere uguale a 1:

$$\int p(a)da = \int |\langle a|\psi\rangle|^2 da = 1 \quad (5.15)$$

5.4 Approfondimento 4: osservabili commutanti

Se due osservabili A, B commutano ($[A, B] = 0$), si dimostra che *esiste una base di autovettori comuni* a A e B ,

$$A|a_i, b_j\rangle = a_i|a_i, b_j\rangle \quad (5.16)$$

$$B|a_i, b_j\rangle = b_j|a_i, b_j\rangle \quad (5.17)$$

corrispondenti agli autovalori a_i e b_j di A e B rispettivamente. In questo caso gli operatori A e B si dicono anche *simultaneamente diagonalizzabili*: infatti sulla base $\{|a_i, b_j\rangle\}$ sono entrambi diagonali. E' chiaro che vale anche il viceversa: se sono simultaneamente diagonalizzabili, A e B commutano, poichè matrici diagonali commutano.

6 Posizione e quantità di moto: gli operatori osservabili X e P_x

Alle due grandezze fisiche, posizione e quantità di moto (lungo l' asse x), corrispondono in meccanica quantistica i due operatori osservabili X e P_x , così definiti:

$$X|\psi\rangle \equiv |x\psi\rangle, \quad P_x|\psi\rangle \equiv -i\hbar\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\rangle \quad (6.1)$$

cioè X trasforma il vettore corrispondente alla funzione d' onda $\psi(x, y, z, t)$ nel vettore corrispondente alla funzione d' onda $x \psi(x, y, z, t)$, mentre P_x lo trasforma nel vettore corrispondente alla derivata rispetto a x della funzione d' onda.

Esercizio : dimostrare che

$$[X, P_x] = i\hbar I \quad (6.2)$$

Esercizio : dimostrare che X è un operatore hermitiano (usare (3.30)).

Esercizio : dimostrare che P_x è un operatore hermitiano se le funzioni d' onda si annullano per $x = \pm\infty$.

Esercizio : XP_x è un operatore hermitiano ?

6.1 Autovalori e autovettori di X

X essendo hermitiano, ha autovalori a reali. Dimostriamo ora che tutti i numeri reali a sono autovalori di X , e che gli autovettori corrispondono a particolari funzioni d' onda $\delta_a(x)$ chiamate *delta di Dirac* (più precisamente non sono funzioni, ma *distribuzioni*, cioè limiti di successioni di funzioni). Scriviamo l' equazione agli autovalori per X :

$$X|\delta_a\rangle = a|\delta_a\rangle \quad (6.3)$$

Usando la definizione di X , si ha $X|\delta_a\rangle = |x\delta_a\rangle$, e quindi per un dato autovalore a si deve avere

$$|x\delta_a\rangle = a|\delta_a\rangle \implies x\delta_a(x) = a\delta_a(x) \quad (6.4)$$

ovvero

$$(x - a)\delta_a(x) = 0 \quad (6.5)$$

Ne consegue che la “funzione” $\delta_a(x)$ deve essere nulla per $x \neq a$. Per $x = a$ non può essere nulla, altrimenti sarebbe nulla ovunque e corrisponderebbe al vettore nullo, autovettore banale di qualunque operatore lineare. D' altra parte $\delta_a(x)$ deve descrivere una particella localizzata in a , poichè corrisponde all' autovettore $|\delta_a\rangle$ dell' operatore di posizione X , e quindi è ragionevole che sia nulla per $x \neq a$ e non nulla per $x = a$.

Se la particella si trova nello stato $|\psi\rangle$, la Regola 3 (per autovalori continui) ci dice che la densità di probabilità $p(a)$ di trovarsi nell' intorno del punto a è:

$$p(a) = |\langle\delta_a|\psi\rangle|^2 \quad (6.6)$$

Sappiamo che la stessa densità di probabilità è data anche dal modulo quadro della funzione d' onda $\psi(x)$ associata a $|\psi\rangle$ nel punto $x = a$, e allora si deve avere (a meno di un inessenziale fattore di fase, cf. Nota 3 della Sez. 5.1)

$$\psi(a) = \langle\delta_a|\psi\rangle \quad (6.7)$$

Il prodotto scalare essendo definito tramite l' integrale (3.7), si ha allora

$$\psi(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_a(x)\psi(x)dx \quad (6.8)$$

Questa formula può anche essere considerata la definizione della “funzione” $\delta_a(x)$. Usandola è facile verificare che la successione di funzioni $\delta_{a,\epsilon}(x)$, che valgono $1/\epsilon$ nell’ intervallo $[a - \epsilon/2, a + \epsilon/2]$ e 0 altrove, per ϵ sempre più piccoli converge alla $\delta_a(x)$.

