

Appunti del corso

**INTRODUZIONE ALLA FISICA QUANTISTICA**

**Alessandro Papa**  
*Dipartimento di Fisica, Università della Calabria*

**Anno Accademico 2009-10**

---

# Indice

|                                                                            |           |
|----------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Prefazione</b>                                                          | <b>7</b>  |
| <b>1 Le origini della teoria quantistica: quantizzazione della luce</b>    | <b>9</b>  |
| 1.1 La fine del periodo classico . . . . .                                 | 9         |
| 1.2 La Fisica teorica classica . . . . .                                   | 10        |
| 1.3 Stato delle conoscenze microscopiche a fine '800 . . . . .             | 10        |
| 1.4 Teoria della radiazione nera . . . . .                                 | 11        |
| 1.4.1 Esistenza di una funzione universale $u_\nu(\nu, T)$ . . . . .       | 12        |
| 1.4.2 Legge di Stefan-Boltzmann . . . . .                                  | 14        |
| 1.4.3 Legge di Wien . . . . .                                              | 16        |
| 1.4.4 Legge di spostamento di Wien . . . . .                               | 19        |
| 1.4.5 Formula dell'irraggiamento di Rayleigh-Jeans . . . . .               | 20        |
| 1.4.6 Formula dell'irraggiamento di Planck . . . . .                       | 22        |
| 1.5 Effetto fotoelettrico . . . . .                                        | 25        |
| 1.6 Effetto Compton . . . . .                                              | 27        |
| 1.7 La doppia fenditura di Young . . . . .                                 | 30        |
| 1.8 Esercitazioni . . . . .                                                | 32        |
| 1.8.1 Riflessione alla Bragg . . . . .                                     | 32        |
| A Appendice: interferenza tra onde elettromagnetiche . . . . .             | 33        |
| B Appendice: diffrazione . . . . .                                         | 35        |
| <b>2 Le origini della teoria quantistica: quantizzazione nella materia</b> | <b>39</b> |
| 2.1 Atomo di Thomson e atomo di Rutherford . . . . .                       | 39        |
| 2.2 L'atomo di Bohr . . . . .                                              | 40        |
| 2.3 L'esperimento di Franck-Hertz . . . . .                                | 41        |
| 2.4 Esperienza di Stern-Gerlach e quantizzazione nello spazio . . . . .    | 44        |
| 2.5 Il principio di corrispondenza . . . . .                               | 45        |
| 2.6 Cenni sull'antica teoria dei quanti . . . . .                          | 46        |
| 2.7 Esercitazioni . . . . .                                                | 48        |
| 2.7.1 Atomo di idrogeno secondo Thomson . . . . .                          | 48        |
| 2.7.2 Atomo di elio secondo Thomson . . . . .                              | 49        |
| 2.7.3 Diffusione Rutherford su atomo di Thomson . . . . .                  | 51        |
| 2.7.4 Diffusione Rutherford su atomo con nucleo puntiforme . . . . .       | 52        |

|          |                                                                                                                |            |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 2.7.5    | Instabilità dell'atomo di Rutherford . . . . .                                                                 | 54         |
| 2.7.6    | Buca di potenziale infinita nell'antica teoria dei quanti . . . . .                                            | 55         |
| 2.7.7    | L'oscillatore armonico unidimensionale nell'antica teoria dei quanti . . . . .                                 | 56         |
| <b>3</b> | <b>I principi della meccanica ondulatoria</b>                                                                  | <b>59</b>  |
| 3.1      | Introduzione . . . . .                                                                                         | 59         |
| 3.2      | Ipotesi di de Broglie. Natura ondulatoria della materia . . . . .                                              | 60         |
| 3.3      | Velocità di fase e velocità di gruppo . . . . .                                                                | 62         |
| 3.4      | Dualismo onda-corpuscolo. Interpretazione statistica . . . . .                                                 | 64         |
| 3.5      | Incertezza della misura e indeterminazione di Heisenberg . . . . .                                             | 65         |
| 3.6      | Complementarità. Variabili compatibili. Causalità . . . . .                                                    | 67         |
| 3.7      | Funzione d'onda e densità di probabilità . . . . .                                                             | 68         |
| 3.8      | Dimensione di una funzione d'onda . . . . .                                                                    | 70         |
| 3.9      | Funzioni non normalizzabili in senso stretto . . . . .                                                         | 71         |
| 3.10     | Valori medi di osservabili . . . . .                                                                           | 71         |
| 3.11     | Sistemi di più particelle . . . . .                                                                            | 74         |
| 3.12     | Concetto di operatore. Regole di commutazione . . . . .                                                        | 75         |
| 3.13     | Operatori hermitiani . . . . .                                                                                 | 77         |
| 3.14     | Coniugazione hermitiana . . . . .                                                                              | 78         |
| 3.15     | Osservabili fisiche ed operatori hermitiani . . . . .                                                          | 79         |
| 3.16     | Operatori con spettro continuo . . . . .                                                                       | 80         |
| 3.17     | Postulato della misura . . . . .                                                                               | 83         |
| 3.18     | Osservabili compatibili . . . . .                                                                              | 85         |
| 3.19     | Enunciato formale della relazione di indeterminazione di Heisenberg . . . . .                                  | 86         |
| 3.20     | Relazione di indeterminazione tempo-energia . . . . .                                                          | 87         |
| 3.21     | Esercitazioni . . . . .                                                                                        | 88         |
| 3.21.1   | Determinazione delle autofunzioni simultanee di due operatori che commutano                                    | 88         |
| 3.21.2   | Applicazioni della relazione di indeterminazione di Heisenberg . . . . .                                       | 90         |
| <b>4</b> | <b>L'equazione di Schrödinger</b>                                                                              | <b>93</b>  |
| 4.1      | Aspetti generali dell'evoluzione temporale . . . . .                                                           | 93         |
| 4.2      | Equazione di Schrödinger per una particella . . . . .                                                          | 93         |
| 4.3      | Equazione di Schrödinger per il caso generale . . . . .                                                        | 95         |
| 4.4      | Alcune osservazioni sull'equazione di Schrödinger . . . . .                                                    | 97         |
| 4.5      | Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo e stati stazionari . . . . .                                   | 98         |
| 4.6      | Proprietà generali dell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo . . . . .                                | 99         |
| 4.7      | Conservazione della norma . . . . .                                                                            | 100        |
| <b>5</b> | <b>Sistemi quantistici unidimensionali</b>                                                                     | <b>103</b> |
| 5.1      | Premessa . . . . .                                                                                             | 103        |
| 5.2      | Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per una particella libera in moto<br>unidimensionale . . . . . | 103        |
| 5.3      | Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per sistemi unidimensionali . . . .                            | 104        |

|          |                                                                         |            |
|----------|-------------------------------------------------------------------------|------------|
| 5.4      | Potenziali costanti a tratti . . . . .                                  | 105        |
| 5.5      | Altre proprietà del moto unidimensionale . . . . .                      | 107        |
| 5.6      | Buca di potenziale . . . . .                                            | 109        |
| 5.7      | Barriera di potenziale . . . . .                                        | 111        |
| 5.8      | Buca di potenziale infinita . . . . .                                   | 112        |
| 5.9      | Coefficiente di trasmissione . . . . .                                  | 113        |
| 5.10     | L'oscillatore armonico unidimensionale . . . . .                        | 115        |
| 5.11     | Sistemi in tre dimensioni con Hamiltoniane separabili . . . . .         | 118        |
| 5.12     | Esercitazioni . . . . .                                                 | 118        |
| 5.12.1   | Sparpagliamento di un pacchetto d'onde gaussiano . . . . .              | 118        |
| 5.12.2   | Particella in buca unidimensionale infinita . . . . .                   | 120        |
| 5.12.3   | Riflessione da barriera di potenziale rettangolare . . . . .            | 121        |
| 5.12.4   | Trasmissione attraverso una barriera di potenziale "a dente" . . . . .  | 122        |
| <b>6</b> | <b>Momento angolare orbitale</b>                                        | <b>125</b> |
| 6.1      | Relazioni di commutazione e operatori di salita e di discesa . . . . .  | 125        |
| 6.2      | Autovalori e autostati del momento angolare . . . . .                   | 127        |
| 6.3      | Il momento angolare orbitale . . . . .                                  | 129        |
| <b>7</b> | <b>Il potenziale centrale e l'atomo di idrogeno</b>                     | <b>133</b> |
| 7.1      | Moto in un campo a simmetria centrale . . . . .                         | 133        |
| 7.2      | Atomo di idrogeno . . . . .                                             | 137        |
| A        | Appendice: formule utili . . . . .                                      | 142        |
|          | <b>Appendici generali</b>                                               | <b>145</b> |
| A        | Costanti fisiche . . . . .                                              | 145        |
| B        | Onde piane nel vuoto . . . . .                                          | 146        |
| C        | Serie di Fourier . . . . .                                              | 149        |
| C.1      | Funzioni periodiche . . . . .                                           | 149        |
| C.2      | Sviluppi in serie di Fourier . . . . .                                  | 150        |
| C.3      | Serie di Fourier di esponenziali complessi . . . . .                    | 151        |
| D        | Trasformata di Fourier . . . . .                                        | 153        |
| D.1      | Definizione e proprietà . . . . .                                       | 153        |
| D.2      | "Relazione di indeterminazione" per la trasformata di Fourier . . . . . | 155        |
| D.3      | Esempi . . . . .                                                        | 156        |
| E        | Delta di Dirac . . . . .                                                | 159        |
| E.1      | Definizione . . . . .                                                   | 159        |
| E.2      | Proprietà della delta di Dirac . . . . .                                | 160        |
| E.3      | Altre rappresentazioni della delta di Dirac . . . . .                   | 160        |
| E.4      | Trasformata di Fourier della delta di Dirac . . . . .                   | 161        |
| E.5      | Integrale della delta di Dirac . . . . .                                | 161        |
| E.6      | Derivate della delta di Dirac . . . . .                                 | 162        |
| E.7      | La delta di Dirac in tre dimensioni . . . . .                           | 163        |



# Prefazione

In queste pagine sono raccolti gli appunti delle lezioni ed una selezione di esercitazioni del corso intitolato **Introduzione alla Fisica Quantistica**. Questo corso è rivolto agli studenti del II anno del Corso di Laurea in Fisica e del Corso di Laurea in Scienza dei Materiali (nuovo ordinamento) dell'Università della Calabria, a partire dall'A.A. 2001/02.

Il corso si articola in 24 ore di teoria ed altrettante di esercitazione ed è strutturato in due parti, fortemente correlate tra loro.

Nella prima parte, in cui predomina l'approccio storico-fenomenologico, vengono presentati i più importanti esperimenti alla scala "microscopica" compiuti a cavallo del XIX e del XX secolo e viene evidenziata l'inadeguatezza dello schema classico all'interpretazione dei loro risultati. Viene sottolineata, in particolare, la necessità di introdurre una nuova meccanica, basata su concetti estranei al paradigma classico, come quelli di **quantizzazione** e di **interpretazione probabilistica** della misura.

Nella seconda parte del corso, più formale, questa nuova meccanica viene presentata nella formulazione della **meccanica ondulatoria**. Dopo averne enunciato i principi generali ed aver introdotto l'equazione di Schrödinger, se ne considerano le applicazioni ai sistemi in una dimensione e a quelli in tre dimensioni con simmetria centrale, fino a discutere l'atomo di idrogeno.

Questa raccolta di appunti **non** deve rappresentare in nessun modo l'unica fonte di informazione per lo studente sulla materia oggetto del corso. La scelta di non chiamarla *dispensa* è stata fatta proprio per scongiurare l'equivoco che lo studente possa sentirsi *dispensato* dalla consultazione dei testi consigliati. Essa deve servire solo come **guida di percorso** nell'organizzazione dello studio e come manualetto di **orientamento bibliografico**.

Ciò vale in particolare per la prima parte del corso, per la quale è più difficile trovare un unico riferimento bibliografico per tutti gli argomenti trattati (tanto più se si pretende che sia in lingua italiana). Questa raccolta di appunti dovrebbe evitare allo studente il disagio iniziale di doversi confrontare con diversi testi e lo dovrebbe aiutare a seguire quotidianamente le lezioni del corso senza grosse difficoltà, fornendogli al tempo stesso tutti i riferimenti bibliografici per gli approfondimenti che si potrebbero rendere necessari per affrontare l'esame.

Il materiale raccolto in queste pagine non è ovviamente originale. In una parte non trascurabile esso è remnescente del corso di Istituzioni di Fisica Teorica tenuto dal prof. P. Menotti e delle relative esercitazioni tenute dal prof. E. Guadagnini che l'autore ha seguito durante i suoi studi all'Università di Pisa. Per un'altra ampia parte il lettore riconoscerà che gli appunti riproducono quasi fedelmente brani dei testi consigliati. Il contributo originale è limitato alla scelta dell'ordine di esposizione degli argomenti, all'aggiunta di esempi illustrativi e allo svolgimento esplicito di alcuni calcoli che nei testi di riferimento sono omessi.

Il materiale è organizzato in capitoli ordinati secondo lo svolgimento cronologico del corso. Le parti scritte con caratteri più piccoli sono relative ad approfondimenti non strettamente necessari per la comprensione delle lezioni successive o ad argomenti che, per lo stesso motivo e per mancanza di tempo, durante un certo anno accademico potrebbero non essere stati trattati. Lo studente è esortato a leggere anche queste parti.

Nel primo capitolo, la teoria della radiazione nera è sviluppata con grande dettaglio, seguendo l'approccio storico, ma durante il corso ne sono esposti solo i passaggi più importanti. Gli ultimi due capitoli, sul momento angolare e sul moto in un campo a simmetria centrale, si riferiscono ad argomenti che nel corso vengono solo accennati e che sono ripresi in corsi successivi. Si è deciso tuttavia di inserirli in forma estesa e dettagliata per utilità futura degli studenti.

Alla fine di ogni capitolo sono riportate le **esercitazioni** più significative sugli argomenti che vi sono stati trattati ed alcuni **esercizi** da svolgere. Talvolta sono presenti anche **appendici matematiche** che richiamano o introducono nozioni e tecniche necessarie per la comprensione del testo. Alla fine di tutta la raccolta si trovano le **appendici generali**, cioè quelle appendici la cui consultazione può rendersi necessaria durante la lettura di più di un capitolo.

I **testi consigliati** per un certo argomento sono riportati alla fine del capitolo corrispondente. Tra essi ce ne sono tre che ricorrono con maggiore frequenza e che meritano pertanto una citazione a parte. Si tratta di

- M. Born, *Fisica atomica*, Bollati Boringhieri;
- A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod;
- L.D. Landau, E.M. Lifshits, *Meccanica quantistica non relativistica*, Editori Riuniti.

Per la preparazione alla prova scritta d'esame si raccomanda agli studenti di utilizzare la raccolta

- G. Passatore, *Problemi di meccanica quantistica elementare*, Franco Angeli Editore,
- e di svolgere gli esercizi assegnati nelle prove scritte degli appelli precedenti.

Infine, un *caveat*: sebbene questa raccolta di appunti sia ormai al suo terzo anno di vita, errori di stampa si annidano sicuramente nel testo e nelle formule e l'esposizione va sicuramente limata in alcuni punti ed arricchita in altri. Sarà pertanto molto apprezzato il contributo degli studenti e di chiunque altro, sia per la segnalazione di errori ed omissioni, sia per ogni proposta di miglioramento.

### Ringraziamenti

Una menzione particolare meritano il dott. Domenico Giuliano, esercitatore del corso dall'A.A. 2003/04, il dott. Marco Rossi, esercitatore del corso rivolto agli studenti di Scienza dei Materiali nell'A.A. 2009/10, ed il dott. Pietro Giudice per le segnalazioni di errori di stampa e per alcune proposte migliorative del testo.

Per aver raccolto l'appello a snidare errori di stampa, si ringraziano gli studenti Aldo Brunetti, Christian Gencarelli, Gianluca Greco, Michele Lucente, Antonio Mandarino, Raffaele Marino, Elio Masciari, Marco Melia, Beatrice Murdaca, Andrea Nava, Giuseppe Nisticò, Michele Pisarra, Francesco Pucci, Giuseppe Pucci, ai nomi dei quali spero di aggiungere presto quello di altri loro colleghi.



# Capitolo 1

## Le origini della teoria quantistica: quantizzazione della luce

### 1.1 La fine del periodo classico

Lo sviluppo della Fisica fino all'inizio del XX secolo si è svolto secondo il paradigma della *dottrina classica*: ai sistemi fisici di cui si vuole studiare l'**evoluzione** viene associato un certo numero di **variabili dinamiche** che possiedono **tutte** ad un certo istante un valore **ben preciso**. L'insieme dei valori di queste variabili definisce lo **stato dinamico** del sistema, la cui evoluzione è completamente **determinata**, se lo stato dinamico è noto ad un istante dato.

L'evoluzione delle variabili dinamiche di un sistema è governata da sistemi di equazioni differenziali del I ordine nel tempo. Si considerino, ad esempio, il caso della meccanica classica, le cui variabili dinamiche posizione  $q$  ed impulso  $p$  evolvono secondo le equazioni di Hamilton, e quello dell'elettromagnetismo classico, le cui variabili dinamiche campo elettrico  $\vec{E}$  ed induzione magnetica  $\vec{B}$  evolvono secondo le equazioni di Maxwell.

Il programma della Fisica classica consiste in due punti fondamentali: (1) l'individuazione delle variabili dinamiche appropriate per il sistema in esame, (2) la determinazione delle loro equazioni di evoluzione, da confrontare con i risultati sperimentali.

Da Newton in poi, l'attuazione di questo programma era sempre stata coronata da successo: ogni nuova scoperta comportava la comparsa di nuove variabili dinamiche e/o di nuove equazioni di evoluzione, cioè poteva essere accomodata all'interno dello schema classico. Ciò nonostante, lo sviluppo della Fisica era avvenuto lungo le linee di una sempre maggiore semplicità ed unità delle conoscenze.

Con l'approssimarsi del 1900, man mano che si precisava la conoscenza dei fenomeni alla scala *microscopica*<sup>1</sup>, la teoria classica cominciò ad incontrare *difficoltà* e *contraddizioni* sempre crescenti, per superare le quali si rese necessario introdurre nuovi *principi*. La teoria costruita su questi principi, la cui formulazione si svolse nell'arco temporale 1900-1925, si chiama **meccanica quantistica**. Essa rappresenta una teoria coerente dei fenomeni microscopici.

---

<sup>1</sup>In questo contesto, per scala **microscopica** si intende quella dei fenomeni atomici e sub-atomici, che corrisponde a lunghezze inferiori ad  $1 \text{ \AA} \equiv 10^{-8} \text{ cm}$ .

## 1.2 La Fisica teorica classica

Alla fine del periodo classico, due sono le categorie di oggetti a cui ricondurre tutti i fenomeni conosciuti: *materia* ed *irraggiamento*.

La **materia** consiste di corpuscoli perfettamente localizzati, soggetti alle leggi della meccanica di Newton. Lo stato dinamico di ogni sistema è definito una volta che siano noti i valori di sei variabili dinamiche, posizione  $\vec{r}$  ed impulso  $\vec{p}$ , per ogni corpuscolo componente.

Il comportamento della materia è descritto dalla teoria **corpuscolare**, capace di spiegare coerentemente un'ampia classe di fenomeni, dalla meccanica dei corpi celesti e dei solidi macroscopici, fino alla scala microscopica, dove viene confermata l'**ipotesi atomica** fornita dai chimici, espressa dalle leggi delle proporzioni costanti (Proust, 1799) e delle proporzioni multiple (Dalton, 1808) ed altre. Le proprietà macroscopiche dei corpi materiali sono ricondotte a quelle delle molecole e degli atomi che li compongono. La difficoltà di operare con sistemi le cui variabili dinamiche sono in numero dell'ordine del numero di Avogadro,  $N_A \simeq 6.02 \times 10^{23}$ , porta alla formulazione della **meccanica statistica** (principalmente ad opera di Boltzmann, 1884), che include la teoria cinetica dei gas e la termodinamica statistica.

L'**irraggiamento** soddisfa le leggi di Maxwell dell'elettromagnetismo; le variabili dinamiche,  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  e  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  sono tante quanti i punti dello spazio-tempo, quindi infinite. L'irraggiamento non si può scindere in corpuscoli localizzati, che conservino questo carattere nel tempo. Ciò sarebbe incompatibile con l'osservazione dei fenomeni di interferenza e diffrazione.

La teoria dell'irraggiamento è **ondulatoria**: solo una teoria ondulatoria è in grado di spiegare gli esperimenti di Young e Fresnel, ponendo fine a metà del 1800 alla controversia sulla natura ondulatoria o corpuscolare della luce. L'ipotesi ondulatoria sta alla base di tutti i fenomeni luminosi conosciuti, inclusa l'ottica geometrica. Le equazioni fondamentali dell'elettromagnetismo sono le equazioni di Maxwell (1855). Esse unificano l'ottica con l'elettricità ed il magnetismo e portano alla previsione delle onde elettromagnetiche, anticipando la scoperta delle onde radio da parte di Hertz (1887).

In definitiva, tutto sembra trovare spiegazione nell'ambito della teoria corpuscolare o in quella dell'irraggiamento, con sorprendente grado di **unità**. Laddove questa spiegazione manchi, ciò è dovuto essenzialmente a difficoltà di carattere matematico.

La ricerca di un grado di unità ancora maggiore di quello raggiunto, portò alla ricerca del mezzo di supporto (etere) della propagazione delle onde elettromagnetiche, in analogia con quello che succede per le onde elastiche. Il fallimento di questa ricerca (esperimento di Michelson e Morley, 1887) portò alla formulazione nel 1905 da parte di Einstein della **teoria della relatività**, che non mette in questione nessuno dei punti del paradigma classico.

## 1.3 Stato delle conoscenze microscopiche a fine '800

Alla fine del secolo XIX, grandi sforzi sperimentali erano stati effettuati per studiare la struttura della materia, le interazioni mutue tra corpi materiali e quelle tra essi ed il campo elettromagnetico.

Attraverso lo studio delle proprietà di **conduzione elettrica** nei gas rarefatti, cioè di gas rac-

chiusi in tubi con pressione interna inferiore a valori dell'ordine di  $10^{-3}$  mm/Hg, si arriva ad ottenere evidenza dei raggi catodici, dei raggi canale e dei raggi anodici.

I **raggi catodici** sono raggi emessi dal catodo, che si propagano in linea retta e vengono deviati da campi elettrici o magnetici. Dalle misure di deflessione si conclude che essi sono costituiti da corpuscoli di carica negativa, di cui si determina il rapporto carica/massa. A questi corpuscoli viene posto il nome di **elettroni** (J.J. Thomson, 1897).

I **raggi canale** sono costituiti da ioni di gas residuo nel tubo, hanno carica positiva e viaggiano verso il catodo, ma ci passano attraverso se esso contiene dei fori (Goldstein, 1886).

I **raggi anodici** sono ioni strappati dall'edificio atomico dell'anodo ed hanno pertanto carica positiva.

L'interazione tra particelle cariche e i campi elettrico e magnetico è descritta in modo completo da Lorentz ed è sintetizzata nell'equazione

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) .$$

In seguito a queste scoperte, l'esistenza di atomi e molecole, da ipotesi di lavoro diventa realtà ammissibile. Si affinano pertanto le tecniche sperimentali per isolare le particelle atomiche e subatomiche: Millikan (1910) con il famoso esperimento delle gocce d'olio riesce ad isolare la carica dell'elettrone e ne determina il valore; vengono messe a punto la camera di Wilson (1912) ed il contatore Geiger (1913).

Con la scoperta della **radioattività** (1896) si ha la prima manifestazione delle proprietà dei **nuclei atomici** e si comincia a disporre di un potente mezzo di investigazione della struttura atomica, l'irraggiamento  $\alpha$ .

Dal lato delle onde elettromagnetiche, lo spettro di lunghezze d'onda noto si estende verso le lunghezze piccole con la scoperta dei raggi X (Röntgen, 1895) le cui proprietà ondulatorie sono messe in luce da von Laue (1912), con le esperienze di diffrazione su cristalli con passo reticolare dell'ordine di  $10^{-8}$  cm, che consentono di associare ai raggi X una lunghezza d'onda  $\lambda_X$  dello stesso ordine di grandezza.

Il carattere ondulatorio dei raggi  $\gamma$ , che fecero la loro apparizione nei processi radioattivi, fu riconosciuto molto più tardi. Ad essi corrispondono lunghezze d'onda  $\lambda_\gamma$  ancora più piccole di quelle dei raggi X.

Con l'affinarsi dell'**analisi spettrale** dell'irraggiamento, si accumula una grande quantità di informazioni sul problema dell'emissione, dell'assorbimento e della diffusione della radiazione. È il confronto tra questi dati sperimentali e la teoria che mostra i primi **disaccordi** tra la teoria classica e l'esperienza.

## 1.4 Teoria della radiazione nera

Un **corpo nero** è un corpo che assorbe completamente l'energia radiante incidente su esso. Siccome ogni corpo può emettere le stesse radiazioni che è in grado di assorbire, il corpo nero può essere inteso anche come una sorgente capace di emettere radiazioni elettromagnetiche di qualsiasi frequenza.

Un corpo nero ideale non esiste in natura, tuttavia un contenitore (forno) a *temperatura uniforme*, sulle cui pareti sia praticata una *piccola apertura*, si comporta come un corpo nero. Tutta la

radiazione che dall'esterno cade sull'apertura, entra attraverso essa nel contenitore e, dopo ripetute riflessioni sulle pareti, viene *completamente assorbita*.

### 1.4.1 Esistenza di una funzione universale $u_\nu(\nu, T)$

All'interno di una cavità vuota, le cui pareti siano mantenute a temperatura  $T$ , si genera della radiazione elettromagnetica. Si raggiunge lo *stato stazionario* quando le pareti assorbono tanta energia radiante quanta ne emettono. La densità di energia che si stabilisce nella cavità è

$$u = \frac{1}{2} \left( \varepsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{\vec{B}^2}{\mu_0} \right), \quad (1.1)$$

che è data dalla somma dei contributi alle varie frequenze e può essere scritta nella forma

$$u = \int_0^\infty u_\nu d\nu, \quad (1.2)$$

dove  $u_\nu$  è la densità di energia la cui frequenza cade tra  $\nu$  e  $\nu + d\nu$ .

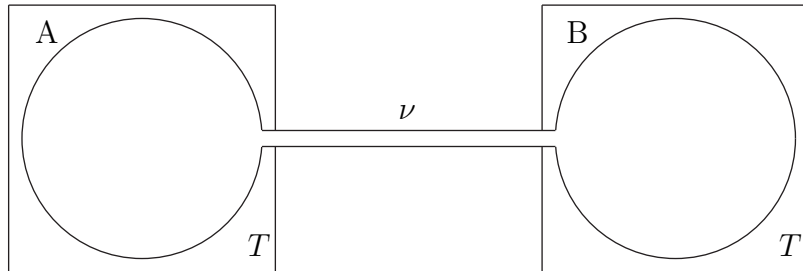


Figura 1.1: Due cavità nere collegate da una filtro di luce alla frequenza  $\nu$ .

È stato dimostrato (Kirchhoff, 1859) che  $u_\nu$  dipende *solo* da  $T$  e non dalle proprietà delle pareti. La dimostrazione è la seguente (si veda la Figura 1.1): supponiamo di avere due cavità nere,  $A$  e  $B$ , collegate entrambe ad un termostato a temperatura  $T$  e supponiamo che per una frequenza  $\nu$  valga  $u_\nu(A) > u_\nu(B)$ . Se le due cavità sono collegate mediante una guida di luce che lasci passare solo radiazione alla frequenza  $\nu$ , cioè si comporti come un *filtro* di luce, una volta staccato il termostato si avrà flusso di radiazione da  $A$  a  $B$  finché  $u_\nu(A) = u_\nu(B)$ . Ciò viola il II principio della termodinamica, poiché non appena inizi il flusso di radiazione da  $A$  a  $B$ , si ha  $T_A < T_B$  e quindi un flusso di energia da un corpo a temperatura più bassa ad uno a temperatura più alta. Poiché ciò non è possibile, si deve negare l'ipotesi e concludere che  $u_\nu(\nu, T)$  è una *funzione universale*.

Il problema che ci proponiamo di studiare è quello della determinazione di questa funzione universale. Come vedremo in quello che segue, l'utilizzo delle conoscenze della Fisica classica, in particolare della termodinamica e dell'elettromagnetismo, non è sufficiente a condurre ad una forma per la  $u_\nu(\nu, T)$  compatibile con le osservazioni sperimentali. Sono state le nuove ipotesi che è stato necessario introdurre per superare questo disaccordo ad aprire la strada ad una nuova Fisica. <sup>2</sup>

---

<sup>2</sup>La trattazione del corpo nero in questa raccolta di appunti è di gran lunga più dettagliata della sua presentazione

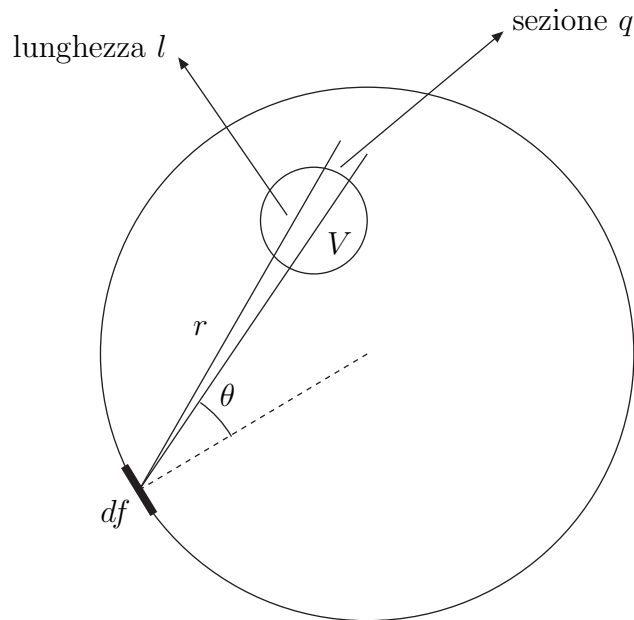


Figura 1.2: Schema per il calcolo dell'energia contenuta nel volumetto  $V$ , dovuta all'irraggiamento della superficie infinitesima  $df$ .

Si definisce **intensità specifica di radiazione**, e si indica con  $K$ , l'energia irradiata nell'unità di tempo dall'unità di superficie della cavità nell'unità di angolo solido. Essa è legata ad  $u$ : si consideri infatti un piccolo volume  $V$  all'interno della cavità e si determini l'energia contenuta in un cilindretto di  $V$  di dimensione lineare  $l$  e di sezione  $q$  proveniente da un elemento di superficie  $df$  posto a distanza  $r$  da  $V$  (si veda la Figura 1.2). Questa energia è data da

$$K df \cos \theta \frac{q}{r^2} \frac{l}{c},$$

dove  $\theta$  è l'angolo tra la normale a  $df$  e la retta che congiunge  $df$  e  $V$ . L'energia totale contenuta in  $V$  sarà data dall'integrale sui contributi di tutti gli elementi della superficie interna della cavità,

$$uV = \frac{KV}{c} \int \frac{\cos \theta}{r^2} df,$$

poiché la somma di  $ql$  su tutti i possibili elementi di superficie  $df$  dà proprio il volume  $V$ . Ora,  $df \cos \theta / r^2$  è proprio l'angolo solido sotto cui  $df$  è visto da  $V$ , quindi

$$\int \frac{\cos \theta}{r^2} df = 4\pi$$

---

in aula, dove, sia per motivi di tempo, sia perché non tutte le nozioni richieste sono già note agli studenti al momento in cui il presente corso viene tenuto, ci si è limitati ad un elenco dei risultati principali.

ed allora

$$u = \frac{4\pi}{c} K . \quad (1.3)$$

Il ragionamento di sopra può essere applicato alla radiazione di ciascuna delle frequenze possibili, cosicché si può scrivere

$$u_\nu = \frac{4\pi}{c} K_\nu , \quad (1.4)$$

dove  $K_\nu$  è l'intensità specifica di radiazione alla frequenza  $\nu$ .

Si chiama **potere emissivo**  $S$  di un corpo nero l'energia irradiata dall'unità di superficie nell'angolo solido  $2\pi$  nell'unità di tempo. L'energia totale emessa verso l'esterno nell'unità di tempo attraverso una apertura di area unitaria è data proprio dal potere emissivo del corpo nero. Esso si calcola nel seguente modo:

$$S = K \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos \theta = \pi K = \frac{c}{4} u . \quad (1.5)$$

La **pressione** della radiazione elettromagnetica all'interno della cavità è data invece da  $p = u/3$ . Infatti, detto  $\vec{P}$  il vettore densità di impulso della radiazione, dato da

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \vec{E} \times \vec{B} , \quad |\vec{P}| = \frac{u}{c} ,$$

si ha che la forza esercitata dalla radiazione sull'elemento di superficie  $df$  risulta essere

$$p df \equiv \frac{dP_\perp}{dt} = df \int \left( \frac{K}{c} \cos \theta \right) 2 \cos \theta d\Omega = df \frac{2K}{c} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{4\pi}{3} \frac{K}{c} df = \frac{u}{3} df ,$$

da cui segue  $p = u/3$ .

### 1.4.2 Legge di Stefan-Boltzmann

Secondo la legge di Stefan-Boltzmann (1879), la densità di energia  $u$  è legata alla temperatura dalla relazione

$$u = a T^4 , \quad (1.6)$$

dove  $a$  è una costante (universale).

Presenteremo due derivazioni di questa legge, entrambe basate solamente sui principi della termodinamica.

#### I derivazione

Consideriamo una cavità nera, inizialmente nello stato  $A$  con temperatura  $T$  e volume  $V_0$  sulla quale siano compiute le seguenti trasformazioni termodinamiche:

1. espansione isoterma dallo stato  $A$  ad uno stato  $B$  con volume  $V_0 + V$ : il lavoro compiuto dalla radiazione nella cavità è dato da  $L_{AB} = pV$  (per questo sistema una trasformazione isoterma è anche isobara); il calore assorbito è dato da  $Q_{AB} = pV + uV$ ;
2. espansione adiabatica infinitesima dallo stato  $B$  ad uno stato  $C$  con volume  $V_0 + V + \delta V$ :  $L_{BC} = p \delta V$ ;

3. compressione isoterma dallo stato  $C$  ad uno stato  $D$  con volume pari a quello iniziale,  $V_0$ :  
 $L_{CD} = -(p - \delta p)(V + \delta V)$ ;
4. trasformazione isocora da  $D$  allo stato iniziale  $A$ : il lavoro compiuto è nullo, mentre il calore assorbito è  $Q_{CD} = \delta u V_0$ .

Il lavoro totale compiuto durante un ciclo è, a meno di infinitesimi di ordine superiore,

$$L_{\text{tot}} = V \delta p ,$$

mentre il calore totale assorbito, a meno di infinitesimi, è pari a  $Q_{AB}$ . Quindi il rendimento del sistema risulta

$$\eta = \frac{L_{\text{tot}}}{Q_{AB}} = \frac{V \delta p}{(p + u)V} .$$

D'altro canto, per una macchina termica reversibile che lavora tra due sorgenti con temperature  $T$  e  $T - \delta T$ , il rendimento è dato da  $\eta = \delta T/T$ , quindi abbiamo

$$\frac{V \delta p}{(p + u)V} = \frac{\delta T}{T} \quad \longrightarrow \quad \frac{dp}{dT} = \frac{p + u}{T} ,$$

da cui, in virtù di  $p = u/3$ , segue  $u = a T^4$ .

## II derivazione

Consideriamo la variazione infinitesima di entropia,

$$dS = \frac{\delta Q}{T} = \frac{dU + p dV}{T} = \frac{1}{T} \left[ d(u(T)V) + p(T) dV \right] = \frac{1}{T} \left[ u(T) + p(T) \right] dV + \frac{V}{T} \frac{du(T)}{dT} dT ,$$

da cui segue

$$\frac{\partial S}{\partial V} = \frac{u + p}{T} = \frac{4}{3} \frac{u}{T} , \quad \frac{\partial S}{\partial T} = \frac{V}{T} \frac{du}{dT} .$$

Poiché  $dS$  è un differenziale esatto, deve valere

$$\frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right) = \frac{\partial}{\partial V} \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right) \quad \longrightarrow \quad -\frac{4}{3} \frac{u}{T^2} + \frac{4}{3} \frac{u'}{T} = \frac{u'}{T} \quad \longrightarrow \quad u = a T^4 .$$

Inoltre<sup>3</sup>,

$$dS = \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right) dV + \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right) dT = \frac{4}{3} a T^3 dV + 4 a T^2 V dT \quad \longrightarrow \quad S = \frac{4}{3} a T^3 V + \text{costante} .$$

---

<sup>3</sup>Si osservi che per indicare l'entropia si usa lo stesso simbolo ( $S$ ) adottato per il potere emissivo di un corpo nero. Ciò non dovrebbe generare alcuna confusione.

### 1.4.3 Legge di Wien

Immaginiamo di iniettare la radiazione “nera” di una cavità a temperatura  $T$  all’interno di un contenitore con pareti perfettamente riflettenti ed adiabatiche, dotato di un pistone mobile in senso verticale. Poiché le pareti sono perfettamente riflettenti, la densità spettrale di energia si manterrà sempre uguale a quella  $u_\nu(\nu, T)$  di corpo nero. Supponiamo poi di ridurre il volume del contenitore, abbassando il pistone con una velocità molto piccola, di modulo  $v$  (si veda la Figura 1.3). Ciò comporta una variazione della distribuzione delle frequenze della radiazione, infatti se radiazione con frequenza  $\nu_1$  incide sulla parete mobile formando un angolo  $\theta$  con la verticale, la radiazione riflessa avrà frequenza

$$\nu = \nu_1 \left( 1 + 2\frac{v}{c} \cos \theta \right) .$$

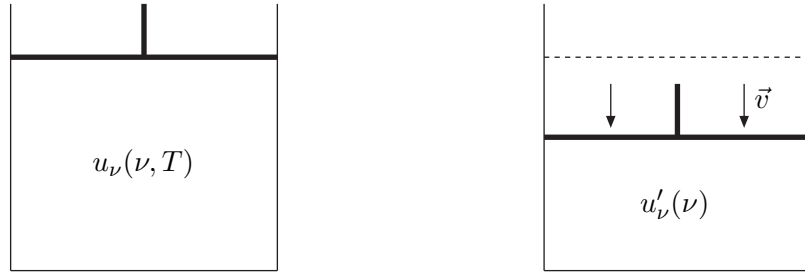


Figura 1.3: Cavità con pareti riflettenti ed adiabatiche all’interno della quale si trovi radiazione nera (sinistra), sottoposta a compressione lenta (destra).

Infatti, in un sistema di riferimento solidale con la parete mobile, la frequenza della radiazione incidente e quella della radiazione riflessa sono uguali, cioè  $\nu'_I = \nu'_R$ . Queste frequenze sono legate a quelle nel sistema di riferimento di laboratorio dalle trasformazioni di Lorentz ( $\beta \equiv v/c$ ,  $\gamma \equiv 1/\sqrt{1-\beta^2}$ )

$$\begin{aligned} \nu'_I &= \gamma\nu_I + \beta\gamma\nu_I \cos \theta' \simeq \nu_I(1 + \beta \cos \theta') , \\ \nu'_R &= \gamma\nu_R - \beta\gamma\nu_R \cos \theta' \simeq \nu_R(1 - \beta \cos \theta') , \end{aligned}$$

quindi

$$\nu_R \simeq \nu_I(1 + 2\beta \cos \theta') \simeq \nu_I(1 + 2\beta \cos \theta) .$$

Dopo una generica compressione, la distribuzione in frequenza dell’energia raggianti sarà una  $u'_\nu(\nu)$ , diversa da quella iniziale, con

$$\int_0^\infty u'_\nu(\nu) d\nu > \int_0^\infty u_\nu(\nu, T) d\nu ,$$

poiché il sistema ha *subito* lavoro, a vantaggio della sua energia interna. Ora, esiste sicuramente una temperatura  $T'$  tale che la densità spettrale di energia a quella temperatura,  $u_\nu(\nu, T')$ , soddisfi

$$\int_0^\infty u'_\nu(\nu) d\nu = \int_0^\infty u_\nu(\nu, T') d\nu .$$

Ma allora, devono esistere necessariamente due frequenze  $\nu_1$  e  $\nu_2$  per le quali

$$\begin{aligned} u'_\nu(\nu_1) &> u_\nu(\nu_1, T') , \\ u'_\nu(\nu_2) &< u_\nu(\nu_2, T') . \end{aligned}$$



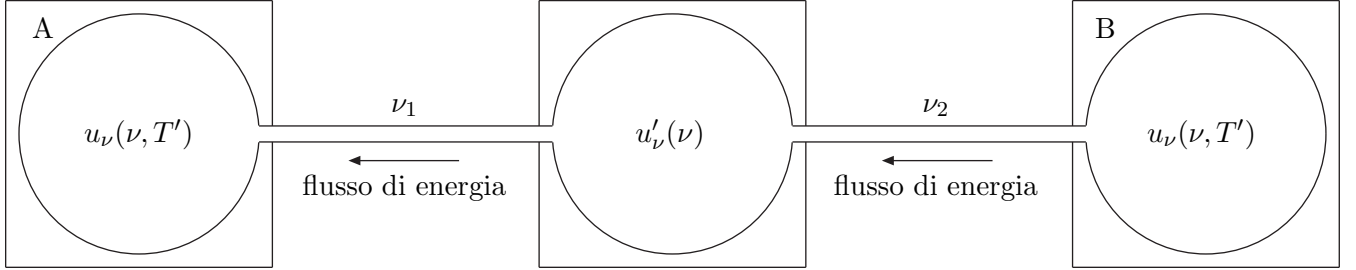


Figura 1.4: Schema per la dimostrazione della legge di Wien.

Collegiamo ora il nostro contenitore a pareti riflettenti con due cavità nere A e B, entrambe a temperatura  $T'$ , mediante filtri di luce (si veda la Figura 1.4). Il collegamento con la cavità A avvenga mediante un filtro di luce che lasci passare solo radiazione a frequenza  $\nu_1$ , il collegamento alla cavità B, mediante un filtro alla frequenza  $\nu_2$ . Succederà allora che ci sarà flusso di radiazione a frequenza  $\nu_1$  *dal contenitore verso la cavità A*, mentre ci sarà flusso di radiazione a frequenza  $\nu_2$  *dalla cavità B al contenitore*, fino a che non si raggiunga l'equilibrio alle rispettive frequenze. Se si regolano le aperture delle guide d'onda in modo opportuno, si può fare in modo di rendere uguale il flusso in entrata nel contenitore a quello in uscita, cosicché l'energia interna e la pressione del contenitore restino invariate. Dopo di ciò, si interrompono i collegamenti tra contenitore e cavità e si riporta il contenitore al volume iniziale sollevando il pistone. Alla fine della trasformazione, l'*unico effetto* sul sistema sarà stato quello di aver reso la temperatura della cavità A *maggiore* di  $T'$  e quella della cavità B *minore* di  $T'$ , violando il II principio della termodinamica. Si deve pertanto concludere che

$$u'_\nu(\nu) = u_\nu(\nu, T') ,$$

cioè che la radiazione all'interno del contenitore a pareti riflettenti resta “nera” istante per istante durante la compressione, ad una temperatura  $T'$  che dipende dal volume del contenitore come fissato dalla condizione di conservazione dell'entropia,

$$\frac{4}{3}a T^3 V = \frac{4}{3}a T'^3 V' . \quad (1.7)$$

Vediamo ora qual è l'effetto sulla distribuzione spettrale della compressione prodotta dallo spostamento del pistone con velocità  $v$ . Concentriamo la nostra attenzione sull'intervallo di frequenze  $[\nu, \nu + d\nu]$  e calcoliamo il bilancio dell'energia in entrata ed in uscita in questo intervallo di frequenze nel tempo  $dt$ , per effetto della riflessione della radiazione su un'arbitraria superficie  $F$  della parete mobile.

La radiazione incidente con frequenza  $\nu$  dopo la riflessione avrà frequenza diversa da  $\nu$ , quindi ci sarà una perdita di energia pari a

$$F K_\nu d\nu dt \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta = F \pi K_\nu d\nu dt . \quad (1.8)$$

Invece, avrà frequenza  $\nu$  tutta la radiazione che incide sulla parete mobile con una frequenza  $\nu_1$  ed un angolo  $\theta$ , tali che  $\nu = \nu_1(1 + 2v/c \cos \theta)$ . In questo caso il guadagno di energia è pari a

$$F \int K_{\nu_1} \cos \theta d\Omega d\nu_1 dt \left( 1 + 2\frac{v}{c} \cos \theta \right) , \quad (1.9)$$

#### 1.4. TEORIA DELLA RADIAZIONE NERA

---

dove l'integrazione sull'angolo solido va estesa su “mezza” sfera ed il fattore  $(1 + 2v/c \cos \theta)$  tiene conto del fatto che l'energia della radiazione riflessa differisce da quella della radiazione incidente dello stesso fattore di cui  $\nu$  differisce da  $\nu'$ . Ora, poiché  $v/c \ll 1$ , si ha

$$K_{\nu_1} \simeq K_\nu + \frac{\partial K_\nu}{\partial \nu}(\nu_1 - \nu) = K_\nu - \frac{\partial K_\nu}{\partial \nu}(2\nu)\frac{v}{c} \cos \theta$$

e la (1.9) diventa

$$F\pi K_\nu d\nu dt - F\frac{\partial K_\nu}{\partial \nu}(2\nu)\frac{v}{c}\frac{2\pi}{3} d\nu dt . \quad (1.10)$$

Pertanto, il guadagno netto in energia alla frequenza  $\nu$  risulta essere

$$d(u_\nu V) = -\frac{4\pi}{3}\nu F\frac{v}{c} dt \frac{\partial K_\nu}{\partial \nu} . \quad (1.11)$$

Poiché

$$\frac{4\pi}{c}K_\nu = u_\nu , \quad Fv dt = -dV ,$$

si ha

$$d(u_\nu V) = \frac{\nu}{3} \frac{\partial u_\nu}{\partial \nu} dV . \quad (1.12)$$

Ora,  $u_\nu$  dipende dal tempo solo per il fatto che  $V$  varia, quindi

$$d(u_\nu V) = \frac{\partial u_\nu}{\partial V} dV V + u_\nu dV ,$$

da cui segue

$$\frac{\partial u_\nu}{\partial V} dV V + u_\nu dV = \frac{\nu}{3} \frac{\partial u_\nu}{\partial \nu} dV , \quad (1.13)$$

cioè

$$V \frac{\partial u_\nu}{\partial V} = \frac{\nu}{3} \frac{\partial u_\nu}{\partial \nu} - u_\nu . \quad (1.14)$$

Posto

$$x = V , \quad y = \nu^3 V ,$$

abbiamo che

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_\nu}{\partial V} &= \frac{\partial u_\nu}{\partial x} + \nu^3 \frac{\partial u_\nu}{\partial y} \\ \frac{\partial u_\nu}{\partial \nu} &= 3\nu^2 V \frac{\partial u_\nu}{\partial y} , \end{aligned} \quad (1.15)$$

pertanto la (1.14) diventa

$$x \frac{\partial u_\nu}{\partial x} + y \frac{\partial u_\nu}{\partial y} = y \frac{\partial u_\nu}{\partial y} - u_\nu \quad \longrightarrow \quad x \frac{\partial u_\nu}{\partial x} + u_\nu = 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial}{\partial x}(xu_\nu) = 0 . \quad (1.16)$$

L'ultima equazione dice che  $xu_\nu$  dipende solo da  $y$ , che equivale a dire che

$$u_\nu(\nu, T) = \frac{1}{V} \psi(\nu^3 V)$$

oppure

$$u_\nu(\nu, T) = \nu^3 \varphi(\nu^3 V) .$$

Essendo  $T^3 V = \text{costante}$ , come segue dalla (1.7), possiamo concludere che

$$u_\nu(\nu, T) = \nu^3 f\left(\frac{\nu}{T}\right) , \quad (1.17)$$

che prende il nome di **legge di Wien**.

Nota la densità spettrale di energia in frequenze è possibile passare a quella in lunghezze d'onda ( $\lambda = c/\nu$ ) osservando che

$$u = \int_0^\infty u_\nu d\nu = \int_\infty^0 \left( u_\nu \frac{d\nu}{d\lambda} \right) d\lambda = \int_\infty^0 \left( -\frac{c}{\lambda^2} u_\nu \right) d\lambda = \int_0^\infty \left( +\frac{c}{\lambda^2} u_\nu \right) d\lambda \equiv \int_0^\infty u_\lambda d\lambda ,$$

cioè

$$u_\lambda(\lambda, T) = \frac{c}{\lambda^2} u_\nu(\nu, T) .$$

La legge di Wien per la distribuzione spettrale in lunghezze d'onda diventa

$$u_\lambda(\lambda, T) = \frac{1}{\lambda^5} g(\lambda T) . \quad (1.18)$$

Poiché la  $u_\nu$  e la  $u_\lambda$  sono funzioni universali, anche le funzioni  $f$  e  $g$  che appaiono nelle Eqq. (1.17) e (1.18) devono essere funzioni universali.

### 1.4.4 Legge di spostamento di Wien

Sperimentalmente è noto che la funzione  $u_\lambda$  al variare di  $\lambda$  presenta un picco per un certo valore  $\lambda_m$ . La legge di Wien (1.18) ci consente di determinare come varia la posizione di questo picco al variare della temperatura. Infatti,  $\lambda_m$  è determinato dalla condizione di annullamento della derivata di  $u_\lambda$  rispetto a  $\lambda$ :

$$\frac{du_\lambda}{d\lambda} = 0 \quad \longrightarrow \quad -\frac{5}{\lambda^6} g(\lambda T) + \frac{1}{\lambda^5} T g'(\lambda T) = 0 ,$$

dove l'apice indica la derivata rispetto all'argomento della funzione  $g$ , cioè rispetto a  $\lambda T$ . Da questa equazione deduciamo

$$5g(\lambda_m T) = (\lambda_m T) g'(\lambda_m T) , \quad (1.19)$$

che può essere risolta nella variabile  $w \equiv \lambda_m T$  una volta che sia nota la funzione  $g$ . Tuttavia, *indipendentemente* dalla forma della funzione  $g$ , la (1.19) dice che il prodotto di  $\lambda_m T$  prende un valore costante (universale), cosicché, determinato sperimentalmente il valore di  $\lambda_m$  per una certa temperatura  $T$ , è possibile conoscere  $\lambda_m$  per ogni altra temperatura.

Osserviamo che sia la legge di Stefan-Boltzmann che la legge di Wien sono state trovate utilizzando solo il carattere elettromagnetico dell'irraggiamento e i principi della termodinamica. Si rilevi, inoltre, la potenza teorica dell'**esperimento mentale** (*Gedankenexperiment*) per la derivazione di entrambe le leggi. <sup>4</sup>

---

<sup>4</sup>L'importanza del Gedankenexperiment nella ricerca in Fisica è sottolineata nella lezione per il premio Nobel di Wien, reperibile al sito [www.nobel.se](http://www.nobel.se), di cui si consiglia la lettura.

### 1.4.5 Formula dell'irraggiamento di Rayleigh-Jeans

Di qui alla fine della Sezione ci occuperemo della determinazione della forma esplicita di  $u_\nu$ . Seguiremo l'approccio di Planck secondo il quale, in virtù dell'indipendenza dalle proprietà materiali della cavità, si può considerare un sistema formato da *un solo oscillatore armonico lineare*, collocato in una cavità con *pareti riflettenti*, in presenza di un *gas perfetto neutro* che interagisca tramite urti con l'oscillatore armonico, facendo sì che esso abbia una energia media  $\overline{E} = \overline{E}(T)$ , che dipende dalla temperatura. Dal teorema di equipartizione dell'energia, segue che  $\overline{E}(T) = kT$ , dove  $k$  è la costante di Boltzmann.

La condizione di equilibrio della radiazione impone che l'oscillatore emetta tanta energia nell'unità di tempo quanta ne assorbe. Cominciamo con il calcolo della potenza emessa,

$$w_{\text{emessa}} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)c^3} \overline{(\dot{x})^2} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)c^3} \omega^4 \overline{x^2} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)c^3} \omega^4 \frac{A^2}{2} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)mc^3} (2\pi\nu)^2 \overline{E} , \quad (1.20)$$

dove si è fatto uso dell'equazione del moto dell'oscillatore,

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 ,$$

della relazione tra l'energia totale dell'oscillatore e l'ampiezza di oscillazione  $A$ ,

$$E = \frac{1}{2} (m\omega^2) A^2$$

e del fatto che, per un moto armonico,  $\overline{x^2} = A^2/2$ .

Il calcolo della potenza assorbita,  $w_{\text{assorbita}}$  è molto più laborioso e conduce al seguente risultato:

$$w_{\text{assorbita}} = \frac{\pi e^2}{(4\pi\epsilon_0)3m} u_\nu . \quad (1.21)$$

Infatti, l'equazione del moto per un oscillatore armonico forzato

$$m \ddot{x} + m\omega^2 x = eE_x(t) ,$$

dove supponiamo che  $E_x(t) = 0$  per  $|t| > \mathcal{T}/2$ , con  $\mathcal{T}$  arbitrariamente grande (in realtà,  $\mathcal{T}$  è irrilevante nel seguito), per le condizioni al contorno

$$x\left(-\frac{\mathcal{T}}{2}\right) = \dot{x}\left(-\frac{\mathcal{T}}{2}\right) = 0$$

ammette soluzione particolare della forma<sup>5</sup>

$$x(t) = \frac{e}{m\omega} \int_{-\mathcal{T}/2}^t \sin[\omega(t-t')] E_x(t') dt' ,$$

da cui seguono

$$\dot{x}(t) = \frac{e}{m} \int_{-\mathcal{T}/2}^t \cos[\omega(t-t')] E_x(t') dt'$$

---

<sup>5</sup>La soluzione omogenea dell'equazione del moto è irrilevante in quanto segue.

e

$$\ddot{x}(t) = \frac{e}{m} E_x(t) - \frac{e\omega}{m} \int_{-T/2}^t \sin[\omega(t-t')] E_x(t') dt' = \frac{e}{m} E_x(t) - \omega^2 x(t) .$$

La potenza assorbita è data da

$$\begin{aligned} \overline{w}_{\text{assorbita}} &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} dt e E_x(t) \dot{x}(t) \\ &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} dt \frac{e^2}{m} E_x(t) \int_{-T/2}^t \cos[\omega(t-t')] E_x(t') dt' \\ &= \frac{1}{T} \frac{e^2}{m} \int_{-T/2}^{+T/2} dt' E_x(t') \int_{t'}^{T/2} \cos[\omega(t-t')] E_x(t) dt \\ &= \frac{1}{T} \frac{e^2}{m} \int_{-T/2}^{+T/2} dt E_x(t) \int_t^{T/2} \cos[\omega(t-t')] E_x(t') dt' \\ &= \frac{1}{2T} \frac{e^2}{m} \int_{-T/2}^{+T/2} dt E_x(t) \int_{-T/2}^{T/2} \cos[\omega(t-t')] E_x(t') dt' \\ &= \frac{1}{2T} \frac{e^2}{m} \int_{-T/2}^{+T/2} dt E_x(t) \int_{-T/2}^{T/2} \frac{e^{i\omega(t-t')} + e^{-i\omega(t-t')}}{2} E_x(t') dt' \\ &= \frac{1}{2T} \frac{e^2}{m} \left| \int_{-T/2}^{+T/2} dt E_x(t) e^{-i\omega t} \right|^2 = \frac{1}{2T} \frac{e^2}{m} (2\pi) \left| \tilde{E}_x(2\pi\nu) \right|^2 , \end{aligned} \quad (1.22)$$

dove  $\tilde{E}_x(\omega)$  è la trasformata di Fourier di  $E_x(t)$  secondo la definizione (D.5) (si veda l'Appendice generale D per la definizione e le proprietà della trasformata di Fourier).

D'altro canto, per le proprietà delle onde elettromagnetiche nel vuoto e per l'isotropia della radiazione nera, si ha

$$u = \frac{1}{2} \left( \varepsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{\vec{B}^2}{\mu_0} \right) = 3 \varepsilon_0 E_x^2$$

e

$$\begin{aligned} \overline{E_x^2} &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} E_x^2(t) dt = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} E_x(t) dt \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{E}_x(\omega) e^{i\omega t} \frac{d\omega}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{E}_x(\omega) d\omega \int_{-T/2}^{T/2} E_x(t) e^{i\omega t} \frac{dt}{\sqrt{2\pi}} \\ &= \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{E}_x(\omega) \tilde{E}_x(-\omega) d\omega = \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{E}_x(\omega)|^2 d\omega = \frac{2}{T} \int_0^{+\infty} |\tilde{E}_x(\omega)|^2 d\omega , \end{aligned}$$

dove si è fatto uso della proprietà  $\tilde{E}_x^*(\omega) = \tilde{E}_x(-\omega)$  che segue dal fatto che  $E_x(t)$  è reale.

In definitiva, abbiamo che

$$u = \int_0^\infty u_\nu d\nu = 3\varepsilon_0 \frac{2}{T} \int_0^{+\infty} |\tilde{E}_x(\omega)|^2 d\omega = \frac{3(4\pi\varepsilon_0)}{T} \int_0^{+\infty} |\tilde{E}_x(2\pi\nu)|^2 d\nu ,$$

da cui si trae

$$u_\nu = \frac{3(4\pi\varepsilon_0)}{T} |\tilde{E}_x(2\pi\nu)|^2$$

e, quindi,

$$\overline{w}_{\text{assorbita}} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{m} (2\pi) \frac{u_\nu}{3(4\pi\varepsilon_0)} = \frac{\pi e^2}{(4\pi\varepsilon_0) 3m} u_\nu .$$

Imponendo  $\overline{w}_{\text{emessa}} = \overline{w}_{\text{assorbita}}$ , si ha, confrontando la (1.20) e la (1.21),

$$u_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \overline{E}(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT, \quad (1.23)$$

che è la **legge di irraggiamento di Rayleigh-Jeans** (1900-1909). Essa è in accordo con la legge di Wien (1.17) e riproduce i risultati sperimentali per piccole frequenze. Tuttavia, essa è *monotona crescente*, pertanto il suo integrale su tutte le frequenze è divergente. Si è parlato a questo proposito di “**catastrofe ultravioletta**”. L’esperienza mostra invece per la  $u_\nu$  un massimo e poi una discesa. Si ipotizzò come via d’uscita a questo problema che l’equilibrio termico in un corpo nero non si raggiunge mai. In realtà l’esperienza mostra che esso si raggiunge ed anche molto velocemente.

### 1.4.6 Formula dell’irraggiamento di Planck

Nella formula di irraggiamento di Rayleigh-Jeans, un fattore,  $8\pi\nu^2/c^3$ , proviene dall’elettrodinamica classica, l’altro,  $\overline{E}(T) = kT$ , dalla meccanica statistica. Planck provò a mettere in discussione il secondo fattore. Il valor medio dell’energia ha origine, in meccanica statistica, dalla seguente espressione:

$$\overline{E}(T) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} E e^{-E/(kT)} dx dp_x}{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-E/(kT)} dx dp_x}, \quad (1.24)$$

dove  $E$  è l’energia dell’oscillatore armonico,

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

Passando alle variabili  $X$  e  $Y$  definite da

$$X^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad Y^2 = \frac{p_x^2}{2m}$$

e da queste alle coordinate polari piane  $r^2 = E$  e  $\varphi$ , l’espressione (1.24) diventa

$$\overline{E}(T) = \frac{\int_0^{+\infty} E e^{-E/(kT)} dE}{\int_0^{+\infty} e^{-E/(kT)} dE} = kT, \quad (1.25)$$

la cui interpretazione è che  $\overline{E}(T)$  risulta dalla media su tutti i valori possibili dell’energia  $E > 0$ , ciascuno di essi essendo “pesato” con il fattore di Boltzmann  $e^{-E/(kT)}$ . Ora, Planck ipotizzò che l’oscillatore non prendesse tutti i possibili valori di  $E > 0$  con continuità, ma solo un sottoinsieme (numerabile) di essi, individuato dalla successione

$$E_n = n\varepsilon, \qquad n = 0, 1, 2, \dots,$$

dove  $\varepsilon$  è il *quanto* elementare di energia. Da questa ipotesi segue che

$$\overline{E}(T) = \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} n\varepsilon e^{-n\varepsilon/(kT)}}{\sum_{n=0}^{+\infty} e^{-n\varepsilon/(kT)}} = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/(kT)} - 1}, \quad (1.26)$$

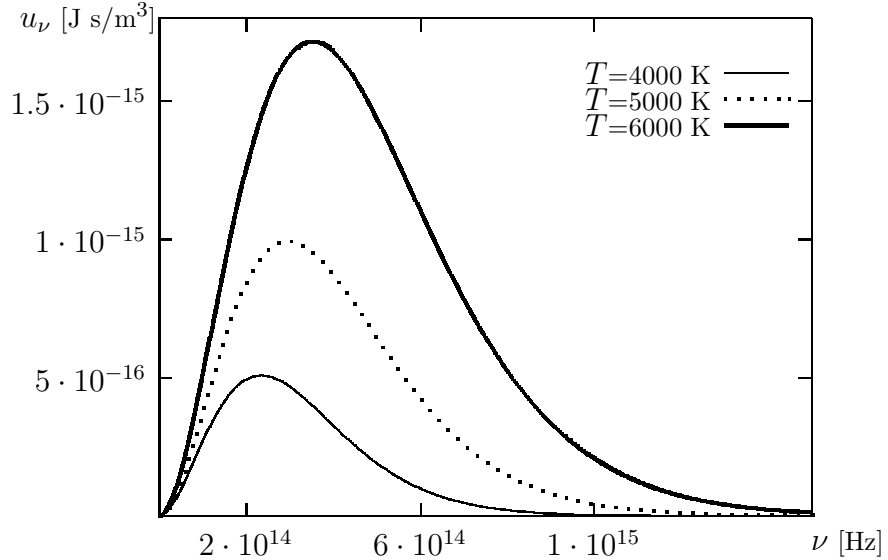


Figura 1.5: Grafico di  $u_\nu(\nu, T)$  per le temperature  $T=4000, 5000, 6000$  K.

da cui si vede che per  $\varepsilon \rightarrow 0$  si riottiene  $\overline{E}(T) = kT$ , come deve essere. La legge di Wien (1.17) impone  $\varepsilon = h\nu$ , dove  $h$  è una costante universale, a cui è stato dato il nome di **costante di Planck**.

In conclusione, abbiamo quindi

$$\overline{E}(T) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/(kT)} - 1} \quad (1.27)$$

e

$$u_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \overline{E}(T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/(kT)} - 1}, \quad (1.28)$$

che è la **legge di irraggiamento di Planck** (1900). Essa risultò essere in perfetto accordo con i risultati sperimentali, in seguito alle misure di Paschen e Rubens. Nella Figura 1.5 è riportato il grafico di  $u_\nu(\nu, T)$  per tre valori della temperatura.

Per trovare la costante che appare nella legge di spostamento di Wien, partiamo dalla densità spettrale scritta in termini delle lunghezze d'onda (si veda la Figura 1.6 per il grafico di  $u_\lambda(\lambda, T)$  per tre valori della temperatura),

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

e determiniamone il punto di massimo. Posto  $y = hc/(\lambda kT)$ , la condizione di massimo  $du_\lambda/d\lambda = 0$  conduce a

$$5(1 - e^{-y}) = y,$$

la cui soluzione si può trovare numericamente e risulta essere  $y = 4.965 \dots$ . Abbiamo pertanto

$$\lambda_m T = \frac{h}{k} \frac{c}{4.965 \dots} \quad (1.29)$$

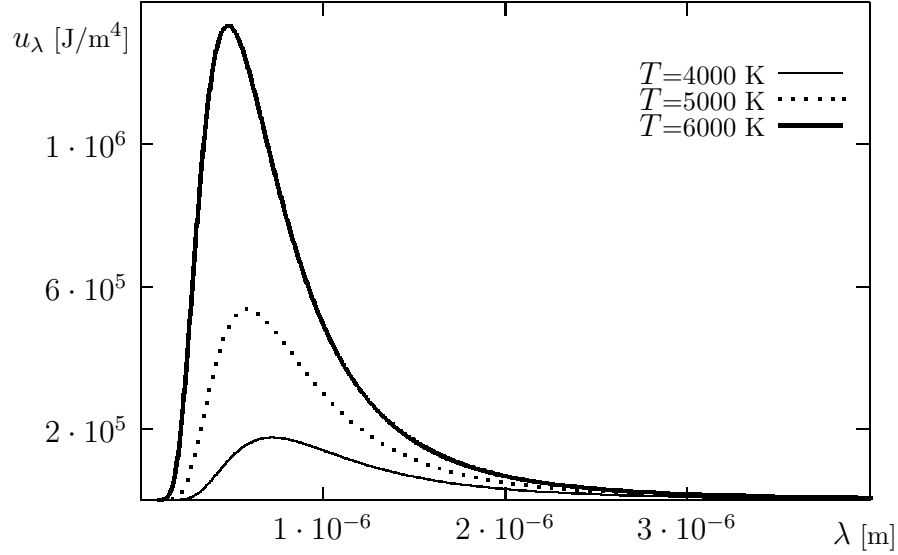


Figura 1.6: Grafico di  $u_\lambda(\lambda, T)$  per le temperature  $T=4000, 5000, 6000$  K.

Dalla misura di  $\lambda_m$  e  $T$  per un qualunque corpo nero, si trova il rapporto  $h/k$ . Ad esempio, il sole ha uno spettro di emissione molto simile a quello di un corpo nero a  $T \simeq 6000$  K e presenta un picco nel verde, con  $\lambda_m \simeq 4500$  Å. Da questi dati è possibile trovare una stima di  $h/k$ .

D'altro canto, abbiamo già trovato in precedenza che il potere emissivo di un corpo nero, che è un quantità accessibile all'esperimento, è dato da  $S = (c/4)u$  (si veda la (1.5)), dove

$$\begin{aligned} u &= \int_0^\infty u_\nu d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \frac{\nu^3}{e^{h\nu/(kT)} - 1} d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx \\ &= \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^\infty dx x^3 \sum_{n=1}^\infty e^{-nx} = \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 6 \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\pi^4}{15} \left(\frac{kT}{h}\right)^4, \end{aligned} \quad (1.30)$$

quindi

$$S = \left(\frac{2\pi^5}{15c^2} \frac{k^4}{h^3}\right) T^4 \equiv \sigma T^4, \quad (1.31)$$

dove  $\sigma$  è detta **costante di Stefan-Boltzmann**. La misura del potere emissivo  $S$  consente di trovare  $k^4/h^3$ . Dai valori sperimentali (dell'epoca di Planck) risulta

$$\begin{aligned} \lambda_m T &= 0.288 \text{ cm grado}, \\ \sigma &= 5.75 \times 10^{-8} \text{ J/(s m}^2 \text{ grado)}, \end{aligned}$$

da cui si ottiene

$$\begin{aligned} h &= 6.55 \times 10^{-34} \text{ J s}, \\ k &= 1.37 \times 10^{-23} \text{ J/grado}. \end{aligned}$$



Per i valori aggiornati di  $\lambda_m T$ ,  $h$  e  $k$ , si rimanda alla tabella dell'Appendice generale A.

Consideriamo ora i limiti di grandi e piccole frequenze per la legge di irraggiamento di Planck:

$$\begin{aligned} h\nu \gg kT : \quad & u_\nu \simeq \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-h\nu/(kT)} , \\ h\nu \ll kT : \quad & u_\nu \simeq \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT . \end{aligned}$$

Nel limite di alte frequenze viene così riprodotta la cosiddetta **legge empirica di Wien**; nel limite di basse frequenze si riottiene la legge di irraggiamento di Rayleigh-Jeans (1.23), che viene riprodotta anche prendendo il limite  $h \rightarrow 0$  della (1.28).

L'ipotesi di Planck che lo scambio di energia tra radiazione e materia avvenisse in modo discreto, per quanti indivisibili di energia, sembrò essere un *artificio matematico* fortunato, ma non una prova irrefutabile della quantizzazione degli scambi di energia.

Si rese pertanto necessario realizzare una nuova serie di esperimenti in grado di analizzare direttamente i processi elementari e di evidenziare l'esistenza di *discontinuità* nell'evoluzione di sistemi fisici alla scala microscopica.

## 1.5 Effetto fotoelettrico

Se l'analisi delle proprietà di irraggiamento di un corpo nero aveva portato Planck a concludere che l'emissione e l'assorbimento di energia raggiante da parte della materia non avvengono con continuità, ma in *quanti di energia* finiti  $h\nu$ , Einstein formulò nel 1905 l'ipotesi ancora più radicale di esistenza dei **quanti di luce**. Secondo questa ipotesi, la luce consiste di quanti (corpuscoli) di energia  $h\nu$  che si muovono con la velocità della luce.

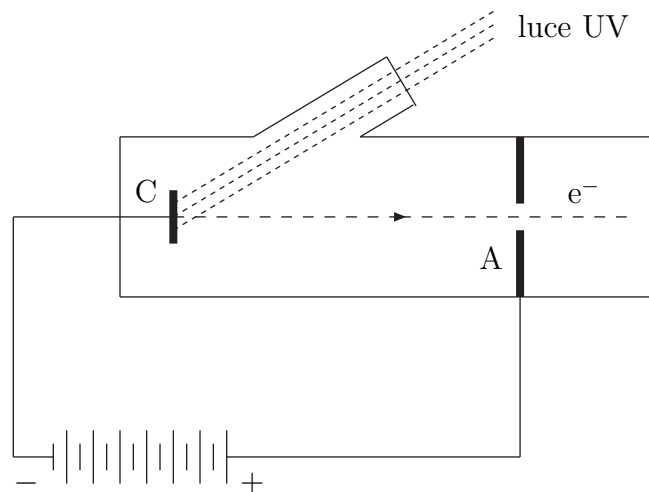


Figura 1.7: Schema dell'apparato sperimentale per l'effetto fotoelettrico.

## 1.5. EFFETTO FOTOELETTRICO

---

Questa ipotesi spiega in modo semplice il cosiddetto **effetto fotoelettrico** (H. Hertz, 1887; Hallwachs, Elster e Geitel, Ladenburg) che può essere realizzato con un apparato come quello schematizzato in Figura 1.7: se si invia su una superficie metallica, ad esempio di metalli alcalini, della luce ultravioletta con una frequenza maggiore di una frequenza di soglia  $\nu_s$  che dipende dal tipo di metallo irradiato, in condizioni di vuoto spinto si osserva che

- la superficie metallica si carica positivamente,
- si libera elettricità negativa sotto forma di elettroni.

Catturando gli elettroni, si può misurare la corrente elettrica. Si può anche determinare la velocità degli elettroni con tecniche di contro-campo o di deflessione. Quello che si trova è che

- il *numero* di elettroni emessi è proporzionale all'*intensità* della radiazione incidente,
- la loro *velocità* dipende solo dalla frequenza  $\nu$  della luce, secondo la relazione

$$\frac{1}{2}mv^2 = E = h\nu - A ,$$

dove  $A$  è una costante caratteristica del metallo.

L'ipotesi dei quanti di luce fornisce una spiegazione esauriente delle osservazioni sperimentali: ogni quanto di luce, colpendo uno degli elettroni del metallo, gli cede la sua energia  $h\nu$ ; se questa energia è maggiore del lavoro di estrazione del metallo  $A$ , l'elettrone spende una parte pari ad  $A$  dell'energia assorbita e la parte restante costituisce l'energia cinetica con cui si muove dopo l'emissione. Se l'energia ceduta dalla radiazione incidente è minore di  $A$ , non vi è alcuna emissione. Da questa interpretazione, segue immediatamente che la frequenza di soglia è determinata dalla condizione

$$h\nu_s - A = 0 \quad \longrightarrow \quad \nu_s = \frac{A}{h} ,$$

Secondo la teoria ondulatoria, invece, un'onda luminosa trasporta una certa quantità di energia proporzionale alla sua intensità; essa cede tutta o parte di questa energia man mano che penetra nel metallo; l'energia accumulata nel metallo consente a certi elettroni di sfuggire da esso. A differenza della spiegazione secondo l'ipotesi corpuscolare, l'emissione non dovrebbe essere istantanea, ma ci dovrebbe essere un *tempo di emissione*, necessario affinché l'energia radiante ceduta al metallo sia almeno pari al lavoro di estrazione.

Nel 1914 Mayer e Gerlach studiarono l'effetto fotoelettrico con piccole particelle di polvere metallica: se questi corpuscoli metallici sono tenuti in sospensione in presenza di un campo elettrico, non appena si produce un elettrone per effetto fotoelettrico (**fotoelettrone**) si manifesta un'accelerazione. Dalla conoscenza delle dimensioni dei corpuscoli, si può stimare, secondo la teoria ondulatoria, il tempo necessario per accumulare l'energia necessaria ad espellere un elettrone. Nelle condizioni sperimentali adottate, questo tempo di emissione doveva essere dell'ordine del secondo. L'esperimento mostrò, invece, che l'emissione di fotoelettroni è *immediata*, in accordo con l'ipotesi corpuscolare dei quanti di luce.

## 1.6 Effetto Compton

La prima evidenza della natura corpuscolare della luce si osserva dalle leggi di *variazione della frequenza* nella diffusione dei raggi X. Classicamente, la diffusione di raggi X su elettroni poco legati (quasi liberi) dovrebbe portare a radiazione diffusa con la *stessa* frequenza di quella primaria: un'onda piana incidente, infatti, fa vibrare un elettrone, che emette un'onda sferica con la stessa frequenza.

Nel 1922 Compton studiò la diffusione di raggi X su un blocco di paraffina<sup>6</sup>: l'osservazione fu che la radiazione diffusa ha una lunghezza d'onda  $\lambda'$  *maggiore* di quella,  $\lambda$ , della radiazione primaria;  $\lambda'$  dipende inoltre dall'angolo di diffusione  $\varphi$  della radiazione (Figura 1.8) e cresce al crescere di esso.

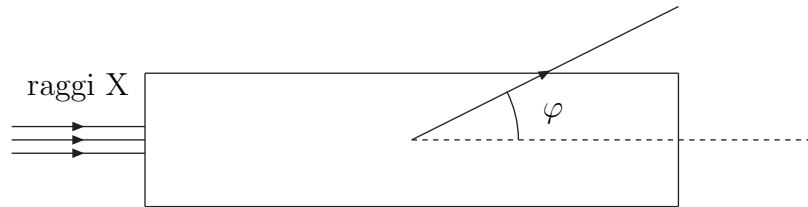


Figura 1.8: Schema della diffusione Compton.

Cerchiamo di interpretare questo risultato secondo la teoria dei quanti di luce e secondo la teoria ondulatoria classica. Partiamo dalla teoria corpuscolare. Poiché i fotoni si muovono alla velocità della luce, sono corpuscoli di massa nulla e dalla teoria della relatività ristretta sappiamo che vale la relazione  $E = pc$ , avendo indicato con  $p$  la quantità di moto. Pertanto, se un fotone ha energia  $E = h\nu$ , il suo impulso nella direzione di propagazione vale

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}.$$

Consideriamo l'urto di un fotone su un elettrone fermo ed indichiamo con  $\varphi$  l'angolo di diffusione del fotone e con  $\psi$  quello di diffusione dell'elettrone. Indichiamo, inoltre, con  $p'$  e con  $P'$  le quantità di moto rispettivamente del fotone e dell'elettrone diffusi.

La conservazione dell'energia e della quantità di moto impone

$$\begin{cases} \vec{p} = \vec{p}' + \vec{P}' \\ mc^2 + pc = \sqrt{P'^2 c^2 + m^2 c^4} + p'c \end{cases}$$

da cui segue, esplicitando la conservazione della quantità di moto per le due componenti longitudinale e trasversa (si veda la Figura 1.9),

$$\begin{cases} p = p' \cos \varphi + P' \cos \psi \\ 0 = p' \sin \varphi - P' \sin \psi \\ mc^2 + pc - p'c = \sqrt{P'^2 c^2 + m^2 c^4}. \end{cases}$$

<sup>6</sup>La paraffina ha una formula del tipo  $(CH_2)_n$  ed è pertanto ricca di idrogeno con bassa energia di legame.

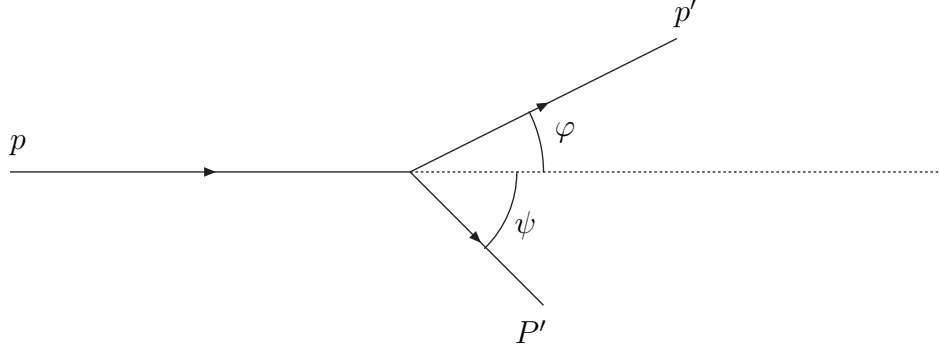


Figura 1.9: Diffusione di un fotone di impulso  $p$  su un elettrone in quiete;  $p'$  è l'impulso del fotone diffuso,  $P'$  è l'impulso dell'elettrone diffuso.

Da queste equazioni, eliminando le variabili  $\psi$  e  $P'$ , si arriva alla relazione

$$mc(p - p') = pp'(1 - \cos \varphi) ,$$

che conduce a

$$mch \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = \frac{h^2}{\lambda\lambda'} (1 - \cos \varphi) ,$$

equivalente a

$$\lambda' - \lambda \equiv \Delta\lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \varphi) = 2 \left( \frac{h}{mc} \right) \sin^2 \left( \frac{\varphi}{2} \right) . \quad (1.32)$$

La grandezza  $\lambda_e \equiv h/(mc) \simeq 2.42 \times 10^{-12}$  m prende il nome di **lunghezza d'onda Compton dell'elettrone**. Per completezza, l'espressione per la quantità di moto di rinculo dell'elettrone è data da

$$P'^2 = (p - p')(p - p' + 2mc) .$$

Nel caso in cui l'elettrone non sia in quiete prima dell'urto, ma possieda quantità di moto  $P$  nella direzione del fotone incidente, il sistema di equazioni di conservazione diventa

$$\begin{cases} p + P = p' \cos \varphi + P' \cos \psi \\ 0 = p' \sin \varphi - P' \sin \psi \\ pc + E = p'c + E' \end{cases}$$

dove  $E = \sqrt{P^2 c^2 + m^2 c^4}$  ed  $E' = \sqrt{P'^2 c^2 + m^2 c^4}$  sono l'energia totale dell'elettrone rispettivamente prima e dopo l'urto. Questo sistema di equazioni conduce a

$$\Delta\lambda = 2\lambda \frac{(P + p)c}{E - Pc} \sin^2 \left( \frac{\varphi}{2} \right) . \quad (1.33)$$

Nel caso di elettrone iniziale fermo,  $\Delta\lambda$  non dipende da  $\lambda$ , ma solo da  $\varphi$ . Il risultato (1.32) è in ottimo accordo con i risultati sperimentali. Compton dimostrò anche l'esistenza degli elettroni di rinculo nella camera di Wilson e, insieme a Simon, studiò la *doppia diffusione* Compton, cioè

la diffusione su un secondo elettrone del fotone diffuso dopo un primo urto contro un elettrone, trovando anche in questo accordo tra teoria corpuscolare e risultato sperimentale.

Secondo la teoria ondulatoria classica, una parte dell'energia elettromagnetica trasportata dalla radiazione incidente viene assorbita dall'elettrone e viene riemessa sotto forma di radiazione con la *stessa* frequenza. Per effetto del *trasferimento continuo* di impulso all'elettrone, esso subisce un'accelerazione progressiva nella direzione dell'onda incidente. Nel *sistema di riposo* dell'elettrone, la radiazione emessa ha impulso nullo e stessa frequenza di quella incidente nello stesso sistema. Nel *sistema di laboratorio*, per effetto Doppler, la frequenza della radiazione emessa è diversa da quella della radiazione incidente:

$$\Delta\lambda = 2\lambda \frac{P_{cl}c}{E_{cl} - P_{cl}c} \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right), \quad (1.34)$$

dove  $P_{cl}$  ed  $E_{cl}$  sono l'impulso e l'energia dell'elettrone. Questo risultato *non* è in accordo con i dati sperimentali che mostrano trasferimento *discontinuo* ad *alcuni* elettroni, invece di *trasferimento continuo* a *tutti* gli elettroni irradiati.

Tuttavia, non si può ignorare la grande somiglianza tra la (1.33) e la (1.34). In effetti, sotto irraggiamento *prolungato*, un elettrone riceve un urto e si mette in moto, poi riceve un secondo urto, e così via. In ogni urto l'elettrone guadagna una quantità di moto  $\sim \vec{p}$  e, dopo molti urti, le fluttuazioni intorno alla direzione incidente si compensano e il guadagno dopo ogni urto (pari a  $p = h\nu/c$ ) diventa sempre più piccolo rispetto all'impulso già acquistato dall'elettrone, cosicché

$$\langle P + p \rangle \simeq \langle P \rangle = P_{cl},$$

dove  $\langle \rangle$  sta per media su molti urti.

Per completezza, dimostriamo ora come si giunge alla formula (1.34). Nel sistema di laboratorio un'onda piana di frequenza  $\nu$  incide su un elettrone che si muove nella direzione di propagazione dell'onda con impulso  $\vec{P}$ . Esso riemette un'onda sferica di frequenza  $\nu'$  nella direzione  $\varphi$ . Nel *sistema di quiete* dell'elettrone, l'onda incidente ha frequenza

$$\nu_0 = \nu \frac{1 - \beta}{\sqrt{1 - \beta^2}},$$

così come l'onda sferica emessa dall'elettrone. Quest'ultima, osservata nel *sistema di laboratorio* sotto la direzione  $\varphi$  ha frequenza

$$\nu' = \nu_0 \frac{1 + \beta \cos \varphi_0}{\sqrt{1 - \beta^2}},$$

dove  $\varphi_0$  è l'angolo corrispondente a  $\varphi$  nel sistema di quiete dell'elettrone. Poiché

$$\nu' \cos \varphi = \nu_0 \frac{\beta + \cos \varphi_0}{\sqrt{1 - \beta^2}},$$

si ha

$$\cos \varphi_0 = \frac{\nu'}{\nu_0} \cos \varphi \sqrt{1 - \beta^2} - \beta$$

e, da qui,

$$\nu' = \nu_0 \sqrt{1 - \beta^2} + \beta \nu' \cos \varphi = (1 - \beta)\nu + \beta \nu' \cos \varphi,$$

cioè

$$\nu' = \frac{(1 - \beta)\nu}{1 - \beta \cos \varphi}.$$

In termini di lunghezze d'onda, si ha

$$\frac{1}{\lambda'} = \frac{1}{\lambda} \frac{1 - \beta}{1 - \beta \cos \varphi} \quad \longrightarrow \quad \lambda' - \lambda \equiv \Delta\lambda = \lambda \beta \frac{1 - \cos \varphi}{1 - \beta} \quad \longrightarrow \quad \Delta\lambda = 2\lambda \frac{Pc}{E - Pc} \sin^2 \left( \frac{\varphi}{2} \right) .$$

## 1.7 La doppia fenditura di Young

La spiegazione dell'effetto fotoelettrico e dell'effetto Compton in termini dell'ipotesi dei quanti di luce sembra puntare decisamente a favore di una teoria corpuscolare della luce. Ciò ribalterebbe l'esito della lunga controversia sulla natura della luce che a metà dell'Ottocento si era conclusa a favore di chi sosteneva la teoria ondulatoria, a seguito degli esperimenti di interferenza e diffrazione di Young e Fresnel.

In questa Sezione ci proponiamo di verificare se la nuova teoria corpuscolare della luce è in grado di spiegare il risultato di uno di questi esperimenti, quello della doppia fenditura di Young, che nell'ambito della teoria ondulatoria si presta ad una immediata interpretazione.

Si faccia incidere della radiazione monocromatica piana di lunghezza d'onda  $\lambda$  su una parete piana, disposta ortogonalmente rispetto alla direzione di propagazione dell'onda (direzione  $z$ ) e dotata di due fenditure  $F_1$  ed  $F_2$  molto strette ed allungate lungo la direzione  $y$ , a distanza  $d$  l'una dall'altra. Si supponga, inoltre, che la larghezza delle fenditure nella direzione  $x$  sia dello stesso ordine di grandezza di  $\lambda$ . Si disponga inoltre uno schermo piano parallelo alla parete al di là di essa, sul quale raccogliere la radiazione passata attraverso le fenditure.

Quando  $F_2$  viene ostruita ed  $F_1$  è tenuta aperta, sullo schermo si produce una figura di diffrazione (si veda l'Appendice B di questo Capitolo), con massimo in corrispondenza della fenditura  $F_1$ . Analogamente, con  $F_1$  ostruita ed  $F_2$  aperta, sullo schermo si produce una figura di diffrazione con massimo in corrispondenza della fenditura  $F_2$ . Con entrambe le fenditure aperte, l'immagine sullo schermo risulta essere la sovrapposizione delle due figure di diffrazione da singola fenditura, ma presenta anche delle *frange di interferenza* (si veda l'Appendice A di questo Capitolo), laddove queste due figure di diffrazione si sovrappongono (si veda la Figura 1.10). La spiegazione di questo fenomeno in termini di teoria ondulatoria è semplice: il campo elettrico totale in un generico punto dello schermo è dato da  $E_1 + E_2$ , dove  $E_{1,2}$  è il campo relativo alla radiazione che emerge dalla fenditura  $F_{1,2}$ . Pertanto, l'intensità totale di radiazione è proporzionale a

$$|E_1 + E_2|^2 = |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2 \operatorname{Re}(E_1 E_2^*) ,$$

dove i termini  $|E_1|^2$  ed  $|E_2|^2$  sono proporzionali all'intensità della radiazione sullo schermo con una delle due fenditure ostruita, mentre il terzo termine è quello di *interferenza*.

Può il risultato di questo esperimento essere spiegato con la teoria corpuscolare della luce? Per la parte con una delle due fenditure ostruita, non ci sono problemi: i fotoni che costituiscono la radiazione incidente vengono deflessi per gli urti contro le pareti della fenditura e giungono sullo schermo disponendosi a formare una figura di diffrazione. Per spiegare le frange di interferenza che si producono quando entrambe le fenditure sono aperte, bisogna ipotizzare che i fotoni che passano da  $F_1$  e quelli che passano da  $F_2$  interferiscano lungo il percorso tra parete e schermo, urtandosi tra di loro, giungendo così sullo schermo secondo la distribuzione corretta.

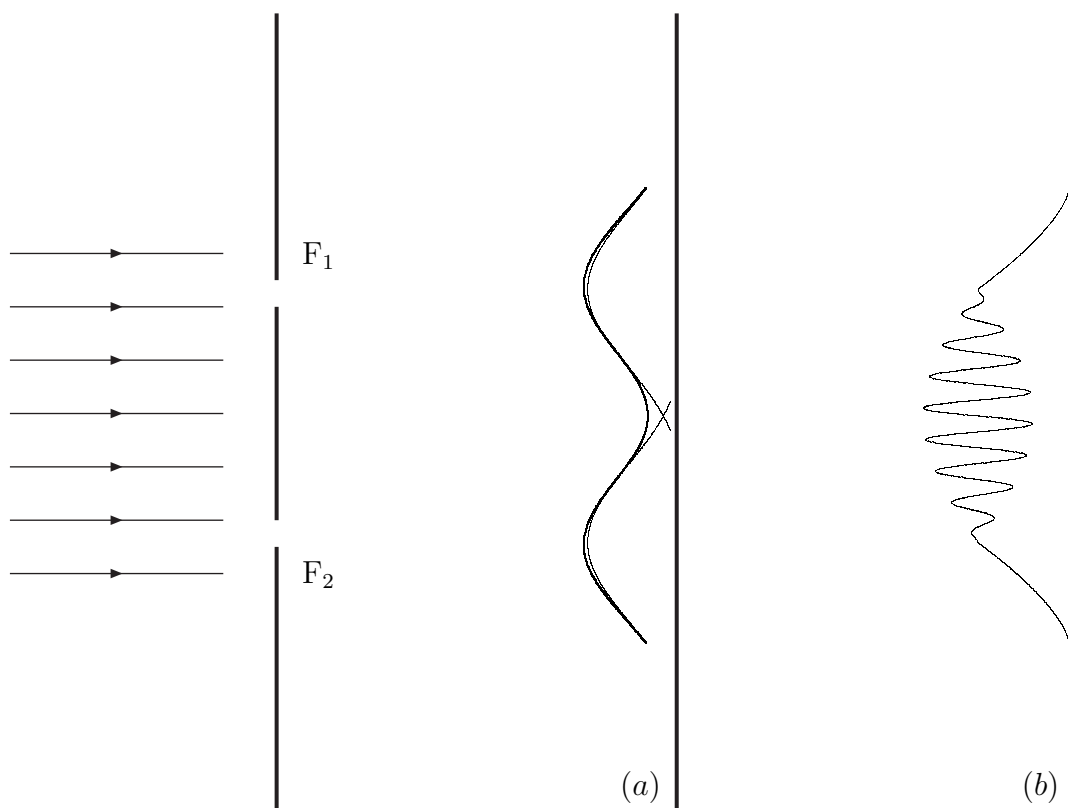


Figura 1.10: La doppia fenditura di Young: (a) secondo la teoria corpuscolare il segnale sullo schermo quando le due fenditure sono aperte deve essere la somma dei segnali ottenuti quando una delle due fenditure è aperta e l'altra chiusa; (b) secondo la teoria ondulatoria si produce interferenza nella regione di sovrapposizione dei due segnali.