In conclusione: ogni numero reale a è autovalore di X , e l’ autovettore corrispondente $|\delta_a\rangle$ è rappresentato dalla “funzione” d’ onda (delta di Dirac) $\delta_a(x)$.

Nota 1 : i valori che prende la funzione d’ onda $\psi(x)$ per ogni x possono interpretarsi come le infinite componenti del vettore $|\psi\rangle$ sulla base $|\delta_a\rangle$, vedi l’ equazione (6.7).

Nota 2 : se usiamo la notazione $|x\rangle$ per indicare l’ autovettore di X corrispondente al suo autovalore x , si ha $X|x\rangle = x|x\rangle$ e

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \quad (6.9)$$

cf. (6.7).

6.2 Autovalori e autovettori di P_x

Lo stesso esercizio può ripetersi per l’ operatore P_x corrispondente alla quantità di moto. Dimostriamo che tutti i numeri reali p sono autovalori di P_x , e che gli autovettori corrispondono a funzioni d’onda $e^{i\hbar px}$. L’ equazione agli autovalori:

$$P_x|\phi_p\rangle = p|\phi_p\rangle \quad (6.10)$$

diventa, per l’ autofunzione $\phi_p(x)$:

$$-i\hbar \frac{\partial \phi_p(x)}{\partial x} = p \phi_p(x) \quad (6.11)$$

la cui soluzione è

$$\phi_p(x) = C e^{i\hbar px} \quad (6.12)$$

con C costante. Questa autofunzione di P_x descrive una particella con quantità di moto p , nel senso che una misura di P_x dà sicuramente come risultato p (Regola 3).

Nota: p deve essere reale, altrimenti $e^{i\hbar px}$ diverge per $x \rightarrow \pm\infty$.

7 Regole di quantizzazione

Quando la grandezza fisica quantistica ha un corrispettivo classico (funzione di x e p_x), esiste una semplice regola per costruirla: basta sostituire l’ operatore X alla variabile x , e l’ operatore P_x alla variabile p_x . Per esempio l’ operatore hamiltoniano

H per l'oscillatore armonico quantistico si ricava dalla funzione hamiltoniana (l'energia in funzione di x e di p_x) dell'oscillatore armonico classico:

$$H(x, p) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \longrightarrow H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (7.1)$$

Nota : bisogna sempre verificare che l'operatore ottenuto sia hermitiano.

Esercizio : trovare l'osservabile corrispondente alla funzione classica xp_x .

8 Generalizzazione a più gradi di libertà

In genere la posizione di un sistema fisico è specificata da più variabili (le coordinate del sistema) x, y, z, \dots . Per esempio la posizione di una particella nello spazio 3-dimensionale è specificata da tre coordinate, la posizione di un sistema di due particelle è specificata da sei coordinate (le coordinate della prima e della seconda particella) etc. Le coordinate x, y, z, \dots diventano operatori osservabili X, Y, Z, \dots in meccanica quantistica, definiti in analogia con l'operatore di posizione X , e così anche per i corrispondenti operatori di quantità di moto P_x, P_y, P_z, \dots :

$$X|\psi\rangle \equiv |x\psi\rangle, \quad P_x|\psi\rangle \equiv -i\hbar\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\rangle \quad (8.1)$$

$$Y|\psi\rangle \equiv |y\psi\rangle, \quad P_y|\psi\rangle \equiv -i\hbar\left|\frac{\partial\psi}{\partial y}\right\rangle \quad (8.2)$$

$$Z|\psi\rangle \equiv |z\psi\rangle, \quad P_z|\psi\rangle \equiv -i\hbar\left|\frac{\partial\psi}{\partial z}\right\rangle \quad (8.3)$$

...

dove ora al vettore di stato $|\psi\rangle$ corrisponde una funzione d'onda $\psi(x, y, z, \dots)$. Dalle definizioni di sopra segue immediatamente che X, Y, Z, \dots commutano tra di loro (perchè è commutativa la moltiplicazione usuale) e che P_x, P_y, P_z, \dots commutano tra di loro (perchè commutano le derivate parziali), mentre Y e P_y oppure Z e P_z hanno regole di commutazioni analoghe a quella di X con P_x . In sintesi, se indichiamo con R_i gli operatori X, Y, Z, \dots e con P_i gli operatori P_x, P_y, P_z, \dots si ha:

$$[R_i, R_j] = 0, \quad [P_i, P_j] = 0, \quad [R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (8.4)$$