Tuttavia, se questa ipotesi fosse vera, diminuendo l'intensità della radiazione incidente fino a far sì che *un fotone per volta* giunga sulla parete ed aumentando opportunamente il tempo di irraggiamento, si dovrebbe osservare la stessa immagine sullo schermo, ma *senza* le frange di interferenza, dal momento che ciascun fotone non può interferire con nessun altro durante il suo viaggio dalla parete allo schermo. Quello che succede in realtà è che le frange **non** scompaiono.<sup>7</sup> Bisogna pertanto concludere che la pura e semplice teoria corpuscolare della luce non è valida.

D'altro canto, se l'esposizione all'irraggiamento è breve, solo pochi fotoni giungono sullo schermo, producendo un *impatto localizzato*, ma senza nessuna figura di interferenza. Quindi anche l'interpretazione puramente ondulatoria non è valida.

Quello che succede è che i fotoni nei loro impatti si distribuiscono in modo *casuale*; solo quando ne arrivano molti si ottiene la distribuzione con le frange di interferenza. Analogamente, quando solo una fenditura è aperta, i singoli fotoni che vi passano attraverso giungono sullo schermo in punti a caso; dopo che ne arrivano molti di essi la distribuzione prende la forma della figura di diffrazione.

<sup>7</sup>Siffatta esperienza è stata effettivamente realizzata da Fabrikant, Biberman e Sushkin nel 1948, usando fasci di elettroni (ciò non cambia la sostanza delle cose, come sarà chiaro nel Capitolo 3).

Una prima conclusione che possiamo trarre da questo esperimento è che non è possibile spiegarne il risultato *solo* con la teoria corpuscolare o *solo* con la teoria ondulatoria. L'aspetto ondulatorio e quello corpuscolare della luce sono inseparabili: la luce si comporta come un flusso di particelle (fotoni), il comportamento di ciascuno dei quali può essere previsto solo in senso *probabilistico*. La probabilità che un fotone si manifesti è governata dall'*onda*. Così, nel caso in cui la fenditura  $F_2$  sia ostruita, la probabilità che un fotone si manifesti in un certo punto dello schermo è governata da  $|E_1|^2$  in quel punto dello schermo. Pertanto,  $|E_1|^2$  rappresenta la distribuzione dei fotoni sullo schermo quando molti di essi ne arrivano. Quando entrambe le fenditure sono aperte, la probabilità che un fotone si manifesti in un certo punto dello schermo è governata da  $|E_1 + E_2|^2$ , che rappresenta pertanto la distribuzione dei fotoni quando molti di essi ne arrivano. Quest'ultima distribuzione include il termine di interferenza.

Possiamo trarre altre conclusioni da questo esperimento. Poiché è stata esclusa l'interazione mutua tra fotoni, com'è possibile che il risultato dell'esperimento cambi in modo così cruciale se una delle due fenditure è aperta o se lo sono entrambe? Cosa cambia per un fotone che passa da una delle fenditure se l'altra fenditura è chiusa o aperta?

Per rispondere a queste domande, cerchiamo di capire da quale fenditura sia passato un certo fotone giunto sullo schermo, quando tutte e due siano aperte. Si può pensare, ad esempio, di collocare un rivelatore dietro la fenditura  $F_1$ : se i fotoni arrivano uno ad uno, ciascuno di essi sarà rivelato oppure no. Se è rivelato, vuol dire che è passato da  $F_1$  ed è stato assorbito dal rivelatore; se non è rivelato, vuol dire che è passato da  $F_2$ . Questa situazione è equivalente a quella con  $F_1$  ostruita ed  $F_2$  aperta: sullo schermo si produce una figura di diffrazione senza le frange di interferenza. In definitiva, il tentativo di effettuare una *misura* sul sistema lo *perturba* radicalmente, cambiandone completamente il risultato. Inoltre, è impossibile determinare la *traiettoria* seguita da ciascun fotone: per farlo bisognerebbe collocare dei rivelatori dietro le fenditure, perturbando il sistema su cui si vuole effettuare la determinazione.

È evidente da quanto detto in questa Sezione che è necessario rinunciare ad alcuni principi della teoria classica e postularne di nuovi su cui costruire la teoria dei fenomeni microscopici.

## 1.8 Esercitazioni

### 1.8.1 Riflessione alla Bragg

Se si sottopone ad irraggiamento X la superficie di un cristallo, si osserva che l'intensità della radiazione diffusa cambia al variare dell'angolo di incidenza della radiazione. Questo fenomeno si spiega con l'interferenza tra la radiazione diffusa dai diversi piani reticolari del cristallo (Bragg, 1913).

La differenza di cammino ottico tra i raggi diffusi dal piano reticolare più esterno e da quello immediatamente sottostante è pari

$$\Delta l = 2d \sin \theta ,$$

dove  $d$  è il passo reticolare e  $\theta$  è l'angolo formato dalla direzione dei raggi X incidenti con la superficie del cristallo (si veda la Figura 1.11).



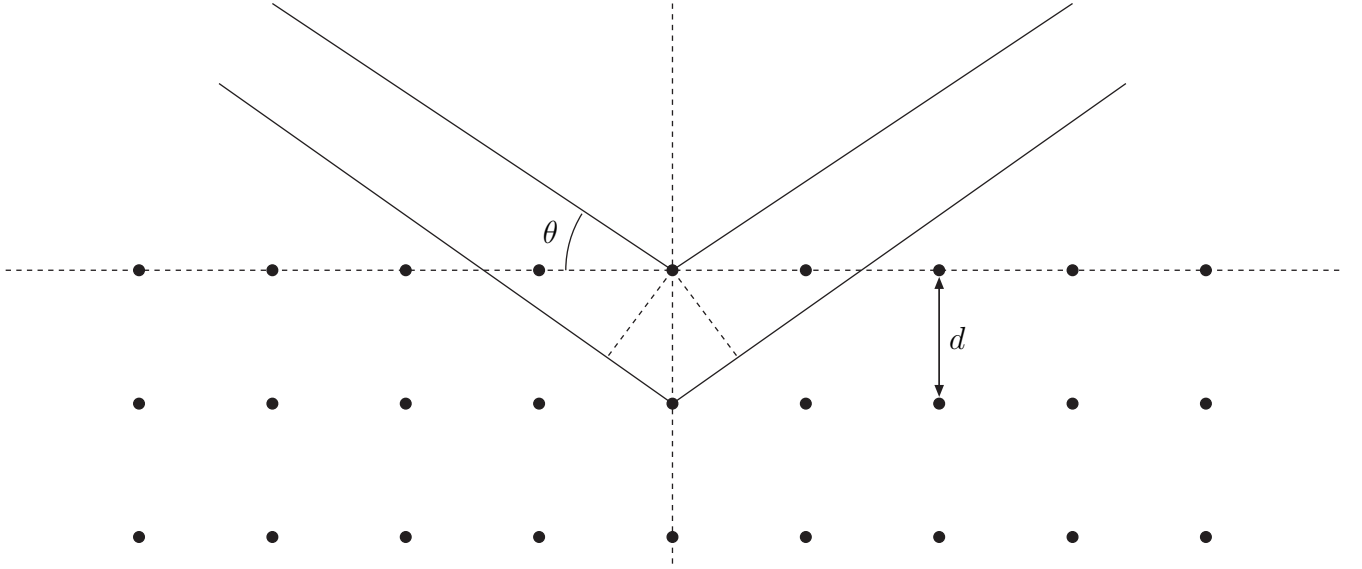


Figura 1.11: Riflessione alla Bragg.

Il valore tipico di  $d$  è dell'ordine di  $1 \text{ \AA}$ , cioè dell'ordine della lunghezza d'onda  $\lambda$  della radiazione X. Si ha interferenza costruttiva per  $\Delta l/\lambda = n$ , con  $n$  intero (si veda l'Appendice A di questo Capitolo). Gli angoli di incidenza per i quali questa condizione è soddisfatta sono quelli in corrispondenza dei quali si hanno i massimi della radiazione diffusa.

## A Appendice: interferenza tra onde elettromagnetiche

Si considerino due onde piane polarizzate linearmente, con la stessa pulsazione  $\omega$ , propagantesi lungo la direzione  $x$ . In un generico punto P le loro ampiezze saranno della forma

$$\begin{aligned} E_1(x, t) &= E_1 \cos(kx - \omega t + \alpha_1) , \\ E_2(x, t) &= E_2 \cos(k(x - \Delta) - \omega t + \alpha_2) . \end{aligned}$$

La media temporale dell'intensità in quel punto è proporzionale a

$$\overline{E_{\text{tot}}^2} = \overline{(E_1(x, t) + E_2(x, t))^2} ,$$

dove la soprallineatura sta per media su un intervallo di tempo pari al periodo dell'oscillazione.

Troviamo innanzitutto l'espressione per  $E_{\text{tot}}^2$ :

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}}^2 &= E_1^2 \cos^2(kx - \omega t + \alpha_1) + E_2^2 \cos^2(k(x - \Delta) - \omega t + \alpha_2) \\ &+ 2E_1 E_2 \cos(kx - \omega t + \alpha_1) \cos(k(x - \Delta) - \omega t + \alpha_2) . \\ &= E_1^2 \cos^2(kx - \omega t + \alpha_1) + E_2^2 \cos^2(k(x - \Delta) - \omega t + \alpha_2) \\ &+ E_1 E_2 \left[ \cos \delta + \cos(2(kx - \omega t) - k\Delta + \alpha_1 + \alpha_2) \right] , \end{aligned}$$

dove  $\delta \equiv \alpha_1 - \alpha_2 + k\Delta$ . Poi, determiniamone la media temporale,

$$\begin{aligned}
 \overline{E_{\text{tot}}^2} &\equiv \frac{1}{T} \int_0^T dt E_{\text{tot}}^2 \\
 &= \frac{1}{T} \int_0^T dt E_1^2(x, t) + \frac{1}{T} \int_0^T dt E_2^2(x, t) \\
 &+ \frac{1}{T} \int_0^T dt E_1 E_2 \left[ \cos \delta + \cos(2(kx - \omega t) - k\Delta + \alpha_1 + \alpha_2) \right] \\
 &= \frac{E_1^2}{2} + \frac{E_2^2}{2} + E_1 E_2 \cos \delta = \frac{1}{2} (E_1^2 + E_2^2 + 2E_1 E_2 \cos \delta) . \tag{A.1}
 \end{aligned}$$

Da questo risultato si vede che l'intensità nel punto P può variare tra un valore minimo, proporzionale a  $(E_1 - E_2)^2$ , realizzato per  $\cos \delta = -1$  (**interferenza distruttiva**) ed un valore massimo, proporzionale a  $(E_1 + E_2)^2$ , realizzato per  $\cos \delta = +1$  (**interferenza costruttiva**). Per onde con la stessa fase iniziale, cioè per  $\alpha_1 = \alpha_2$ , la condizione di interferenza costruttiva è realizzata quando

$$k\Delta = 2n\pi \quad \longrightarrow \quad \frac{2\pi}{\lambda} \Delta = 2n\pi \quad \longrightarrow \quad \Delta = n\lambda , \quad n \text{ intero} ,$$

cioè quando la differenza di cammino ottico  $\Delta$  è un multiplo intero della lunghezza d'onda  $\lambda$ . La condizione di interferenza distruttiva è realizzata invece per

$$k\Delta = (2n + 1)\pi \quad \longrightarrow \quad \Delta = \left(n + \frac{1}{2}\right) \lambda , \quad n \text{ intero} .$$

Se le ampiezze  $E_1$  ed  $E_2$  sono uguali, nei punti di interferenza distruttiva l'intensità di radiazione è nulla.

Usando la notazione complessa per il campo elettrico, possiamo scrivere

$$\begin{aligned}
 E_1(x, t) &= \text{Re} \left[ E_1 e^{i\alpha_1} e^{i(kx - \omega t)} \right] \equiv \text{Re} \left[ \mathcal{E}_1(x, t) \right] , \\
 E_2(x, t) &= \text{Re} \left[ E_2 e^{i\alpha_2} e^{i(k(x - \Delta) - \omega t)} \right] \equiv \text{Re} \left[ \mathcal{E}_2(x, t) \right] ,
 \end{aligned}$$

e l'intensità media totale nel punto P risulta proporzionale a

$$\frac{1}{2} |\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2|^2 = \frac{1}{2} \left[ |\mathcal{E}_1|^2 + |\mathcal{E}_2|^2 + 2 \text{Re}(\mathcal{E}_1 \mathcal{E}_2^*) \right] ,$$

come si può verificare facilmente.

Un esempio particolarmente interessante di interferenza è quello che si realizza inviando un'onda piana monocromatica di lunghezza d'onda  $\lambda$  su una parete piana, disposta ortogonalmente rispetto alla direzione di propagazione dell'onda (direzione  $z$ ) e dotata di due fenditure molto strette ed allungate lungo la direzione  $y$ , a distanza  $d$  l'una dall'altra (si veda la Figura 1.12). L'immagine che si produrrà su uno schermo piano parallelo alla parete, posto a distanza  $L \gg d$  da essa, presenterà un'alternanza lungo la direzione  $x$  di strisce chiare e scure (**frange**). L'intensità della radiazione in un generico punto P dello schermo dipenderà infatti dall'interferenza tra l'onda che emerge dalla prima fenditura e quella che emerge dalla seconda. I punti di chiaro sullo schermo sono quelli per

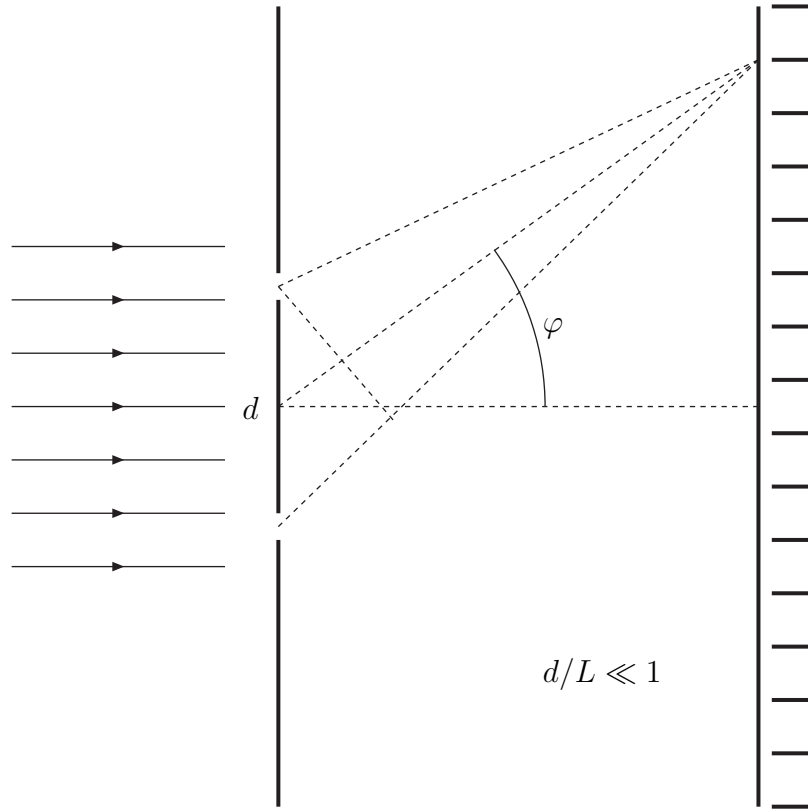


Figura 1.12: Schema di interferenza da doppia fenditura.

i quali si verifica interferenza costruttiva, cioè quelli per cui la differenza di cammino ottico fra le onde che emergono dalle due fenditure è un multiplo intero della lunghezza d'onda. Per il sistema in questione ciò significa

$$d \sin \varphi = n \lambda, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

dove  $\varphi$  è l'angolo sotto cui un generico punto dello schermo è visto da un punto sulla parete che ha la sua stessa coordinata  $y$  ed è equidistante alle due fenditure. Analogamente, le strisce di scuro sono individuate dalla condizione

$$d \sin \varphi = \left(n + \frac{1}{2}\right) \lambda, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

## B Appendice: diffrazione

Se si invia un'onda piana monocromatica di lunghezza d'onda  $\lambda$  su una parete piana, disposta ortogonalmente rispetto alla direzione di propagazione dell'onda e dotata di una fenditura, che per semplicità supporremo circolare, di diametro  $d$  dell'ordine di  $\lambda$ , la distribuzione dell'intensità della

radiazione su uno schermo piano parallelo alla parete avrà la forma di un alone circolare chiaro, con intensità massima nel punto di mezzo, corrispondente al centro della fenditura, accompagnato da un alternarsi di cerchi concentrici chiari e scuri, sempre più ravvicinati e con contrasto via via decrescente. A questo fenomeno si dà il nome di **diffrazione** (si veda la Figura 1.13).

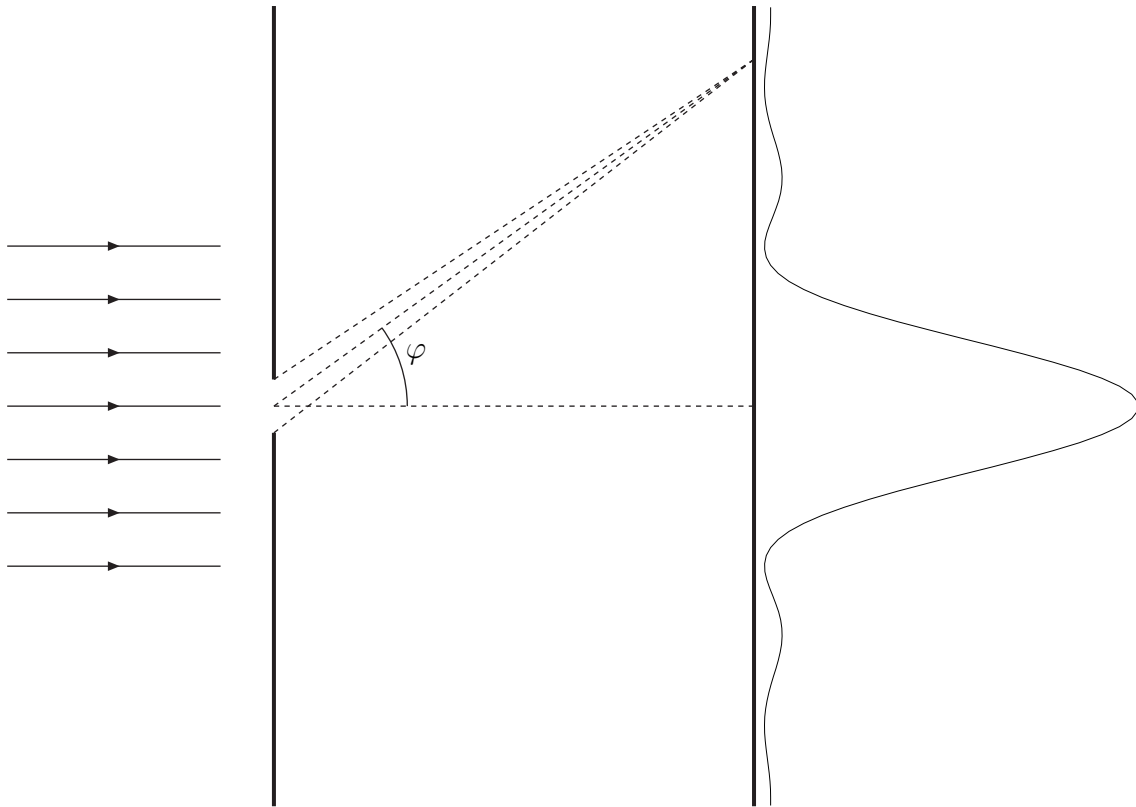


Figura 1.13: Schema di diffrazione da fenditura.

Si può dimostrare che il sistema ottico in questione è equivalente a quello in cui ciascuno dei punti che si trovano sul cerchio delimitato dalla fenditura si comporta come sorgente di radiazione elettromagnetica con la stessa ampiezza e la stessa lunghezza d'onda  $\lambda$  di quella incidente, *in fase* con gli altri punti, e che la figura di diffrazione che si produce sullo schermo è il risultato della mutua interferenza tra la radiazione emessa da tutti questi punti. I cerchi di scuro sullo schermo sono individuati dalla condizione

$$d \sin \varphi = n\lambda, \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots,$$

dove  $\varphi$  è l'angolo sotto cui un generico punto P dello schermo è visto dal centro della fenditura.

È evidente che se la dimensione della fenditura  $d$  è molto maggiore della lunghezza d'onda  $\lambda$ , i cerchi di diffrazione saranno così ravvicinati che l'intera figura di diffrazione apparirà come un'unica macchia luminosa sullo schermo, in corrispondenza del centro della fenditura, come ci si aspetta dall'ottica geometrica.

## Esercizi

1. Ricavare la (1.33).

## Bibliografia

- Per la teoria della radiazione nera:  
T. Becker, *Teoria dell'elettricità*, Sansoni;  
M. Born, *Fisica atomica*, Bollati Boringhieri.
- Per l'effetto fotoelettrico e l'effetto Compton:  
A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod.
- Per la doppia fenditura di Young:  
C. Cohen-Tannoudji, *Mécanique quantique*, Hermann.
- Per l'interferenza tra onde elettromagnetiche:  
L. Lovitch, S. Rosati, *Fisica generale, vol. 2*, Casa Editrice Ambrosiana.
- Per la diffrazione:  
J.D. Jackson, *Elettrodinamica classica*, Zanichelli.

---

## Capitolo 2

# Le origini della teoria quantistica: quantizzazione nella materia

### 2.1 Atomo di Thomson e atomo di Rutherford

Le scoperte scientifiche della fine del XIX secolo, che avevano verificato al di là di ogni dubbio l'ipotesi atomica della materia, aprirono la strada alla formulazione di modelli sulla struttura dell'atomo.

Nel 1903 J.J. Thomson ipotizzò che un atomo con numero atomico  $Z$  fosse costituito da una sfera uniformemente carica di raggio dell'ordine di  $1 \text{ \AA}$  con carica totale positiva pari a  $+Ze$ , all'interno della quale siano distribuiti gli  $Z$  elettroni, un pò come l'uvetta in un panettone o i semi in un'anguria. Questo modello atomico, però, risultò incompatibile con varie osservazioni sperimentali: in particolare, non era in grado di spiegare il risultato degli esperimenti di diffusione di particelle  $\alpha$  su lamine sottili condotti da Rutherford a partire dal 1911.

Quando un fascio omogeneo di particelle  $\alpha$  ( $Z = 2$ ,  $A = 4$ ) viene fatto incidere perpendicolarmente ad una lamina sottile di oro, ciascuna particella del fascio viene deflessa per effetto dell'interazione con gli atomi della lamina. La distribuzione angolare delle particelle deflesse può essere determinata mediante l'impiego di uno schermo mobile di materiale scintillante o di un contatore Geiger. Poiché le particelle  $\alpha$  sono molto più pesanti degli elettroni, la loro deflessione dipende esclusivamente dalla distribuzione della carica positiva degli atomi della lamina.

Se essa fosse uniforme su dimensioni dell'ordine di  $1 \text{ \AA}$ , come nel modello di Thomson, le particelle  $\alpha$  dovrebbero attraversare la lamina subendo una debole deflessione. Gli esperimenti di Rutherford mostrarono invece che la maggior parte delle particelle attraversavano indisturbate la lamina, ma che alcune di esse subivano deflessioni molto violente, rimbalzando talvolta all'indietro, come se avessero colpito qualcosa di particolarmente duro. I risultati ottenuti da Rutherford erano compatibili con un modello di atomo in cui tutta la carica positiva fosse concentrata in un **nucleo** centrale di dimensioni dell'ordine di  $10^{-13} \text{ cm}$ .<sup>1</sup> Intorno al nucleo, dopo un grande spazio vuoto, si troverebbero gli  $Z$  elettroni, che si muovono intorno ad esso, come i pianeti intorno al sole (ma a distanze, in

---

<sup>1</sup>Inizialmente si pensava che il nucleo fosse costituito da  $A$  protoni ed  $A - Z$  elettroni, in modo da avere una carica nucleare totale di  $+Ze$  ed un numero di massa pari ad  $A$ . In seguito alla scoperta del **neutrone** (1932), fu chiaro che esso era formato da  $Z$  protoni e  $A - Z$  neutroni.

proporzione, maggiori), occupando una sfera di raggio dell'ordine di  $1 \text{ \AA}$ . Essi determinano le proprietà chimiche degli elementi (legami, elettronegatività, ecc.).

Tuttavia anche il modello atomico di Rutherford non poteva essere completamente accettato, perché incompatibile con la struttura degli **spettri di emissione e di assorbimento** di luce da parte della materia.

Il perfezionamento delle tecniche di indagine spettroscopica aveva messo in evidenza che un atomo emette o assorbe radiazione elettromagnetica di frequenze ben definite. Ciò equivale a dire che il suo spettro di emissione o di assorbimento presenta **righe spettrali strette**. Lo spettro di emissione o assorbimento cambia da atomo ad atomo, ma per un tipo di atomo fissato, è lo stesso per tutti gli atomi, se si opera nelle stesse condizioni sperimentali. Ogni atomo può essere quindi identificato mediante questo spettro. L'atomo di Rutherford non prevede questa possibilità: ciascun elettrone in orbita intorno al nucleo sarebbe soggetto ad un'accelerazione e quindi irraggerebbe energia elettromagnetica, perdendo energia in modo continuo e compiendo una traiettoria a spirale fino a cadere sul nucleo. Durante questo processo l'elettrone emetterebbe radiazione elettromagnetica con spettro continuo di frequenze, in disaccordo con le osservazioni sperimentali che mostrano uno spettro discreto di frequenze. Nel caso di un atomo di idrogeno, inoltre, la durata del moto di spiralizzazione dell'elettrone intorno al nucleo fino alla sua caduta può essere stimato in circa  $10^{-10}$  s, che implica che tale atomo non potrebbe esistere per un intervallo di tempo più lungo di questo!

## 2.2 L'atomo di Bohr

Il modello atomico di Rutherford è inadeguato a spiegare la stabilità dell'atomo e a rendere conto degli spettri di riga degli atomi. Il modello atomico proposto da Bohr è ispirato dalla necessità di riprodurre la struttura degli spettri di riga.

Per l'atomo di idrogeno le frequenze di emissione o assorbimento soddisfano la seguente legge empirica

$$\nu = \bar{R} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (2.1)$$

con  $n, m$  interi positivi ( $m > n$ ). La costante  $\bar{R} \simeq 3.29 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  è chiamata **costante di Rydberg** ed è caratteristica dell'atomo di idrogeno.<sup>2</sup> Per atomi più complessi non esistono formule così semplici, ma vale in ogni caso la **regola di combinazione di Rydberg-Ritz** (1905): quando due frequenze fanno parte di uno spettro, succede spesso che ne faccia parte anche la loro differenza o la loro somma. Per prevedere quelle che ci fanno effettivamente parte, si possono formulare delle semplici regole di selezione.

Nel 1913 Bohr ipotizzò che l'atomo non si comporta come un sistema classico, suscettibile di cambiare energia in modo continuo, ma che esso può esistere solo in un certo numero di **stati stazionari** o **stati quantici**, ciascuno con energia definita. L'energia dell'atomo è quindi **quantizzata**: può variare solo a salti successivi, corrispondenti a transizioni da uno stato all'altro. A ciascuna transizione da un livello  $E_j$  ad un livello  $E_i < E_j$  è accompagnata l'emissione di un fotone di energia  $h\nu = E_j - E_i$ ; a ciascuna transizione da un livello  $E_i$  ad un livello  $E_j > E_i$  è accompagnato l'assor-

---

<sup>2</sup>Spesso con il nome costante di Rydberg si indica la quantità  $R = h\bar{R} \simeq 13.6 \text{ eV}$ .



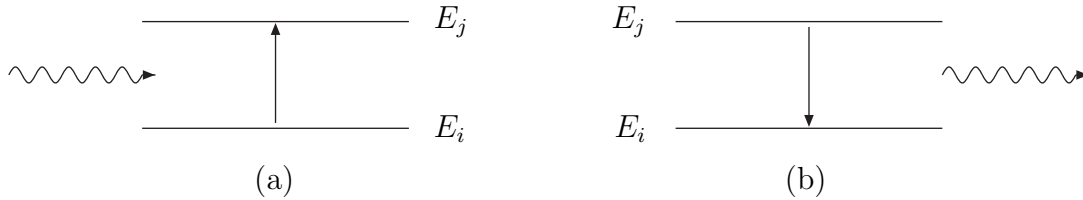


Figura 2.1: Assorbimento (a) ed emissione (b) di un fotone da parte di un atomo che subisce una transizione tra due livelli energetici.

bimento di un fotone di energia  $h\nu = E_j - E_i$  (si veda la Figura 2.1). Se l'atomo si trova nello stato di energia più bassa, lo **stato fondamentale**, non può emettere e resta stabile.

Questa ipotesi spiega sia l'esistenza dello spettro a righe, sia la regola di combinazione. Per l'atomo di idrogeno si ritrova la legge empirica (2.1), ammettendo che

$$E_n = -h \frac{\bar{R}}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

Pertanto, lo stato fondamentale dell'atomo di idrogeno ha energia  $E_1 = -h\bar{R} = -R \simeq -13.6$  eV, il livello energetico immediatamente superiore (I livello eccitato) è  $E_2 = E_1/4$ , il successivo (II livello eccitato)  $E_3 = E_1/9$ , e così via. Le righe spettrali corrispondenti a transizioni tra un livello  $n > 1$  ed il livello fondamentale formano la **serie di Lyman**, quelle a transizioni tra un livello  $n > 2$  ed il livello  $n = 2$  formano la **serie di Balmer**, quelle a transizioni tra un livello  $n > 3$  ed il livello  $n = 3$  formano la **serie di Paschen**.<sup>3</sup> Storicamente le righe della serie di Balmer furono osservate per prime, perché cadono nella regione visibile dello spettro della radiazione elettromagnetica.

## 2.3 L'esperimento di Franck-Hertz

Una conferma della teoria di Bohr viene dalle esperienze di Franck e G. Hertz (1914) che consistono nel provocare l'eccitazione degli atomi mediante urto di elettroni e nel misurare indirettamente l'energia perduta dagli elettroni nell'urto, che coincide con quella ceduta all'atomo per eccitarlo. In questo modo, si possono determinare le altezze dei diversi livelli al di sopra di quello fondamentale, cioè le **energie di eccitazione**  $E_2 - E_1$ ,  $E_3 - E_1$ , e così via. Il confronto tra i valori trovati con quelli ricavati dalla spettroscopia costituisce una verifica dell'ipotesi di Bohr di quantizzazione dei livelli energetici.

Lo schema dell'apparato sperimentale è illustrato nella Figura 2.2. In un tubo di vetro contenente la sostanza che si vuole studiare allo stato di gas o di vapore rarefatto, si trova il sistema per il lancio di elettroni. Esso è costituito da un filamento incandescente F e da una griglia G, mantenuta ad

<sup>3</sup>Per completezza di informazione, le transizioni tra un livello  $n > 4$  ed il livello  $n = 4$  formano la serie di Brackett, quelle tra un livello  $n > 5$  ed il livello  $n = 5$  formano la serie di Pfund.

### 2.3. L'ESPERIMENTO DI FRANCK-HERTZ

---

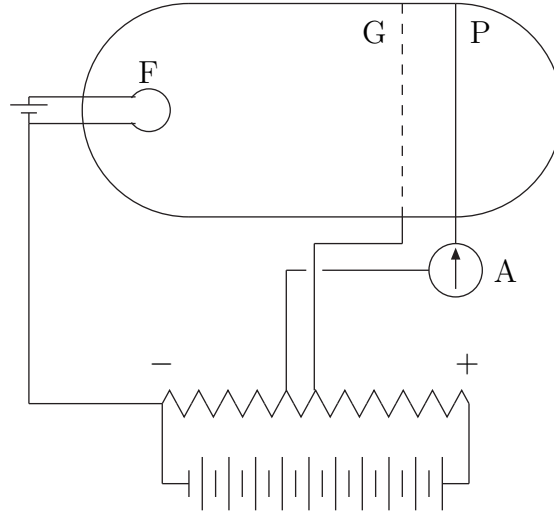


Figura 2.2: Schema dell'esperimento di Franck-Hertz.

un potenziale positivo rispetto ad F da una batteria di pile. Mediante un potenziometro è possibile regolare questa differenza di potenziale. Il campo elettrico esistente tra F e G accelera gli elettroni, i quali si precipitano sulla griglia metallica ed in parte la attraversano. Al di là della griglia, a circa 1 mm di distanza, si trova una placca P, mantenuta ad un potenziale leggermente inferiore a quello della griglia, cosicché gli elettroni in questo spazio sono lievemente rallentati. Giunti sulla placca P, essi tornano al filamento attraverso un galvanometro A.

Se gli elettroni non subiscono urti anelastici, essi si muovono di moto accelerato fino alla griglia, dove raggiungono il massimo della loro velocità. Tale massimo corrisponde ad una energia cinetica uguale ad  $eV$ , dove  $V$  è la differenza di potenziale tra filamento e griglia. Tale energia cinetica è più che sufficiente a far vincere agli elettroni il debole controcampo esistente tra griglia e placca, cosicché quelli che passano tra le maglie della griglia arrivano tutti alla placca e sono registrati dal galvanometro.

Supponiamo di aumentare ora il potenziale  $V$ , finché  $eV$  sia di poco superiore ad  $E_2 - E_1$ : allora l'energia cinetica degli elettroni, in vicinanza della griglia, sarà sufficiente a produrre degli urti anelastici. Alcuni degli elettroni quindi perderanno in un urto quasi tutta la loro energia e non saranno più capaci di vincere il controcampo ed arrivare alla placca. Pertanto, il galvanometro, appena  $eV$  supera il limite  $E_2 - E_1$ , segnerà una brusca diminuzione di corrente. Leggendo il potenziale  $V'$  per cui si ha questa discontinuità, potremo calcolare la prima energia di eccitazione con la formula

$$E_2 - E_1 = eV' .$$

Questo potenziale  $V'$  si chiama **potenziale di risonanza**.

Aumentando ancora il potenziale, la corrente va aumentando, finché si produce una nuova brusca diminuzione per un valore  $V''$  prossimo al doppio di  $V'$ . Infatti, con l'aumentare di  $V$ , succede che gli urti anelastici, anziché prodursi solo in vicinanza della griglia, si producono già più indietro, cioè più verso il filamento, e più si aumenta  $V$ , più si arretra la regione dove avvengono tali urti. Di

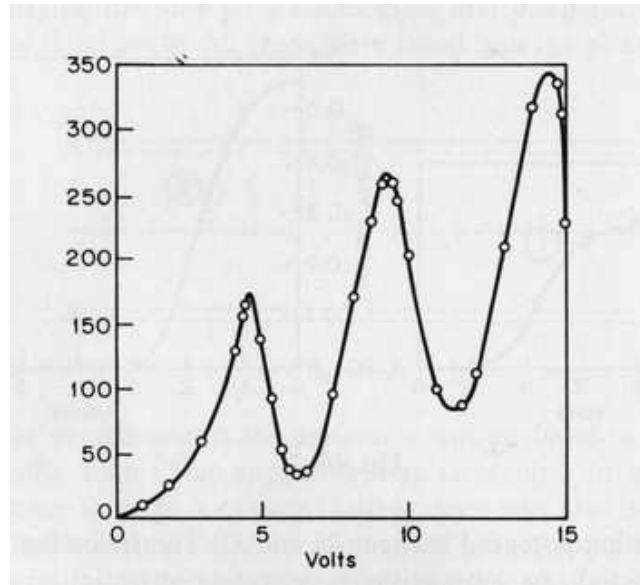


Figura 2.3: Grafico della corrente in funzione della differenza di potenziale, come ottenuto originariamente da Franck ed Hertz. Si osservi che la distanza tra due picchi consecutivi è pari a circa 5 V, come atteso per il vapore di mercurio.

conseguenza, gli elettroni che hanno perduto tutta la loro velocità in un urto possono venire ancora accelerati dal campo prima di arrivare alla griglia. Quando  $V$  raggiunge il valore  $2(E_2 - E_1)$ , alcuni di questi elettroni, dopo il primo urto anelastico, riacquistano nel campo elettrico un'altra volta l'energia  $E_2 - E_1$  e quindi subiscono presso la griglia un secondo urto anelastico, in cui perdono di nuovo la loro energia cinetica e non riescono ad arrivare alla placca. Allo stesso modo si avrà una nuova diminuzione di corrente per  $V = 3(E_2 - E_1)$ , e così via. Le curve sperimentali, ottenute originariamente con vapori di mercurio, mostrano l'andamento descritto per la corrente al variare della differenza di potenziale (si veda la Figura 2.3).

Una misura più precisa del potenziale di risonanza  $V'$  si determina dalla distanza tra due massimi consecutivi della curva, anziché dalla posizione del primo massimo. Si eliminano così quelle cause di errore sistematico, come le differenze di potenziale di contatto, che producono uno spostamento complessivo di tutta la curva o che perturbano la prima parte di essa.

È possibile mediante lo stesso apparato sperimentale determinare le energie dei livelli superiori ad  $E_2$ ? Quando la densità della sostanza nel tubo di vetro è tale che gli urti tra elettroni ed atomo sono molto frequenti, succede che non appena gli elettroni hanno raggiunto l'energia sufficiente per produrre l'eccitazione dell'atomo al livello  $E_2$ , la perdono immediatamente in un urto e non arrivano mai a possedere l'energia sufficiente a provocare un'eccitazione ad un livello superiore ad  $E_2$ . Tuttavia, diminuendo la pressione del gas all'interno del tubo, si può ridurre la frequenza degli urti quanto basta a consentire ad alcuni elettroni di raggiungere energie cinetiche superiori ad  $E_3 - E_1$  e a produrre così transizioni dell'atomo dal livello fondamentale al II livello eccitato. In questa situazione sperimentale, la curva mostrerà due serie di massimi, la seconda delle quali

corrisponde al II livello di eccitazione.

## 2.4 Esperienza di Stern-Gerlach e quantizzazione nello spazio

Finora abbiamo discusso fatti sperimentali che mostrano quantizzazione nella luce e nella materia. Un altro tipo di quantizzazione è stato evidenziato dall'esperienza di Stern e Gerlach (1922), che si basa sullo studio della deviazione di getti di atomi o molecole **paramagnetici** in presenza di **campi magnetici disomogenei**.

Un atomo paramagnetico è caratterizzato dal fatto di possedere un momento magnetico permanente

$$\vec{\mu} = M\vec{l},$$

dove  $\vec{l}$  è il momento angolare intrinseco dell'atomo ed  $M$  una costante di proporzionalità. L'orientazione di  $\vec{\mu}$  (o di  $\vec{l}$ ) definisce l'orientazione dell'atomo stesso. In presenza di un campo di induzione magnetica  $\vec{B}$ , si ha **precessione** di  $\vec{\mu}$  intorno alla direzione di  $\vec{B}$ ; se  $\vec{B}$  è uniforme, l'atomo paramagnetico si muove di moto rettilineo uniforme accompagnato dal moto di precessione del suo momento magnetico; se  $\vec{B}$  non è uniforme, l'atomo è soggetto alla forza

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U_m, \quad U_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (2.3)$$

Un getto di atomi paramagnetici che attraversi una regione con un campo non uniforme subisce pertanto una **deflessione**.

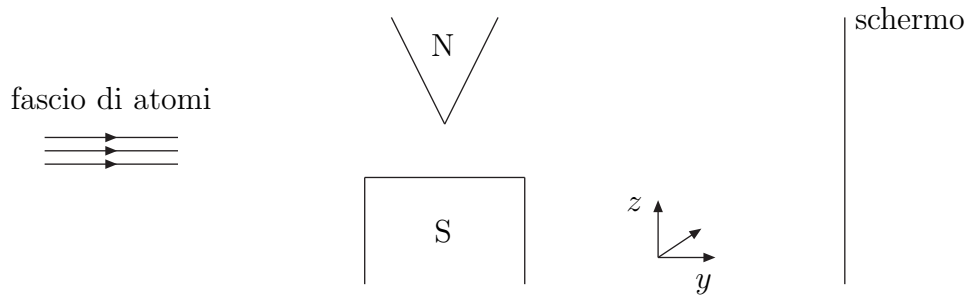


Figura 2.4: Schema dell'esperimento di Stern-Gerlach.

Supponiamo di considerare la situazione sperimentale in cui un fascio collimato di atomi paramagnetici (ad esempio di atomi di argento) in moto lungo l'asse  $y$  venga fatto passare attraverso le espansioni di un magnete sagomato in modo tale da produrre un campo di induzione magnetica disomogeneo lungo la direzione  $z$  (si veda la Figura 2.4). Gli atomi nell'attraversare il magnete sono soggetti ad un moto di precessione lungo l'asse  $z$ , per effetto del quale le componenti  $\mu_x$  e  $\mu_y$  del momento magnetico oscillano intorno a zero, tanto più rapidamente quanto più  $B_z$  è intenso, mentre

$\mu_z$  resta costante. Inoltre, per effetto della (2.3), essi sono soggetti anche ad una forza che, mediata su un periodo di precessione, è diretta lungo l'asse  $z$  e vale

$$\overline{F}_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}.$$

Se indichiamo con  $2l$  la distanza percorsa da ciascun atomo nel campo magnetico e con  $E_k$  l'energia cinetica di ciascun atomo del getto, l'angolo di deflessione, per un getto di atomi veloci, può essere stimato in

$$\theta \simeq \frac{v_z}{v_y} \simeq \frac{a_z}{v} \frac{2l}{v} = \frac{\mu_z}{mv^2} \frac{\partial B_z}{\partial z} 2l = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \frac{l}{E_k} \propto \mu_z,$$

dove abbiamo posto  $v \simeq v_y$ .

Se gli atomi del fascio fossero orientati a caso, allora  $\mu_z$  dovrebbe essere distribuito in modo uniforme tra  $-\mu$  e  $+\mu$  e gli impatti degli atomi su uno schermo, posto dall'altra parte del magnete rispetto alla sorgente del fascio, dovrebbero produrre una tacca allungata lungo  $z$ . In realtà, si osserva una *successione* di piccole tacche, la cui distanza varia al variare di  $B_z$ , ma di cui non varia il numero. Ciascuna tacca corrisponde ad un valore determinato di  $\mu_z$  e quindi di  $l_z$ . Ciò implica che esiste quantizzazione di certe grandezze caratteristiche dei movimenti interni dell'atomo. A questo tipo di quantizzazione si dà il nome di **quantizzazione nello spazio**.

## 2.5 Il principio di corrispondenza

La quantizzazione di certe grandezze fisiche è incompatibile con la teoria corpuscolare classica della materia. Il paradigma classico non è più valido, perché non basta aggiungere nuove variabili o modificare le leggi di evoluzione. La determinazione dei valori numerici precisi delle grandezze quantizzate, come ad esempio i livelli energetici degli atomi, e la loro evoluzione temporale, come ad esempio la vita media degli atomi eccitati, richiede una nuova teoria, basata su nuovi principi. Questa teoria è la **meccanica quantistica**.

Prima della formulazione della meccanica quantistica è stata sviluppata la teoria dell'atomo di Bohr o **antica teoria dei quanti**, ad opera dello stesso Bohr e di altri (Kramers, Sommerfeld, ecc.). L'ingrediente principale di questa teoria è il **principio di corrispondenza**, che è stato formulato da Bohr solo nel 1923, ma ha ispirato tutti i lavori precedenti.

Il principio di corrispondenza risponde alla domanda: in che misura le nozioni e i risultati della *fisica classica* possono essere di guida nell'elaborazione e interpretazione della teoria vera?

Secondo Bohr, la teoria classica è corretta a livello macroscopico, cioè va bene nel limite in cui le discontinuità quantistiche possono essere considerate come infinitamente piccole. Usando le parole di Bohr, "la teoria quantistica deve tendere asintoticamente alla teoria classica nel limite di *grandi numeri quantici*".

Per illustrare questa affermazione, consideriamo l'applicazione del principio di corrispondenza alla **determinazione della costante di Rydberg**. L'atomo di idrogeno, secondo la teoria classica di Rutherford, è uno stato con energia totale  $E < 0$ , caratterizzato da un elettrone in moto su un'orbita ellittica intorno ad un protone. La frequenza *classica* del moto periodico dell'elettrone è

$$\nu_{cl} = \frac{4\varepsilon_0}{e^2} \sqrt{\frac{2}{m}} |E|^{3/2}. \quad (2.4)$$

## 2.6. CENNI SULL'ANTICA TEORIA DEI QUANTI

---

Nel corso del moto l'elettrone emette a frequenze  $\nu_{\text{cl}}$  o armoniche superiori, perdendo energia in modo continuo.

Confrontiamo questa descrizione con la perdita di energia per *salti discreti* che deriva dalla teoria atomica di Bohr:

$$E_{n+1} - E_n = -h \frac{\bar{R}}{(n+1)^2} + h \frac{\bar{R}}{n^2} \simeq 2h \frac{\bar{R}}{n^3}, \quad (2.5)$$

per  $n \rightarrow \infty$ . In questo limite, il fotone emesso nella transizione  $n+1 \rightarrow n$  ha frequenza *quantistica*

$$\nu_{\text{qu}} = 2 \frac{\bar{R}}{n^3}. \quad (2.6)$$

Secondo il principio di corrispondenza, la frequenza classica deve coincidere con quella quantistica nel limite di grandi  $n$ , cioè  $\nu_{\text{qu}} = \nu_{\text{cl}}$ , che implica

$$2 \frac{\bar{R}}{n^3} = \frac{4\varepsilon_0}{e^2} \sqrt{\frac{2}{m}} |E_n|^{3/2} = \frac{4\varepsilon_0}{e^2} \sqrt{\frac{2}{m}} \frac{(h\bar{R})^{3/2}}{n^3},$$

da cui segue che

$$\bar{R} = \frac{1}{h} \frac{me^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2} \longrightarrow R \equiv h\bar{R} = \frac{me^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2} \longrightarrow E_n = -\frac{me^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2n^2\hbar^2}. \quad (2.7)$$

Il risultato per  $\bar{R}$  è in accordo con il risultato sperimentale con una precisione dell'ordine di  $10^{-4}$ . Questo accordo rappresentò un clamoroso successo per la teoria atomica di Bohr. Il ragionamento seguito per l'atomo di idrogeno può essere esteso agli altri atomi idrogenoidi ( $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$ , ...) ed anche per questi atomi l'accordo è eccellente.

## 2.6 Cenni sull'antica teoria dei quanti

L'antica teoria dei quanti consiste in un metodo generale di calcolo delle grandezze quantizzate, basato sulle ipotesi di Bohr e sul principio di corrispondenza. In sintesi, i sistemi materiali seguono le leggi classiche, ma, tra tutte le soluzioni possibili delle equazioni del moto, vanno ritenute accettabili solo quelle che soddisfano certe regole di quantizzazione *ad hoc*. A ciascuna di queste soluzioni corrisponde un'energia ben definita; la serie discontinua dei valori di energia così ottenuti determina lo spettro atomico.

Per determinare queste regole di quantizzazione, proviamo a generalizzare il procedimento seguito nel caso dell'atomo di idrogeno. Lì era stato imposto che  $h\nu_{\text{cl}}$  deve coincidere con la differenza tra i livelli  $E_{n+1}$  ed  $E_n$  nel limite di  $n$  grandi. Ciò equivale a imporre che

$$\frac{1}{h} \frac{dE}{dn} \sim \nu_{\text{cl}}(E) \quad \text{per } n \rightarrow \infty,$$

dove  $n$  è stata trattata come variabile continua. Da questa relazione si può ricavare che

$$\int^E \frac{dE}{\nu_{\text{cl}}(E)} = nh + \text{cost}.$$

Se si assume che questa relazione valga per tutti i valori di  $n$ , si ha

$$\int_{E_{\min}}^E \frac{dE}{\nu_{\text{cl}}(E)} = nh, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.8)$$

dove  $E_{\min}$  è la minima energia del sistema classico.

Per **sistemi periodici con un solo grado di libertà** si può dimostrare che<sup>4</sup>

$$\int_{E_{\min}}^E \frac{dE}{\nu_{\text{cl}}(E)} = \oint_{H(q,p)=E} p dq \quad \longrightarrow \quad \oint_{H(q,p)=E} p dq = nh. \quad (2.9)$$

dove  $\oint_{H(q,p)=E}$  vuol dire integrale sulla curva chiusa definita da  $H(q, p) = E$ , con  $H(q, p)$  la funzione Hamiltoniana del sistema. La seconda equazione in (2.9) è la **regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld**.

Per **sistemi multiperiodici** (Wilson, Sommerfeld) per cui vale  $p_1(q_1), p_2(q_2), \dots$ , ad ogni funzione  $p_r(q_r)$  corrisponde un moto periodico di frequenza  $\nu_r$ ; il moto del sistema risulta dalla combinazione dei moti periodici alle varie frequenze. Per ogni moto periodico si può scrivere una regola di quantizzazione

$$\oint p_r dq_r = n_r h, \quad r = 1, 2, \dots, n.$$

Gli interi  $n_1, n_2, \dots$ , si chiamano **numeri quantici**.

Riprendiamo il caso dell'atomo di idrogeno, cioè di un sistema a due corpi con potenziale di interazione centrale di tipo coulombiano. È noto dalla meccanica classica che per questo sistema l'energia  $E < 0$  ed il momento angolare  $L \geq 0$  sono costanti del moto. In particolare, il moto è piano, quindi il sistema ha due gradi di libertà, la coordinata radiale  $r$  e quella angolare  $\varphi$ , rispetto a ciascuna delle quali il moto è periodico. L'Hamiltoniana del sistema è data da

$$H = \frac{1}{2m} \left( p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2} \right) - \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r} = E = \text{costante},$$

dove  $p_\varphi$  è il momento coniugato alla coordinata  $\varphi$  e coincide con il momento angolare costante  $L$ , mentre  $p_r$  è il momento coniugato alla coordinata radiale  $r$ . Le due regole di quantizzazione sono

$$1) \quad \oint p_\varphi d\varphi = lh \quad \longrightarrow \quad 2\pi L = lh \quad \longrightarrow \quad L = l\hbar,$$

$$2) \quad \oint p_r dr = kh \quad \longrightarrow \quad \sqrt{\frac{2\pi^2 m e^4}{(-E)(4\pi\epsilon_0)^2}} - 2\pi L = kh \quad \longrightarrow \quad E_n = -\frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2n^2 \hbar^2};$$

$l$  si chiama **numero quantico azimutale**,  $k$  è il **numero quantico radiale**, mentre  $n = l + k$  si chiama **numero quantico principale**. Il risultato per  $E_n$  coincide con quello trovato nella Sezione precedente. L'energia quantizzata dipende dalla somma dei due numeri quantici  $l$  e  $k$ . Ciò deriva dal fatto che il moto nella coordinata  $r$  e quello nella coordinata  $\varphi$  hanno lo stesso periodo. All'energia  $E_n$  corrispondono  $n$  orbite quantizzate definite da  $l = 1, 2, \dots, n$  ( $l = 0$  è escluso, perché corrisponderebbe ad un'orbita passante per il nucleo). Il valore  $n = l$  corrisponde all'orbita circolare.

<sup>4</sup>Si veda L.D. Landau, E.M. Lifshits, *Meccanica*, Editori Riuniti.

## 2.7. ESERCITAZIONI

---

Questa trattazione dell'atomo di idrogeno va confrontata con quella esatta, basata sulla *moderna* meccanica quantistica, che sarà presentata nel Capitolo 7.

Per sistemi con simmetria di rivoluzione intorno ad un asse, ad esempio l'asse  $z$ , il momento angolare lungo quell'asse,  $L_z$ , è una costante del moto. Poiché  $L_z$  può essere considerata come il momento coniugato  $p_\varphi$  di una variabile angolare  $\varphi$ , abbiamo la regola di quantizzazione

$$\oint p_\varphi d\varphi = mh \quad \longrightarrow \quad L_z = m\hbar ;$$

$m$  è chiamato **numero quantico magnetico**. Questa condizione di quantizzazione spiega l'effetto di quantizzazione nello spazio introdotto con la discussione sull'esperimento di Stern-Gerlach.

All'antica teoria dei quanti va riconosciuto il **successo** nella corretta valutazione dei termini spettrali di molti sistemi atomici e molecolari: atomo di idrogeno, atomi idrogenoidi ( $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$ , ...), atomi alcalini, spettro vibrazionale e rotazionale delle molecole, spettri X degli atomi, effetto Zeeman normale. Inoltre, quando integrata con una teoria semiclassica dell'interazione tra radiazione e materia, consente di trovare le regole di selezione e le probabilità delle transizioni atomiche.

Tuttavia, la teoria è **incompleta**, infatti le regole di Bohr-Sommerfeld valgono solo per sistemi (multi)periodici, non sono contemplati i fenomeni che coinvolgono urti, non sono trattati gli atomi complessi, ci sono problemi nella descrizione dello spettro dell'atomo di elio e dell'effetto Zeeman anomalo.

Inoltre, essa è **contraddittoria**, infatti la quantizzazione di  $L_z$  in caso di simmetria rotazionale intorno a  $z$  si dovrebbe applicare anche a sistemi con simmetria sferica, cioè con simmetria rotazionale intorno a qualsiasi asse.

Ci sono, poi, varie difficoltà di principio: perché le traiettorie sono quantizzate? come si introduce il concetto stesso di traiettoria?

## 2.7 Esercitazioni

### 2.7.1 Atomo di idrogeno secondo Thomson

Nell'atomo di Thomson, la carica positiva  $+Ze$  è distribuita uniformemente su una sfera di raggio  $R$  dell'ordine di  $1 \text{ \AA}$ , mentre gli  $Z$  elettroni, che possiedono ciascuno carica elettrica pari a  $-e$ , si trovano all'interno della sfera.

Ci proponiamo innanzitutto di trovare l'andamento del campo elettrico e del potenziale elettrostatico dovuti alla carica positiva. Applicando il teorema di Gauss, troviamo immediatamente che il campo elettrico varia con la distanza dal centro della sfera secondo la legge seguente:

$$\vec{E}(r) = \begin{cases} \frac{Ze}{(4\pi\epsilon_0)R^3}\vec{r} & \text{per } r < R \\ \frac{Ze}{(4\pi\epsilon_0)r^2}\hat{r} & \text{per } r \geq R \end{cases} \quad (2.10)$$

Il potenziale elettrostatico è dato invece da

$$\varphi(r) = \begin{cases} -\frac{1}{2}\frac{Ze}{(4\pi\epsilon_0)R^3}r^2 + \frac{3}{2}\frac{Ze}{(4\pi\epsilon_0)R} & \text{per } r < R \\ \frac{Ze}{(4\pi\epsilon_0)r} & \text{per } r \geq R \end{cases} \quad (2.11)$$



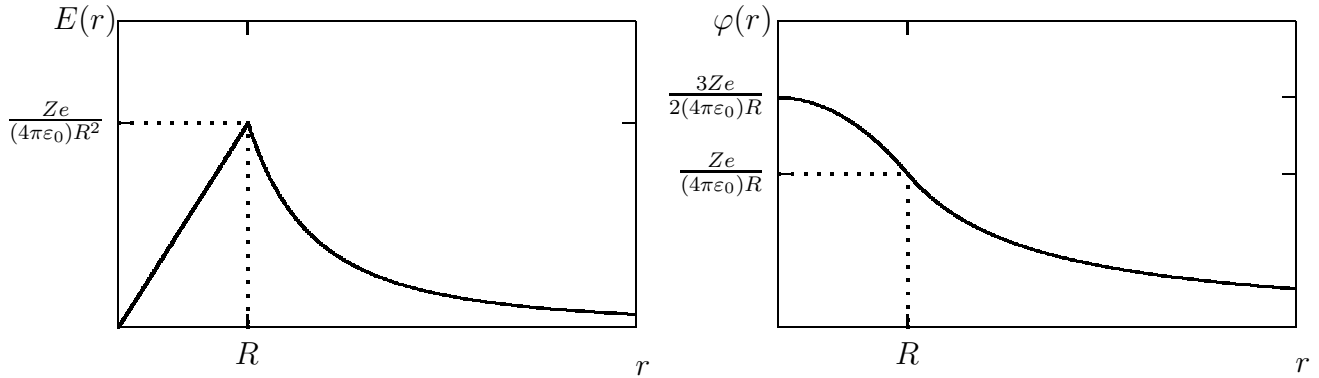


Figura 2.5: Grafici del modulo del campo elettrico  $E(r)$  e del potenziale elettrostatico  $\varphi(r)$  prodotti dalla carica positiva  $Ze$  di un atomo di Thomson.

dove abbiamo usato la condizione  $\varphi(\infty) = 0$ .

Per l'atomo di idrogeno,  $Z = 1$ , l'energia potenziale dell'elettrone è data da  $V(r) = -e\varphi(r)$  che presenta un minimo in  $r = 0$ , cioè al centro della sfera, che rappresenta pertanto la posizione di equilibrio stabile. L'energia di ionizzazione è pari al lavoro necessario per portare l'elettrone dalla posizione di equilibrio ad una distanza infinita dal centro della sfera; essa è data da

$$V(\infty) - V(0) = \frac{3}{2} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)R} \sim 10 \text{ eV} ,$$

che è in buon accordo con il valore sperimentale, 13.6 eV.

Consideriamo ora la frequenza delle oscillazioni dell'elettrone intorno alla posizione di equilibrio. L'energia potenziale intorno ad  $r = 0$  è della forma

$$V(r) = \text{cost} + \frac{1}{2} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)R^3} r^2 ,$$

che è quella di un oscillatore armonico tridimensionale con costante di richiamo

$$k = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)R^3}$$

e pulsazione

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{\frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)mR^3}} \sim 10^{16} \frac{\text{rad}}{\text{s}} .$$

I risultati sperimentali per le frequenze di emissione dell'atomo di idrogeno mostrano, come noto, uno spettro a righe, mentre, secondo il modello di Thomson, l'emissione può avvenire ad una sola frequenza,  $\nu = \omega/(2\pi)$ .

## 2.7.2 Atomo di elio secondo Thomson

Nel caso dell'atomo di elio, il potenziale elettrostatico dovuto alla carica positiva  $+2e$  si ottiene dalla (2.11) ponendo  $Z = 2$ . Per determinare le posizioni di equilibrio dei due elettroni all'interno

## 2.7. ESERCITAZIONI

---

della sfera, è conveniente utilizzare il formalismo hamiltoniano. La dinamica del sistema dei due elettroni è descritta dalla seguente Hamiltoniana:

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)R} \left( 6 - \frac{\vec{r}_1^2}{R^2} - \frac{\vec{r}_2^2}{R^2} \right) + \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} ,$$

dove l'ultimo termine rappresenta l'interazione coulombiana tra i due elettroni. Passando alle coordinate del centro di massa e alla posizione relativa, ponendo cioè

$$\begin{aligned} \vec{r}_{\text{CM}} &= \vec{r}_1 + \vec{r}_2 , & \vec{r} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 , \\ \vec{p}_{\text{CM}} &= \frac{1}{2}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2) , & \vec{p} &= \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) , \end{aligned}$$

si ottiene

$$H = \frac{\vec{p}_{\text{CM}}^2}{m} + \frac{\vec{p}^2}{m} - \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)R} \left( 6 - \frac{\vec{r}_{\text{CM}}^2}{2R^2} - \frac{\vec{r}^2}{2R^2} \right) + \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r} \equiv H_{\text{CM}} + H_r + \text{cost} ,$$

dove

$$H_{\text{CM}} = \frac{\vec{p}_{\text{CM}}^2}{m} + \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)} \frac{\vec{r}_{\text{CM}}^2}{2R^3} \equiv \frac{\vec{p}_{\text{CM}}^2}{m} + V_{\text{CM}}$$

e

$$H_r = \frac{\vec{p}^2}{m} + \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)} \frac{\vec{r}^2}{2R^3} + \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r} \equiv \frac{\vec{p}^2}{m} + V_r .$$

La posizione di equilibrio si ottiene imponendo

$$\frac{dV_{\text{CM}}}{dr_{\text{CM}}} = 0 , \quad \frac{dV_r}{dr} = 0 ,$$

da cui si ottiene

$$r_{\text{CM}} = 0 , \quad r = R .$$

All'equilibrio i due elettroni si trovano a distanza pari al raggio  $R$  della sfera e il loro centro di massa si trova al centro della sfera.

Il potenziale  $V_{\text{CM}}$  intorno alla posizione di equilibrio è quello di un oscillatore armonico tridimensionale con pulsazione (tre volte degenera)

$$\omega = \sqrt{\frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)mR^3}} ;$$

il potenziale  $V_r$ , sviluppato in serie di Taylor intorno alla posizione di equilibrio, è

$$V_r = \text{cost} + \frac{3}{2} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)R^3} (r - R)^2 + \mathcal{O}\left((r - R)^3\right) ,$$

che implica due frequenze di oscillazione nulle ed una pulsazione

$$\omega = \sqrt{\frac{3e^2}{(4\pi\epsilon_0)mR^3}} .$$

Sperimentalmente queste frequenze **non** sono state rilevate.

### 2.7.3 Diffusione Rutherford su atomo di Thomson

Consideriamo la diffusione di particelle  $\alpha$  ( $Z_1 = 2$ ,  $A_1 = 4$ ) su un atomo d'oro ( $Z_2 = 79$ ,  $A_2 = 197$ ). Nella diffusione gli elettroni non giocano alcun ruolo poiché la loro massa è trascurabile rispetto a quella delle particelle  $\alpha$ . È quindi sufficiente considerare la diffusione coulombiana di particelle di carica elettrica positiva pari a  $Z_1 e$  da parte di un'altra carica positiva pari a  $Z_2 e$  distribuita, secondo Thomson, uniformemente in una sfera di raggio  $R$  di dimensioni dell'ordine di  $10^{-8}$  cm.

Lavoreremo nell'approssimazione di piccola deflessione:<sup>5</sup> l'effetto dell'interazione coulombiana, responsabile della deflessione della traiettoria della particella  $\alpha$ , sarà calcolato sulla sua traiettoria *indeflessa*. A posteriori si verificherà la validità dell'approssimazione.

Detto  $b$  il parametro di impatto della particella  $\alpha$  ed  $R$  il raggio della distribuzione sferica di carica positiva dell'atomo di oro, dobbiamo distinguere due casi.

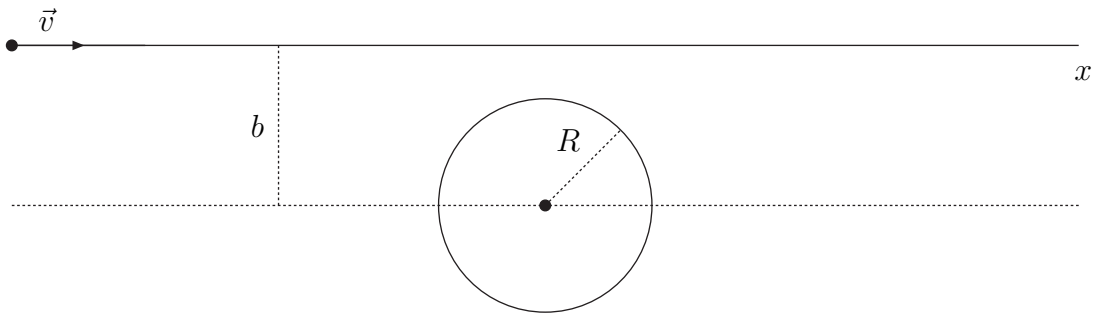


Figura 2.6: Diffusione Rutherford di una particella  $\alpha$  su un atomo di oro: caso  $b > R$ .

Per  $b > R$  (Figura 2.6) il campo visto dalla particella  $\alpha$  è quello di una carica *puntiforme*  $Z_2 e$  localizzata al centro della sfera. Abbiamo allora

$$\Delta p_{\perp} = \int_{-\infty}^{\infty} F_{\perp} dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F_{\perp}}{v} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Z_1 e E_{\perp}}{v} dx = \frac{1}{2\pi b} \frac{Z_1 e}{v} \int_{-\infty}^{\infty} E_{\perp} 2\pi b dx .$$

L'ultimo integrale rappresenta il flusso del campo elettrico attraverso la superficie laterale di un cilindro infinito di raggio  $b$  ed è uguale, per il teorema di Gauss, a  $Z_2 e / \epsilon_0$ . Quindi, abbiamo

$$\Delta p_{\perp} = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{bv(4\pi\epsilon_0)} , \quad \theta = \frac{\Delta p_{\perp}}{mv} = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{mbv^2(4\pi\epsilon_0)} ,$$

dove  $\theta$  rappresenta l'angolo di deflessione.

Per  $b < R$  (Figura 2.7) una parte della traiettoria della particella  $\alpha$  si trova all'interno della sfera, dove il campo elettrico è diretto radialmente verso l'esterno e vale in modulo  $E(r) = Z_2 e r / (4\pi\epsilon_0 R^3)$ . Abbiamo allora

$$\Delta p_{\perp} = \int_{-\bar{x}}^{-\bar{x}} \frac{Z_1 e E_{\perp}^{(ext)}}{v} dx + \int_{-\bar{x}}^{\bar{x}} \frac{Z_1 e E_{\perp}^{(int)}}{v} dx + \int_{\bar{x}}^{\infty} \frac{Z_1 e E_{\perp}^{(ext)}}{v} dx$$

<sup>5</sup>Per un approfondimento su questa tecnica di approssimazione, si veda L.D. Landau, E.M. Lifshits, *Meccanica*, Editori Riuniti.

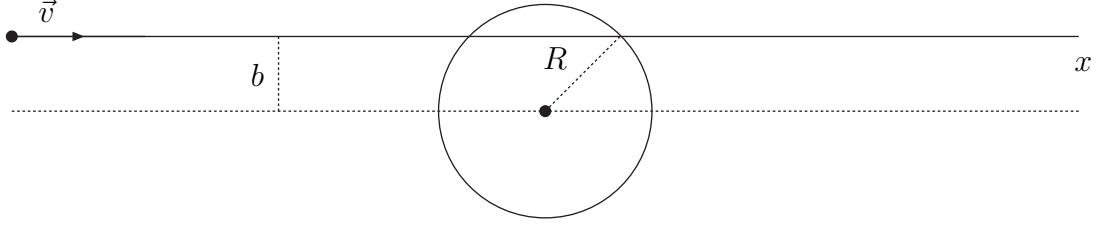


Figura 2.7: Diffusione Rutherford di una particella  $\alpha$  su un atomo di oro: caso  $b < R$ .

$$= \int_{-\infty}^{-\bar{x}} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)(x^2 + b^2)} \frac{b}{\sqrt{x^2 + b^2}} \frac{dx}{v} + \int_{-\bar{x}}^{\bar{x}} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)R^3} \sqrt{x^2 + b^2} \frac{b}{\sqrt{x^2 + b^2}} \frac{dx}{v} \\ + \int_{\bar{x}}^{\infty} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)(x^2 + b^2)} \frac{b}{\sqrt{x^2 + b^2}} \frac{dx}{v} ,$$

dove  $\bar{x} = \sqrt{R^2 - b^2}$  rappresenta il punto in cui la particella  $\alpha$  “entra” nell’atomo. Usando

$$\int \frac{dx}{(x^2 + b^2)^{3/2}} = \frac{x}{b^2 \sqrt{x^2 + b^2}} ,$$

si può facilmente ottenere

$$\Delta p_{\perp} = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)bv} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{b^2}{R^2} \right)^{3/2} \right] , \quad \theta = \frac{\Delta p_{\perp}}{mv} .$$

La funzione  $\theta(b)$  così ottenuta

$$\theta(b) = \begin{cases} \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)mbv^2} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{b^2}{R^2} \right)^{3/2} \right] & \text{per } b < R \\ \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{mbv^2(4\pi\epsilon_0)} & \text{per } b > R \end{cases}$$

ha un massimo per  $b \simeq R$  che è dell’ordine di 1/10 di grado (si veda la Figura 2.8). In sostanza, le particelle  $\alpha$  vengono deflesse molto debolmente da un atomo di Thomson.

#### 2.7.4 Diffusione Rutherford su atomo con nucleo puntiforme

Le particelle proiettile e l’atomo bersaglio sono gli stessi della precedente Sottosezione, solo che ora consideriamo la carica positiva dell’atomo localizzata in una regione di spazio così piccola rispetto alle dimensioni atomiche da poterla trattare come puntiforme.

Supponiamo che la particella  $\alpha$  abbia velocità di modulo  $v_0$  quando viene sparata verso l’atomo e che sia inizialmente molto lontana da esso (si veda la Figura 2.9). Per la conservazione dell’energia, la velocità con cui la particella si allontana asintoticamente ha modulo pari a  $v_0$ . Per la conservazione del momento angolare, il momento angolare in un generico punto della traiettoria della particella è uguale in modulo a quello iniziale, cioè

$$mv_0 b = mr^2 \frac{d\theta}{dt} .$$

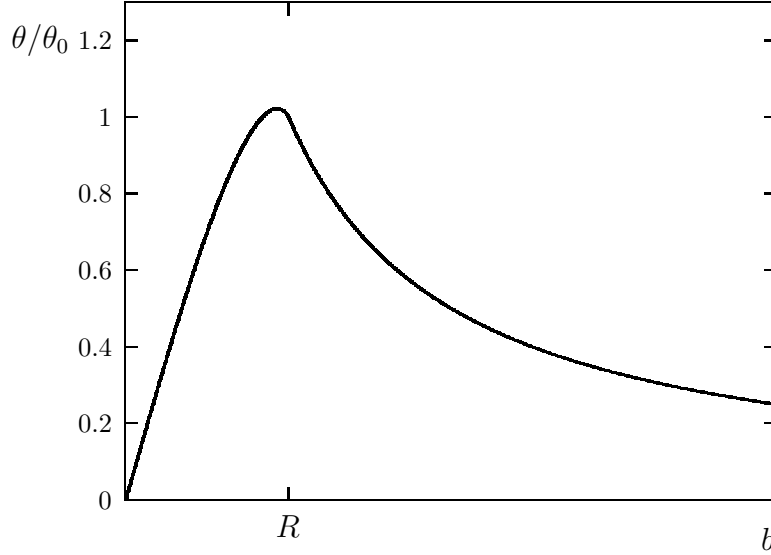


Figura 2.8: Grafico dell'angolo di deflessione  $\theta$  in unità di  $\theta_0 = 2Z_1Z_2e^2/[(4\pi\epsilon_0)mRv^2]$  al variare del parametro di impatto  $b$ .

Abbiamo allora

$$\begin{aligned}\Delta p_y &= \int_{-\infty}^{\infty} F_y dt = \int_{-\infty}^{\infty} F \sin \theta dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)r^2} \sin \theta dt = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)v_0 b} \int_{-\infty}^{\infty} \sin \theta \frac{d\theta}{dt} dt \\ &= \frac{Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)v_0 b} \int_0^{\pi-\varphi} \sin \theta d\theta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)v_0 b} (1 + \cos \varphi) .\end{aligned}$$

D'altro canto,  $\Delta p_y = m\Delta v_y = mv_0 \sin \varphi$ , quindi

$$mv_0 \sin \varphi = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)v_0 b} (1 + \cos \varphi) \quad \longrightarrow \quad b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)mv_0^2} \cot \left( \frac{\varphi}{2} \right) \equiv k \cot \left( \frac{\varphi}{2} \right) .$$

Come si può vedere, per valori piccoli del parametro di impatto si possono avere deflessioni ad angoli molto grandi; per  $b = 0$  si ha  $\varphi = \pi$ , cioè la particella è deflessa all'indietro.

Se invece di una singola particella  $\alpha$  abbiamo un fascio omogeneo di particelle  $\alpha$ , possiamo domandarci quale sia il numero di particelle deflesse di un angolo compreso tra  $\varphi - d\varphi$  e  $\varphi$  nell'unità di tempo e per valore unitario del flusso incidente. Il numero cercato è quello delle particelle che hanno parametro di impatto compreso tra  $b$  e  $b + db$ , dove  $b = k \cot(\varphi/2)$ . Tale numero, per un flusso unitario, è pari a  $dn = 2\pi b db$ . Inoltre, essendo

$$db = -\frac{k}{2 \sin^2(\varphi/2)} d\varphi ,$$

si ha

$$|dn| = \pi k^2 \frac{\cos(\varphi/2)}{\sin^3(\varphi/2)} |d\varphi| .$$

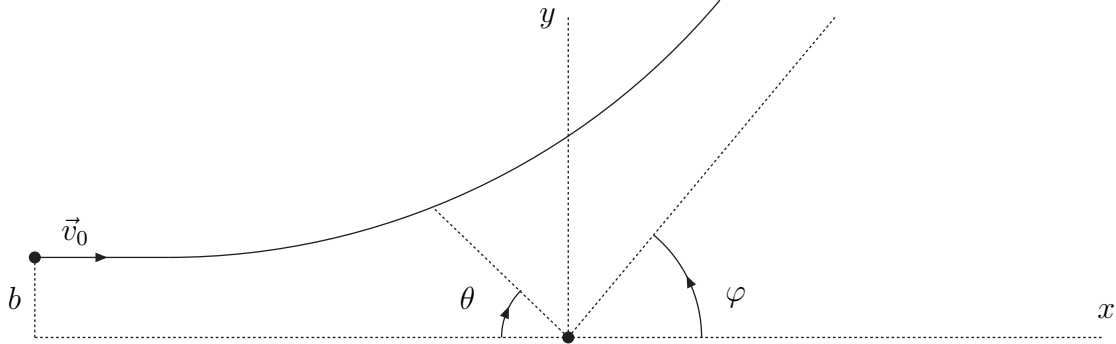


Figura 2.9: Diffusione Rutherford di una particella  $\alpha$

Queste particelle saranno diffuse uniformemente su una zona di sfera di raggio unitario e superficie pari a  $2\pi \sin \varphi d\varphi$ . Quindi il numero di particelle deflesse nell'unità di superficie della sfera di raggio unitario è

$$W(\varphi) = \frac{dn}{2\pi \sin \varphi d\varphi} = \frac{k^2}{4 \sin^4(\varphi/2)} = \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2(4\pi\epsilon_0)mv_0^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\varphi/2)}.$$

Questa è la nota espressione della **sezione d'urto differenziale** per la diffusione Rutherford.

Confrontando le evidenze sperimentali con la formula della sezione d'urto di Rutherford si può determinare la carica nucleare  $Z_2$ . Il valore trovato risulta essere in accordo con il numero atomico dell'elemento usato come bersaglio. Per collisioni quasi frontali si hanno deviazioni dalla distribuzione teorica, che vale fino a valori di  $b$  dell'ordine di  $10^{-13}$  cm.

Il modello di atomo che emerge dall'esperimento di Rutherford è quello di tipo "planetario". La carica positiva  $Z_2 e$  è localizzata in un **nucleo** compatto, di dimensioni dell'ordine  $10^{-13}$  cm. Poiché l'atomo è neutro, esso deve contenere anche  $Z_2$  elettroni. Gli elettroni si muovono intorno al nucleo in una sfera di raggio dell'ordine di  $10^{-8}$  cm; essi determinano le proprietà chimiche degli elementi.

### 2.7.5 Instabilità dell'atomo di Rutherford

È noto dall'elettrodinamica classica che una particella elettricamente carica soggetta ad accelerazione irraggia perdendo così energia al ritmo

$$w = \frac{2}{3} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)c^3} |\vec{a}|^2,$$

dove  $\vec{a}$  è l'accelerazione.

L'elettrone di un atomo di idrogeno in orbita circolare intorno al nucleo, costituito da un solo protone, è soggetto all'accelerazione centripeta. Pertanto esso irraggia perdendo energia e quindi descrivendo orbite classiche di raggio via via minore, fino a collidere con il protone ed annichilirsi. Proviamo a determinare i tempi caratteristici della spiralizzazione dell'elettrone sul protone di un atomo di idrogeno e le proprietà che dovrebbe avere la radiazione emessa dall'elettrone durante il processo.

Approssimiamo il moto dell'elettrone come un moto circolare con raggio variabile. La condizione di equilibrio dinamico per una orbita circolare di raggio  $r$  è

$$ma = m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r^2} \quad \longrightarrow \quad v = \frac{e}{\sqrt{(4\pi\epsilon_0)mr}} \quad \longrightarrow \quad \omega = \frac{e}{r\sqrt{(4\pi\epsilon_0)mr}} .$$

L'energia totale dell'elettrone è data dalla somma di energia cinetica ed energia potenziale:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r} ,$$

in accordo con il teorema del viriale. Imponendo

$$w = -\frac{dE}{dt} ,$$

troviamo

$$w = \frac{2}{3} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)c^3} \left( \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)mr^2} \right)^2 = -\frac{d}{dt} \left( -\frac{1}{2} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r} \right) = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r^2} \dot{r} ,$$

che conduce a

$$\dot{r} = -\frac{4}{3} \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 c^3 r^2} .$$

Questa equazione può essere risolta per separazione delle variabili ed il risultato è

$$r(t) = \left[ R^3 - \frac{4e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 c^3} t \right]^{1/3} ,$$

dove  $R$  è il raggio al tempo  $t = 0$ . Da questo risultato si vede che il raggio dell'orbita dell'elettrone diventerebbe nullo in un tempo

$$\tau = \frac{(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 c^3 R^3}{4e^4} \simeq 10^{-10} \text{ sec} !$$

Inoltre, la frequenza della radiazione emessa dall'elettrone nell'intervallo di tempo  $\tau$  dovrebbe cambiare con continuità secondo la legge

$$\nu(t) = \frac{e}{2\pi\sqrt{(4\pi\epsilon_0)m} r^{3/2}(t)} .$$

È inutile dire che non c'è alcuna evidenza sperimentale di un comportamento di questo tipo.

### 2.7.6 Buca di potenziale infinita nell'antica teoria dei quanti

Ci proponiamo di determinare i livelli energetici di una particella di massa  $m$ , in moto rettilineo lungo un asse che chiameremo  $x$ , confinata nel segmento di estremi  $x = 0$  ed  $x = a$ . Questo sistema può essere descritto come quello di una particella soggetta al potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } 0 < x < a \\ \infty & \text{altrove} \end{cases}$$

che rappresenta una **buca di potenziale** di profondità infinita. Messa in movimento con una spinta, la particella effettua un moto periodico, andando avanti e indietro con impulso di modulo costante, salvo nei punti estremi, dove esso cambia di segno in un tempo trascurabile.

L'energia totale  $E$  (costante) è solo quella cinetica ed è data da

$$E = \frac{p^2}{2m} ,$$

che implica  $p = +\sqrt{2mE}$ , quando la particella si muove da  $x = 0$  ad  $x = a$ , e  $p = -\sqrt{2mE}$ , quando si muove da  $x = a$  ad  $x = 0$ . La regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld (2.9) impone che

$$\oint p dq = \int_0^a (+\sqrt{2mE}) dx + \int_a^0 (-\sqrt{2mE}) dx = 2 \int_0^a \sqrt{2mE} dx = 2a \sqrt{2mE} = nh ,$$

con  $n = 0, 1, 2, \dots$ , da cui segue che i livelli energetici permessi sono quelli per cui

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} , \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

È interessante osservare che questo risultato coincide con quello che troveremo nel Capitolo 5 usando la moderna meccanica quantistica.

### 2.7.7 L'oscillatore armonico unidimensionale nell'antica teoria dei quanti

Consideriamo una particella di massa  $m$  in moto unidimensionale, soggetta ad una forza di richiamo elastica con costante  $k = m\omega^2$  ed applichiamo la regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld (2.9) per determinare i livelli energetici di questo sistema. L'energia totale  $E$  (costante) del sistema è data dalla somma dell'energia cinetica della particella e di quella potenziale della molla,

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 .$$

Da questa relazione segue che  $p = +\sqrt{2m(E - m\omega^2 q^2/2)}$  quando la particella si muove dall'estremo sinistro del moto a quello destro e  $p = -\sqrt{2m(E - m\omega^2 q^2/2)}$  quando si muove nel verso contrario. Gli estremi del moto sono determinati dalla condizione  $p = 0$ , che conduce a

$$q_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \equiv \pm A(E) ,$$

La regola di quantizzazione (2.9) impone che

$$\begin{aligned} \oint p dq &= \int_{-A(E)}^{+A(E)} \left[ +\sqrt{2m \left( E - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \right)} \right] dq + \int_{+A(E)}^{-A(E)} \left[ -\sqrt{2m \left( E - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \right)} \right] dq \\ &= 2 \int_{-A(E)}^{+A(E)} \left[ +\sqrt{2m \left( E - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \right)} \right] dq = \frac{4E}{\omega} \int_{-1}^{+1} \sqrt{1-x^2} dx = \frac{2E}{\omega} \pi = nh , \end{aligned}$$



con  $n = 0, 1, 2, \dots$ , da cui segue che i livelli energetici permessi sono quelli per cui

$$E_n = n \hbar \omega .$$

Nel Capitolo 5 vedremo la trattazione dell'oscillatore armonico unidimensionale secondo la moderna teoria quantistica.

## Bibliografia

- Per l'esperimento di Franck-Hertz:  
E. Persico, *Fondamenti della meccanica atomica*, Zanichelli.
- Per l'esperimento di Stern-Gerlach:  
A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod;  
J.J. Sakurai, *Modern quantum mechanics*, Addison-Wesley.

---

## Capitolo 3

# I princìpi della meccanica ondulatoria

### 3.1 Introduzione

In questo Capitolo presenteremo i princìpi della **meccanica quantistica**, cioè della “moderna” teoria dei quanti. Essa è la teoria delle interazioni non-relativistiche tra le particelle elementari. Finora non è stata smentita da alcuna evidenza sperimentale.

La fondazione della meccanica quantistica si può collocare storicamente nell’intervallo temporale tra il 1923 ed il 1927. Il formalismo generale col quale oggi essa è conosciuta si deve a Dirac, tuttavia essa apparve originariamente in due formulazioni apparentemente diverse, la meccanica delle matrici e la meccanica ondulatoria.

La **meccanica delle matrici** (Heisenberg, Born, Jordan) si basa sul principio che in ogni teoria fisica occorre distinguere le nozioni e le quantità fisicamente **osservabili** da quelle che non lo sono. Le prime devono figurare nella teoria, le seconde possono essere abbandonate senza danno.

L’antica teoria dei quanti fallisce perché fa appello a tutto un insieme di nozioni che non hanno fondamento sperimentale. Ad esempio, è possibile seguire sperimentalmente il moto dell’elettrone su un’orbita di Bohr dell’atomo di idrogeno? Per farlo, occorrerebbero raggi luminosi di lunghezza d’onda  $\lambda$  minore del raggio medio  $a$  dell’orbita considerata:  $\lambda \ll a$  (raggi X). Ma l’urto di un fotone X con un elettrone comporta un trasferimento di impulso dell’ordine di  $h/\lambda \gg h/a$  (effetto Compton) e quindi una perturbazione del moto. In particolare, per un elettrone sull’orbita di Bohr fondamentale ( $n = 1$ ), l’energia media trasferita per urto è dell’ordine di quella di ionizzazione.

Poiché nessuna esperienza permette di affermare che l’elettrone descrive effettivamente un’orbita precisa, *la nozione di orbita può essere abbandonata*. Il fatto che un atomo sia in uno **stato di energia** ben determinato non implica che esso possieda ad ogni istante una posizione ed un impulso precisi. I dati fisicamente osservabili sono invece le *frequenze* e le *intensità* di irraggiamento.

Ciascuna frequenza  $\nu$  di emissione o assorbimento è associata ad una coppia di livelli energetici  $n$  ed  $m$  dell’atomo, è naturale quindi individuarla mediante il simbolo  $\nu_{nm}$ . L’insieme delle frequenze di emissione o assorbimento di un atomo può essere pertanto rappresentato sotto forma di una matrice di elemento generico  $\nu_{nm}$ .

Secondo la meccanica delle matrici, ad *ogni* grandezza fisica viene fatta corrispondere una matrice. Ciò fa entrare in gioco immediatamente un’algebra *non-commutativa*. Le equazioni del moto delle variabili dinamiche sono equazioni tra matrici. Seguendo il **principio di corrispondenza**, si

ammette che queste equazioni siano formalmente identiche alle equazioni (tra grandezze con l'algebra ordinaria) del sistema classico corrispondente.

La **meccanica ondulatoria** (Schrödinger) si basa sui lavori di de Broglie sulle onde di materia: la materia, come la luce, presenta un doppio aspetto ondulatorio e corpuscolare. Generalizzando questa nozione di onde di materia, Schrödinger scopre l'**equazione di propagazione** della funzione d'onda che rappresenta un dato sistema quantistico.

Fu lo stesso Schrödinger a dimostrare nel 1926 l'**equivalenza** tra meccanica delle matrici e meccanica ondulatoria, mentre, come anticipato, si deve a Dirac la messa a punto del formalismo generale della teoria quantistica. La teoria che ne risulta è una teoria non-relativistica delle particelle elementari. Successivamente essa fu completata da una teoria quantistica del campo elettromagnetico (Dirac, 1927; Jordan, Pauli, 1928).

L'**interpretazione** e la **coerenza interna** della teoria sono state pienamente comprese grazie ai lavori di Born, Heisenberg, Bohr (1926-1930). A questa interpretazione ci si riferisce come a quella della **scuola di Copenaghen**.

Dopo violente controversie e malgrado irriducibili opposizioni (tra le quali si contano quelli di Einstein e degli stessi Schrödinger e de Broglie), essa ha ricevuto l'adesione della grande maggioranza dei fisici. Il dibattito, che dura tuttora, si situa ormai sul terreno della **filosofia della scienza**.

## 3.2 Ipotesi di de Broglie. Natura ondulatoria della materia

Nel 1925 de Broglie ipotizzò il dualismo onda-corpuscolo anche nella materia. La stessa corrispondenza che esiste tra un'onda luminosa e un quanto di luce deve esistere tra un'**onda di materia** e una particella. La connessione tra i due aspetti deve essere data da  $E = h\nu = \hbar\omega$ . Dal punto di vista della relatività ristretta  $E$  e  $\vec{p}$  sono quantità omogenee, sono infatti componenti dello stesso quadrivettore. Se quindi  $E$ , componente *temporale* del quadrivettore energia-impulso, è proporzionale a  $\nu$ , cioè al *numero di vibrazioni nell'unità di tempo*, il modulo di  $\vec{p}$ , componente *spaziale* del quadrivettore, deve essere proporzionale a  $1/\lambda$ , cioè al *numero d'onde per unità di lunghezza*, con la stessa costante di proporzionalità, cioè  $p = h/\lambda$ .