Nota : da quanto discusso sopra, l'azione della osservabile quantità di moto \vec{P} sulle funzioni d'onda è data dal gradiente $-i\hbar\nabla$:

$$\vec{P}|\psi\rangle = -i\hbar|\nabla\psi\rangle \quad (8.5)$$

Essendo operatori commutanti, X, Y, Z, \dots hanno autovettori comuni. Come è semplice verificare, questi autovettori sono dati da $|\delta_{a,b,c}\rangle$, con funzioni d'onda corrispondenti

$$\delta_{a,b,c}(x, y, z) = \delta_a(x)\delta_b(y)\delta_c(z) \quad (8.6)$$

dove a, b, c sono gli autovalori rispettivamente di X, Y, Z .

Lo stesso ragionamento può farsi per le osservabili commutanti quantità di moto P_x, P_y, P_z . Ai loro autovettori comuni $|\phi_{p_x, p_y, p_z}\rangle$ corrispondono le funzioni d' onda:

$$\phi_{p_x, p_y, p_z} = C e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} = C e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \quad (8.7)$$

con p_x, p_y, p_z rispettivamente autovalori di P_x, P_y, P_z .

Esercizio : dimostrare per induzione le seguenti formule:

$$[X, P_x^n] = i\hbar n P_x^{n-1} \quad (8.8)$$

$$[P_x, X^n] = -i\hbar n X^{n-1} \quad (8.9)$$

E' utile ricordare l' identità $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$, di immediata verifica.

Esercizio : usando le formule di sopra, dimostrare che

$$[\vec{R}, \vec{P}^2] = 2i\hbar \vec{P} \quad (8.10)$$

$$[\vec{P}, V(\vec{R})] = -i\hbar \nabla V(\vec{R}) \quad (8.11)$$

dove si suppone che il potenziale V sia espandibile in serie di potenze delle coordinate \vec{r} .

9 Valori medi e indeterminazione

9.1 Valor medio di una variabile statistica

Supponiamo che A sia una variabile statistica, che può prendere valori a_i con probabilità $p(a_i)$. Questo significa che se A viene "estratta" N volte, prenderà il valore a_i un numero di volte N_i , con N_i/N tanto più vicino alla probabilità $p(a_i)$ quanto più N è grande.

La media dei valori di A in N "estrazioni" è data da

$$\frac{N_1 a_1 + N_2 a_2 + \dots}{N} \quad (9.1)$$

e per N molto grande diventa

$$\langle A \rangle = p(a_1) a_1 + p(a_2) a_2 + \dots = \sum_i p(a_i) a_i \quad (9.2)$$

Questa quantità, indicata con $\langle A \rangle$, viene detta *valor medio* di A .

9.2 Valore medio di un' osservabile in uno stato $|\psi\rangle$

Il valore medio dell' osservabile A nello stato $|\psi\rangle$ viene definito come in (9.2). Tramite la Regola 3 della MQ questa espressione prende la forma:

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \sum_i p(a_i) a_i = \sum_i |\langle a_i | \psi \rangle|^2 a_i = \sum_i \langle \psi | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle a_i \\ &= \sum_i \langle \psi | A | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle = \langle \psi | A \sum_i | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle\end{aligned}\quad (9.3)$$

ricordando che $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$. Nell' ultima uguaglianza si è usata la completezza $\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = I$.

Si ha quindi

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (9.4)$$

Questa formula è molto utile: permette di calcolare il valore medio di una osservabile A in uno stato $|\psi\rangle$ senza dover necessariamente conoscere il suo spettro $\{a_i\}$.

9.3 Scarto quadratico medio: indeterminazione

Lo scarto quadratico medio ΔA di una variabile statistica A è definito come:

$$(\Delta A)^2 \equiv \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \quad (9.5)$$

La stessa definizione vale per un' osservabile A : ΔA indica allora quanto si disperdono intorno alla media $\langle A \rangle$ i risultati di misure dell' osservabile A . Per questo motivo ΔA viene anche chiamato *indeterminazione* dell' osservabile A nello stato $|\psi\rangle$. Maggiore è ΔA , maggiore sarà l' incertezza sui risultati di una misura di A .

Nota: sviluppando il quadrato nel secondo membro della (9.5) si trova:

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (9.6)$$

→ lo scarto quadratico medio è dato dalla media del quadrato meno il quadrato della media.