Un altro modo di giustificare la relazione di de Broglie tra impulso e lunghezza d'onda è quello che segue. La fase di un'onda piana,

$$\phi = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t = 2\pi \left( \frac{1}{\lambda} \vec{n} \cdot \vec{r} - \nu t \right) ,$$

è un invariante di Lorentz e può essere scritta (a meno di un segno) come il prodotto scalare di Lorentz tra il quadrivettore  $(\omega/c, \vec{k}) = 2\pi(\nu/c, \vec{n}/\lambda)$  ed il quadrivettore  $(ct, \vec{r})$ :

$$\phi = - \left( \frac{\omega}{c}, \vec{k} \right) \cdot (ct, \vec{r}) .$$

Poiché la componente temporale del quadrivettore energia-impulso  $(E/c, \vec{p})$  è proporzionale alla componente temporale del quadrivettore  $(\omega/c, \vec{k})$  con costante di proporzionalità pari ad  $\hbar$ , è naturale assumere che

$$\left( \frac{E}{c}, \vec{p} \right) = \hbar \left( \frac{\omega}{c}, \vec{k} \right) ,$$

cosicché la fase dell'onda di materia può essere scritta in forma invariante di Lorentz come

$$\phi = \frac{1}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) = -\frac{1}{\hbar} \left( \frac{E}{c}, \vec{p} \right) \cdot (ct, \vec{r}) .$$

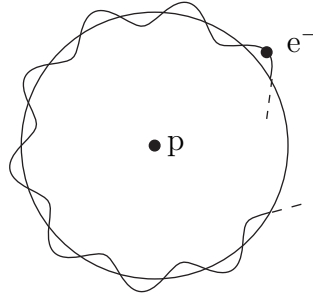


Figura 3.1: Rappresentazione della condizione di stazionarietà dell'onda associata all'elettrone dell'atomo di idrogeno.

Può essere utile osservare che, mentre per un fotone si ha

$$\frac{h}{\lambda} = p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} \quad \longrightarrow \quad \lambda = \frac{c}{\nu} ,$$

che è la usuale *relazione di dispersione* per le onde elettromagnetiche, per un sistema materiale si ha che  $E$  e  $p$  sono legati da

$$E = \frac{p^2}{2m} + V ,$$

dove  $V$  è l'energia potenziale, quindi non sussiste più la relazione  $\lambda = c/\nu$ .

La teoria delle onde di materia permette di comprendere semplicemente la quantizzazione dei livelli energetici degli atomi. Nel caso dell'atomo di idrogeno, ad esempio, se all'elettrone viene associata un'onda **stazionaria**, allora la variazione di fase dopo una rivoluzione completa,  $\Delta\phi = k 2\pi r$ , deve essere un multiplo intero di  $2\pi$ ,

$$k 2\pi r = n 2\pi \quad \longrightarrow \quad 2\pi \frac{p}{\hbar} r = n 2\pi \quad \longrightarrow \quad l = n\hbar , \quad n = 1, 2, \dots ,$$

dove  $l$  è il modulo del momento angolare. Ritroviamo così la condizione di quantizzazione del momento angolare.

Le onde materiali ipotizzate da de Broglie ebbero la **dimostrazione sperimentale** negli anni 1927-1928.

Nel 1927, Davisson e Germer osservarono che nella riflessione di **fasci di elettroni** su monocristalli si verificano fenomeni di interferenza alla von Laue come per i raggi X. Nel 1928 G.P. Thomson e Rupp trovarono che fasci di elettroni attraverso sottili fogli (metalli, mica) danno origine a fenomeni di diffrazione dello stesso tipo di quelli prodotti dai raggi X (anelli di Debye-Scherrer).

### 3.3. VELOCITÀ DI FASE E VELOCITÀ DI GRUPPO

---

Per elettroni non-relativistici la relazione di de Broglie si scrive  $\lambda = h/p = h/(mv)$  e, se gli elettroni sono accelerati in un tubo catodico da una differenza di potenziale  $V$ , la loro energia cinetica finale risulterà essere  $mv^2/2 = eV$ , da cui si deduce

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}} \simeq \sqrt{\frac{150}{V}} \text{ \AA} ,$$

con  $V$  espresso in Volt. Per differenze di potenziale  $V \simeq 10 \text{ kV}$  si ha  $\lambda \simeq 0.122 \text{ \AA}$  (raggi X duri).

La natura ondulatoria della materia si può dimostrare per il caso di **neutroni**. Per neutroni *termici*, cioè con energia corrispondente a  $T = 300 \text{ K}$ , si ha  $\lambda = 1.81 \text{ \AA}$ . Nel 1932 Stern osservò che anche **raggi molecolari** (idrogeno, elio) mostrano fenomeni di diffrazione quando sono fatti riflettere sulla superficie di cristalli.

### 3.3 Velocità di fase e velocità di gruppo

L'associazione di una massa puntiforme con energia  $E$  ed impulso  $p$  con un'onda piana *infinitamente estesa* con frequenza  $\nu$  e lunghezza d'onda  $\lambda$  contiene un elemento di *irrazionalità*, come osservava Bohr. Più realisticamente si deve associare ad una particella un'onda di *estensione ridotta*. In questa Sezione faremo vedere che è possibile realizzare un'onda siffatta mediante la sovrapposizione di onde piane con vettori d'onda vicini. Si parla allora più opportunamente di **pacchetto d'onde**.

Un'onda piana  $e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$  è caratterizzata da una **velocità di fase**, definita come la velocità con cui si muove una superficie (piana) di fase costante. Una superficie di fase costante di un'onda piana in moto lungo la direzione  $x$  è data dalla condizione

$$\phi = kx - \omega t = \text{costante} , \quad \longrightarrow \quad x = \frac{\omega}{k}t + \text{costante} ,$$

che vuol dire che questa superficie si muove con velocità

$$v_f \equiv \left( \frac{dx}{dt} \right)_{\phi=\text{costante}} = \frac{\omega}{k} .$$

Il valore di  $v_f$  è fissato dalla dipendenza di  $\omega$  da  $k$ , cioè da  $\omega = \omega(k)$ , detta **legge di dispersione**. Nel caso di un'onda elettromagnetica nel vuoto  $\omega = kc$  e la velocità di fase è pari a  $c$ . Osserviamo che la velocità di fase **non** è determinabile sperimentalmente, poiché non si può “mettere un segno” sull'onda liscia infinitamente estesa e misurarne la velocità.

Ci proponiamo ora di far vedere che mediante una sovrapposizione di onde piane è possibile realizzare un pacchetto d'onde di estensione limitata e definire una velocità per questo *gruppo* di onde.

Consideriamo il pacchetto d'onde

$$\psi(\vec{r}, t) = \int f(\vec{k}') e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega' t)} d\vec{k}' , \quad f(\vec{k}') \equiv A(\vec{k}') e^{i\alpha(\vec{k}')} ,$$

### 3.3. VELOCITÀ DI FASE E VELOCITÀ DI GRUPPO

che rappresenta la sovrapposizione di onde piane  $e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega' t)}$ , ciascuna con ampiezza  $A(\vec{k}')$ , che supporremo essere “piccata” intorno al vettore d’onda  $\vec{k}$ . Ci chiediamo in che misura il moto di questo pacchetto d’onde può essere assimilato a quello di una particella classica. Per semplicità, limitiamoci al caso unidimensionale, nel quale abbiamo

$$\psi(x, t) = \int f(k') e^{i(k'x - \omega' t)} dk' = \int A(k') e^{i(k'x - \omega' t + \alpha)} dk' ,$$

con  $A(k')$  “piccata” intorno a  $k$  su un dominio  $D$  con estensione  $\Delta k$  intorno a  $k$ .

Introdotta la variabile di fase  $\phi \equiv k'x - \omega't + \alpha$ , abbiamo che, se il fattore di fase  $e^{i\phi}$  oscilla molte volte nel dominio  $D$ , allora l’integrale che definisce  $\psi(x, t)$  dà contributo trascurabile. Il contributo dominante di  $\psi(x, t)$  è ottenuto per  $\phi \simeq$  costante nel dominio  $D$ , cioè quando

$$\left. \frac{d\phi}{dk'} \right|_{k'=k} = \left( x - t \frac{d\omega'}{dk'} + \frac{d\alpha}{dk'} \right)_{k'=k} \simeq 0 .$$

Questa condizione definisce il punto  $\bar{x}$  in cui la  $\psi(x, t)$  prende il valore massimo,

$$\bar{x} \simeq t \frac{d\omega}{dk} - \frac{d\alpha}{dk} ,$$

dove  $d/dk$  sta per  $d/dk'$  calcolata nel punto  $k' = k$  e  $\omega = \omega(k)$ . Per stimare l’estensione spaziale del pacchetto d’onde  $\Delta x$ , usiamo il fatto che se  $e^{i\phi}$  effettua in  $D$  più di, diciamo, una oscillazione, l’integrale diventa trascurabile. Allora, la condizione da imporre è

$$\Delta\phi \simeq \Delta k \left| \frac{d\phi}{dk} \right| \lesssim 1 ,$$

che implica

$$\Delta k \left| x - t \frac{d\omega}{dk} + \frac{d\alpha}{dk} \right| = \Delta k |x - \bar{x}| \lesssim 1 ,$$

cioè

$$|x - \bar{x}| \equiv \Delta x \lesssim \frac{1}{\Delta k} .$$

Questo risultato indica che è possibile costruire un pacchetto d’onda di estensione limitata  $\Delta x$ , pur di sovrapporre onde piane con vettori d’onda compresi in un intervallo di estensione  $\Delta k$  intorno ad un valore di picco,  $k$ . Più localizzato nello spazio è il pacchetto d’onde, maggiore è l’estensione dell’intervallo di vettori d’onda (e quindi di frequenze) delle onde piane che è necessario sovrapporre. Il punto di massimo del pacchetto d’onde,  $\bar{x}$ , si muove con velocità data da

$$v_g \equiv \frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{d\omega}{dk} , \tag{3.1}$$

a cui si dà il nome di **velocità di gruppo**.

In virtù della corrispondenza di de Broglie tra energia e frequenza e tra impulso e vettore d’onda,

$$E = h\nu = \hbar\omega , \quad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k ,$$

abbiamo

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}, \quad v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp},$$

che vanno confrontate con la definizione standard di velocità della particella.

Nel **caso non-relativistico**,  $E = p^2/(2m)$ , abbiamo

$$v_f = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}, \quad v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v,$$

da cui si vede che la  $v_g$  è la corretta definizione di velocità da attribuire al pacchetto d'onde per realizzare la corrispondenza con una particella.

Nel **caso relativistico**, detta  $m_0$  la massa a riposo della particella, si ha che

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = m_0 \gamma c^2, \quad p = m_0 \gamma v, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}},$$

da cui segue che

$$v_f = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} > c \text{ (!)}, \quad v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E} = v.$$

Anche nel caso relativistico,  $v_g$  riproduce correttamente la velocità della particella associata al pacchetto d'onde.

I risultati di questa Sezione e le evidenze sperimentali di esistenza delle onde di materia presentate nella precedente Sezione suggeriscono di interpretare una particella materiale come un pacchetto d'onde. Tuttavia, questa interpretazione **non** è corretta: un pacchetto d'onde tende a dissiparsi molto rapidamente.

## 3.4 Dualismo onda-corpuscolo. Interpretazione statistica

Proviamo a questo punto a tirare le somme di quanto visto finora. Innanzitutto, sia la luce che la materia *si comportano* a volte come onde, a volte come corpuscoli. Tra i processi che abbiamo discusso, alcuni possono essere interpretati in termini **corpuscolari**: sono quei processi, come l'effetto fotoelettrico e l'effetto Compton, in cui si misurano **energia e quantità di moto**. Altri possono essere interpretati in termini **ondulatori**: sono quei processi, come la doppia fenditura di Young o la diffrazione di elettroni, in cui si fanno misure di **posizione e tempo**.

Tuttavia, ciò non significa che sia possibile provare che si ha a che fare proprio con corpuscoli od onde. Per classificare un "oggetto" come **corpuscolo** è necessario determinarne *con esattezza e simultaneamente* posizione e quantità di moto (Heisenberg). Se ciò non può essere fatto, se cioè non possiamo determinare mai più di una delle due proprietà con precisione arbitraria, come vedremo nella prossima Sezione, allora non possiamo parlare di corpuscolo. D'altro canto, abbiamo già osservato che l'interpretazione di una particella come **pacchetto d'onda** è insostenibile perché i pacchetti d'onda tendono a *dissiparsi* nel corso del tempo.

Il concetto unificatore è quello di **probabilità** (Heisenberg, Bohr, 1927): come abbiamo già concluso discutendo la doppia fenditura di Young, l'onda è associata alla probabilità che una particella si



manifesti in un certo punto dello spazio. Anche se la particella si manifesta con **impatti localizzati** nell'apparato di rivelazione, non è possibile classificarla come corpuscolo.

In definitiva, è necessario costruire una nuova teoria, che faccia a meno di qualche principio fondamentale della teoria classica e che sia edificata su nuovi principi, capace di descrivere correttamente i fenomeni fisici alla scala “microscopica”.

### 3.5 Incertezza della misura e indeterminazione di Heisenberg

In questa Sezione presenteremo due esempi che mettono in evidenza l'impossibilità di determinare con arbitraria precisione e simultaneamente la posizione e l'impulso di una particella.<sup>1</sup>

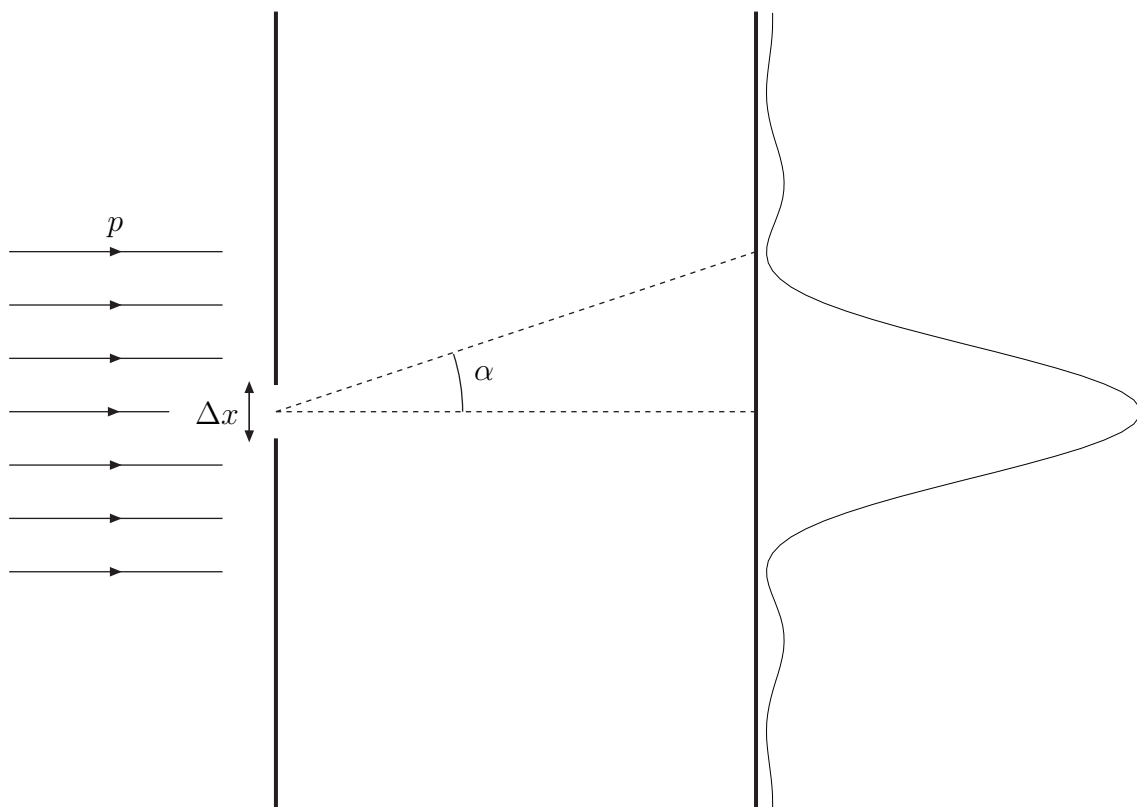


Figura 3.2: Illustrazione dell'esempio 1.

**Esempio 1:** fascio di elettroni attraverso una fenditura (Figura 3.2).

Un fascio omogeneo di elettroni viene inviato verso una superficie con una fenditura di dimensioni dell'ordine della lunghezza d'onda di de Broglie degli elettroni. Come noto, su uno schermo disposto oltre la fenditura parallelamente ad essa si produce una figura di diffrazione costituita

<sup>1</sup>Questi esempi sono tratti da M. Born, *op. cit.*; altri esempi possono essere trovati su A. Messiah, *op. cit.*.

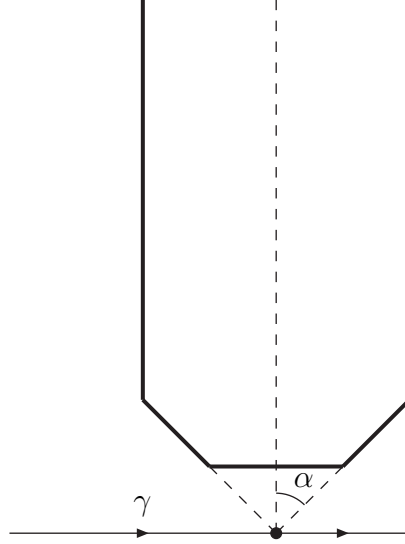


Figura 3.3: Illustrazione dell'esempio 2.

dalla sovrapposizione degli impatti localizzati prodotti dai singoli elettroni. La maggior parte di essi finiscono nella regione dello schermo alla stessa altezza della fenditura e l'intensità della loro distribuzione diminuisce allontanandosi da questo punto, fino ad un minimo di intensità nulla realizzato in corrispondenza dell'angolo di deflessione  $\sin \alpha = \lambda/d$ , dove  $d$  è la dimensione verticale della fenditura.

Questo dispositivo può essere considerato un apparato di misura della posizione verticale  $x$  degli elettroni, con incertezza  $\Delta x$  data dalla dimensione verticale dell'apertura,  $d$ .

L'apparire della figura di diffrazione dice che alcuni elettroni sono passati attraverso la fenditura, ma il punto in cui è avvenuto il passaggio è indefinito. I singoli elettroni vengono deflessi nelle fenditure o verso l'alto o verso il basso. Ogni singolo elettrone acquista una componente della quantità di moto nella direzione  $x$  dell'ordine  $\Delta p \sim p \sin \alpha$ , poiché la grande maggioranza degli elettroni finisce nella regione compresa tra i primi due minimi della figura di diffrazione. D'altro canto, sulla base della descrizione ondulatoria, si ha che

$$\Delta x \sin \alpha \sim \lambda = \frac{h}{p}, \quad \longrightarrow \quad \Delta p \sim \frac{h}{\Delta x} \quad \longrightarrow \quad \Delta x \Delta p \sim h.$$

Come risultato della determinazione della posizione dell'elettrone per mezzo della fenditura, che comporta l'incertezza  $\Delta x$ , la particella acquista una quantità di moto lungo  $x$  di ordine  $h/\Delta x$ .

Quindi  $h$  rappresenta un **limite assoluto** alla misura simultanea di coordinata e quantità di moto.

**Esempio 2:** determinazione della posizione con un microscopio (Figura 3.3).

Per determinare la posizione di un elettrone è necessario illuminarlo ed osservarne la luce diffusa. Se vogliamo definire la posizione il più precisamente possibile, impieghiamo luce di lunghezza d'onda

la più corta possibile (raggi  $\gamma$ ). La posizione dell'elettrone, quando venga irradiato con luce  $\gamma$ , può essere determinata con un errore  $\Delta x \sim \lambda / \sin \alpha$ , che è il potere risolvibile del microscopio.<sup>2</sup>

Secondo il punto di vista corpuscolare, l'elettrone subisce un rinculo per effetto Compton, in qualche misura indeterminato, di ordine di grandezza  $h\nu/c$ . Poiché il quanto di luce è di fatto osservato nel microscopio, l'indeterminazione di direzione dell'elettrone è legata ad  $\alpha$ . Abbiamo quindi

$$\Delta p \sim \frac{h\nu}{c} \sin \alpha, \quad \longrightarrow \quad \Delta x \Delta p \sim h.$$

### 3.6 Complementarità. Variabili compatibili. Causalità

Alla scala microscopica **non** si può fare distinzione netta tra il fenomeno naturale e lo strumento con cui lo si osserva. Ciò è giustificato solo quando  $\hbar$  può essere considerato piccolo. Questo è un limite all'analisi in linguaggio classico del fenomeno studiato. Per andare al di là di questo limite occorre *modificare il dispositivo sperimentale*, introducendo nuove possibilità di interazione tra oggetto e strumento. I risultati di osservazioni effettuate in condizioni sperimentali diverse vanno considerate **complementari**: la totalità dei risultati delle osservazioni descrive le proprietà degli oggetti microscopici.

Le variabili  $x$  e  $p_x$  si dicono **variabili complementari**, nel senso che la misura precisa di  $x$  e quella di  $p_x$  richiedono montaggi sperimentali incompatibili. In altri termini, lo *stesso* apparato sperimentale adottato per una misura precisa di  $x$  non può essere usato per una misura precisa di  $p_x$ , se non entro il limite dato da  $\Delta x \Delta p_x \sim \hbar$ .

Si può enunciare il **principio di complementarità** dicendo che la descrizione con il linguaggio classico delle proprietà fisiche degli oggetti microscopici necessita l'impiego di variabili complementari.

Si dicono **variabili compatibili** le variabili dinamiche che possono essere determinate *simultaneamente* in modo preciso. Esempi di variabili compatibili sono le terne  $(x, y, z)$ ,  $(p_x, p_y, p_z)$ ,  $(x, p_y, p_z)$ , ecc., ossia tutte le terne che non contengano una delle coppie di variabili  $(x, p_x)$ ,  $(y, p_y)$  o  $(z, p_z)$ .

Un **insieme completo** di variabili compatibili  $a, b, c, \dots$ , è un insieme di variabili compatibili a due a due, tale che ogni altra variabile compatibile con ciascuna di esse è necessariamente una loro funzione,  $f(a, b, c, \dots)$ . Una misura precisa effettuata su un insieme completo di variabili compatibili di un sistema rappresenta il *massimo di informazione* che si possa ottenere su questo sistema. Essa definisce completamente il suo **stato dinamico** a cui corrisponde una **funzione d'onda** determinata.

La **causalità** si può applicare con rigore solo a *sistemi isolati*. Nota la funzione d'onda dello stato dinamico di un sistema isolato ad un certo istante, la sua funzione d'onda ad ogni istante successivo è determinata completamente da quella iniziale.

Tuttavia, dal momento in cui si effettua una osservazione del sistema, la **perturbazione** esercitata dallo strumento di osservazione non può essere mai trascurata. Inoltre, essa resta in qualche

<sup>2</sup>Un modo di giustificare questa relazione è osservare che un elettrone irradiato produce una figura di diffrazione esattamente come un foro in una superficie, con la sola differenza che i chiari e gli scuri sono invertiti.

misura **imprevedibile** e **incontrollabile**. L'intervento dell'apparecchio di misura *distrugge la connessione causale* tra lo stato del sistema prima e dopo la misura. In generale, non è possibile predire con certezza in quale stato si troverà il sistema dopo la misura.

### 3.7 Funzione d'onda e densità di probabilità

Lo stato dinamico di un sistema quantistico è definito completamente dalla **funzione d'onda**  $\psi$  del sistema. Essa è in generale una funzione complessa di un insieme di variabili compatibili. Per il sistema quantistico di una singola particella<sup>3</sup> può quindi essere una funzione di  $x, y, z$  o di  $p_x, p_y, p_z$  o di  $p_x, y, z$ , ecc., cioè di tutte le terne di variabili dinamiche che non contengano insieme le coppie di variabili  $(x, p_x)$  o  $(y, p_y)$  o  $(z, p_z)$ .

**Postulato 0:** la funzione d'onda nulla non è associata ad alcuno stato fisico.

**Postulato 1:** se  $\psi$  è la funzione d'onda di un sistema quantistico corrispondente ad un certo stato fisico, tutte le funzioni d'onda della forma  $c\psi$ , dove  $c$  è una costante complessa, corrispondono al medesimo stato fisico.

**Postulato 2 (principio di sovrapposizione):** se un sistema quantistico può trovarsi negli stati fisici descritti dalle funzioni d'onda  $\psi_1$  e  $\psi_2$ , allora può trovarsi anche in tutti gli stati fisici descritti dalle combinazioni lineari  $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$ , con  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  costanti complesse.

L'insieme di tutte le funzioni d'onda di un sistema quantistico ha pertanto la struttura di uno **spazio vettoriale** sul corpo dei complessi, in generale di dimensione infinita, in cui il ruolo di vettore è svolto dalla funzione d'onda. Ad ogni stato fisico corrisponde un'infinità di *vettori*, chiamata **raggio**, costituita da vettori che differiscono uno dall'altro per una costante moltiplicativa.

D'ora in poi, per semplicità di notazione, ci riferiremo al caso di sistema quantistico di singola particella. L'estensione al caso di sistemi di più particelle è immediata.

A differenza di una particella classica, per la quale lo stato dinamico è definito dalla posizione  $\vec{r}$  e dall'impulso  $\vec{p}$ , in meccanica quantistica la funzione d'onda  $\psi(\vec{r})$  di una particella ha una estensione spaziale: non si può attribuire ad una particella quantistica una *posizione precisa*, ma solo definire la *probabilità* di trovare la particella localizzata in una certa regione di spazio quando si effettua una misura di posizione.

Detta  $P(\vec{r})d\vec{r}$  la probabilità di trovare la particella nell'elemento di volume  $(\vec{r}, \vec{r}+d\vec{r})$ , chiameremo  $P(\vec{r})$  **densità di probabilità (di presenza)** della particella. La probabilità di trovare la particella in un volume  $V$  sarà data da

$$P(V) = \int_V P(\vec{r})d\vec{r}. \quad (3.2)$$

Analogamente, non si può attribuire in generale ad una particella quantistica un *impulso preciso*. Ciò sarebbe possibile nel caso in cui la funzione d'onda fosse un'onda piana,

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}},$$

nel qual caso potremmo associare alla particella con certezza l'impulso  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ , in accordo con l'ipotesi di de Broglie. Tuttavia, in generale,  $\psi(\vec{r})$  è una sovrapposizione di onde piane di vettore

---

<sup>3</sup>Si suppone che la particella non possieda momento angolare intrinseco o che gli effetti dovuti ad esso possano essere ignorati. Ciò sarà sempre vero per gli argomenti trattati in questo corso.

d'onda  $\vec{k}$  variabile. Si può definire solo la *probabilità* di trovare l'impulso in una certa regione dello spazio degli impulsi quando si effettua una misura di impulso.

Detta  $\Pi(\vec{p})d\vec{p}$  la probabilità di trovare l'impulso della particella nell'intervallo  $(\vec{p}, \vec{p}+d\vec{p})$ , chiameremo  $\Pi(\vec{p})$  **densità di probabilità di impulso** della particella. La probabilità di trovare l'impulso della particella nel dominio  $D$  dello spazio degli impulsi sarà data da

$$\Pi(D) = \int_D \Pi(\vec{p})d\vec{p}. \quad (3.3)$$

Segue dal concetto stesso di probabilità che  $P(\vec{r})$ ,  $\Pi(\vec{p}) > 0$  e che  $P(\vec{r})$  e  $\Pi(\vec{p})$  integrate rispettivamente su tutto lo spazio e su tutti gli impulsi devono soddisfare

$$\int_{\text{tutto lo spazio}} P(\vec{r})d\vec{r} = 1, \quad \int_{\text{tutti gli impulsi}} \Pi(\vec{p})d\vec{p} = 1. \quad (3.4)$$

**Definizione:** si definisce la densità di probabilità di posizione  $P(\vec{r})$  come l'intensità della funzione d'onda associata alla particella, cioè

$$P(\vec{r}) = \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2.$$

La prima delle condizioni (3.4) si traduce quindi nella

$$\int_{\text{tutto lo spazio}} |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1, \quad (3.5)$$

detta **condizione di normalizzazione** della funzione d'onda. L'esistenza dell'integrale che appare in questa condizione richiede che la funzione d'onda  $\psi(\vec{r})$  sia quadrato-sommabile su tutto lo spazio, cioè che appartenga a  $L^2(\mathbf{R}^3)$ . La radice quadrata di questo integrale rappresenta la **norma**  $\|\psi\|$  della funzione d'onda  $\psi(\vec{r})$  rispetto al seguente prodotto scalare, definito nello spazio delle funzioni d'onda:

$$(\psi_1, \psi_2) \equiv \langle \psi_1, \psi_2 \rangle \equiv \int \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (3.6)$$

È immediato verificare che la definizione (3.6) soddisfa tutti i requisiti di un prodotto scalare in uno spazio vettoriale sul corpo dei complessi.

Dal punto di vista matematico, lo spazio delle funzioni d'onda che stiamo costruendo si chiama **spazio di Hilbert**: esso è uno spazio vettoriale in cui è definito un prodotto scalare e che inoltre è *completo*<sup>4</sup> rispetto alla norma indotta da tale prodotto scalare.

Passiamo ora alla definizione di  $\Pi(\vec{p})$ . Detta  $\varphi(\vec{p})$  la trasformata di Fourier<sup>5</sup> della funzione d'onda  $\psi(\vec{r})$ , definita da

$$\varphi(\vec{p}) = \int \psi(\vec{r}) \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d\vec{r}, \quad (3.7)$$

<sup>4</sup>In uno spazio  $V$ , in cui è definita una norma, una successione di elementi  $x_n \in V$  si dice **di Cauchy** se  $\|x_n - x_m\| \rightarrow 0$  per  $n, m \rightarrow \infty$ ; lo spazio si dice **completo** rispetto alla data norma se ogni successione di Cauchy converge ad un elemento  $x \in V$  nel senso della norma, cioè  $\|x_n - x\| \rightarrow 0$  per  $n \rightarrow \infty$ . Nel caso di  $L^2(\mathbf{R}^3)$ , significa che ogni successione di Cauchy di funzioni quadrato-sommabili converge nel senso della norma indotta da (3.6) ad una funzione quadrato-sommabile.

<sup>5</sup>Si veda l'Appendice generale D per definizione e proprietà della trasformata di Fourier.

### 3.8. DIMENSIONE DI UNA FUNZIONE D'ONDA

---

la funzione d'onda  $\psi(\vec{r})$  si può scrivere in termini di  $\varphi(\vec{p})$  nel modo seguente:

$$\psi(\vec{r}) = \int \varphi(\vec{p}) \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d\vec{p}, \quad (3.8)$$

cioè come la anti-trasformata di Fourier di  $\varphi(\vec{p})$ . Da quest'ultima espressione risulta che  $\psi(\vec{r})$  può essere scritta come combinazione lineare di onde elementari  $e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}/(2\pi\hbar)^{3/2}$  di impulso  $\vec{p}$  determinato, aventi ampiezza  $\varphi(\vec{p})$ . Se ci fosse soltanto il termine  $e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}/(2\pi\hbar)^{3/2}$ , il risultato della misura di impulso sarebbe con certezza  $\vec{p}_0$ . Se  $\varphi(\vec{p})$  ha valori notevoli in un piccolo intorno di  $\vec{p}_0$ , il valore trovato è quasi certamente situato in prossimità di  $\vec{p}_0$ .

**Definizione:** si definisce la densità di probabilità di impulso  $\Pi(\vec{p})$  come

$$\Pi(\vec{p}) = \varphi^*(\vec{p})\varphi(\vec{p}) = |\varphi(\vec{p})|^2.$$

In virtù dell'identità di Parseval (D.12), si ha che

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = \int |\varphi(\vec{p})|^2 d\vec{p}, \quad (3.9)$$

che dice che la seconda delle condizioni (3.4) è soddisfatta automaticamente se è soddisfatta la prima di esse. La funzione  $\varphi(\vec{p})$  è chiamata **funzione d'onda nello spazio degli impulsi**. Lo spazio delle funzioni d'onda nello spazio degli impulsi è isomorfo a quello delle funzioni d'onda nello spazio delle coordinate. In esso può essere definito un prodotto scalare analogamente a quanto fatto in (3.6) con le funzioni d'onda nello spazio delle coordinate:

$$(\varphi_1, \varphi_2) \equiv \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle \equiv \int \varphi_1^*(\vec{p}) \varphi_2(\vec{p}) d\vec{p}. \quad (3.10)$$

Per la proprietà della trasformata di Fourier di conservare il prodotto scalare, si ha che  $(\psi_1, \psi_2) = (\varphi_1, \varphi_2)$ , se  $\psi_1(\vec{r})$  e  $\psi_2(\vec{r})$  sono due funzioni d'onda nello spazio delle coordinate e  $\varphi_1(\vec{p})$  e  $\varphi_2(\vec{p})$  le corrispondenti funzioni d'onda nello spazio degli impulsi. In definitiva,  $\psi$  e  $\varphi$  sono **rappresentazioni equivalenti** dello stesso stato dinamico. In quanto segue, il simbolo  $\psi$  indicherà sempre una funzione d'onda nello spazio delle coordinate, il simbolo  $\varphi$  una funzione d'onda nello spazio degli impulsi.

Concludiamo questa Sezione con una osservazione: la particella associata a  $\psi$  (o a  $\varphi$ ) non ha né una posizione, né un impulso precisi; ad ogni risultato della misura di posizione o di impulso è associata una probabilità di essere ottenuto. Se si considerano  $N$  sistemi equivalenti, indipendenti l'uno dall'altro, tutti descritti dalla medesima  $\psi$ , la distribuzione dei risultati della misura della posizione è data, per  $N \rightarrow \infty$ , proprio da  $P(\vec{r})$  e quella della misura di impulso, nello stesso limite, da  $\Pi(\vec{p})$ .

## 3.8 Dimensione di una funzione d'onda

La dimensione di una funzione d'onda  $\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$  può essere determinata immediatamente osservando che  $|\psi(\vec{r})|^2$  rappresenta una densità di probabilità di posizione, cioè una probabilità per unità di volume (si veda, ad esempio, la (3.5)). Ciò implica che  $|\psi(\vec{r})|^2$  ha le dimensioni dell'inverso

di una lunghezza al cubo, cioè  $[\psi(\vec{r})]^2 = L^{-3}$ , da cui segue che  $[\psi(\vec{r})] = L^{-3/2}$ . Per sistemi bidimensionali, per i quali  $\psi = \psi(x, y)$ , o unidimensionali, per i quali  $\psi = \psi(x)$ , si ha  $[\psi] = L^{-1}$  e  $[\psi] = L^{-1/2}$ , rispettivamente.

Analogamente si può trovare che la dimensione del modulo quadro di una funzione d'onda nello spazio degli impulsi  $\varphi(\vec{p}) = \varphi(p_x, p_y, p_z)$  è quella dell'inverso del cubo di un impulso (si veda la (3.9)), cioè  $[\varphi(\vec{p})]^2 = (ML/T)^{-3}$ , da cui segue che  $[\varphi(\vec{p})] = (ML/T)^{-3/2}$ . Per sistemi bidimensionali, per i quali  $\varphi = \varphi(p_x, p_y)$ , o unidimensionali, per i quali  $\varphi = \varphi(p_x)$ , si ha  $[\varphi] = (ML/T)^{-1}$  e  $[\varphi] = (ML/T)^{-1/2}$ , rispettivamente.

### 3.9 Funzioni non normalizzabili in senso stretto

La condizione di normalizzazione

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1 ,$$

è soddisfatta da funzioni d'onda che tendono a zero per  $|\vec{r}| \rightarrow \infty$  in modo sufficientemente rapido. Ciò significa che anche la probabilità di trovare la particella, il cui stato è descritto dalla funzione d'onda  $\psi$ , deve andare a zero rapidamente per  $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ . In altri termini, la particella può essere trovata, con probabilità apprezzabilmente diversa da zero, in una porzione limitata dello spazio.

La funzione d'onda  $\psi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ , che, come abbiamo visto, rappresenta una particella libera con impulso definito  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ , **non** è normalizzabile, poiché il suo modulo quadro è costante e l'integrale di una costante esteso a tutto lo spazio è evidentemente divergente. Ciò non deve sorprendere, perché una particella libera di impulso definito ha uguale probabilità di trovarsi in ogni punto dello spazio. In casi come questo,  $|\psi(\vec{r})|^2$  non può essere interpretata come densità di probabilità, tuttavia un rapporto del tipo

$$\frac{\int_{V_1} |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}}{\int_{V_2} |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}} , \quad (3.11)$$

rimane ben definito e rappresenta la *probabilità relativa* di trovare il sistema nel volume  $V_1$ , rispetto a quella di trovarlo nel volume  $V_2$ .

### 3.10 Valori medi di osservabili

Sia  $F(\vec{r})$  una qualunque osservabile, funzione delle coordinate di una particella che si trovi nello stato dinamico  $\psi$ . Il **valor medio** di  $F(\vec{r})$  sullo stato  $\psi$  è la media aritmetica delle misure di  $F(\vec{r})$  effettuate su un numero grande  $N$  di sistemi equivalenti, indipendenti l'uno dall'altro, rappresentati ciascuno dalla stessa  $\psi$ . Il risultato di una singola misura di  $F(\vec{r})$  è completamente determinato una volta che sia determinato  $\vec{r}$ , ma un certo valore di  $\vec{r}$  è ottenuto con probabilità  $P(\vec{r})$ . Abbiamo allora che il valor medio di  $F(\vec{r})$  può essere definito come

$$\langle F(\vec{r}) \rangle = \int F(\vec{r}) P(\vec{r}) d\vec{r} = \int F(\vec{r}) |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = \int \psi^*(\vec{r}) F(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} . \quad (3.12)$$

L'espressione all'ultimo membro di sopra può essere interpretata come il prodotto scalare  $(\psi, \hat{F}\psi)$ , dove  $\hat{F}$  è l'*operatore moltiplicativo* che manda una funzione  $\psi(\vec{r})$  dello spazio di Hilbert delle funzioni

d'onda di un sistema in un'altra funzione d'onda dello stesso spazio,  $F(\vec{r})\psi(\vec{r})$ . Un esempio di valore medio è quello della coordinata  $x$  della posizione di una particella nello stato  $\psi$ , dato da

$$\langle x \rangle = \int x |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = \int \psi^*(\vec{r}) x \psi(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (3.13)$$

Analogamente, se  $G(\vec{p})$  è qualunque osservabile, funzione dell'impulso di una particella che si trovi nello stato dinamico  $\varphi$ , il suo valor medio è definito come

$$\langle G(\vec{p}) \rangle = \int G(\vec{p}) \Pi(\vec{p}) d\vec{p} = \int G(\vec{p}) |\varphi(\vec{p})|^2 d\vec{p} = \int \varphi^*(\vec{p}) G(\vec{p}) \varphi(\vec{p}) d\vec{p}. \quad (3.14)$$

Anche qui, l'espressione all'ultimo membro può essere interpretata come il prodotto scalare  $(\varphi, \hat{G}\varphi)$ , dove  $\hat{G}$  è l'*operatore moltiplicativo* che manda una funzione  $\varphi(\vec{p})$  dello spazio di Hilbert delle funzioni d'onda di un sistema in un'altra funzione d'onda dello stesso spazio,  $G(\vec{p})\varphi(\vec{p})$ . Un esempio di valore medio è quello della componente  $p_x$  dell'impulso di una particella nello stato  $\varphi$ , dato da

$$\langle p_x \rangle = \int p_x |\varphi(\vec{p})|^2 d\vec{p} = \int \varphi^*(\vec{p}) p_x \varphi(\vec{p}) d\vec{p}. \quad (3.15)$$

Ora, poiché  $\psi(\vec{r})$  e  $\varphi(\vec{p})$  sono rappresentazioni equivalenti dello stato di una particella, deve essere possibile determinare il valor medio di una  $F(\vec{r})$  conoscendo di una particella la sua funzione d'onda nello spazio degli impulsi  $\varphi(\vec{p})$  e, analogamente, il valor medio di una  $G(\vec{p})$  conoscendo la funzione d'onda  $\psi(\vec{r})$ .

Per capire come procedere, consideriamo il caso semplice di  $\langle p_x \rangle$ . Innanzitutto, osserviamo che  $p_x \varphi(\vec{p})$  è la trasformata di Fourier di  $-i\hbar \partial \psi(\vec{r}) / \partial x$ , infatti

$$\begin{aligned} p_x \varphi(\vec{p}) &= p_x \int \psi(\vec{r}) \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d\vec{r} = \int p_x \psi(\vec{r}) \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d\vec{r} = \int \psi(\vec{r}) i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] d\vec{r} \\ &= i\hbar \int \psi(\vec{r}) \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} dydz \Big|_{x \rightarrow -\infty}^{x \rightarrow +\infty} - \int \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) \right] \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d\vec{r}, \end{aligned}$$

ma il primo termine all'ultimo membro è nullo per una funzione di  $L^2(\mathbf{R}^3)$ , poiché  $\psi(\vec{r})$  deve necessariamente annullarsi per  $x \rightarrow \pm\infty$ . Poiché la trasformata di Fourier conserva il prodotto scalare, abbiamo che

$$\langle p_x \rangle = \int \varphi^*(\vec{p}) p_x \varphi(\vec{p}) d\vec{p} = \int \psi^*(\vec{r}) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(\vec{r}) d\vec{r},$$

dove l'ultima espressione può essere scritta come il prodotto scalare  $(\psi, \hat{p}_x \psi)$ , in cui  $\hat{p}_x$  è l'*operatore differenziale* che manda la funzione  $\psi(\vec{r})$  in  $-i\hbar \partial \psi(\vec{r}) / \partial x$ .

In modo del tutto analogo si può mostrare che

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) x \psi(\vec{r}) d\vec{r} = \int \varphi^*(\vec{p}) \left( +i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} \right) \varphi(\vec{p}) d\vec{p},$$

dove l'ultima espressione può essere scritta come il prodotto scalare  $(\varphi, \hat{x} \varphi)$ , in cui  $\hat{x}$  è l'*operatore differenziale* che manda la funzione  $\varphi(\vec{p})$  in  $+i\hbar \partial \varphi(\vec{p}) / \partial p_x$ .



Questi risultati possono essere generalizzati a qualunque  $G(\vec{p})$  che sia un polinomio o una serie uniformemente convergente di  $p_x, p_y, p_z$ ,

$$\langle G(\vec{p}) \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) G\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}}\right) \psi(\vec{r}) d\vec{r},$$

e a qualunque  $F(\vec{r})$  che sia un polinomio o una serie uniformemente convergente di  $x, y, z$ ,

$$\langle F(\vec{r}) \rangle = \int \varphi^*(\vec{p}) F\left(+i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}\right) \varphi(\vec{p}) d\vec{p},$$

dove  $G(-i\hbar \partial/\partial \vec{r})$  vuol dire  $G(\vec{p})$  con  $\vec{p}$  rimpiazzato da  $-i\hbar \partial/\partial \vec{r}$  e  $F(+i\hbar \partial/\partial \vec{p})$  vuol dire  $F(\vec{r})$  con  $\vec{r}$  rimpiazzato da  $+i\hbar \partial/\partial \vec{p}$ .

In definitiva, il valor medio di una  $F(\vec{r})$  è associato all'azione di un operatore  $\hat{F}$  che agisce come *operatore moltiplicativo* sulle funzioni d'onda nello spazio delle coordinate,

$$(\psi, \hat{F}\psi) = \int \psi^*(\vec{r}) F(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r},$$

e come *operatore differenziale* sulle funzioni d'onda nello spazio degli impulsi,

$$(\varphi, \hat{F}\varphi) = \int \varphi^*(\vec{p}) F\left(+i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}\right) \varphi(\vec{p}) d\vec{p}.$$

Viceversa, il valor medio di una  $G(\vec{p})$  è associato all'azione di un operatore  $\hat{G}$  che agisce come *operatore moltiplicativo* sulle funzioni d'onda nello spazio degli impulsi,

$$(\varphi, \hat{G}\varphi) = \int \varphi^*(\vec{p}) G(\vec{p}) \varphi(\vec{p}) d\vec{p},$$

e come *operatore differenziale* sulle funzioni d'onda nello spazio delle coordinate,

$$(\psi, \hat{G}\psi) = \int \psi^*(\vec{r}) G\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}}\right) \psi(\vec{r}) d\vec{r}.$$

I valori medi  $\langle x \rangle$  e  $\langle p_x \rangle$  sono, per definizione, *reali*. Poiché

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) x \psi(\vec{r}) d\vec{r},$$

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(\vec{r}) d\vec{r},$$

gli operatori  $x$  e  $(-i\hbar \partial/\partial x)$  sono **hermitiani**. Infatti, sono tali gli operatori lineari<sup>6</sup> per cui vale

$$\int \psi^*(\vec{r}) (\mathcal{O}\psi(\vec{r})) d\vec{r} = \int (\mathcal{O}\psi(\vec{r}))^* \psi(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (3.16)$$

per ogni funzione  $\psi \in L^2(\mathbf{R}^3)$ . Analogamente, sono hermitiani  $\vec{r}$  e  $-i\hbar \vec{\nabla}$ , così come lo sono  $F(\vec{r})$  e  $G(-i\hbar \vec{\nabla})$  se le funzioni  $F$  e  $G$  sono reali. È immediato verificare che la condizione di hermiticità dell'operatore moltiplicativo  $x$  nello spazio delle  $\psi(\vec{r})$  implica quella dell'operatore  $i\hbar \partial/\partial p_x$  nello spazio delle  $\varphi(\vec{p})$ , così come quella dell'operatore differenziale  $-i\hbar \partial/\partial x$  nello spazio delle  $\psi(\vec{r})$  implica quella dell'operatore moltiplicativo  $p_x$  nello spazio delle  $\varphi(\vec{p})$ . In definitiva, si può dire che  $\hat{x}$  e  $\hat{p}_x$  sono operatori hermitiani, indipendentemente dalla rappresentazione adottata (si veda la Tabella 3.1).