9.4 Principio di indeterminazione

Se consideriamo due osservabili A e B , un importante teorema pone un limite inferiore al prodotto delle loro indeterminazioni. Definiamo il vettore

$$(A + i\lambda B)|\phi\rangle \quad (9.7)$$

dove λ è un numero reale, e $|\phi\rangle$ un arbitrario vettore di stato normalizzato. Per la quarta proprietà del prodotto scalare, la norma di questo vettore deve essere ≥ 0 :

$$((A + i\lambda B)|\phi\rangle, (A + i\lambda B)|\phi\rangle) = \langle A^2 \rangle + \lambda^2 \langle B^2 \rangle + \lambda \langle C \rangle \geq 0 \quad (9.8)$$

dove si è posto $C \equiv i[A, B]$, e quindi C è hermitiano. Perchè valga la diseguaglianza di sopra, il discriminante del polinomio quadratico in λ deve essere ≤ 0 :

$$\langle C \rangle^2 - 4\langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \leq 0 \quad (9.9)$$

Ponendo $A' = A - \langle A \rangle$, $B' = B - \langle B \rangle$, $C' = i[A', B'] = i[A, B] = C$, il ragionamento di sopra può essere ripetuto e si arriva a:

$$\langle C \rangle^2 - 4\langle A'^2 \rangle \langle B'^2 \rangle = \langle C \rangle^2 - 4(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \leq 0 \quad (9.10)$$

il che implica

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (9.11)$$

ricordando che $|i| = 1$. Se A e B sono rispettivamente l'operatore di posizione X e l'operatore quantità di moto P , si ha la *relazione di indeterminazione di Heisenberg*:

$$\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2} \quad (9.12)$$

9.5 Evoluzione nel tempo dei valori medi

Con la formula (9.4) si può calcolare la derivata rispetto al tempo del valor medio di un'osservabile:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \frac{d}{dt} (\langle \psi |, A | \psi \rangle) = \\ &= \left(\frac{d}{dt} \langle \psi |, A | \psi \rangle \right) + (\langle \psi |, \left(\frac{\partial}{\partial t} A \right) | \psi \rangle) + (\langle \psi |, A \frac{d}{dt} | \psi \rangle) \end{aligned}$$

e usando l'equazione di Schrödinger per esprimere $\frac{d}{dt} | \psi \rangle$ si trova

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \langle \frac{\partial}{\partial t} A \rangle \quad (9.13)$$

Questa equazione viene anche chiamata *teorema di Ehrenfest*.

10 Sistemi conservativi

Si dicono conservativi i sistemi fisici per i quali l'hamiltoniano non dipende esplicitamente dal tempo. Per esempio l'oscillatore armonico è un sistema conservativo, mentre una particella in un potenziale $V(x) = \frac{1}{2}m\omega x^2 + c \sin(\omega t)$ non è un sistema conservativo.

10.1 Soluzioni dell' equazione di Schrödinger

Per i sistemi conservativi l' equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (10.1)$$

si risolve in due passi:

Primo passo: si trovano autovalori e autovettori dell' osservabile H . Poichè H non dipende esplicitamente dal tempo, non dipendono da t nemmeno i suoi autovalori e autovettori. Supponiamo di aver risolto l' equazione agli autovalori:

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (10.2)$$

e quindi di conoscere lo spettro $\{E_n\}$ di H con i relativi autovettori $|\phi_n\rangle$, che formano una base (indipendente da t) per lo spazio degli stati fisici. Il secondo passo ci permette di determinare $|\psi(t)\rangle$ conoscendo $|\psi(0)\rangle$.

Secondo passo: si espande $|\psi(t)\rangle$ sulla base $\{|\phi_n\rangle\}$,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle \quad (10.3)$$

dove possono dipendere da t solo i coefficienti dell' espansione. Supponiamo ora di conoscere lo stato a tempo $t = 0$, cioè di conoscere $|\psi(0)\rangle$. Questo vuol dire conoscere tutte le sue componenti sulla base $\{|\phi_n\rangle\}$, che sono date dai coefficienti $c_n(0)$. Sostituendo l' espansione (10.3) nell' equazione di Schrödinger si trova:

$$\sum_n i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} |\phi_n\rangle = \sum_n c_n(t) E_n |\phi_n\rangle \quad (10.4)$$

dove nel secondo membro si è usata la linearità di H e l' equazione agli autovalori (10.2). Portando tutto a primo membro:

$$\sum_n (i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} - c_n(t) E_n) |\phi_n\rangle = 0 \quad (10.5)$$

Il membro di sinistra è un vettore che deve essere uguale al vettore nullo. Questo implica che tutte le sue componenti devono essere nulle:

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} - c_n(t) E_n = 0 \quad (10.6)$$

Risolvendo queste equazioni differenziali elementari si trovano le componenti $c_n(t)$ del vettore $|\psi(t)\rangle$:

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (10.7)$$

Pertanto la soluzione dell' equazione di Schrödinger è:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\phi_n\rangle \quad (10.8)$$

dove E_n e $|\phi_n\rangle$ sono noti perchè determinati nel primo passo, e $c_n(0)$ sono le componenti dello stato iniziale $|\psi(0)\rangle$.

Nota : se lo stato iniziale $|\psi(0)\rangle$ è un autovettore $|\phi_n\rangle$ di H , dalla discussione di sopra segue che evolve nel tempo con un fattore di fase:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\phi_n\rangle \quad (10.9)$$

Poichè i fattori di fase non cambiano lo stato fisico, questo stato non cambia nel tempo, e per tale ragione gli autostati di H vengono anche detti *stati stazionari*.

10.2 Costanti del moto

Si definiscono *costanti del moto* osservabili A che soddisfano le condizioni:

$$[A, H] = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t}A = 0 \quad (10.10)$$

Si deduce che una costante del moto A ha le seguenti proprietà:

- i) il suo valor medio rimane costante nel tempo
- ii) i suoi autovalori sono costanti nel tempo, i suoi autovettori sono stati stazionari
- ii) la probabilità $p(a_i)$ di ottenere come risultato di una misura un autovalore a_i non cambia nel tempo

Esercizio : dimostrarlo.

11 Limite classico della meccanica quantistica

Consideriamo per semplicità una particella in un potenziale $V(\vec{r})$. L' osservabile hamiltoniano è:

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}) \quad (11.1)$$

ottenuto dall' hamiltoniana classica sostituendo gli operatori \vec{R} e \vec{P} a \vec{r} e \vec{p} . Per il teorema di Ehrenfest, i valori medi di \vec{R} e \vec{P} soddisfano alle equazioni:

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{R}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{R}, H]\rangle = \frac{1}{m}\langle\vec{P}\rangle \quad (11.2)$$

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{P}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{P}, H]\rangle = -\langle\nabla V(\vec{R})\rangle \quad (11.3)$$

dove $\nabla V(\vec{R})$ si ottiene dall' espressione classica di $\nabla V(\vec{r})$ con la sostituzione $\vec{r} \rightarrow \vec{R}$. Usando la prima equazione per esprimere $\langle\vec{P}\rangle$ come $m\frac{d}{dt}\langle\vec{R}\rangle$, e ricordando che $\vec{F}(\vec{r}) = -\nabla V(\vec{r})$ (forza = - gradiente del potenziale) la seconda equazione diventa:

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\vec{R}\rangle = \langle\vec{F}(\vec{R})\rangle \quad (11.4)$$

Che traiettoria segue il valor medio della posizione $\langle \vec{R} \rangle$ della particella ? Quanto si avvicina alla traiettoria classica ?

L' equazione di sopra ricorda molto da vicino la seconda legge della dinamica di Newton $\vec{F} = m\vec{a}$. Il valor medio $\langle \vec{R} \rangle(t)$ seguirebbe esattamente una traiettoria classica se l' equazione fosse

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{R} \rangle = \vec{F}(\langle \vec{R} \rangle) \quad (11.5)$$

cioè se

$$\langle \vec{F}(\vec{R}) \rangle = \vec{F}(\langle \vec{R} \rangle) \quad (11.6)$$

In genere il valor medio di una funzione di una variabile statistica non coincide con la funzione del valor medio della variabile. Per esempio $\langle X^2 \rangle \neq \langle X \rangle^2$. Ci sono tuttavia situazioni, chiamate *quasi classiche*, in cui la differenza tra queste due quantità diventa trascurabile. Questo succede per funzioni d' onda $\psi(\vec{r})$ sufficientemente localizzate intorno al valor medio $\langle \vec{R} \rangle$. Si ha allora:

$$\langle \vec{F}(\vec{R}) \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \vec{F}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r} \approx \vec{F}(\langle \vec{R} \rangle) \int \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r} = \vec{F}(\langle \vec{R} \rangle) \quad (11.7)$$

dove si può portar fuori dall' integrale il termine della forza valutato in $\langle \vec{R} \rangle$ se \vec{F} non varia apprezzabilmente nella regione di spazio in cui la funzione d' onda è diversa da zero. In queste condizioni il moto del valor medio della posizione della particella coincide con quello della meccanica classica.

Nel limite macroscopico (limite classico) questa condizione si verifica. Dal teorema di Ehrenfest si evince quindi che le equazioni della meccanica classica sono *conseguenza* dell' equazione di Schrödinger in condizioni limite generalmente soddisfatte dai sistemi classici.