<sup>6</sup>Si veda la Sezione 3.12.

|                                               | Rappresentazione<br>delle coordinate              | Rappresentazione<br>degli impulsi                       |
|-----------------------------------------------|---------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| Funzione d'onda                               | $\psi(\vec{r})$                                   | $\varphi(\vec{p})$                                      |
| Prodotto scalare                              | $\int \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) d\vec{r}$ | $\int \varphi_1^*(\vec{p}) \varphi_2(\vec{p}) d\vec{p}$ |
| $\hat{x}$                                     | $x$                                               | $+i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}$                 |
| autofunzioni di $\hat{x}$ : $\psi_{x_0}$      | $\delta(x - x_0)$                                 | $(e^{-ip_x x_0/\hbar})/\sqrt{2\pi\hbar}$                |
| $(\psi_{x_0}, \psi_{x_1})$                    | $\delta(x_0 - x_1)$                               | $\delta(x_0 - x_1)$                                     |
| $\hat{p}_x$                                   | $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$             | $p_x$                                                   |
| autofunzioni di $\hat{p}_x$ : $\varphi_{p_0}$ | $(e^{ip_0 x/\hbar})/\sqrt{2\pi\hbar}$             | $\delta(p - p_0)$                                       |
| $(\varphi_{p_0}, \varphi_{p_1})$              | $\delta(p_0 - p_1)$                               | $\delta(p_0 - p_1)$                                     |

Tabella 3.1: Tabella di confronto tra le rappresentazioni delle coordinate e degli impulsi.

### 3.11 Sistemi di più particelle

Per illustrare l'estensione degli argomenti delle precedenti Sezioni al caso di sistemi di più particelle, consideriamo il caso di un sistema di *due* particelle.

Siano

$$\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1), \quad \vec{p}_1 = (p_{x_1}, p_{y_1}, p_{z_1}),$$

le variabili posizione ed impulso della particella 1 e

$$\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2), \quad \vec{p}_2 = (p_{x_2}, p_{y_2}, p_{z_2}),$$

quelle della particella 2. Indichiamo con  $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$  la probabilità di trovare la particella 1 in  $(\vec{r}_1, \vec{r}_1 + d\vec{r}_1)$  e la particella 2 in  $(\vec{r}_2, \vec{r}_2 + d\vec{r}_2)$  e con  $\Pi(\vec{p}_1, \vec{p}_2) d\vec{p}_1 d\vec{p}_2$  la probabilità di trovare l'impulso della particella 1 in  $(\vec{p}_1, \vec{p}_1 + d\vec{p}_1)$  e l'impulso della particella 2 in  $(\vec{p}_2, \vec{p}_2 + d\vec{p}_2)$ . L'espressione

$$P_1(\vec{r}_1) = \int P(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2$$

rappresenta la (densità di) probabilità di trovare la particella 1 in  $\vec{r}_1$ , *dovunque* si trovi la particella 2. Analogamente si costruiscono le espressioni per  $P_2(\vec{r}_2)$ ,  $\Pi_1(\vec{p}_1)$ ,  $\Pi_2(\vec{p}_2)$ . Tutte le distribuzioni introdotte sono **normalizzate**:

$$\int \int P(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = 1, \quad \dots, \quad \int \Pi(\vec{p}_2) d\vec{p}_2 = 1.$$

Lo stato dinamico del sistema è determinato dalla funzione d'onda  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  o dalla sua trasformata di Fourier  $\varphi(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$ :

$$\varphi(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = \int \int \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{e^{-i\vec{p}_1 \cdot \vec{r}_1/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{e^{-i\vec{p}_2 \cdot \vec{r}_2/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2,$$

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \int \int \varphi(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \frac{e^{i\vec{p}_1 \cdot \vec{r}_1 / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{e^{i\vec{p}_2 \cdot \vec{r}_2 / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 .$$

In analogia con il caso di una singola particella, definiamo  $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$  e  $\Pi(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = |\varphi(\vec{p}_1, \vec{p}_2)|^2$ . Le **condizioni di normalizzazione** si scrivono

$$\int \int |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \int \int |\varphi(\vec{p}_1, \vec{p}_2)|^2 d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 = 1 ,$$

dove la prima uguaglianza è assicurata dall'identità di Parseval.

I valori medi si definiscono in modo analogo al caso di singola particella. Avremo, per esempio,

$$\begin{aligned} \langle x_1 \rangle &= \int \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) x_1 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \int \int \varphi^*(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial p_{x_1}} \right) \varphi(\vec{p}_1, \vec{p}_2) d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 , \\ \langle p_{x_1} \rangle &= \int \int \varphi^*(\vec{p}_1, \vec{p}_2) p_{x_1} \varphi(\vec{p}_1, \vec{p}_2) d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 = \int \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 . \end{aligned}$$

Se vale  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_1)\psi(\vec{r}_2)$ , allora  $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = P_1(\vec{r}_1)P_2(\vec{r}_2)$  e  $\Pi(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = \Pi_1(\vec{p}_1)\Pi_2(\vec{p}_2)$ , cioè non esiste correlazione tra la statistica delle misure effettuate su ciascuna delle due particelle. Infatti,  $P_1(\vec{r}_1) = |\psi_1(\vec{r}_1)|^2$  e  $\Pi_1(\vec{p}_1) = |\varphi_1(\vec{p}_1)|^2$ , dove  $\varphi_1(\vec{p}_1)$  è la funzione d'onda nello spazio degli impulsi associata a  $\psi_1(\vec{r}_1)$ .

## 3.12 Concetto di operatore. Regole di commutazione

Un **operatore**  $\mathcal{O}$  è un'applicazione da uno spazio di funzioni  $\mathcal{S}$  nello stesso spazio  $\mathcal{S}$ , che associa ad ogni funzione  $\psi \in \mathcal{S}$  una nuova funzione  $\Psi = \mathcal{O}\psi \in \mathcal{S}$ . D'ora in poi, per fissare le idee, lo spazio  $\mathcal{S}$  sarà identificato con lo spazio delle funzioni d'onda nella rappresentazione delle coordinate di un sistema di singola particella, cioè con  $L^2(\mathbf{R}^3)$ . Tutte le considerazioni che seguono, potranno essere estese allo spazio delle funzioni d'onda nella rappresentazione degli impulsi di un sistema di singola particella o allo spazio delle funzioni d'onda di sistemi di più particelle.

Un operatore  $\mathcal{O}$  si dice **lineare** se vale

$$\mathcal{O}(\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 \mathcal{O}\psi_1 + \lambda_2 \mathcal{O}\psi_2$$

per ogni coppia  $(\lambda_1, \lambda_2)$  di numeri complessi.

Esempi di operatori lineari sono gli *operatori differenziali*  $\partial/\partial x$ ,  $\partial/\partial y$ ,  $\partial/\partial z$ ,  $\partial/\partial t$ , e ogni *operatore moltiplicativo*  $f(\vec{r}, t)$  definito dall'associare a  $\psi(\vec{r}, t)$  la funzione  $\Psi(\vec{r}, t) = f(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)$ .

**Definizione 1 (moltiplicazione di un operatore per una costante):** se  $\mathcal{O}$  è un operatore e  $c$  una costante, l'operatore  $(c\mathcal{O})$  è definito da

$$(c\mathcal{O})\psi = c(\mathcal{O}\psi) ,$$

**Definizione 2 (somma di due operatori):** se  $\mathcal{O}_1$  e  $\mathcal{O}_2$  sono due operatori, l'operatore  $\mathcal{A} = \mathcal{O}_1 + \mathcal{O}_2$  è definito da

$$\mathcal{A}\psi = \mathcal{O}_1\psi + \mathcal{O}_2\psi ,$$

**Definizione 3 (prodotto di due operatori):** se  $\mathcal{O}_1$  e  $\mathcal{O}_2$  sono due operatori, l'operatore  $\mathcal{P} = \mathcal{O}_1\mathcal{O}_2$  è definito da

$$\mathcal{P}\psi = \mathcal{O}_1\mathcal{O}_2\psi = \mathcal{O}_1(\mathcal{O}_2\psi) .$$

È importante osservare che il prodotto di due operatori **non** è **commutativo**: il risultato dell'azione su una stessa funzione del prodotto  $\mathcal{O}_1\mathcal{O}_2$  è in generale diverso da quello del prodotto  $\mathcal{O}_2\mathcal{O}_1$ . Si definisce **commutatore** di due operatori  $\mathcal{O}_1$  ed  $\mathcal{O}_2$  l'operatore

$$[\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2] \equiv \mathcal{O}_1\mathcal{O}_2 - \mathcal{O}_2\mathcal{O}_1 . \quad (3.17)$$

Ad esempio, gli operatori  $x$  e  $-i\hbar\partial/\partial x$  non commutano, infatti

$$\left[ x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right] \psi = \left( x \left( -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right) \right) \psi - \left( \left( -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right) x \right) \psi = i\hbar\psi , \quad \forall \psi ,$$

da cui segue che  $[x, -i\hbar\partial/\partial x] = i\hbar$ . Analogamente si dimostra che  $[y, -i\hbar\partial/\partial y] = [z, -i\hbar\partial/\partial z] = i\hbar$ . Si ottiene invece che

$$[x, y] = [x, z] = [y, z] = 0 ,$$

così come

$$\left[ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \right] = \left[ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \right] = \left[ -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \right] = 0 .$$

Se come spazio di funzioni  $\mathcal{S}$  si prende lo spazio delle funzioni d'onda nella rappresentazione degli impulsi  $\varphi(\vec{p})$ , è facile ottenere i seguenti risultati:

$$\begin{aligned} [p_x, p_y] &= [p_x, p_z] = [p_y, p_z] = 0 , \\ \left[ i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}, i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y} \right] &= \left[ i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}, i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z} \right] = \left[ i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}, i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z} \right] = 0 , \\ \left[ i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}, p_x \right] &= \left[ i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}, p_y \right] = \left[ i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}, p_z \right] = i\hbar . \end{aligned}$$

Ricordando che  $-i\hbar\partial/\partial x, \dots$  corrispondono agli operatori  $\hat{p}_x, \dots$  nella rappresentazione delle coordinate, mentre  $i\hbar\partial/\partial p_x, \dots$  corrispondono agli operatori  $\hat{x}, \dots$  nella rappresentazione degli impulsi (si veda la Tabella 3.1), i commutatori di sopra si possono scrivere nel seguente modo:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{y}] &= [\hat{x}, \hat{z}] = [\hat{y}, \hat{z}] = 0 , \\ [\hat{p}_x, \hat{p}_y] &= [\hat{p}_x, \hat{p}_z] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0 , \\ [\hat{x}, \hat{p}_x] &= [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar , \end{aligned} \quad (3.18)$$

e valgono indipendentemente dalla rappresentazione adottata. Le relazioni (3.18) si chiamano **relazioni fondamentali di commutazione**. Si osservi che esse hanno la stessa struttura delle parentesi di Poisson canoniche della meccanica analitica, a meno di un fattore  $i\hbar$ .

Nel seguito del corso e nei corsi successivi di meccanica quantistica si farà un uso notevole di commutatori tra operatori. Vale quindi la pena di elencare qui alcune proprietà, la cui dimostrazione segue immediatamente dalla definizione (3.17):

1.  $[A, A] = 0$  ,
2.  $[A, B] = -[B, A]$  ,
3.  $[c, A] = 0$  , se  $c = \text{costante}$ ,
4.  $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$  ,  $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$  .

### 3.13 Operatori hermitiani

La definizione di **operatori hermitiani** è stata già data in (3.16). Da quella definizione si può far seguire che un operatore è hermitiano se soddisfa

$$\int \psi_1^*(\vec{r})(\mathcal{O}\psi_2(\vec{r}))d\vec{r} = \int (\mathcal{O}\psi_1(\vec{r}))^*\psi_2(\vec{r})d\vec{r}, \quad (3.19)$$

per ogni coppia di funzioni  $\psi_1$  e  $\psi_2$  in  $L^2(\mathbf{R}^3)$ .

Gli operatori hermitiani godono di interessanti proprietà, per effetto delle quali essi giocano un ruolo fondamentale in meccanica quantistica. Per illustrare queste proprietà è necessario prima dare la seguente

**Definizione 4:** dato un operatore  $\mathcal{O}$  che agisce in uno spazio di funzioni  $\mathcal{S}$ , si dice che  $\psi$  è **autofunzione** di  $\mathcal{O}$  con **autovalore**  $\lambda$  se vale

$$\mathcal{O}\psi = \lambda\psi. \quad (3.20)$$

Si chiama **autospazio** relativo all'autovalore  $\lambda$  il sottospazio di  $\mathcal{S}$  generato dalle autofunzioni indipendenti dell'autovalore  $\lambda$ . Se la dimensione di questo sottospazio è pari a  $g > 1$ , cioè se esistono  $g > 1$  autofunzioni *linearmente indipendenti*  $\psi_1, \dots, \psi_g$  di  $\mathcal{O}$  con il medesimo autovalore  $\lambda$ , si dice che l'autovalore  $\lambda$  è **degenere** con grado di degenerazione pari a  $g$ . Se la dimensione dell'autospazio è pari ad uno, l'autovalore corrispondente si dice **non-degenere**.

D'ora in poi, restringiamo la nostra attenzione allo spazio delle funzioni d'onda nella rappresentazione delle coordinate  $\psi(\vec{r})$  in cui sia definito il prodotto scalare (3.6). Se  $\mathcal{O}$  è un operatore qualunque,  $\lambda$  è in generale un numero complesso. Tuttavia, nel caso in cui  $\mathcal{O}$  sia un operatore hermitiano valgono i seguenti teoremi:

**Teorema 1:** ogni autovalore  $\lambda$  è un numero **reale**.

Per verificarlo, basta partire dalla definizione (3.16) ed applicarla ad una autofunzione  $f$  di  $\mathcal{O}$  con autovalore  $\lambda$ .

**Teorema 2:** se  $\psi_1$  ed  $\psi_2$  sono due autofunzioni indipendenti di  $\mathcal{O}$ , allora sono tra loro **ortogonali** rispetto al prodotto scalare (3.6).

La dimostrazione del Teorema 2 è banale nel caso in cui  $\psi_1$  ed  $\psi_2$  siano autofunzioni con autovalori distinti  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$ . Infatti, partendo dalla definizione (3.19) ed usando il Teorema 1, abbiamo che

$$\lambda_2 \int \psi_1^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})d\vec{r} = \lambda_1 \int \psi_1^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})d\vec{r}, \quad \lambda_1 \neq \lambda_2,$$

da cui segue

$$\int \psi_1^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})d\vec{r} = 0.$$

Nel caso delle  $g$  autofunzioni relative ad un eventuale autovalore degenere, è sempre possibile costruire  $g$  combinazioni lineari indipendenti di esse per ottenere  $g$  nuove autofunzioni che siano ortogonali tra di loro. Il procedimento è quello della *ortogonalizzazione di Gram-Schmidt* dell'algebra lineare per gli spazi metrici di dimensione finita.

### 3.14. CONIUGAZIONE HERMITIANA

---

Se le autofunzioni di un operatore hermitiano  $\mathcal{O}$  sono individuate da un indice discreto  $n$  (il caso di spettro continuo di autovalori sarà trattato a parte nella Sezione 3.16) e se si impone che esse siano normalizzate ad uno, per effetto del Teorema 2 possiamo scrivere in forma compatta

$$(\psi_n, \psi_m) = \int \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) d\vec{r} = \delta_{nm} , \quad (3.21)$$

dove  $\delta_{nm}$ , uguale a uno se  $n = m$ , uguale a zero in tutti gli altri casi, è la **delta di Kronecker**.

I Teoremi 1 e 2 possono essere facilmente riformulati nel caso in cui lo spazio  $\mathcal{S}$  sia quello delle funzioni d'onda nella rappresentazione degli impulsi.

Abbiamo visto alla fine della Sezione 3.10 che la condizione che i valori medi di posizione ed impulso siano quantità reali implica che i corrispondenti operatori siano hermitiani. È naturale estendere questa richiesta a tutte le osservabili fisiche.

## 3.14 Coniugazione hermitiana

Una operazione molto utile in meccanica quantistica è quella di **coniugazione hermitiana**. In questo corso ne vedremo alcune applicazioni nel Capitolo sul momento angolare.

Dato un operatore  $\mathcal{O}$ , si dice **hermitiano coniugato** di  $\mathcal{O}$  quell'operatore, indicato con  $\mathcal{O}^\dagger$ , tale che

$$(\psi_1, \mathcal{O}\psi_2) = (\mathcal{O}^\dagger\psi_1, \psi_2) , \quad (3.22)$$

cioè

$$\int \psi_1^*(\vec{r}) (\mathcal{O}\psi_2(\vec{r})) d\vec{r} = \int (\mathcal{O}^\dagger\psi_1(\vec{r}))^* \psi_2(\vec{r}) d\vec{r} , \quad \forall \psi_1, \psi_2 \in L^2(\mathbf{R}^3) \quad (3.23)$$

Un operatore hermitiano  $\mathcal{O}$  è un operatore che coincide con il suo hermitiano coniugato, cioè tale che  $\mathcal{O} = \mathcal{O}^\dagger$ .

Elenchiamo qui alcune proprietà della coniugazione hermitiana; la loro dimostrazione segue immediatamente dalla definizione (3.23):

1.  $(c\mathcal{O})^\dagger = c^* \mathcal{O}^\dagger$  ,
2.  $(\mathcal{O}_1 + \mathcal{O}_2)^\dagger = \mathcal{O}_1^\dagger + \mathcal{O}_2^\dagger$  ,
3.  $(\mathcal{O}_1\mathcal{O}_2)^\dagger = \mathcal{O}_2^\dagger \mathcal{O}_1^\dagger$  .

Si osservi che, se  $\mathcal{O}_1$  e  $\mathcal{O}_2$  sono operatori hermitiani, il loro prodotto  $\mathcal{O}_1\mathcal{O}_2$  in generale **non** è hermitiano, infatti

$$(\mathcal{O}_1\mathcal{O}_2)^\dagger = \mathcal{O}_2^\dagger \mathcal{O}_1^\dagger = \mathcal{O}_2\mathcal{O}_1 \neq \mathcal{O}_1\mathcal{O}_2 ,$$

a meno che  $[\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2] = 0$ .

### 3.15 Osservabili fisiche ed operatori hermitiani

Consideriamo l'espressione (3.8) e, per evitare complicazioni inessenziali, adattiamola al caso di un sistema unidimensionale:

$$\psi(x) = \int \varphi(p_x) \frac{e^{ip_x x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp_x. \quad (3.24)$$

Essa ci dice che la funzione d'onda  $\psi(x)$  può essere interpretata come la sovrapposizione lineare di funzioni della forma

$$\psi_{p_x} \equiv \frac{e^{ip_x x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad (3.25)$$

ciascuna presa con coefficiente  $\varphi(p_x)$ . Abbiamo già osservato che la misura dell'impulso sullo stato  $\psi$  può dare valore  $p_x$  con (densità di) probabilità data da  $|\varphi(p_x)|^2$ , se la funzione d'onda è normalizzata ad uno.

Osserviamo ora che le funzioni  $\psi_{p_x}$  sono tutte e sole le autofunzioni dell'operatore  $-i\hbar\partial/\partial x$ , cioè dell'operatore impulso  $\hat{p}_x$  nella rappresentazione delle coordinate, infatti

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_{p_x} = p_x \psi_{p_x},$$

da cui si vede che ciascuna  $\psi_{p_x}$  ha autovalore  $p_x$ . Possiamo quindi interpretare la (3.24) nel seguente modo: dato l'operatore hermitiano  $\hat{p}_x$  nella rappresentazione delle coordinate, detto  $\{\psi_{p_x}\}$  l'insieme di tutte le sue autofunzioni e  $\{p_x\}$  l'insieme dei corrispondenti autovalori, ogni funzione d'onda  $\psi(x)$  si può scrivere come combinazione lineare delle  $\{\psi_{p_x}\}$  con coefficienti  $\varphi(p_x)$ ; il risultato della misura di  $p_x$  sullo stato  $\psi$  può essere uno degli autovalori dell'operatore  $\hat{p}_x$ , con probabilità data dal modulo quadro del corrispondente coefficiente  $\varphi(p_x)$ , se la funzione d'onda è stata opportunamente normalizzata.

È naturale generalizzare la precedente interpretazione ad ogni osservabile fisica e formulare il seguente

**Postulato 3:** ad ogni **osservabile fisica** corrisponde un **operatore hermitiano**  $\mathcal{O}$ ; detto  $\{\psi_n\}$  l'insieme delle autofunzioni di questo operatore e  $\{\lambda_n\}$  l'insieme dei rispettivi autovalori, dove  $n$  è un indice che può essere sia discreto che continuo, ogni funzione d'onda  $\psi$  del sistema si può scrivere come combinazione lineare delle autofunzioni  $\{\psi_n\}$  con coefficienti  $c_n$ ; il risultato della misura dell'osservabile sullo stato  $\psi$  può dare come risultato solo uno degli autovalori  $\{\lambda_n\}$  con probabilità (densità di probabilità nel caso di indice continuo) data da  $|c_n|^2$ , se la funzione d'onda è normalizzata ad uno.

Si dice che le  $\{\psi_n\}$  sono una **base completa** dello spazio di Hilbert degli stati del sistema; questa base è **ortogonale**, in virtù del Teorema 2 della Sezione 3.13, **ortonormale** se le  $\psi_n$  sono normalizzate ad uno.

Un esempio di realizzazione di quanto enunciato in questo postulato nel caso di indice  $n$  **continuo** è quello dato da cui siamo partiti in questa Sezione e cioè quello dell'osservabile  $p_x$ .

Come esempio del caso di indice  $n$  **discreto** possiamo considerare l'osservabile energia totale  $E$  del sistema costituito da una particella soggetta a potenziale armonico unidimensionale, che tratteremo in dettaglio nel Capitolo 5. In casi come questo, l'operatore corrispondente all'osservabile

energia ammette un insieme discreto di autofunzioni  $\{\psi_n\}$  con autovalori  $\{\lambda_n\}$ . Il postulato sostiene che ogni funzione d'onda (normalizzata)  $\psi$  di questo sistema si può scrivere nella forma

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n \quad (3.26)$$

e che la misura dell'osservabile energia su questo stato può dare come risultato solo uno dei  $\lambda_n$ , con probabilità  $|c_n|^2$ .

A questo punto è doveroso domandarsi come si possano determinare i coefficienti  $c_n$  della combinazione lineare, note le autofunzioni  $\{\psi_n\}$  di un certo operatore hermitiano associato ad una osservabile fisica e nota la funzione d'onda  $\psi$ .

Partiamo dal caso in cui l'indice  $n$  sia discreto: avremo allora per  $\psi$  una espansione come quella data in (3.26). Prendendo il prodotto scalare del I e del II membro per una data autofunzione  $\psi_m$ , otteniamo

$$(\psi_m, \psi) = \sum_n c_n (\psi_m, \psi_n) = c_m$$

poiché  $(\psi_m, \psi_n) = \delta_{nm}$ . Abbiamo allora la relazione che consente di ottenere un certo  $c_n$  note  $\psi$  ed  $\psi_n$ :

$$c_n = (\psi_n, \psi) . \quad (3.27)$$

La forma esplicita del prodotto scalare nella (3.27) dipende dalla rappresentazione adottata.

Nel caso di indice  $n$  continuo il procedimento è analogo e sarà discusso nella Sezione 3.16. Tuttavia, possiamo tentativamente applicare la stessa formula (3.27) derivata per il caso discreto all'esempio (3.24) da cui siamo partiti all'inizio di questa Sezione e vedere a cosa ci conduce. Qui il ruolo di  $c_n$  è svolto da  $\varphi(p_x)$ , mentre quello di  $\psi_n$  è svolto da  $e^{ip_x x/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$ . Se applichiamo ciecamente la (3.27), otteniamo

$$\varphi(p_x) = \int \frac{e^{-ip_x x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x) dx ,$$

che è la corretta relazione (si veda (3.7)) che consente di esprimere la funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi a partire da quella delle coordinate. In definitiva, la formula (3.27) vale sia per il caso discreto che per il caso continuo.

Per l'approfondimento dello studio di osservabili con spettro di autovalori continuo, si rimanda alla Sezione 3.16 nella quale vengono sfruttate a pieno le proprietà della **delta di Dirac**, introdotta nell'Appendice generale E.

## 3.16 Operatori con spettro continuo

La misura delle osservabili posizione ed impulso di una particella in moto unidimensionale può fornire un risultato variabile con continuità su tutto l'asse reale. In virtù del Postulato 3, lo spettro degli autovalori degli operatori posizione ed impulso deve essere continuo. In questa Sezione ci proponiamo di trovare innanzitutto le autofunzioni degli operatori posizione ed impulso e di studiarne alcune proprietà.



Iniziamo la discussione con l'operatore posizione  $\hat{x}$  nella *rappresentazione delle coordinate*, dove esso è semplicemente l'operatore moltiplicativo  $x$ . Le autofunzioni di  $\hat{x}$  devono soddisfare per definizione la condizione

$$x\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x) . \quad (3.28)$$

Questa condizione dice che quando una  $\psi_{x_0}(x)$  è moltiplicata per  $x$  deve dare come risultato la stessa  $\psi_{x_0}(x)$  moltiplicata per una costante. È evidente che  $\psi_{x_0}(x)$  non può essere una funzione estesa e che l'unico modo di soddisfare la condizione richiesta è che essa sia nulla dappertutto eccetto che nel punto  $x_0$ . Tale proprietà è goduta dalla **delta di Dirac**, discussa nell'Appendice generale E. In particolare, la proprietà (E.7) della delta di Dirac coincide con la condizione (3.28). Abbiamo quindi che le  $\delta(x - x_0)$ , al variare di  $x_0$  su tutto l'asse reale, rappresentano tutte e sole le autofunzioni dell'operatore  $\hat{x}$  nella rappresentazione delle coordinate e che ciascun autovalore  $x_0$  è non-degenere. La proprietà (E.8)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0)\delta(x - x_1)dx = \delta(x_0 - x_1) \quad (3.29)$$

esprime la condizione di ortogonalità tra autofunzioni relative ad autovalori diversi, dal momento che il I membro non è altro che il prodotto scalare  $(\psi_{x_0}, \psi_{x_1})$  calcolato nella rappresentazione delle coordinate. La relazione (3.29) rappresenta l'analogo della (3.21), con la delta di Kronecker rimpiazzata dalla delta di Dirac. La relazione

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_0)\delta(x - x_0) dx_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_0)\psi_{x_0}(x) dx_0 , \quad (3.30)$$

che segue dalla (E.3), ci dice che ogni funzione d'onda  $\psi$  si può scrivere come combinazione lineare delle autofunzioni  $\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$  dell'operatore  $\hat{x}$ , con coefficienti  $\psi(x_0)$ . Il modulo quadro di ciascun coefficiente, cioè  $|\psi(x_0)|^2$ , fornisce correttamente la (densità di) probabilità di ottenere  $x_0$  come risultato della misura della posizione sullo stato  $\psi$ , in accordo con il Postulato 3. Per trovare ciascuno dei "coefficienti"  $\psi(x_0)$  il metodo è lo stesso illustrato nel caso discreto: si prende il prodotto scalare del I e II membro della (3.30) con  $\psi_{x_1}(x) = \delta(x - x_1)$ :

$$\begin{aligned} (\psi_{x_1}, \psi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_0)(\psi_{x_1}, \psi_{x_0}) dx_0 \\ \longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\delta(x - x_1) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0\psi(x_0) \int_{-\infty}^{+\infty} dx\delta(x - x_0)\delta(x - x_1) \\ \longrightarrow \psi(x_1) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_0)\delta(x_1 - x_0) dx_0 , \end{aligned}$$

che è l'analogo della (3.27).

Nel caso dell'operatore  $\hat{p}_x$  nella *rappresentazione degli impulsi*, dove esso è semplicemente l'operatore moltiplicativo  $p_x$ , il procedimento è identico a quello relativo all'operatore  $\hat{x}$  nella rappresentazione delle coordinate. Le autofunzioni di  $\hat{p}_x$  devono soddisfare per definizione la condizione

$$p_x\varphi_{p_0}(p) = p_0\varphi_{p_0}(p) , \quad (3.31)$$

da cui segue che  $\varphi_{p_0} = \delta(p - p_0)$ . La proprietà di ortogonalità si scrive

$$(\varphi_{p_0}, \varphi_{p_1}) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(p - p_0)\delta(p - p_1)dp = \delta(p_0 - p_1) \quad (3.32)$$

### 3.16. OPERATORI CON SPETTRO CONTINUO

---

e l'espansione di una generica funzione d'onda  $\varphi(p)$  diventa

$$\varphi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p_0) \delta(p - p_0) dp_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p_0) \varphi_{p_0}(p) dp_0 . \quad (3.33)$$

Tutte le considerazioni fatte nel caso di  $\hat{x}$  si possono ripetere qui in modo del tutto analogo.

Consideriamo ora invece l'operatore  $\hat{p}_x$  nella *rappresentazione delle coordinate*, dove esso prende la forma dell'operatore differenziale  $-i\hbar\partial/\partial x$ . Abbiamo già visto che in questa rappresentazione le autofunzioni di  $\hat{p}_x$  sono date dalle funzioni

$$\psi_{p_0}(x) = \frac{e^{ip_0x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

e che una generica  $\psi(x)$  si può scrivere come sovrapposizione lineare di queste autofunzioni

$$\psi(x) = \int \varphi(p) \psi_p(x) dp = \int \varphi(p) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp$$

con coefficienti dati da  $\varphi(p)$  (si veda la discussione all'inizio della Sezione 3.15). La condizione di ortogonalità tra le autofunzioni  $\psi_{p_0}(x)$  in questa rappresentazione si scrive

$$\begin{aligned} (\psi_{p_0}, \psi_{p_1}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ip_0x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{ip_1x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(p_0-p_1)x/\hbar} dx \\ &= \frac{1}{\hbar} \delta\left(\frac{1}{\hbar}(p_0 - p_1)\right) = \delta(p_0 - p_1) , \end{aligned} \quad (3.34)$$

dove si è fatto uso delle (E.5) e (E.10). Come si vede confrontando la (3.32) e la (3.34), la condizione di ortogonalità prende la stessa forma nella rappresentazione degli impulsi e in quella delle coordinate, come deve essere. Questo è il motivo per cui le autofunzioni  $\psi_{p_0}(x)$  erano state normalizzate con il fattore  $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ .

Infine, il caso dell'operatore  $\hat{x}$  nella *rappresentazione degli impulsi* procede in modo del tutto analogo a quello dell'operatore  $\hat{p}_x$  nella rappresentazione delle coordinate ed è omissso per brevità. Ci limitiamo a dare l'espressione delle autofunzioni  $\varphi_{x_0}(p)$ :

$$\varphi_{x_0}(p) = \frac{e^{-ipx_0/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} .$$

Per un sommario schematico dei risultati presentati in questa Sezione, si rimanda alla Tabella 3.1.

Tutte le considerazioni fatte in questa Sezione possono essere estese facilmente al caso di funzioni d'onda di singola particella in tre dimensioni e a quello di più particelle.

Nel caso di altre osservabili con spettro continuo, come ad esempio l'energia  $E$  per l'insieme degli stati non legati di una particella soggetta ad un potenziale, il formalismo da adottare è lo stesso. Avremo una rappresentazione dell'energia per la quale le cose procedono esattamente come per  $\hat{x}$  nella rappresentazione delle coordinate o per  $\hat{p}_x$  nella rappresentazione degli impulsi. Se invece si lavora nella rappresentazione delle coordinate, occorre conoscere la forma delle autofunzioni dell'operatore associato ad  $E$  in quella rappresentazione ed usare lo stesso formalismo descritto nel caso di  $\hat{p}_x$  nella rappresentazione delle coordinate;

analogamente, se si lavora nella rappresentazione degli impulsi, occorre conoscere la forma delle autofunzioni dell'operatore associato ad  $E$  in quella rappresentazione ed usare lo stesso formalismo del caso di  $\hat{x}$  nella rappresentazione degli impulsi.

In definitiva abbiamo tante rappresentazioni quante sono le osservabili fisiche e la descrizione di un sistema quantistico è equivalente in tutte le rappresentazioni. Per passare dalla rappresentazione dell'osservabile  $A$  a quella dell'osservabile  $B$  è sufficiente conoscere la forma che le autofunzioni dell'operatore  $\hat{A}$  prendono nella rappresentazione dell'osservabile  $B$ . Quest'ultima affermazione è vera anche nel passaggio da rappresentazioni con "spettro discreto" a rappresentazioni con "spettro continuo".<sup>7</sup>

### 3.17 Postulato della misura

Nella prima parte del corso abbiamo dato vari esempi di come l'operazione di misura perturbi un sistema quantistico. In questa Sezione introdurremo l'ultimo postulato della meccanica quantistica, quello che stabilisce come la funzione d'onda di un sistema viene modificata da un processo di misura. Prima di enunciare questo postulato, tuttavia, può essere utile illustrarlo con un esempio concreto.

Un modo di misurare la posizione lungo l'asse  $x$  di una particella in moto rettilineo libero lungo l'asse  $y$  è quello di porre uno schermo piano lungo l'asse  $x$ , in grado di "assorbire" la particella, che contenga però una fenditura in corrispondenza dell'intervallo  $[\bar{x} - \Delta x/2, \bar{x} + \Delta x/2]$  (l'apparato descritto è quello schematizzato in Figura 3.2). Se al di là dello schermo un rivelatore riceve un segnale, vuol dire che la particella sottoposta al processo di misura è passata attraverso la fenditura e quindi ha posizione lungo  $x$  pari a  $\bar{x}$  con indeterminazione  $\Delta x$ . Senza perdere in generalità, possiamo supporre che la funzione d'onda  $\psi$  della particella sia molto stretta lungo la direzione  $y$ , cosicché la posizione lungo  $y$  della particella sia definita istante per istante. Trascuriamo inoltre per semplicità la dipendenza da  $z$ , cioè supponiamo di effettuare la misura in un mondo bidimensionale. Allora, un istante prima che la particella giunga sullo schermo, il suo stato è descritto da una funzione  $\psi(x)$ , che abbiamo visto può essere scritta come sovrapposizione delle autofunzioni dell'operatore posizione, cioè come combinazione lineare di delta di Dirac,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_0) \psi_{x_0}(x) dx_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_0) \delta(x - x_0) dx_0 .$$

Ciascuna  $\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$  rappresenta uno stato in cui la particella ha posizione definita lungo  $x$  e pari a  $x_0$ . Se lo stato della particella fosse rappresentato proprio da  $\psi_{x_0}(x)$ , allora la particella verrebbe rivelata dopo lo schermo se  $x_0$  fosse compreso tra  $\bar{x} - \Delta x/2$  e  $\bar{x} + \Delta x/2$ , altrimenti non ci sarebbe alcun segnale. In altri termini, la funzione d'onda verrebbe modificata nel seguente modo dal processo di misura:

prima dello schermo:  $\psi_{x_0}(x)$

oltre lo schermo:  $\begin{cases} \psi_{x_0}(x) & \text{se } \bar{x} - \Delta x/2 \leq x \leq \bar{x} + \Delta x/2 \\ 0 & \text{altrimenti .} \end{cases}$

<sup>7</sup>Per un approfondimento sulla **teoria della rappresentazione** si rimanda a A. Messiah, *op. cit.*.

Poiché la funzione d'onda è rappresentata in generale da una sovrapposizione di funzioni  $\psi_{x_0}(x)$  con tutti i possibili valori di  $x_0$  e l'effetto della misura su ciascuna delle funzioni  $\psi_{x_0}(x)$  è quello descritto nello schema precedente, la funzione d'onda dopo la misura diventa la  $\Psi(x)$  data dalla *proiezione* di  $\psi(x)$  lungo le sole autofunzioni  $\psi_{x_0}(x)$  con  $x_0$  compreso tra  $\bar{x} - \Delta x/2$  e  $\bar{x} + \Delta x/2$ , cioè

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_0) \psi_{x_0}(x) dx_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_0) \delta(x - x_0) dx_0 \\ \rightarrow \Psi(x) &= \int_{\bar{x}-\Delta x/2}^{\bar{x}+\Delta x/2} \psi(x_0) \psi_{x_0}(x) dx_0 = \int_{\bar{x}-\Delta x/2}^{\bar{x}+\Delta x/2} \psi(x_0) \delta(x - x_0) dx_0 .\end{aligned}$$

In maniera del tutto analoga si potrebbe ragionare nel caso di una misura dell'impulso  $p_x$  su uno stato descritto da  $\psi(x)$ . Se il risultato della misura dà un impulso compreso nell'intervallo  $(\bar{p}_x - \Delta p/2, \bar{p}_x + \Delta p/2)$ , abbiamo allora

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) \psi_p(x) dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp \\ \rightarrow \Psi(x) &= \int_{\bar{p}-\Delta p/2}^{\bar{p}+\Delta p/2} \varphi(p) \psi_p(x) dp = \int_{\bar{p}-\Delta p/2}^{\bar{p}+\Delta p/2} \varphi(p) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp .\end{aligned}$$

Il processo di misura agisce in sostanza come un'operazione di **filtro** sulla funzione d'onda che descrive un sistema: vengono lasciate passare invariate le componenti della funzione d'onda lungo le autofunzioni i cui autovalori sono quelli corrispondenti al risultato della misura, vengono "assorbite" le altre. L'effetto sulla funzione d'onda di questa operazione di filtro viene chiamato talvolta **collasso** o **riduzione** della funzione d'onda, perché una funzione d'onda che prima della misura contiene in generale tutte le componenti rispetto alle autofunzioni dell'osservabile oggetto della misura, dopo la misura viene ridotta alla sovrapposizione di un sottoinsieme delle componenti inizialmente presenti.

Nel caso di osservabili con spettro discreto di autovalori, le cose procedono in modo ancora più semplice. In virtù del fatto che il risultato di un processo di misura può essere solo uno degli autovalori dell'osservabile oggetto della misura (Postulato 3) e che ogni autovalore è isolato dagli altri, la funzione d'onda  $\psi$  dopo la misura viene ridotta alla sola componente lungo l'autofunzione (o le autofunzioni, in caso di degenerazione) che ha come autovalore il risultato della misura.

Quanto visto finora giustifica il seguente

**Postulato 4:** se la misura di un'osservabile fisica su uno stato  $\psi$  ha dato come risultato l'autovalore  $\lambda$  dell'operatore hermitiano associato a quella osservabile, lo stato  $\psi$  risulterà modificato dopo la misura nello stato  $\Psi$  dato dalla **proiezione** di  $\psi$  nell'autospazio relativo all'autovalore  $\lambda$ .

Una conseguenza importante di questo postulato e del Postulato 3 è che, se si effettua una seconda misura della stessa osservabile sullo stato  $\Psi$ , si ottiene sempre lo stesso risultato  $\lambda$ .

Nel caso di un'osservabile che abbia spettro discreto di autovalori non-degeneri  $\{\lambda_n\}$  con autofunzioni  $\{\psi_n\}$ , se la misura di quella osservabile su uno stato  $\psi = \sum_n c_n \psi_n$  ha dato come risultato l'autovalore  $\lambda_m$ , lo stato  $\Psi$  dopo la misura risulterà essere  $\Psi = c_m \psi_m$ . Si noti che, se lo stato  $\psi$  era normalizzato, lo stato  $\Psi$  in generale non lo sarà e bisognerà procedere ad una nuova normalizzazione prima di utilizzare  $\Psi$  per predire la probabilità del risultato di nuove misure.

Nel caso di un'osservabile che abbia spettro discreto di autovalori degeneri  $\{\lambda_n\}$ , ciascuno con degenerazione  $g_n$  ed autofunzioni  $\{\psi_n^{(g_n)}\}$ , dove per ogni  $n$  fissato l'indice  $g_n$  in  $\psi_n^{(g_n)}$  conta le

autofunzioni indipendenti nell'autospazio di  $\lambda_n$ , se la misura di quella osservabile su uno stato  $\psi = \sum_n \sum_{g_n} c_n^{(g_n)} \psi_n^{(g_n)}$  ha dato come risultato l'autovalore  $\lambda_m$ , lo stato  $\Psi$  dopo la misura risulterà essere  $\Psi = \sum_{g_m} c_m^{(g_m)} \psi_m^{(g_m)}$ .

Nel caso di un'osservabile che abbia spettro continuo di autovalori, bisogna modificare il Postulato 4 sostituendo "l'autovalore  $\lambda$ " con "l'autovalore  $\lambda$  con incertezza  $\Delta\lambda$ " e "nell'autospazio relativo all'autovalore  $\lambda$ " con "nell'unione degli autospazi relativi agli autovalori compresi nell'intervallo  $[\lambda - \Delta\lambda/2, \lambda + \Delta\lambda/2]$ ".

### 3.18 Osservabili compatibili

Due osservabili si definiscono **compatibili** se i loro corrispondenti operatori hermitiani  $\mathcal{O}_1$  e  $\mathcal{O}_2$  commutano tra di loro, cioè se

$$[\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2] = 0 .$$

Dimostreremo ora un importante teorema.

**Teorema 3:** due osservabili compatibili ammettono una **base comune** di autofunzioni.

Indichiamo con  $\mathcal{O}_1$  e  $\mathcal{O}_2$  gli operatori hermitiani corrispondenti alle due osservabili compatibili e consideriamo, per cominciare, il caso che lo spettro di  $\mathcal{O}_1$  sia **non-degenere**. Ricordiamo che ciò vuol dire che ad ogni autovalore  $\lambda$  di  $\mathcal{O}_1$  corrisponde un autospazio di dimensione pari ad uno. Sia dunque  $\lambda_1$  un autovalore di  $\mathcal{O}_1$  e sia  $\psi$  una sua autofunzione, cioè

$$\mathcal{O}_1\psi = \lambda_1\psi .$$

Abbiamo allora

$$\mathcal{O}_1(\mathcal{O}_2\psi) = (\mathcal{O}_1\mathcal{O}_2)\psi = (\mathcal{O}_2\mathcal{O}_1)\psi = \mathcal{O}_2(\mathcal{O}_1\psi) = \mathcal{O}_2(\lambda_1\psi) = \lambda_1(\mathcal{O}_2\psi) , \quad (3.35)$$

dove si è usato il fatto che  $\mathcal{O}_1$  e  $\mathcal{O}_2$  commutano. Questo risultato ci dice che anche  $\mathcal{O}_2\psi$  è autofunzione di  $\mathcal{O}_1$  con autovalore  $\lambda_1$  e, poiché  $\mathcal{O}_2\psi$  non può essere indipendente da  $\psi$ , essa deve necessariamente differire da  $\psi$  di una costante moltiplicativa, cioè

$$\mathcal{O}_2\psi = \lambda_2\psi .$$

Ma questa equazione significa che  $\psi$  è *anche* autofunzione di  $\mathcal{O}_2$  con autovalore  $\lambda_2$ .

Consideriamo ora il caso che lo spettro di  $\mathcal{O}_1$  sia **degenere** e ripercorriamo la dimostrazione precedente, supponendo che  $\lambda_1$  abbia degenerazione pari a  $g$ . In questo caso il risultato (3.35) dice che  $\mathcal{O}_2\psi$  è una combinazione lineare di  $g$  autofunzioni indipendenti di  $\mathcal{O}_1$  nell'autospazio con autovalore  $\lambda_1$ . Tuttavia, è sempre possibile prendere  $g$  nuove combinazioni lineari indipendenti nello stesso autospazio in modo tale che esse siano autofunzioni di  $\mathcal{O}_2$  (il procedimento è lo stesso della diagonalizzazione di una matrice hermitiana di dimensione finita). Queste nuove  $g$  combinazioni continueranno ovviamente ad essere autofunzioni di  $\mathcal{O}_1$  con autovalore  $\lambda_1$ .

In definitiva, è sempre possibile trovare una base di autofunzioni comune a due osservabili compatibili. È facile vedere che questa base può essere scelta in modo da soddisfare la condizione di ortonormalizzazione.

### 3.19. ENUNCIATO FORMALE DELLA RELAZIONE DI INDETERMINAZIONE DI HEISENBERG

---

Il teorema si può estendere ad un **insieme completo** di osservabili compatibili, cioè ad un insieme di osservabili compatibili a due a due, tale che ogni altra osservabile compatibile con tutte le osservabili dell'insieme è necessariamente una loro funzione.

Consideriamo ora la misura in successione di due **osservabili incompatibili** su uno stato iniziale  $\psi$ . Per semplicità, limitiamoci al caso che lo spettro sia discreto e non-degenere. Se l'operazione di misura dell'osservabile 1 ha dato come risultato un certo valore  $\lambda_1$ , dopo la misura lo stato del sistema si troverà nell'autofunzione  $\psi_{\lambda_1}$  corrispondente a quell'autovalore. Poiché  $\psi_{\lambda_1}$  non è in generale autofunzione dell'operatore  $\mathcal{O}_2$  corrispondente all'osservabile 2, essa si scriverà come una certa combinazione lineare delle autofunzioni di  $\mathcal{O}_2$ , pertanto la misura su  $\psi_{\lambda_1}$  dell'osservabile 2 può dare in generale come risultato uno *qualunque* degli autovalori di  $\mathcal{O}_2$ , con una certa probabilità.

La situazione cambia completamente nel caso di due **osservabili compatibili**. Se l'operazione di misura dell'osservabile 1 ha dato come risultato un certo valore  $\lambda_1$ , dopo la misura lo stato del sistema sarà descritto dall'autofunzione  $\psi_{\lambda_1}$  corrispondente a quell'autovalore. Tuttavia, poiché  $\psi_{\lambda_1}$  è anche autofunzione di  $\mathcal{O}_2$  con un certo autovalore  $\lambda_2$ , la misura dell'osservabile 2 dopo quella dell'osservabile 1 darà con certezza il risultato  $\lambda_2$ . Da quel momento in poi, ogni misura successiva dell'osservabile 1 o dell'osservabile 2 continuerà a dare risultato  $\lambda_1$  o  $\lambda_2$ , rispettivamente.

Se si estende questo ragionamento al caso di un **insieme completo** di osservabili compatibili, dopo la misura in successione di tutte le osservabili dell'insieme si ottiene uno stato sul quale ogni misura successiva di ciascuna di esse sarà completamente determinata.

## 3.19 Enunciato formale della relazione di indeterminazione di Heisenberg

Consideriamo per semplicità il caso di una particella in una dimensione e siano  $\psi(x)$  e

$$\varphi(p) = \int \frac{e^{-ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x) dx ,$$

le sue funzioni d'onda nella rappresentazione delle coordinate e degli impulsi, rispettivamente. Se  $\psi(x)$  occupa una regione di estensione dell'ordine di  $\Delta x$  nello spazio delle  $x$  e  $\varphi(p)$  occupa una regione di estensione dell'ordine di  $\Delta p$  nello spazio delle  $p$ , allora  $\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar$ . Le quantità  $\Delta x$  e  $\Delta p$  sono chiamate rispettivamente **incertezza sulla posizione** e **incertezza sull'impulso**.

Un enunciato formale della relazione di indeterminazione di Heisenberg può essere ottenuto adottando le seguenti definizioni per  $\Delta x^2$  e  $\Delta p^2$ :

$$\Delta x^2 \equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 , \quad (3.36)$$

$$\Delta p^2 \equiv \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 , \quad (3.37)$$

dove  $\langle \rangle$  rappresenta il valor medio sullo stato del sistema. In sostanza,  $\Delta x^2$  e  $\Delta p^2$  vengono identificati con gli scarti quadratici medi delle distribuzioni  $|\psi(x)|^2$  e  $|\varphi(p)|^2$ , rispettivamente. Avendo dato queste definizioni, si può dimostrare che vale sempre

$$\Delta x^2 \Delta p^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} . \quad (3.38)$$

Per la dimostrazione di questo risultato possiamo fare riferimento alla Sezione D.2, osservando che  $\varphi(p)$  è proprio la trasformata di Fourier della  $\psi(x)$  definita in (D.5), a parte costanti moltiplicative inessenziali, con l'identificazione  $k = p/\hbar$  e che  $\Delta x^2$  e  $\Delta p^2$  introdotte in quella Sezione sono identiche a quelle appena definite qui. Poiché nella Sezione D.2 era stato dimostrato che  $\Delta x^2 \Delta k^2 \geq 1/4$ , possiamo concludere che vale la (3.38).

Nel caso tridimensionale, le relazioni di indeterminazione di Heisenberg si scrivono

$$\begin{cases} \Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2 , \\ \Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2 , \\ \Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2 . \end{cases} \quad (3.39)$$

Vale la pena di osservare qui che le coppie di variabili per le quali esistono relazioni di indeterminazione (ad esempio  $x$  e  $p_x$ ) sono quelle i cui operatori hermitiani associati non commutano tra di loro. Più precisamente, la quantità che misura l'indeterminazione ( $\hbar$  nel caso dell'indeterminazione posizione-impulso) è legata al valore del commutatore ( $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$  nell'esempio considerato). In generale, coppie di osservabili i cui operatori hermitiani associati non commutano tra loro danno luogo a relazioni di indeterminazione del tipo di quelle posizione-impulso.

## 3.20 Relazione di indeterminazione tempo-energia

Esiste anche una relazione di indeterminazione del tipo  $\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar$ . Essa è di interpretazione molto diversa da quella di  $\Delta x \Delta p$ , nella quale posizione ed impulso giocano ruoli simmetrici e sono riferiti ad un istante dato  $t$ . Nel caso di energia e tempo, la prima è una *variabile dinamica* del sistema, mentre  $t$  è un *parametro*. Quindi  $\Delta E$  rappresenta l'incertezza sul valore della variabile dinamica energia, mentre  $\Delta t$  rappresenta l'intervallo di tempo caratteristico del ritmo di evoluzione del sistema.

Ci sono diversi modi in cui l'indeterminazione energia-tempo si può evidenziare. Quello più interessante fisicamente è quello che si incontra nello studio della teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo che esula dal programma di questo corso. Qui ci limitiamo a dare un esempio elementare.

Consideriamo una particella libera a cui è associato un pacchetto d'onde  $\psi(x)$  di larghezza  $\Delta x$  e velocità di gruppo  $v \equiv \partial E / \partial p$ . L'istante in cui la particella passa per un dato punto dello spazio è indeterminato di una quantità data dall'intervallo di tempo necessario affinché tutto il "treno" d'onde transiti per quel punto, quindi  $\Delta t \simeq \Delta x / v$ . D'altro canto, poiché il pacchetto d'onde ha un'estensione nello spazio degli impulsi  $\Delta p$ , si ha

$$\Delta E \simeq \frac{\partial E}{\partial p} \Delta p = v \Delta p \simeq \frac{\Delta x}{\Delta t} \Delta p \gtrsim \frac{\hbar}{\Delta t} ,$$

dove l'ultimo passaggio segue dall'indeterminazione posizione-impulso.

## 3.21 Esercitazioni

### 3.21.1 Determinazione delle autofunzioni simultanee di due operatori che commutano

Consideriamo gli operatori

$$\mathcal{O}_1 = \frac{p^2}{2m}, \quad \mathcal{O}_2 = p,$$

corrispondenti rispettivamente alle osservabili energia e impulso di una particella in moto libero lungo una retta, che identifichiamo con l'asse  $x$ . Nella rappresentazione delle coordinate, questi operatori prendono la forma

$$\mathcal{O}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad \mathcal{O}_2 = -i\hbar \frac{d}{dx}.$$

È immediato verificare che  $[\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2] = 0$ , che equivale a dire che per questo sistema energia ed impulso sono *osservabili compatibili*. Deve allora essere possibile trovare un insieme *comune* di autofunzioni per gli operatori  $\mathcal{O}_1$  ed  $\mathcal{O}_2$ . La verifica di questa proprietà è immediata, se si osserva che un'autofunzione di  $\mathcal{O}_2$  con autovalore  $p$ ,

$$\psi_p(x) = e^{ipx/\hbar},$$

è anche autofunzione di  $\mathcal{O}_1$ , con autovalore  $E = p^2/2m$ , essendo

$$\mathcal{O}_1 \psi_p(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_p(x)}{dx^2} = \frac{p^2}{2m} \psi_p(x).$$

È evidente che anche  $\psi_{-p}(x)$  è autofunzione di  $\mathcal{O}_1$  con lo stesso autovalore  $E = p^2/2m$ . Ciò significa che ciascuno degli autovalori  $E$  dell'operatore  $\mathcal{O}_1$  è *doppiamente degenere*.

Sebbene il problema della determinazione delle autofunzioni simultanee di  $\mathcal{O}_1$  ed  $\mathcal{O}_2$  sia banalmente risolto, può essere istruttivo procedere in modo diverso, per illustrare un metodo facilmente generalizzabile a tutti i casi in cui sia presente degenerazione dello spettro.

Partiamo quindi dall'equazione agli autovalori per l'operatore  $\mathcal{O}_1$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 \psi_E(x) &= E \psi_E(x) \\ \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} &= E \psi_E(x), \end{aligned}$$

dove l'autovalore  $E$  deve essere necessariamente un numero *reale positivo*. Quest'ultima equazione può essere riscritta come

$$\frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} + k^2 \psi_E(x) = 0, \quad k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2},$$

le cui soluzioni indipendenti possiamo scrivere sia nella forma

$$\psi_E^{(1)}(x) = e^{ikx}, \quad \psi_E^{(2)}(x) = e^{-ikx},$$



che nella forma

$$\psi_E^{(1)}(x) = \sin(kx) , \quad \psi_E^{(2)}(x) = \cos(kx) .$$

Le soluzioni scritte nella prima forma sono manifestamente autofunzioni di  $\mathcal{O}_2$  con autovalori  $p = \pm \hbar k$ , rispettivamente. Tuttavia, sempre per fini illustrativi, scegliamo di scrivere le autofunzioni di  $\mathcal{O}_1$  nella seconda forma, nella quale esse non sono automaticamente autofunzioni di  $\mathcal{O}_2$ , poiché

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_2 \psi_E^{(1)}(x) &= -i\hbar \frac{d \sin(kx)}{dx} = -i\hbar k \cos(kx) = -i\hbar k \psi_E^{(2)}(x) , \\ \mathcal{O}_2 \psi_E^{(2)}(x) &= -i\hbar \frac{d \cos(kx)}{dx} = +i\hbar k \sin(kx) = +i\hbar k \psi_E^{(1)}(x) . \end{aligned}$$

Possiamo scrivere queste due equazioni in forma compatta nel seguente modo

$$\mathcal{O}_2 \begin{pmatrix} \psi_E^{(1)} \\ \psi_E^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar k \\ i\hbar k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_E^{(1)} \\ \psi_E^{(2)} \end{pmatrix} .$$

Il problema di trovare quali combinazioni lineari di  $\psi_E^{(1)}$  e  $\psi_E^{(2)}$  siano autofunzioni di  $\mathcal{O}_2$  è equivalente a quello di trovare gli autovettori della matrice al II membro dell'equazione precedente. Gli autovalori di questa matrice soddisfano l'equazione caratteristica  $\lambda^2 - (\hbar k)^2 = 0$  e sono pertanto dati da

$$\lambda_+ = +\hbar k \equiv p , \quad \lambda_- = -\hbar k = -p .$$

Un'autofunzione di  $\mathcal{O}_2$  con autovalore  $\lambda_+ = \hbar k$  è una combinazione lineare di  $\psi_E^{(1)}$  e  $\psi_E^{(2)}$  che soddisfi l'equazione

$$\mathcal{O}_2 \left( \alpha \psi_E^{(1)} + \beta \psi_E^{(2)} \right) = \lambda_+ \left( \alpha \psi_E^{(1)} + \beta \psi_E^{(2)} \right) ,$$

cioè

$$\alpha \mathcal{O}_2 \psi_E^{(1)} + \beta \mathcal{O}_2 \psi_E^{(2)} = \hbar k \left( \alpha \psi_E^{(1)} + \beta \psi_E^{(2)} \right) .$$

Da questa equazione segue che

$$-i\hbar k \alpha \psi_E^{(2)} + i\hbar k \beta \psi_E^{(1)} = \hbar k \alpha \psi_E^{(1)} + \hbar k \beta \psi_E^{(2)} .$$

Siccome  $\psi_E^{(1)}$  e  $\psi_E^{(2)}$  sono indipendenti, questa equazione ammette soluzioni solo se i coefficienti di  $\psi_E^{(1)}$  e  $\psi_E^{(2)}$  al I e al II membro coincidono. Ciò conduce alla relazione  $\alpha = i\beta$ . Quindi un'autofunzione di  $\mathcal{O}_2$  con autovalore  $\lambda_+ = p = \hbar k$  è della forma

$$\psi_p(x) = \alpha \psi_E^{(1)} + i\alpha \psi_E^{(2)} = \alpha \left( \psi_E^{(1)} + i\psi_E^{(2)} \right) = \alpha \left( \sin(kx) + i \cos(kx) \right) = \alpha e^{ikx} ,$$

come doveva essere. Analogamente si trova che l'autofunzione di  $\mathcal{O}_2$  con autovalore  $\lambda_- = -p = -\hbar k$  è data da  $e^{-ikx}$ .

### 3.21.2 Applicazioni della relazione di indeterminazione di Heisenberg

La relazione di indeterminazione posizione-impulso può essere utilizzata per stimare l'energia del livello fondamentale di sistemi quantistici.

Consideriamo, ad esempio, il caso di una particella di massa  $m$  in moto unidimensionale soggetta a potenziale armonico unidimensionale, la cui energia è data da

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 .$$

In meccanica classica, lo stato di minima energia è quello in cui la particella è in quiete, con velocità nulla. È ragionevole, quindi, assumere

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0 .$$

Abbiamo allora

$$\langle x^2 \rangle = \Delta x^2 \qquad \langle p^2 \rangle = \Delta p^2 .$$

Poiché

$$\Delta x^2 \Delta p^2 \sim \frac{\hbar^2}{4} ,$$

abbiamo

$$\langle E \rangle = \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \Delta x^2 \sim \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar^2}{4\Delta p^2} ,$$

il cui valore minimo è realizzato per

$$\Delta p^2 = \frac{m\hbar\omega}{2} ,$$

per cui si ha

$$\langle E \rangle_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2} .$$

Questo valore può essere preso come stima dell'energia del livello fondamentale dell'oscillatore armonico. Vedremo nella Sezione 5.10 che questo risultato coincide con quello esatto.

Come altro esempio, possiamo considerare l'atomo di idrogeno, la cui energia è

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r} .$$

Detto  $a$  il “raggio” dell'atomo nello stato fondamentale, possiamo supporre che la carica dell'elettrone sia distribuita uniformemente in una sfera di raggio  $a$ , cosicché l'energia potenziale elettrostatica del sistema è

$$V \sim -\frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)a} .$$

Come stima della indeterminazione della posizione dell'elettrone, possiamo prendere proprio  $a$ . Abbiamo allora, in virtù della relazione di indeterminazione di Heisenberg, che l'indeterminazione dell'impulso è

$$\Delta p \sim p > \frac{\hbar}{a} ,$$

da cui segue che

$$\frac{p^2}{2m} > \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

e, quindi,

$$E > \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)a}.$$

Il valore minimo di  $E$  è realizzato per

$$a = \frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{me^2}$$

in corrispondenza del quale si ha

$$E_{\min} = -\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}.$$

Come vedremo nella Sezione 7.2 questa è proprio l'espressione dell'energia del livello fondamentale dell'atomo di idrogeno. La lunghezza  $a$  si chiama **raggio di Bohr** e vale circa  $0.529 \text{ \AA}$ .

## Esercizi

1. Determinare quanto rapidamente deve tendere a zero per  $|\vec{r}| \rightarrow \infty$  una funzione d'onda  $\psi(\vec{r})$  normalizzabile. Considerare separatamente i casi di dimensione spaziale uguale ad uno, a due ed a tre.
2. Dimostrare a partire dalla definizione (3.19) che  $\hat{x}$  e  $\hat{p}_x$  sono operatori hermitiani.
3. Riformulare il processo di misura descritto all'inizio della Sezione 3.17 includendo anche la dipendenza da  $z$  della funzione d'onda.
4. Descrivere l'esperimento della doppia fenditura di Young in termini di funzioni d'onda.

## Bibliografia

- Per le evidenze sperimentali delle onde di materia, per la discussione sul dualismo onda-corpuscolo e per l'indeterminazione di Heisenberg:  
M. Born, *Fisica atomica*, Bollati Boringhieri.
- Per tutto il resto:  
A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod.

---

# Capitolo 4

## L'equazione di Schrödinger

### 4.1 Aspetti generali dell'evoluzione temporale

Tutte le considerazioni fatte nel Capitolo precedente si riferivano a sistemi quantistici ad un istante di tempo fissato. Il problema che ci proponiamo di affrontare in questo Capitolo è quello della **evoluzione temporale** della funzione d'onda di un sistema quantistico, cioè il problema di determinare la funzione d'onda di un sistema al tempo  $t$ ,  $\psi(t)$ , nota la funzione d'onda ad un istante di tempo precedente,  $\psi(t_0)$ .

L'equazione di “propagazione” dell'onda  $\psi$  non può essere ottenuta con un ragionamento deduttivo. Deve essere *postulata* e sottoposta al vaglio degli *esperimenti*.

Le condizioni *a priori* da richiedere all'equazione di evoluzione sono che essa sia

- **lineare ed omogenea:** se  $\psi_1$  e  $\psi_2$  sono soluzioni dell'equazione, anche ogni loro combinazione lineare  $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$  lo è;
- **del I ordine rispetto al tempo:** è sufficiente conoscere  $\psi$  ad un certo istante di tempo dato per conoscerne l'evoluzione successiva.

Nella prossima Sezione scriveremo l'equazione di evoluzione temporale per il caso elementare di una particella libera non-relativistica per poi generalizzarla ai casi di particella soggetta a potenziale e a sistemi di più particelle in interazione.

### 4.2 Equazione di Schrödinger per una particella

Dall'ipotesi di de Broglie segue che la funzione d'onda di una particella libera non-relativistica può essere scritta come una sovrapposizione di onde piane monocromatiche,

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \varphi(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p},$$

con  $\omega = E/\hbar$  e  $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$  e con energia ed impulso legati dalla relazione  $E = p^2/(2m)$ .

## 4.2. EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER PER UNA PARTICELLA

---

Ignorando le questioni di convergenza degli integrali quando se ne prenda la derivata rispetto ad alcuni dei loro parametri, consideriamo

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \int E \varphi(\vec{p}) e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p}, \\ -i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) &= \int \vec{p} \varphi(\vec{p}) e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p}, \\ -\hbar^2 \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}, t) &= \int p^2 \varphi(\vec{p}) e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p}, \end{aligned}$$

da cui segue che

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}, t), \quad (4.1)$$

che è l'**equazione di Schrödinger** per una particella libera. Osserviamo che questa equazione è lineare ed omogenea e del I ordine rispetto al tempo. Inoltre, essa è in un certo senso la “traduzione” quantistica di  $E = p^2/(2m)$ , con la corrispondenza

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}, \quad (4.2)$$

da cui segue che

$$p^2 \rightarrow -\hbar^2 \vec{\nabla}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right).$$

Supponiamo ora che la particella sia soggetta ad un potenziale  $V(\vec{r})$ . Quando l'estensione del pacchetto d'onde è piccola rispetto alla dimensione della regione tipica di variazione del potenziale  $V(\vec{r})$ , il centro del pacchetto si muove come una particella classica con posizione, impulso ed energia dati da  $\vec{r}_{\text{cl}}$ ,  $\vec{p}_{\text{cl}}$  ed  $E_{\text{cl}}$ , e legati tra loro dalla relazione

$$E_{\text{cl}} = H(\vec{r}_{\text{cl}}, \vec{p}_{\text{cl}}) = \frac{\vec{p}_{\text{cl}}^2}{2m} + V(\vec{r}_{\text{cl}}),$$

dove  $H(\vec{r}, \vec{p})$  è la **Hamiltoniana** classica del sistema. Inoltre, nelle condizioni dette, vale che

$$V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) \simeq V(\vec{r}_{\text{cl}})\psi(\vec{r}, t).$$

Se ci si limita a intervalli di tempi sufficientemente brevi da non far avvertire alla particella la variazione spaziale del potenziale  $V$ , il pacchetto d'onde può essere ancora scritto come una sovrapposizione di onde piane monocromatiche. Abbiamo allora

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &\simeq E_{\text{cl}} \psi(\vec{r}, t), \\ -i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) &\simeq \vec{p}_{\text{cl}} \psi(\vec{r}, t), \end{aligned}$$

da cui segue che

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}, t) - V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t) \simeq \left( E_{\text{cl}} - \frac{\vec{p}_{\text{cl}}^2}{2m} - V(\vec{p}_{\text{cl}}) \right) \psi(\vec{r}, t) \simeq 0.$$

Si postula allora che l'equazione d'onda sia della forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) , \quad (4.3)$$

che è l'**equazione di Schrödinger** per una particella soggetta al potenziale  $V(\vec{r})$ .

### 4.3 Equazione di Schrödinger per il caso generale

Il punto di partenza per scrivere l'equazione di Schrödinger per un sistema quantistico qualunque è l'Hamiltoniana del sistema classico corrispondente. Essa è una funzione delle coordinate generalizzate  $q_i$ , dei loro momenti coniugati  $p_i$  ed eventualmente del tempo  $t$ ,  $H = H(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n, t)$ . Quando l'Hamiltoniana classica non dipende esplicitamente dal tempo essa è una costante del moto ed è identificabile con l'energia totale  $E$  del sistema.

Le regole di corrispondenza da applicare per costruire l'equazione di Schrödinger per un sistema quantistico di cui sia nota la sua Hamiltoniana classica sono

$$H \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} , \quad p_i \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i} , \quad (4.4)$$

che conducono all'equazione

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q_1, \dots, q_n, t)}{\partial t} = H \left( q_1, \dots, q_n, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_n}, t \right) \psi(q_1, \dots, q_n, t) . \quad (4.5)$$

Questa è l'**equazione di Schrödinger** nella rappresentazione delle coordinate. L'*operatore* che appare al II membro dell'equazione di Schrödinger si chiama **operatore Hamiltoniano** nella rappresentazione delle coordinate.

Le regole di corrispondenza (4.4) presentano due fonti di ambiguità.

La prima è la **non-invarianza** rispetto ad un cambio di coordinate nello spazio delle configurazioni. Consideriamo ad esempio il caso di una particella libera su un piano. In coordinate cartesiane abbiamo l'Hamiltoniana classica

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) ,$$

che conduce all'equazione

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y, t) .$$

In coordinate polari piane  $(r, \theta)$  questa equazione si scrive

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, \theta, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \psi(r, \theta, t) .$$

### 4.3. EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER PER IL CASO GENERALE

---

Se invece passiamo a coordinate polari piane *prima* di applicare le regole di corrispondenza, l'Hamiltoniana classica diventa

$$H = \frac{1}{2m} \left( p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} \right)$$

e l'applicazione delle regole di corrispondenza (4.4) a partire da *questa* Hamiltoniana classica conduce all'equazione

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, \theta, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \psi(r, \theta, t),$$

che è diversa da quella ottenuta in precedenza. La convenzione da seguire è che le regole di corrispondenza (4.4) vanno applicate alle *coordinate cartesiane*.

La seconda fonte di ambiguità deriva dal fatto che le regole di corrispondenza (4.4) mettono in relazione grandezze algebriche ordinarie con operatori che *non commutano* tra di loro. Così, ad esempio, se il termine  $p^2/(2m)$  che appare in una Hamiltoniana classica può essere riscritto equivalentemente in una forma come questa

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \frac{1}{\sqrt{q}} p q p \frac{1}{\sqrt{q}},$$

le regole di corrispondenza implicano

$$\frac{p^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2}, \quad \frac{1}{2m} \frac{1}{\sqrt{q}} p q p \frac{1}{\sqrt{q}} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{4q^2} \right).$$

È necessario quindi stabilire una prescrizione valida in tutti i casi di interesse, cioè per Hamiltoniane classiche che in coordinate cartesiane siano della forma

$$H = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m_i} + V(q_1, \dots, q_n) + \sum_{i=1}^n p_i f_i(q_1, \dots, q_n). \quad (4.6)$$

Le regole di corrispondenza non danno problemi che per il III termine al II membro. La prescrizione è che questo termine venga *simmetrizzato* prima che esse vengano applicate:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[ p_i f_i(q_1, \dots, q_n) + f_i(q_1, \dots, q_n) p_i \right].$$

Come prima applicazione consideriamo un oscillatore armonico unidimensionale. La sua Hamiltoniana classica è

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

a cui corrisponde l'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x, t).$$



Un altro esempio è quello di un atomo complesso, con numero atomico  $Z$  e nucleo di massa  $M$ . La sua Hamiltoniana classica è

$$H = \frac{P^2}{2M} + \sum_{i=1}^Z \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)|\vec{R} - \vec{r}_i|} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} ,$$

dove i primi due termini al II membro rappresentano l'energia cinetica del nucleo e degli  $Z$  elettroni, rispettivamente, mentre il terzo e il quarto termine rappresentano l'energia potenziale di interazione coulombiana elettroni-nucleo ed elettrone-elettrone, rispettivamente. L'equazione di Schrödinger corrispondente è

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{R}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_Z, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^Z \nabla_{\vec{r}_i}^2 - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)|\vec{R} - \vec{r}_i|} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \psi(\vec{R}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_Z, t) ,$$

in cui l'interpretazione dei vari termini e della notazione è immediata.

## 4.4 Alcune osservazioni sull'equazione di Schrödinger

Ci sono diversi modi di giustificare la forma dell'equazione di Schrödinger. L'approccio seguito qui è stato quello di A. Messiah, *op. cit.*. Può essere interessante confrontare questo approccio con quello di L.D. Landau e E.M. Lifshits, *op. cit.*, che parte dall'equazione di Hamilton-Jacobi della meccanica classica, e che è discusso in dettaglio anche in H. Goldstein, *Meccanica classica*, Zanichelli.

Nell'approccio seguito in questi appunti, si è lavorato sin dall'inizio nella rappresentazione delle coordinate. Ciò è stato fatto al solo scopo di aiutare l'intuizione nei vari passaggi per giustificare l'equazione di Schrödinger. Tuttavia, l'estensione alla rappresentazione degli impulsi è naturale: sono fatte salve tutte le prescrizioni e le convenzioni stabilite, con la sola eccezione che le regole di corrispondenza (4.4) vanno modificate in

$$H \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} , \quad q_i \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} , \quad (4.7)$$

cosicché l'equazione di Schrödinger in questa rappresentazione si scrive

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(p_1, \dots, p_n, t)}{\partial t} = H \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial p_1}, \dots, i\hbar \frac{\partial}{\partial p_n}, p_1, \dots, p_n, t \right) \varphi(p_1, \dots, p_n, t) . \quad (4.8)$$

Nel caso dell'oscillatore armonico unidimensionale discusso alla fine della Sezione precedente avremmo, ad esempio,

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(p, t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \varphi(p, t) - \frac{m\omega^2}{2} \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} \varphi(p, t) .$$

Quando si vorrà considerare l'equazione di Schrödinger prescindendo da una particolare rappresentazione, la si potrà scrivere nella forma seguente:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(t) , \quad (4.9)$$

dove  $\hat{H} = H(\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_n, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n)$  e, a seconda della rappresentazione,  $\hat{q}_i, \hat{p}_i$  saranno operatori moltiplicativi o differenziali e  $\psi(t)$  sarà la funzione d'onda  $\psi(\vec{r}, t)$  o  $\varphi(\vec{p}, t)$ .

## 4.5 Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo e stati stazionari

In quanto segue restringeremo la discussione ad un sistema quantistico il cui analogo classico abbia una Hamiltoniana che non dipende esplicitamente dal tempo, cioè  $\partial H/\partial t = 0$ . In questo caso possiamo identificare l'energia totale  $E$  del sistema con l'Hamiltoniana stessa. A livello quantistico è naturale far corrispondere all'osservabile energia  $E$  l'operatore Hamiltoniano  $\hat{H}$ . In accordo con il postulato 3 enunciato nel Capitolo precedente, tale operatore deve essere allora **hermitiano**. Negli esempi considerati alla fine della Sezione 4.3 ciò è verificato banalmente ed è vero in generale per tutte le Hamiltoniane della forma (4.6) che copre tutti i casi di interesse di questo corso (si veda anche la Sezione 4.7).

Abbiamo visto nel Capitolo precedente che gli autovalori e le autofunzioni di un operatore hermitiano sono fondamentali perché consentono di conoscere quali sono i possibili risultati della misura dell'osservabile corrispondente a quell'operatore e di determinare come viene modificata la funzione d'onda dal processo di misura. Nel caso dell'operatore Hamiltoniano, l'equazione agli autovalori è

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E, \quad (4.10)$$

dove  $\psi_E$  è l'autofunzione corrispondente all'autovalore  $E$ . Questa equazione non contiene alcuna dipendenza dal tempo, quindi la dipendenza dal tempo nelle  $\psi_E$  può apparire solo in forma moltiplicativa, cioè  $\psi_E(t) = f(t)\bar{\psi}_E$ , dove  $\bar{\psi}_E$  dipende solo da  $\vec{r}$  o  $\vec{p}$ , a seconda della rappresentazione usata per  $\hat{H}$ . L'equazione agli autovalori per  $\hat{H}$  viene talvolta chiamata **equazione di Schrödinger indipendente dal tempo**. Per trovare l'evoluzione temporale delle  $\psi_E(t)$ , dobbiamo usare l'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi_E(t)}{\partial t} = \hat{H}\psi_E(t),$$

che, combinata con l'equazione agli autovalori (4.10), dà

$$i\hbar \frac{\partial \psi_E(t)}{\partial t} = E\psi_E(t).$$

La soluzione di questa equazione è immediata:

$$\psi_E(t) = e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \bar{\psi}_E.$$

L'evoluzione temporale per una autofunzione dell'energia consiste nell'acquistare un fattore di fase dipendente dal tempo. Questo fattore di fase è inessenziale quando si calcolino su queste autofunzioni valori medi di osservabili qualunque. Per questo motivo, gli stati descritti dalle autofunzioni  $\psi_E$  si chiamano **stati stazionari**. Consideriamo, ad esempio,

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_E(t) &\equiv (\psi_E(t), \hat{x}\psi_E(t)) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_E^*(x, t) x \psi_E(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iEt/\hbar} \bar{\psi}_E^*(x) x e^{-iEt/\hbar} \bar{\psi}_E(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_E^*(x) x \bar{\psi}_E(x) dx \end{aligned}$$

$$\equiv (\bar{\psi}_E, \hat{x}\bar{\psi}_E) \equiv \langle x \rangle_E(0) ,$$

dove abbiamo posto  $t_0 = 0$ . Questo risultato indica che il valor medio dell'osservabile  $x$  su una autofunzione  $\psi_E(t)$  è costante nel tempo. Lo stesso vale per qualunque altra osservabile.

Conoscere *tutti* gli autovalori  $E$  e le rispettive autofunzioni  $\bar{\psi}_E$  dell'operatore Hamiltoniano di un sistema è sufficiente per conoscere l'evoluzione di una qualunque funzione d'onda del sistema. Infatti, in virtù del postulato 3, ogni funzione d'onda  $\psi$  al tempo  $t_0 = 0$  può essere scritta come combinazione lineare delle autofunzioni  $\bar{\psi}_E$ , cioè

$$\psi(t=0) = \sum_E c_E \bar{\psi}_E ,$$

dove  $\sum_E$  significa somma su tutte le autofunzioni (stiamo assumendo per semplicità di notazione che lo spettro degli autovalori sia discreto) e i coefficienti  $c_E$  possono essere trovati, nota  $\psi$  e tutte le  $\bar{\psi}_E$ , usando la formula (3.27). Allora, per la linearità dell'equazione di Schrödinger, la funzione d'onda ad un istante di tempo successivo  $t$  sarà

$$\psi(t) = \sum_E c_E e^{-iEt/\hbar} \bar{\psi}_E , \quad (4.11)$$

cioè sarà ancora una sovrapposizione delle autofunzioni  $\bar{\psi}_E$  con ciascuno dei coefficienti  $c_E$  modificato in  $c_E e^{-iEt/\hbar}$ . L'evoluzione temporale di una generica funzione d'onda può quindi essere vista come l'effetto combinato della variazione della fase nel tempo delle sue componenti ad energia definita  $\bar{\psi}_E$ , ognuna con la sua pulsazione  $\omega = E/\hbar$ .

## 4.6 Proprietà generali dell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

Per fissare le idee, consideriamo una particella di massa  $m$  in un potenziale  $V(\vec{r})$  che supponiamo tenda a zero per  $r = |\vec{r}| \rightarrow \infty$  e lavoriamo nella rappresentazione delle coordinate.

L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per questo sistema è<sup>1</sup>

$$\hat{H}\psi_E(\vec{r}) \equiv \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right] \psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}) .$$

Il problema agli autovalori è ben definito solo quando si specificano le condizioni di **regolarità** della funzione  $\psi_E$  e le **condizioni al contorno**. Tali condizioni devono essere compatibili con l'interpretazione fisica della funzione d'onda. Esse sono che  $\psi_E(\vec{r})$  e le **sue derivate parziali del I ordine** devono essere funzioni **continue** e **limitate** in tutto lo spazio.

Si possono dimostrare i seguenti risultati:

(a)  $E < 0$ : l'equazione ha soluzione solo per certi valori particolari di  $E$  che formano uno **spettro discreto**; inoltre,

$$\psi_E(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 , \quad \int |\psi_E(\vec{r})|^2 d\vec{r} < \infty ,$$

---

<sup>1</sup>D'ora in poi ometteremo la sopralineatura di  $\psi_E$ .

#### 4.7. CONSERVAZIONE DELLA NORMA

---

la probabilità di trovare la particella all'infinito è nulla; la particella è localizzata in un dominio finito e si parla, dunque, di **stato legato**.

(b)  $E > 0$ : l'equazione si può risolvere per ogni  $E$ , si ha quindi **spettro continuo**; le  $\psi_E(\vec{r})$  **non** si annullano all'infinito ed il loro comportamento asintotico è analogo a quello di un'onda piana  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ ;  $|\psi_E(\vec{r})|$  tende verso una costante non-nulla oppure oscilla indefinitamente; la particella **non** resta localizzata in un dominio finito e si parla di **stato non-legato**.

Osserviamo, quindi, che la **quantizzazione** dei livelli energetici è connessa con il problema della ricerca degli autovalori di  $\hat{H}$ . Questo problema può essere risolto in modo esatto in pochi casi semplici. Di questi, ne vedremo alcuni nel Capitolo seguente, dove tratteremo sistemi unidimensionali con potenziali costanti a tratti e l'oscillatore armonico unidimensionale. Un altro sistema per il quale il problema agli autovalori può essere risolto completamente è l'atomo di idrogeno che sarà trattato, invece, nell'ultimo Capitolo di questi appunti. Nelle situazioni complesse bisogna ricorrere a tecniche di approssimazione (calcolo variazionale, approssimazione semiclassica, teoria delle perturbazioni, calcolo numerico, ecc.) che non saranno oggetto di questo corso.

### 4.7 Conservazione della norma

Data la funzione d'onda di una particella  $\psi(\vec{r}, t) \in L^2(\mathbf{R}^3)$ , la sua norma è stata definita come

$$N = \int \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d\vec{r}.$$

In questa Sezione ci proponiamo di studiare se  $N$  varia nel tempo per effetto dell'evoluzione temporale.

Osserviamo, innanzitutto, che se vale l'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi,$$

vale anche la sua complessa coniugata

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = (\hat{H} \psi)^*.$$

Abbiamo allora che

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \psi^* (\hat{H} \psi) - (\hat{H} \psi)^* \psi \right],$$

da cui segue

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \int \left[ \psi^* (\hat{H} \psi) - (\hat{H} \psi)^* \psi \right] d\vec{r},$$

cioè  $N$  resta costante se e solo se l'integrale al II membro è nullo. Ma questa condizione, che deve essere soddisfatta per ogni funzione d'onda  $\psi$ , non è altro che la condizione di hermiticità di  $\hat{H}$ . Quindi l'evoluzione conserva la norma di una funzione d'onda se e solo se  $\hat{H}$  è un operatore hermitiano. Abbiamo già anticipato che ciò succede per tutti i casi di interesse di questo corso, che

sono rappresentati da Hamiltoniane della forma (4.6). La dimostrazione di questa affermazione è lasciata per esercizio al lettore.

Qui ci limitiamo a farlo vedere per il caso di una particella in un potenziale  $V(\vec{r})$ . In rappresentazione delle coordinate l'operatore Hamiltoniano è

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

Poiché  $V(\vec{r})$  è reale, resta da dimostrare che

$$\int \left[ \psi^* (\vec{\nabla}^2 \psi) - (\vec{\nabla}^2 \psi)^* \psi \right] d\vec{r} = 0 .$$

Immaginiamo per un momento che l'integrale sia esteso ad un certo dominio finito  $V$ , delimitato dalla superficie  $S$ ; abbiamo

$$\int_V \left[ \psi^* (\vec{\nabla}^2 \psi) - (\vec{\nabla}^2 \psi)^* \psi \right] d\vec{r} = \int_V \vec{\nabla} \cdot \left[ \psi^* (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi)^* \psi \right] d\vec{r} = \int_S \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial n} - \frac{\partial \psi^*}{\partial n} \psi \right] dS ,$$

per il teorema della divergenza; qui  $\partial/\partial n$  rappresenta la derivata normale esterna. Quando il dominio  $V$  tende all'infinito, l'integrale su  $S$  tende a zero, in virtù del fatto che  $\psi$  è quadrato-sommabile.

In definitiva, la norma resta costante nel tempo ed è quindi sufficiente normalizzare la funzione d'onda una volta per tutte al tempo iniziale  $t_0$ . La condizione di normalizzazione fissa il modulo della costante moltiplicativa arbitraria delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger; la fase di questa costante resta arbitraria.

La conservazione della norma si interpreta facilmente introducendo il concetto di **corrente**. Consideriamo ancora il caso di una particella in un potenziale  $V(\vec{r})$  e mettiamoci nella rappresentazione delle coordinate. Dall'equazione di Schrödinger e dalla sua complessa coniugata

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right] \psi , \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right] \psi^* \end{aligned}$$

moltiplicando la prima membro a membro per  $\psi^*$ , la seconda membro a membro per  $\psi$  e prendendo la differenza membro a membro delle due equazioni, otteniamo

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \cdot \left[ \psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right] .$$

Detto

$$\vec{J}(\vec{r}, t) \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \left[ \psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right] \quad (4.12)$$

il vettore **corrente** e ricordando che  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  è la densità di probabilità  $P$ , l'equazione appena ottenuta per  $\partial|\psi|^2/\partial t$  si può scrivere

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 , \quad (4.13)$$

#### 4. BIBLIOGRAFIA

---

cioè ha la stessa forma dell'**equazione di continuità** in idrodinamica: il movimento di una particella quantistica può essere assimilato a quello di un fluido classico con densità  $P$  e corrente  $\vec{J}$ .

La definizione di  $J$  contiene una arbitrarietà:  $\vec{J}' = \vec{J} + \vec{v}$ , dove  $\vec{v}$  è un vettore costante va ugualmente bene. Tuttavia, la definizione data è la più semplice e naturale, infatti l'operatore  $(-i\hbar/m)\vec{\nabla}$  che appare nella definizione corrisponde a  $\vec{p}/m$ , inoltre  $\psi^*\psi$  corrisponde a  $P$  che è l'analogo della densità  $\rho$  del fluido, cosicché  $\vec{J}$  corrisponde a  $\rho\vec{v}$ , come nell'analogo idrodinamico. Nel caso particolare di un'onda piana  $Ae^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)/\hbar}$  si ha  $\vec{J}(\vec{r}, t) = |A|^2\vec{p}/m$ .

Nel caso di una soluzione stazionaria dell'equazione di Schrödinger

$$\psi_E(\vec{r}, t) = \psi_E(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$$

la conservazione della norma è evidente per quanto detto all'inizio di questa Sezione, poiché l'argomento utilizzato lì è valido per una generica funzione in  $L^2(\mathbf{R}^3)$  e la funzione d'onda di uno stato legato appartiene a  $L^2(\mathbf{R}^3)$ . Nel caso di stato non-legato, per il quale la funzione d'onda non va a zero all'infinito e non è normalizzabile, quell'argomento non è applicabile. Tuttavia, l'equazione di continuità (4.13) vale in entrambi i casi e diventa  $\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$ . Si può quindi dire che per uno stato stazionario la conservazione della norma è espressa dall'equazione  $\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$ , che è interessante perché indipendente dalla forma di  $V(\vec{r})$ .

## Bibliografia

- A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod.

# Capitolo 5

## Sistemi quantistici unidimensionali

### 5.1 Premessa

In questo Capitolo ci soffermeremo sulla soluzione dell'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo nel caso di quei sistemi quantistici unidimensionali per i quali essa può essere trovata esattamente.

Prima di tutto considereremo il caso semplice di una particella *libera*, che ci consentirà di entrare nell'argomento senza dover superare grosse difficoltà tecniche. Poi passeremo alla discussione del caso di particella soggetta a potenziale costante a tratti, che ci fornirà il paradigma per l'esposizione degli aspetti generali del problema di Schrödinger in una dimensione. Infine considereremo l'applicazione al caso di potenziale di tipo armonico.

In tutto questo Capitolo lavoreremo nella rappresentazione delle coordinate.

### 5.2 Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per una particella libera in moto unidimensionale

Il più semplice sistema quantistico che si possa immaginare è quello di una particella di massa  $m$  non soggetta ad alcun potenziale e vincolata a muoversi lungo una direzione stabilita che faremo coincidere con l'asse  $x$ . L'operatore Hamiltoniano per questo sistema nella rappresentazione delle coordinate è

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}.$$

Il problema agli autovalori o, equivalentemente, l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per questo sistema, si scrive

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_E''(x) = E \psi_E(x), \quad (5.1)$$

dove  $\psi_E(x)$  indica l'autofunzione di  $H$  con autovalore  $E$ . Risolvere questo problema vuol dire trovare tutti i valori possibili dell'autovalore  $E$  e le corrispondenti autofunzioni  $\psi_E(x)$ . Consideriamo

### 5.3. EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER INDIPENDENTE DAL TEMPO PER SISTEMI UNIDIMENSIONALI

---

dapprima il caso  $E > 0$  e riscriviamo l'equazione (5.1) nella forma

$$\psi_E''(x) + k^2 \psi_E(x) = 0, \quad k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

che ammette *due* soluzioni indipendenti della forma

$$\psi_E^{(\pm)}(x) = c_{\pm} e^{\pm i k x}.$$

Abbiamo così che tutti i valori dell'energia  $E > 0$  sono possibili autovalori dell'operatore Hamiltoniano e che per ciascuno di essi la degenerazione è pari a due. Le autofunzioni  $\psi_E^{(\pm)}$  sono della stessa forma delle già note autofunzioni (3.25) dell'operatore  $p_x = -i\hbar d/dx$ , infatti

$$-i\hbar \frac{d\psi_E^{(\pm)}(x)}{dx} = \pm \hbar k \psi_E^{(\pm)}(x),$$

da cui deduciamo che le due autofunzioni indipendenti  $\psi_E^{(\pm)}$  con una certa energia  $E > 0$  sono anche autofunzioni dell'operatore impulso, una con autovalore  $p = +\hbar k$ , l'altra con autovalore  $p = -\hbar k$ . Possiamo scrivere allora che tutte le autofunzioni dell'Hamiltoniana di una particella libera in una dimensione con  $E > 0$  sono della forma

$$\psi_p(x) = c_p e^{ipx/\hbar}, \quad (5.2)$$

con  $p = \hbar k = \sqrt{2mE}$  variabile nell'intervallo  $(-\infty, +\infty)$ . Per  $p > 0$  si parla di onda “progressiva”, per  $p < 0$  di onda “regressiva”. La costante moltiplicativa  $c_p$  è arbitraria. Ponendo  $c_p = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$  imponiamo che le  $\psi_p$  siano normalizzate come indicato nella (3.34).