Nota : consideriamo l' esempio di un granello di polvere, di massa $m \approx 10^{-15}$ kg e velocità $v \approx 10^{-3}$ m/s . Essendo un oggetto macroscopico, la sua funzione d' onda è non nulla solo in una regione dell' ordine delle dimensioni del granello, circa 1 micron ($10^{-6}m$), abbastanza piccolo per soddisfare alle condizioni discusse sopra. Notiamo che ΔX (se prendiamo per semplicità il caso unidimensionale) dà una stima della larghezza della regione in cui la funzione d' onda è non nulla. La sua lunghezza d' onda di De Broglie, $\lambda = \frac{h}{p}$ (dove p è la quantità di moto del granello) è dell' ordine di $10^{-16}m$. Dalla relazione di indeterminazione $\Delta X \Delta P \geq \frac{h}{2}$ si trova che

$$\frac{\Delta P}{P} = \frac{\Delta P}{h} \lambda \geq \frac{\lambda}{2\Delta X} \quad (11.8)$$

e data l' estrema piccolezza di $\lambda/\Delta X \approx 10^{-10}$, l' incertezza sulla quantità di moto ΔP è anch' essa molto piccola rispetto al valore di P .

In conclusione: per oggetti classici ΔX è piccolo rispetto alla distanza in cui varia apprezzabilmente la forza, ed è piccolo anche il rapporto $\Delta P/P$. Questo invece non accade per oggetti quantistici (atomi, elettroni, etc.).

12 Oscillatore armonico

Un gran numero di sistemi fisici, anche microscopici, manifesta oscillazioni in buona approssimazione di tipo armonico: ogni particella sottoposta a una forza di richiamo verso una posizione di equilibrio oscilla in prima approssimazione (cioè per piccole oscillazioni) in modo armonico. Quindi nello studio della materia, dove ad esempio le molecole sono legate a posizioni di equilibrio tramite le forze intermolecolari, è essenziale la trattazione quantistica dell'oscillatore armonico. Iniziamo dalla sua trattazione in meccanica classica.

12.1 Oscillatore armonico classico

L'energia potenziale V di una particella di massa m legata a una molla è data da

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (12.1)$$

con $k > 0$ costante che dipende dalle caratteristiche di rigidità della molla, e x scostamento dalla posizione di equilibrio ($x = 0$) della molla. La forza agente sulla particella è quindi:

$$F = -\frac{dV}{dx} = -kx \quad (12.2)$$

dove il segno meno significa che F si oppone allo spostamento dalla posizione di equilibrio. Dalla legge di Newton questa forza è pari alla massa per l'accelerazione della particella:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx \quad (12.3)$$

i.e. un'equazione differenziale per $x(t)$ che ha per soluzione

$$x(t) = x_M \cos(\omega t - \varphi), \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \text{frequenza angolare di oscillazione} \quad (12.4)$$

come si può verificare semplicemente sostituendo $x(t)$ nell'equazione differenziale. L'elongazione massima x_M e la fase iniziale φ dipendono dalle condizioni iniziali $x(0), v(0)$ (le due costanti di integrazione).

L'energia E della particella

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 \quad (12.5)$$

si conserva nel tempo. In particolare quando la particella si trova alla estremità dell'oscillazione la sua velocità è nulla, e la sua energia è quindi

$$E = \frac{1}{2}kx_M^2 \quad (12.6)$$

da cui si ricava l'elongazione massima x_m come funzione dell'energia:

$$x_M = \sqrt{\frac{2E}{k}} = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad (12.7)$$

Nota: in meccanica classica l' energia di un oscillatore può prendere qualsiasi valore $E \geq 0$. ($E = 0$ corrisponde a particella ferma nella posizione di equilibrio).

12.2 Oscillatore armonico quantistico

Come descritto nella Sezione 10, si parte dall' operatore Hamiltoniano per l' oscillatore armonico:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (12.8)$$

espresso in termini degli operatori hermitiani di posizione X e quantità di moto P . Il passo 1 consiste nel trovare le soluzioni all' equazione agli autovalori

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle. \quad (12.9)$$

In termini delle funzioni d' onda $\phi(x)$ questa equazione diventa

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \phi(x) = E \phi(x) \quad (12.10)$$

che si ottiene semplicemente dall' equazione tra vettori (12.9) proiettando sulla base degli autovettori $|x\rangle$ dell' operatore di posizione X :

$$\langle x|H|\phi\rangle = E \langle x|\phi\rangle \quad (12.11)$$

ricordando come agiscono X e P , vedi (6.1), e la definizione di funzione d' onda $\phi(x) = \langle x|\phi\rangle$. A questo punto possiamo risolvere l' equazione differenziale (12.10), e trovare così gli autovalori e gli autovettori di H . Possiamo anche scegliere una strada *algebrica* per risolvere (12.9), ed è questa strada che esponiamo sinteticamente nel seguito.

12.3 Notazioni

$$\hat{X} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X, \quad \hat{P} \equiv \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P \Rightarrow [\hat{X}, \hat{P}] = iI \quad (12.12)$$

Si introducono poi gli operatori *non* hermitiani:

$$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}), \quad a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \quad (12.13)$$

chiamati rispettivamente operatore di *creazione* e di *distruzione*, che sono uno l' aggiunto dell' altro. Usando le relazioni di commutazione tra \hat{X} e \hat{P} , si verifica facilmente che

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (12.14)$$

e inoltre

$$H = \left(N + \frac{I}{2}\right) \hbar\omega, \quad N \equiv a^\dagger a \quad (12.15)$$

L'operatore N è hermitiano, ed è chiamato operatore *numero*.
 Se ν e $|\phi_\nu\rangle$ sono rispettivamente gli autovalori e autovettori di N :

$$N|\phi_\nu\rangle = \nu|\phi_\nu\rangle \quad (12.16)$$

automaticamente abbiamo trovato anche autovalori e autovettori di H . Infatti si ha

$$H|\phi_\nu\rangle = (N + \frac{1}{2}) \hbar\omega|\phi_\nu\rangle = (\nu + \frac{1}{2}) \hbar\omega|\phi_\nu\rangle \quad (12.17)$$

dal che risulta che $|\phi_\nu\rangle$ è autovettore di H con autovalore $\nu + \frac{1}{2}$.

Esercizio: verificare anche le seguenti commutazioni:

$$[N, a] = -a, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (12.18)$$

12.4 Autovalori e autovettori di N

Troviamo ora i possibili ν , autovalori di N .

Osservazione 1: gli autovalori ν sono ≥ 0 . Prendiamo infatti un qualunque autovettore $|\phi_\nu\rangle$. Applicando l'operatore a si ottiene un vettore, la cui norma (come per tutti i vettori), deve essere ≥ 0 :

$$0 \leq \|a|\phi_\nu\rangle\|^2 = \langle\phi_\nu|a^\dagger a|\phi_\nu\rangle = \langle\phi_\nu|N|\phi_\nu\rangle = \nu\langle\phi_\nu|\phi_\nu\rangle = \nu \quad (12.19)$$

da cui si deduce $\nu \geq 0$.

Osservazione 2: se $|\phi_\nu\rangle$ è un autovettore non nullo di N con autovalore ν , si ha:

- i) $\nu = 0 \Leftrightarrow a|\phi_\nu\rangle = 0$
- ii) se $\nu > 0$, $a|\phi_\nu\rangle$ è un autovettore di N non nullo con autovalore $\nu - 1$.

La i) si dimostra immediatamente usando l'Osservazione 1. Per la ii), si nota che se $\nu > 0$, $a|\phi_\nu\rangle \neq 0$ (perchè la sua norma è > 0). Si ha allora:

$$Na|\phi_\nu\rangle = aN|\phi_\nu\rangle - a|\phi_\nu\rangle = a\nu|\phi_\nu\rangle - a|\phi_\nu\rangle = (\nu - 1)a|\phi_\nu\rangle \quad (12.20)$$

dove la prima uguaglianza deriva dalla regola di commutazione di N con a in (12.18).

- Osservazione 3:** se $|\phi_\nu\rangle$ è un autovettore non nullo di N con autovalore ν ,
- i) $a^\dagger|\phi_\nu\rangle$ è sempre diverso dal vettore nullo.
 - ii) $a^\dagger|\phi_\nu\rangle$ è un autovettore di N non nullo con autovalore $\nu + 1$.

Per dimostrare la i) basta calcolare $\|a^\dagger|\phi_\nu\rangle\|^2 = \langle\phi_\nu|aa^\dagger|\phi_\nu\rangle = \langle\phi_\nu|N + 1|\phi_\nu\rangle = (\nu + 1)\langle\phi_\nu|\phi_\nu\rangle$ e poichè $\nu \geq 0$ per l'Osservazione 1, si ha $\|a^\dagger|\phi_\nu\rangle\|^2 > 0 \Rightarrow a^\dagger|\phi_\nu\rangle \neq 0$. La ii) si dimostra in modo analogo alla ii) dell'Osservazione 2, usando la regola di commutazione di N con a^\dagger in (12.18).

Con queste Osservazioni si dimostra che:

lo spettro di N include tutti gli interi ≥ 0

Consideriamo infatti un autovettore $|\phi_\nu\rangle$ non nullo di N . Agendo su di esso ripetutamente con l'operatore di distruzione a , per l'Osservazione 2 si ottengono autovettori con autovalori $\nu - 1, \nu - 2, \dots$. Se ν fosse diverso da un numero intero, si arriverebbe a un autovettore non nullo con autovalore compreso tra 1 e 0 (estremi esclusi). Ma una successiva applicazione di a produrrebbe un autovettore con autovalore negativo, e questo contraddice l'Osservazione 1. Quindi ν deve essere intero, e l'applicazione ripetuta di a su $|\phi_\nu\rangle$ termina con un autovettore con autovalore 0. Per l'Osservazione 2 una successiva applicazione di a produce il vettore nullo, senza contraddire l'Osservazione 1.

Agendo invece ripetutamente con l'operatore di creazione a^\dagger sull'autovettore con autovalore 0 produce una serie infinita di autovettori con autovalori $1, 2, 3, \dots$ e questo dimostra che lo spettro di N include *tutti* i numeri interi $n \geq 0$. Denoteremo quindi con $|\phi_n\rangle$ l'autovettore di N corrispondente all'autovalore intero n . \square

12.5 Autovalori e autovettori di H

Dall'eq. (12.17) si ricavano gli autovalori di H :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (12.21)$$

a cui corrispondono gli autovettori $|\phi_n\rangle$, che sono comuni a H e a N . L'autovettore $|\phi_0\rangle$ rappresenta lo stato di energia minima

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (12.22)$$

Qui si vedono fondamentali differenze con l'oscillatore classico:

- l'energia è **quantizzata** in "pacchetti" $\hbar\omega$
- l'energia minima è maggiore di 0

Gli operatori a e a^\dagger rispettivamente distruggono e creano un **quanto di energia** $\hbar\omega$, e per questo si chiamano operatori di distruzione e di creazione.

Vediamo ora come si trovano gli autovettori $|\phi_n\rangle$. Partiamo dall'autovettore $|\phi_0\rangle$ corrispondente all'energia minima E_0 , che si chiama anche **stato fondamentale**. Sappiamo che (Osservazione 2):

$$a|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P})|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}}P\right)|\phi_0\rangle = 0 \quad (12.23)$$

Ricordando come agiscono gli operatori X e P su un ket, si trova un'equazione per la funzione d'onda $\phi_0(x)$ corrispondente al ket $|\phi_0\rangle$:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} (-i\hbar) \frac{d}{dx} \right) \phi_0(x) = 0 \Rightarrow \left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \phi_0(x) = 0 \quad (12.24)$$

la cui soluzione è una funzione gaussiana:

$$\phi_0(x) = c \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right), \quad c = \text{costante di normalizzazione} \quad (12.25)$$

Abbiamo così trovato la funzione d'onda dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico quantistico. Questa è l'unica soluzione dell'equazione (12.24), e pertanto l'autovalore E_0 è non degenere.

Esercizio: dimostrare che se

$$c = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \quad (12.26)$$

si ha :

$$\langle \phi_0 | \phi_0 \rangle = \int |\phi_0(x)|^2 dx = 1 \quad (12.27)$$

Esercizio: dimostrare che tutti gli autovalori E_n sono *non degeneri*. Suggerimento: per induzione, dimostrando che se E_n è non degenere, allora anche E_{n+1} è non degenere. Si usa il fatto che $a|\phi_{n+1}\rangle$ è autovettore di N con autovalore n (Osservazione 2).

Osservazione 4: se $|\phi_{n-1}\rangle$ è normalizzato,

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\phi_{n-1}\rangle \quad (12.28)$$

è normalizzato. Infatti

$$\langle \phi_n | \phi_n \rangle = \frac{1}{n} \langle \phi_{n-1} | a a^\dagger | \phi_{n-1} \rangle = \frac{1}{n} \langle \phi_{n-1} | N + 1 | \phi_{n-1} \rangle = 1 \quad (12.29)$$

Quindi per trovare la funzione d'onda $\phi_1(x)$ si applica a^\dagger su $\phi_0(x)$, per trovare $\phi_2(x)$ si applica $\frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger$ su $\phi_1(x)$ e così di seguito si trovano tutte le funzioni d'onda corrispondenti agli autovettori di N (o di H).