Nel caso  $E < 0$  l'equazione (5.1) si può mettere nella forma

$$\psi_E''(x) - \kappa^2 \psi_E(x) = 0, \quad \kappa \equiv \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

che ammette *due* soluzioni indipendenti della forma

$$\psi_E^{(\pm)}(x) = c_{\pm} e^{\pm \kappa x}.$$

Entrambe queste soluzioni **non** sono accettabili, perché corrispondono a funzioni d'onda non limitate e quindi incompatibili con l'interpretazione probabilistica.

In definitiva, abbiamo che il problema di Schrödinger indipendente dal tempo per una particella libera in moto unidimensionale ammette uno **spettro continuo** di soluzioni per tutti i valori di  $E > 0$ , con autofunzioni della forma (5.2). Ad ogni valore di  $E$  corrispondono due autofunzioni indipendenti, ciascuna delle quali è a sua volta autofunzione dell'impulso con autovalore  $p = \pm \sqrt{2mE}$ .

## 5.3 Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per sistemi unidimensionali

L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per una particella in moto lungo l'asse  $x$  sotto l'effetto di un potenziale  $V(x)$  è

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi_E(x) = E \psi_E(x),$$



che può essere riscritta nella forma

$$\psi_E''(x) + [\varepsilon - U(x)]\psi_E(x) = 0, \quad \varepsilon \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad U(x) \equiv \frac{2mV(x)}{\hbar^2}. \quad (5.3)$$

Questo tipo di problema differenziale si chiama **di Sturm-Liouville** e di esso vanno cercate le soluzioni **limitate**, **continue** e **derivabili** nell'intervallo  $(-\infty, +\infty)$ . Risolvere questo problema equivale a trovare tutti gli autovalori  $E$  e le rispettive autofunzioni  $\psi_E$  dell'operatore Hamiltoniano (in rappresentazione delle coordinate)

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

Osserviamo che:

1. se  $\psi_E(x)$  è una soluzione di (5.3), anche  $C\psi_E(x)$  lo è, per ogni costante complessa  $C$ ;
2. poiché l'equazione differenziale è del II ordine rispetto ad  $x$ , per un valore di  $E$  esisteranno al massimo due soluzioni indipendenti, quindi la *degenerazione* di un autovalore può valere al massimo due;
3. siccome  $V(x)$  è **reale**, l'equazione differenziale da risolvere è reale ed allora, se  $\psi_E(x)$  è una soluzione, anche  $\psi_E^*(x)$  lo è; ciò equivale a dire che sono separatamente soluzioni del problema sia la **parte reale**, sia la **parte immaginaria** di  $\psi_E(x)$ , quindi le soluzioni del problema possono essere cercate tra le funzioni reali; nel caso in cui non ci sia degenerazione, la parte reale di  $\psi_E(x)$  e la sua parte immaginaria non possono essere indipendenti l'una dall'altra, ma devono essere necessariamente multipla una dell'altra.

## 5.4 Potenziali costanti a tratti

Il problema (5.3) può essere risolto esattamente nel caso di potenziali che presentino **discontinuità di I specie** in certi punti e che restino costanti altrove. L'asse  $x$  risulta così diviso in un certo numero  $n$  di intervalli in ciascuno dei quali il potenziale conserva un valore costante determinato (si veda la Figura 5.1).

Osserviamo innanzitutto che, essendo<sup>1</sup>

$$\psi'' = (U - \varepsilon)\psi,$$

con  $U$  che presenta discontinuità di I specie, anche  $\psi''$  presenta discontinuità di I specie. Ciò implica che  $\psi$  e  $\psi'$  sono funzioni **continue** dappertutto.

Indichiamo con  $U_1, \dots, U_n$  i valori presi da  $U(x)$  nelle  $n$  regioni in cui è costante, procedendo da sinistra verso destra lungo l'asse reale. Consideriamo una di queste regioni e sia  $U_i$  il valore costante di  $U(x)$  in quella regione.

Per  $\varepsilon > U_i$ , l'equazione differenziale da risolvere è della forma

$$\psi''(x) + k_i^2 \psi(x) = 0, \quad k_i = \sqrt{\varepsilon - U_i} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_i)},$$

<sup>1</sup>D'ora in poi ometteremo il pedice  $E$  in  $\psi_E$ .

#### 5.4. POTENZIALI COSTANTI A TRATTI

---

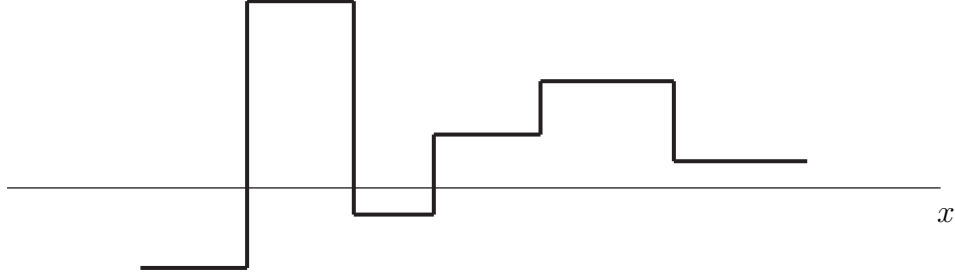


Figura 5.1: Esempio di potenziale costante a tratti  $U(x)$ .

che ammette soluzioni indipendenti di tipo oscillante della forma

$$e^{ik_i x} , \quad e^{-ik_i x} .$$

La prima di queste soluzioni si chiama “progressiva”, la seconda “regressiva”.

Per  $\varepsilon < U_i$ , l'equazione differenziale da risolvere è della forma

$$\psi''(x) - \kappa_i^2 \psi(x) = 0 , \quad \kappa_i = \sqrt{U_i - \varepsilon} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_i - E)} ,$$

che ammette soluzioni indipendenti di tipo esponenziale della forma

$$e^{\kappa_i x} , \quad e^{-\kappa_i x} .$$

La soluzione generale si ottiene “raccordando” quelle in ciascuna regione di potenziale costante, mediante le condizioni di continuità della funzione e della sua derivata nei punti di discontinuità del potenziale. Poiché abbiamo  $n$  regioni di potenziale costante,  $2n$  parametri liberi nella soluzione generale (due parametri per la soluzione generale in ciascuna regione di potenziale costante),  $n - 1$  punti di discontinuità di I specie in ciascuno dei quali impone due condizioni di raccordo, abbiamo  $2n - 2(n - 1) = 2$  parametri arbitrari.

Tuttavia, per essere accettabile l'autofunzione deve essere **limitata** per  $x \rightarrow \pm\infty$ . Ciò comporta che il numero di parametri arbitrari possa scendere ad uno o a zero. Possono presentarsi tre casi (supponiamo, per fissare le idee,  $U_1 < U_n$ ):

1.  $\varepsilon > U_n$ : in questo caso, sia nella regione 1 (che è quella che si estende verso  $-\infty$ ) che nella regione  $n$  (che è quella che si estende verso  $+\infty$ ) la soluzione è di tipo oscillante (contiene sia il termine “progressivo”, che quello “regressivo”), quindi è limitata e non si annulla né per  $x \rightarrow -\infty$ , né per  $x \rightarrow +\infty$ ; non è necessario imporre alcuna restrizione sul comportamento all'infinito, pertanto sono permessi tutti i valori di  $\varepsilon > U_n$ , cioè di  $E > V_n$ , e per ciascun valore di  $E$  ci sono due soluzioni indipendenti (**degenerazione uguale a due**); si dice che lo spettro è **continuo** ed il moto è **illimitato nei due versi**;
2.  $U_1 < \varepsilon < U_n$ : in questo caso, nella regione 1 la soluzione è di tipo oscillante (contiene sia il termine “progressivo”, che quello “regressivo”), quindi è limitata e non si annulla per  $x \rightarrow -\infty$ ;

nella regione  $n$  la soluzione è di tipo esponenziale, ma il termine della forma  $e^{\kappa_n x}$  deve essere scartato, poiché comporterebbe una crescita indefinita della funzione d'onda per  $x \rightarrow +\infty$ , quindi il numero dei parametri arbitrari si riduce ad uno; sono permessi tutti i valori di  $\varepsilon$  compresi tra  $U_1$  e  $U_n$ , cioè di  $E$  compresa tra  $V_1$  e  $V_n$ , e per ciascun valore di  $E$  c'è una sola soluzione (**non c'è degenerazione**); si dice che lo spettro è **continuo** ed il moto è **illimitato in un verso** (qui, per  $x \rightarrow -\infty$ );

3.  $\varepsilon < U_1$ : in questo caso, sia nella regione 1 che nella regione  $n$  la soluzione è di tipo esponenziale, ma nella regione 1 deve essere scartato il termine della forma  $e^{-\kappa_1 x}$ , poiché comporterebbe una crescita indefinita della funzione d'onda per  $x \rightarrow -\infty$ , nella regione  $n$  deve essere scartato il termine della forma  $e^{\kappa_n x}$ , poiché comporterebbe una crescita indefinita della funzione d'onda per  $x \rightarrow +\infty$ , quindi il numero dei parametri arbitrari si riduce a zero; ciò significa che il problema in generale non ammette soluzione, se non per particolari valori **discreti** di  $E < V_1$ , per ciascuno dei quali esiste una sola soluzione (**non c'è degenerazione**); si dice che lo spettro è **discreto** e, poiché la funzione d'onda tende a zero per  $x \rightarrow \pm\infty$ , il moto è limitato ad una regione di estensione finita (**stato legato**).

Queste conclusioni possono essere estese al caso di potenziali unidimensionali (regolari) di forma qualunque che tendono ad un valore costante  $U_-$  per  $x \rightarrow -\infty$  e ad un valore costante  $U_+$  per  $x \rightarrow +\infty$ .

Osserviamo che non esiste soluzione del problema (5.3) per  $E$  minore di  $V(x)$  per tutti gli  $x$ . In questo caso, infatti,

$$U - \varepsilon > 0, \quad \forall x \quad \longrightarrow \quad \psi'' = (U - \varepsilon)\psi \quad \begin{cases} > 0 & \text{se } \psi > 0 \\ < 0 & \text{se } \psi < 0 \end{cases}$$

cioè  $\psi$  è concava verso l'alto quando è positiva, verso il basso quando è negativa, quindi diverge in almeno uno dei limiti  $x \rightarrow \pm\infty$  e va scartata.

## 5.5 Altre proprietà del moto unidimensionale

In questa Sezione enunciamo alcune altre proprietà del moto unidimensionale, valide per potenziali di forma arbitraria.

1. Siano  $\psi_1$  e  $\psi_2$  due soluzioni del problema (5.3) con la *stessa* energia, allora

$$\begin{cases} \psi_1'' + (\varepsilon - U)\psi_1 = 0 \\ \psi_2'' + (\varepsilon - U)\psi_2 = 0 \end{cases}$$

Se moltiplichiamo membro a membro la prima equazione per  $\psi_2$ , la seconda per  $\psi_1$  e poi facciamo la sottrazione membro a membro tra le due equazioni, otteniamo

$$\psi_1\psi_2'' - \psi_1''\psi_2 = 0 \quad \longrightarrow \quad (\psi_1\psi_2' - \psi_1'\psi_2)' = 0 \quad \longrightarrow \quad W(\psi_1, \psi_2) \equiv \psi_1\psi_2' - \psi_1'\psi_2 = \text{costante} .$$

## 5.5. ALTRE PROPRIETÀ DEL MOTO UNIDIMENSIONALE

---

La funzione  $W(\psi_1, \psi_2)$  si chiama **Wronskiano** di  $\psi_1$  e  $\psi_2$ . Il risultato ottenuto ci dice che esso è costante se calcolato su due soluzioni con la medesima energia. Questa costante è uguale a zero se  $\psi_{1,2}$  tende a zero in almeno uno dei due limiti  $x \rightarrow \pm\infty$ . In tal caso abbiamo

$$\left(\frac{\psi_1}{\psi_2}\right)' = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_1 = C\psi_2 ,$$

cioè le due soluzioni **non** sono indipendenti, quindi non c'è degenerazione.

Si osservi che questo risultato è in perfetto accordo con le conclusioni sullo studio dei potenziali costanti a tratti.

2. Se  $V(x) = V(-x)$ , l'equazione di Schrödinger (5.3) è invariante sotto la trasformazione  $x \rightarrow -x$  (**parità**), cioè se  $\psi(x)$  è una soluzione, anche  $\psi(-x)$  lo è. Si possono verificare due casi:

(a)  $E$  non-degenere: in questo caso  $\psi(x)$  e  $\psi(-x)$  **non** sono indipendenti, ma

$$\begin{aligned} \psi(-x) = C\psi(x) &\longrightarrow \psi(x) = C\psi(-x) &\longrightarrow \psi(-x) = C^2\psi(-x) \\ &\longrightarrow C^2 = 1 &\longrightarrow C = \pm 1 , \end{aligned}$$

quindi

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

cioè ogni autofunzione di  $H$  ha **parità definita**;

(b)  $E$  degenere: in questo caso  $\psi(x)$  e  $\psi(-x)$  sono in generale indipendenti, ma si possono prendere le combinazioni

$$\psi_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi(x) \pm \psi(-x)) ,$$

che sono autofunzioni indipendenti di  $E$  con **parità definita**.

In definitiva, se  $V(x) = V(-x)$  è sempre possibile trovare un insieme di autofunzioni di  $H$  con parità definita.

3. **Teorema dell'oscillazione:** è valido solo per lo **spettro discreto** ed afferma che l'autofunzione del **livello fondamentale**, cioè il livello con la minima  $E$ , ha **zero nodi**, cioè non si annulla mai per valori di  $x$  finiti, l'autofunzione del **I livello eccitato** ha **un nodo**, cioè si annulla una volta sola al finito, l'autofunzione del **II livello eccitato** ha **due nodi**, ecc. Inoltre, ogni nodo dell'autofunzione del livello  $(n+1)$ -esimo giace tra due nodi dell'autofunzione del livello  $n$ -esimo (se si considerano qui come nodi anche  $x \rightarrow \pm\infty$ )<sup>2</sup>.

Il risultato di questo teorema, combinato con la proprietà discussa al punto 2. consente di concludere che, per un sistema con  $V(x) = V(-x)$ , l'autofunzione del livello fondamentale è pari, quella del I livello eccitato è dispari, quella del II livello fondamentale è pari, e così via, in alternanza.

---

<sup>2</sup>La dimostrazione di questo teorema segue dalle proprietà del Wronskiano che sono discusse in dettaglio in A. Messiah, *op. cit.*

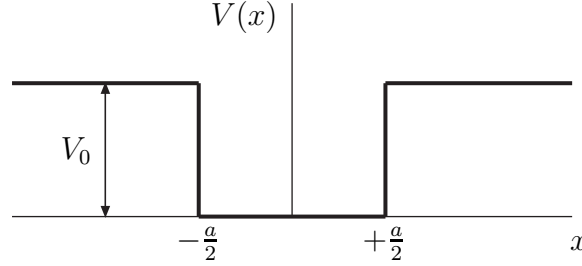


Figura 5.2: Buca di potenziale.

## 5.6 Buca di potenziale

Consideriamo il seguente potenziale

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{per } x \leq -a/2 & \text{(regione I)} \\ 0 & \text{per } |x - a/2| < 0 & \text{(regione II)} \\ V_0 & \text{per } x \geq +a/2 & \text{(regione III)} \end{cases}$$

che rappresenta una **buca di potenziale** di profondità  $V_0$  e larghezza  $a$  (si veda la Figura 5.2). Vogliamo studiare le soluzioni del problema di Schrödinger (5.3) per questo sistema con  $0 < E < V_0$ .

Per quanto visto nelle Sezioni precedenti sappiamo che per questo intervallo di energie:

- lo spettro è **discreto** e **non-degenere**;
- ogni soluzione può essere presa **reale**;
- ogni soluzione ha **parità definita**; in particolare, l'autofunzione del livello fondamentale è pari e non ha nodi, quella del I livello eccitato è dispari ed ha un nodo, ecc.;
- le autofunzioni rappresentano **stati legati**.

La forma di una generica soluzione nelle tre regioni di potenziale costante è la seguente:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= Ae^{\kappa x}, \\ \psi_{II}(x) &= B \cos(kx + \varphi), \\ \psi_{III}(x) &= Ce^{-\kappa x}, \end{aligned} \tag{5.4}$$

dove

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

e vale la relazione

$$(a\kappa)^2 + (ak)^2 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}. \tag{5.5}$$

## 5.6. BUCA DI POTENZIALE

---

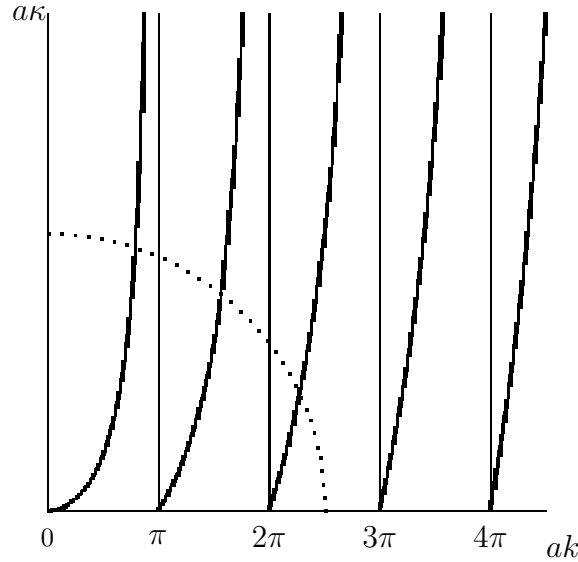


Figura 5.3: Soluzione grafica dell'equazione di Schrödinger agli autovalori per una buca di potenziale unidimensionale di profondità  $V_0$  e larghezza  $a$ . La curva tratteggiata rappresenta un segmento di circonferenza di raggio  $a\sqrt{V_0}$ .

Le condizioni di raccordo della funzione d'onda e della sua derivata prima in  $x = -a/2$  e in  $x = +a/2$ , che equivalgono ad imporre la continuità della derivata logaritmica in questi punti, conducono a

$$\begin{aligned}\kappa &= k \tan\left(\frac{ka}{2} - \varphi\right), \\ \kappa &= k \tan\left(\frac{ka}{2} + \varphi\right),\end{aligned}$$

da cui segue

$$\tan\left(\frac{ka}{2} - \varphi\right) = \tan\left(\frac{ka}{2} + \varphi\right), \quad \longrightarrow \quad \varphi = \frac{n\pi}{2}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Pertanto, i valori di  $E$  per i quali il problema ammette soluzione sono quelli per cui vale

$$\kappa = k \tan\left(\frac{ka}{2} + \frac{n\pi}{2}\right), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (5.6)$$

con il vincolo (5.5). La soluzione del sistema formato dalla (5.6) e dalla (5.5) può essere trovata graficamente, riportando nel I quadrante del piano cartesiano  $(ak, a\kappa)$  il grafico di (5.5), che è quello di una circonferenza, e il grafico di (5.6) che è quello di un ramo della funzione tangente moltiplicata per  $x$  (per  $n$  pari) e della funzione cotangente moltiplicata per  $x$  (per  $n$  dispari). È

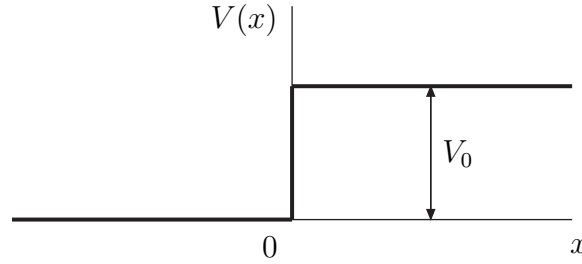


Figura 5.4: Barriera di potenziale.

facile vedere che il sistema ammette sempre la soluzione con  $n = 0$  (quindi  $\varphi = 0$ ) che corrisponde al livello fondamentale, per ogni valore della profondità e della larghezza della buca. L'autofunzione corrispondente, come si può vedere dalla (5.4) ponendo  $\varphi = 0$ , è pari. L'esistenza di altre soluzioni dipende dai valori di  $V_0$  e di  $a$ : in generale, più la buca è larga e profonda, maggiore è il numero di stati legati (si veda la Figura 5.3).

## 5.7 Barriera di potenziale

Consideriamo il seguente potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < 0 \text{ (regione I)} \\ V_0 & \text{per } x \geq 0 \text{ (regione II)} \end{cases}$$

che rappresenta una **barriera di potenziale** di altezza  $V_0$  (si veda la Figura 5.4). Vogliamo studiare le soluzioni del problema di Schrödinger (5.3) per questo sistema con  $0 < E < V_0$  nel limite  $V_0 \rightarrow \infty$ .

Per questo intervallo di energie abbiamo

- spettro **continuo** e **non-degenere**;
- ogni soluzione può essere presa **reale**.

La forma di una generica soluzione nelle due regioni di potenziale costante è la seguente:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A \sin(kx + \varphi), \\ \psi_{II}(x) &= B e^{-\kappa x}, \end{aligned} \tag{5.7}$$

dove

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

Le condizioni di raccordo della funzione d'onda e della sua derivata prima in  $x = 0$  conducono a

$$\begin{cases} A \sin \varphi = B \\ kA \cos \varphi = -\kappa B \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} k \cot \varphi = -\kappa \\ B/A = \sin \varphi. \end{cases}$$

## 5.8. BUCA DI POTENZIALE INFINITA

---

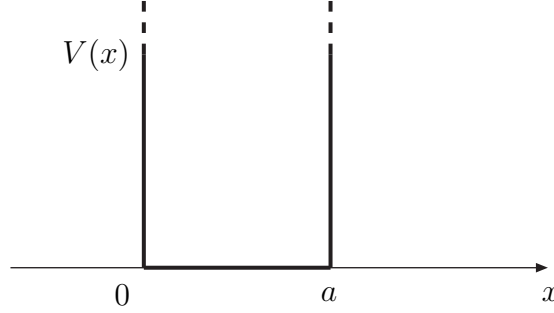


Figura 5.5: Buca di potenziale infinita.

Consideriamo la prima equazione del II sistema:

$$\cot \varphi = -\frac{\kappa}{k} \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty} -\infty \quad \longrightarrow \quad \varphi = 0^-, \pi^- \quad \longrightarrow \quad B = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_{II}(x) = 0 ,$$

cioè, per  $V_0 \rightarrow \infty$  la funzione d'onda nella regione II si annulla (non c'è penetrazione attraverso una barriera infinitamente elevata). Inoltre,

$$\psi'_I(0) = kA \cos \varphi \neq 0 ,$$

quindi in  $x = 0$  la derivata prima della funzione d'onda è discontinua nel limite  $V_0 \rightarrow \infty$ . In definitiva, all'interno della regione II, dove il potenziale è infinito, la funzione d'onda è nulla; nel punto  $x = 0$  la funzione d'onda  $\psi_I$  si annulla, ma la sua derivata prima è diversa da zero.

Queste conclusioni si possono estendere al caso in cui nella regione I il potenziale (regolare) sia di forma qualunque.

## 5.8 Buca di potenziale infinita

Consideriamo il potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } 0 < x < a \\ \infty & \text{altrove} \end{cases}$$

che rappresenta una **buca di potenziale** di profondità infinita (si veda la Figura 5.5). Per questo sistema le soluzioni di (5.3) vanno cercate per valori di  $E$  positivi.

Dobbiamo avere che

- lo spettro è **discreto** e **non-degenere**;
- ogni soluzione può essere presa **reale**;
- ogni soluzione ha **parità definita** sotto riflessione rispetto all'asse  $x = a/2$ ; in particolare, l'autofunzione del livello fondamentale è pari e non ha nodi interni, quella del I livello eccitato è dispari ed ha un nodo interno, ecc..



Per quanto visto nella Sezione precedente, nelle regioni  $x < 0$  e  $x > a$  la funzione d'onda deve essere identicamente nulla. Nella regione  $0 < x < a$  la soluzione è della forma

$$\psi(x) = A \sin(kx + \varphi), \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

A questa soluzione dobbiamo imporre le condizioni di annullamento al bordo:

$$\psi(0) = 0 \quad \longrightarrow \quad \varphi = 0,$$

(l'altra soluzione,  $\varphi = \pi$  ha come effetto di mandare  $\psi(x)$  in  $-\psi(x)$  che non è una soluzione indipendente) e

$$\psi(a) = 0 \quad \longrightarrow \quad ka = n\pi \quad \longrightarrow \quad E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Si osservi che lo spettro dei livelli energetici coincide con quello ottenuto dalla regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld della antica teoria dei quanti. Per grandi numeri quantici,  $n \rightarrow \infty$ , la separazione *relativa* tra i livelli tende a zero e si recuperano le predizioni della meccanica classica.

Le autofunzioni hanno la forma

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & \text{per } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{altrove,} \end{cases} \quad (5.8)$$

che soddisfano le proprietà di parità ed il teorema dell'oscillazione.

## 5.9 Coefficiente di trasmissione

In questa Sezione e nella successiva ci occuperemo del problema della riflessione e della trasmissione attraverso una barriera di potenziale. A titolo illustrativo, consideriamo il caso di un potenziale  $V(x)$  che cresce in modo monotono in  $(-\infty, +\infty)$  tra zero ed un valore asintotico  $V_0$  (si veda la Figura 5.6).

In meccanica classica, una particella con energia totale  $E > V_0$  attraversa la barriera di potenziale, quindi non c'è riflessione. Ci proponiamo di discutere cosa succede in meccanica quantistica. Per farlo, consideriamo il problema di Schrödinger (5.3) per  $E > V_0$ , limitandoci a discutere il comportamento asintotico delle soluzioni per  $x \rightarrow \pm\infty$ . Innanzitutto, osserviamo che in queste condizioni lo spettro è **continuo** e doppiamente **degenere**, cioè per ogni valore di  $E$  ci sono due soluzioni indipendenti. Una delle soluzioni indipendenti ha la forma asintotica seguente:

$$\begin{aligned} x \rightarrow +\infty, \quad \psi &\sim A e^{ik_2 x}, & k_2 &= \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}, \\ x \rightarrow -\infty, \quad \psi &\sim e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}, & k_1 &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \end{aligned}$$

Questa soluzione “corrisponde” al caso di una particella in moto da sinistra verso destra: per  $x \rightarrow -\infty$  abbiamo sia l'onda progressiva, che rappresenta l'**onda incidente**, sia quella regressiva, che

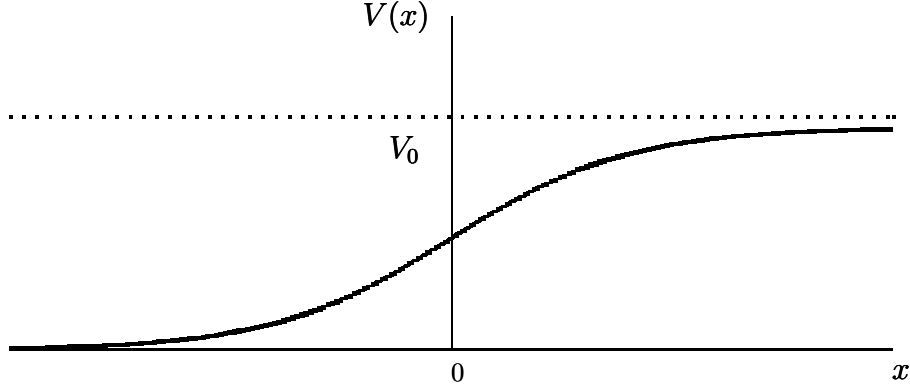


Figura 5.6: Esempio di barriera di potenziale.

rappresenta l'**onda riflessa**; per  $x \rightarrow +\infty$  abbiamo solo l'onda progressiva, che rappresenta l'**onda trasmessa**<sup>3</sup>.

A ciascuno dei termini della soluzione possiamo associare un valore per la corrente  $J$ , definita in (4.12),

$$\begin{array}{lll} \text{onda incidente} & e^{ik_1x} & J = \frac{\hbar k_1}{m}, \\ \text{onda riflessa} & B e^{-ik_1x} & J = -\frac{\hbar k_1}{m}|B|^2, \\ \text{onda trasmessa} & A e^{ik_2x} & J = \frac{\hbar k_2}{m}|A|^2, \end{array}$$

che giustificano le seguenti definizioni:

$$\begin{array}{ll} \text{coefficiente di trasmissione} & T \equiv \frac{k_2}{k_1}|A|^2, \\ \text{coefficiente di riflessione} & R \equiv |B|^2 = 1 - T, \end{array}$$

dove l'ultima uguaglianza segue dalla conservazione della corrente,  $J'(x) = 0$  (si veda la Sezione 4.7).

Per il caso  $0 < E < V_0$ , la forma asintotica della soluzione è la stessa che nel caso  $E > V_0$ , con la sostituzione

$$k_2 \rightarrow i\kappa_2, \quad \kappa_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

Non c'è onda trasmessa, ma decrescita esponenziale per  $x \rightarrow +\infty$ , quindi **riflessione totale**.

Si può dimostrare che per  $0 < E < V_0$  il coefficiente di riflessione non dipende dal verso dell'onda incidente. Per la dimostrazione di questo risultato e per una discussione più generale del problema della trasmissione e della riflessione, si rimanda a L.D. Landau, E.M. Lifshits, *op. cit.*.

<sup>3</sup>Queste affermazioni sono improprie, dal momento che si riferiscono ad onde stazionarie. La discussione del problema in termini di trasmissione e riflessione non può prescindere dallo studio del moto di un pacchetto d'onde localizzato (si veda A. Messiah, *op. cit.*). Tuttavia, per semplicità e per aiutare l'intuizione, continueremo ad esprimerci in questi termini.

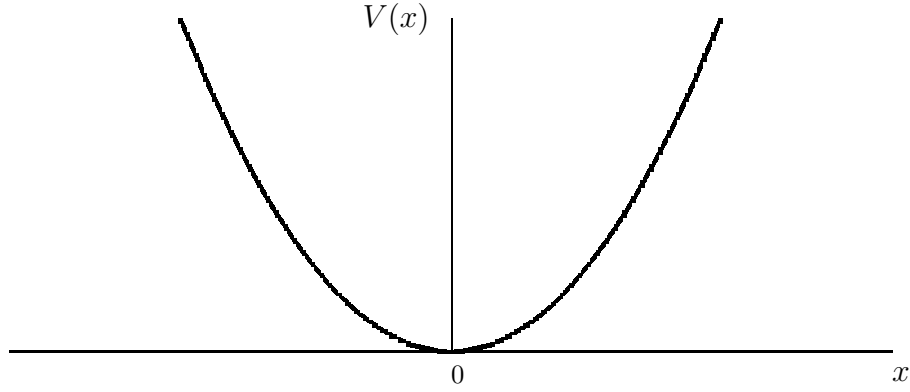


Figura 5.7: Potenziale armonico.

## 5.10 L'oscillatore armonico unidimensionale

In questa Sezione ci occuperemo della soluzione del problema (5.3) nel caso di potenziale armonico,

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 .$$

Dalla discussione generale sulle proprietà del moto unidimensionale ci aspettiamo

- soluzioni solo per  $E > 0$ ;
- spettro **discreto** e **non-degenere**;
- soluzioni **reali**;
- **parità definita**; in particolare, l'autofunzione del livello fondamentale è pari e non ha nodi, quella del I livello eccitato è dispari ed ha un nodo, ecc..

L'equazione differenziale da risolvere è

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) = 0 . \quad (5.9)$$

Passando alla variabile  $\xi = x/x_0$ , dove  $x_0$  è la scala di lunghezza fondamentale del sistema in esame,

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} ,$$

l'equazione agli autovalori prende la forma

$$\psi''(\xi) + (\lambda - \xi^2)\psi(\xi) = 0 , \quad \lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} . \quad (5.10)$$

### 5.10. L'OSCILLATORE ARMONICO UNIDIMENSIONALE

---

Poiché per grandi valori di  $|\xi|$  questa equazione ammette una soluzione della forma  $\exp(-\xi^2/2)$  (l'altra soluzione,  $\exp(+\xi^2/2)$ , non è accettabile perché illimitata), poniamo

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

e troviamo che  $u(\xi)$  deve essere soluzione dell'equazione

$$u''(\xi) - 2\xi u'(\xi) + (\lambda - 1)u(\xi) = 0 . \quad (5.11)$$

Cerchiamo soluzioni di questa equazione nella forma di serie di potenze di  $\xi$ ,

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n . \quad (5.12)$$

Sostituendo questa espressione nella (5.11), troviamo

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[ (n+1)(n+2)a_{n+2} + (\lambda - 1 - 2n)a_n \right] \xi^n = 0 ,$$

da cui segue la relazione ricorsiva

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)} a_n . \quad (5.13)$$

Per effetto di questa relazione tutti i coefficienti di ordine pari sono legati tra di loro e lo stesso vale per i coefficienti di ordine dispari. Per ogni valore di  $\lambda$  (e quindi di  $E$ ) abbiamo così due soluzioni indipendenti: quella ottenuta dalla relazione (5.13) partendo da

$$a_0 \neq 0 , \quad a_1 = 0 ,$$

che contiene solo potenze pari ed è quindi una funzione **pari**, e quella ottenuta partendo da

$$a_0 = 0 , \quad a_1 \neq 0 ,$$

che contiene solo potenze dispari ed è quindi una funzione **dispari**. La soluzione più generale sarà una combinazione lineare di queste due.

Tuttavia, non tutte le soluzioni trovate sono accettabili. In particolare, se **tutti** i termini della serie (5.12) fossero mantenuti, otterremmo soluzioni che divergono per  $|\xi| \rightarrow \infty$  in modo da rendere inaccettabile la soluzione completa per  $\psi(\xi)$ . Infatti, nel limite  $n \rightarrow \infty$ , abbiamo

$$a_{n+2} \simeq \frac{a_n}{(n/2)} ,$$

da cui segue

$$a_n \sim \frac{C}{(n/2)!}$$

e, quindi,

$$\sum_n a_n \xi^n \sim C \sum_n \frac{(\xi^2)^{n/2}}{(n/2)!} \sim C e^{\xi^2} .$$

Danno luogo a soluzioni accettabili solo quelle serie per le quali tutti i termini da un certo punto in poi si annullano, cioè le *serie troncate* o polinomi. Condizione necessaria e sufficiente di troncamento della serie è che per un certo  $n$  si abbia  $a_{n+2} = 0$ . Ciò succede solo quando

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

Ancora una volta vediamo che la discretizzazione dei livelli energetici segue dalla restrizione di limitatezza asintotica imposta alle soluzioni del problema agli autovalori.

La costruzione delle autofunzioni è semplice. L'autofunzione  $\psi_0(\xi)$  del livello fondamentale ( $n = 0$ ) è quella per cui la serie (pari) di  $u(\xi)$  si annulla dal termine  $a_2$  in poi, quindi contiene solo il termine  $a_0$ . Essa è quindi della forma

$$\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2} .$$

Come si vede, si tratta di una gaussiana centrata nell'origine, quindi di una funzione pari, senza nodi e per la quale sappiamo già che la relazione di indeterminazione è realizzata al minimo. L'autofunzione  $\psi_1(\xi)$  del I livello eccitato ( $n = 1$ ) è quella per cui la serie (dispari) di  $u(\xi)$  si annulla dal termine  $a_3$  in poi, quindi contiene solo il termine  $a_1$ . Essa è quindi della forma

$$\psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\xi^2/2} .$$

Si tratta evidentemente di una funzione dispari, con un nodo. La forma generale delle autofunzioni  $\psi_n(\xi)$  è la seguente:

$$\psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} , \quad (5.14)$$

dove  $C_n$  sono le costanti di normalizzazione, fissate dalla condizione

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1 ,$$

e gli  $H_n(\xi)$  sono i cosiddetti **polinomi di Hermite**, definiti da

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} .$$

A titolo di esempio, riportiamo i primi polinomi di Hermite:

$$H_0 = 1 , \quad H_1 = 2\xi , \quad H_2 = 4\xi^2 - 2 , \quad H_3 = 8\xi^3 - 12\xi , \quad H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 .$$

La condizione di ortogonalità tra le  $\psi_n$  è assicurata dal fatto che

$$(H_n, H_m) = \int_{-\infty}^{+\infty} H_n^*(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \pi^{1/2} 2^n n! \delta_{nm} .$$

Da questa proprietà segue anche che la condizione di normalizzazione ad uno per le autofunzioni  $\psi_n(x)$  fissa

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} .$$

## 5.11 Sistemi in tre dimensioni con Hamiltoniane separabili

La soluzione del problema di Schrödinger indipendente dal tempo nel caso di un sistema in tre dimensioni si può ricondurre a quella di sistemi unidimensionali nel caso di Hamiltoniana della forma

$$H(x, y, z) = H_1(x) + H_2(y) + H_3(z) .$$

Ammettendo di conoscere tutte le autofunzioni  $\{\psi_{E_1}(x)\}$  di  $H_1(x)$ ,  $\{\psi_{E_2}(y)\}$  di  $H_2(y)$ ,  $\{\psi_{E_3}(z)\}$  di  $H_3(z)$  ed i loro rispettivi autovalori (eventualmente degeneri)  $\{E_1\}$ ,  $\{E_2\}$ ,  $\{E_3\}$ , il problema agli autovalori

$$H(x, y, z)\psi_E(x, y, z) = \left(H_1(x) + H_2(y) + H_3(z)\right)\psi_E(x, y, z) = E\psi_E(x, y, z) \quad (5.15)$$

ammette come soluzioni tutti e solo i prodotti di autofunzioni

$$\psi_E(x, y, z) = \psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(y)\psi_{E_3}(z)$$

con autovalore  $E = E_1 + E_2 + E_3$ , come si può facilmente verificare.

## 5.12 Esercitazioni

### 5.12.1 Sparpagliamento di un pacchetto d'onde gaussiano

La funzione d'onda di una particella libera, in moto unidimensionale, è data al tempo  $t = 0$  da

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{\sigma}} e^{-x^2/(2\sigma^2)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p, 0) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp ,$$

dove

$$\varphi(p, 0) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar}} e^{-p^2\sigma^2/(2\hbar^2)}$$

è la corrispondente funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi. La funzione d'onda  $\psi(x, 0)$  (e quindi la funzione d'onda  $\varphi(p, 0)$ ) è normalizzata ad uno.

Poiché  $E = p^2/(2m)$ , per effetto dell'evoluzione temporale ogni componente ad impulso (e quindi energia) definita acquista il fattore di fase

$$e^{-iE\frac{t}{\hbar}} = e^{-i\frac{p^2}{2m}\frac{t}{\hbar}} ,$$

quindi

$$\begin{aligned} \varphi(p, t) &= \varphi(p, 0) e^{-i\frac{p^2}{2m}\frac{t}{\hbar}} , \\ \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p, t) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p, 0) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p^2}{2m}\frac{t}{\hbar}} dp . \end{aligned}$$

È facile verificare (si veda anche l'Appendice generale D) che

$$\langle x \rangle_0 = \langle x \rangle_t = \langle p \rangle_0 = \langle p \rangle_t = 0 ,$$

$$(\Delta x^2)_{t=0} = \langle x^2 \rangle_0 = \frac{\sigma^2}{2},$$

$$(\Delta p^2)_{t=0} = \langle p^2 \rangle_0 = (\Delta p^2)_t = \langle p^2 \rangle_t = \frac{\hbar^2}{2\sigma^2},$$

da cui segue che

$$(\Delta x^2)_{t=0}(\Delta p^2)_{t=0} = \frac{\hbar^2}{4},$$

cioè un pacchetto d'onde gaussiano ha la minima indeterminazione possibile.

Per effetto dell'evoluzione temporale, la “larghezza” della funzione d'onda nello spazio degli impulsi  $\Delta p^2$  rimane invariata. Ciò è ragionevole, poiché  $\varphi(p, 0)$  acquista per effetto dell'evoluzione temporale solo un fattore di fase e quindi il suo modulo quadro è costante nel tempo. La “larghezza” della funzione d'onda nello spazio delle coordinate  $\Delta x^2$ , invece aumenta. In altri termini, la funzione d'onda  $\psi(x, t)$  continua a descrivere una particella la cui posizione media è  $\langle x \rangle_t = \langle x \rangle_0 = 0$ , ma la larghezza della distribuzione di probabilità intorno al valor medio aumenta col passare del tempo (“sparpagliamento”).

Calcoliamo ora  $\Delta x^2$  ad un istante  $t > 0$  generico. Poiché  $\langle x \rangle_t = 0$ , ciò equivale a calcolare  $\langle x^2 \rangle_t$ . È conveniente lavorare con la funzione d'onda  $\varphi(p, t)$ ; abbiamo quindi

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_t &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p, t)^* \left( i\hbar \frac{d}{dp} \right)^2 \varphi(p, t) dp \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar}} e^{-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2}} e^{+i\frac{p^2}{2m} \frac{t}{\hbar}} \right] \left( i\hbar \frac{d}{dp} \right)^2 \left[ \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar}} e^{-\frac{p^2 \sigma^2}{2\hbar^2}} e^{-i\frac{p^2}{2m} \frac{t}{\hbar}} \right] dp. \end{aligned}$$

Per semplificare la notazione, facciamo le seguenti posizioni:

$$\frac{\sigma^2}{2\hbar^2} \equiv A, \quad \frac{t}{2m\hbar} \equiv B.$$

Calcoliamo prima la derivata seconda rispetto a  $p$ ,

$$\frac{d^2}{dp^2} e^{-(A+iB)p^2} = -2(A+iB)[1 - 2p^2(A+iB)]e^{-(A+iB)p^2},$$

cosicché si ha

$$\begin{aligned} (\Delta x^2)_t = \langle x^2 \rangle_t &= 2\hbar^2(A+iB) \sqrt{\frac{2A}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} [1 - 2p^2(A+iB)] e^{-2Ap^2} dp \\ &= \hbar^2 A \left( 1 + \frac{B^2}{A^2} \right) = \frac{\sigma^2}{2} \left( 1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \sigma^4} \right), \end{aligned}$$

dove si è fatto uso degli integrali (D.23) e (D.24). Abbiamo trovato, quindi, quanto anticipato, cioè che  $\Delta x^2$  per un pacchetto gaussiano a  $t = 0$  cresce nel tempo. La relazione di indeterminazione al tempo  $t$  diventa allora

$$(\Delta x^2)_t (\Delta p^2)_t = \frac{\hbar^2}{4} \left( 1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \sigma^4} \right)$$

## 5.12. ESERCITAZIONI

---

che è maggiore di  $\hbar^2/4$  per  $t > 0$ . Poiché per  $t > 0$  l'indeterminazione posizione-impulso non è più quella minima ed osservando che il pacchetto d'onde gaussiano è l'unico per il quale essa lo è, si deve concludere che, per effetto dell'evoluzione temporale, un pacchetto gaussiano a  $t = 0$  non lo è più per  $t > 0$ . Si lascia per esercizio la determinazione della forma del pacchetto d'onde  $\psi(x, t)$ .

Lo studio dell'evoluzione di un pacchetto d'onde gaussiano che al tempo  $t = 0$  sia della forma più generale

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{\sigma}} e^{-x^2/(2\sigma^2)} e^{ip_0 x/\hbar}$$

viene lasciato per esercizio.

### 5.12.2 Particella in buca unidimensionale infinita

Lo stato di una particella di massa  $m$  in una buca di potenziale unidimensionale infinita con estremi in  $x = 0$  e  $x = a$  (si veda la Figura 5.5) sia descritto al tempo  $t = 0$  dalla funzione d'onda

$$\psi(x) = \begin{cases} C & \text{per } a/3 \leq x \leq 2a/3 \\ 0 & \text{altrove.} \end{cases}$$

La condizione di normalizzazione per  $\psi(x)$  impone

$$C = \sqrt{\frac{3}{a}}.$$

La funzione d'onda  $\psi(x)$  può essere scritta come combinazione lineare delle autofunzioni dell'energia (5.8), cioè

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x),$$

con

$$\begin{aligned} c_n = (\psi_n, \psi) &= \int_{a/3}^{2a/3} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sqrt{\frac{3}{a}} dx = \frac{\sqrt{6}}{n\pi} \left[ \cos\left(\frac{n\pi}{3}\right) - \cos\left(\frac{2n\pi}{3}\right) \right] \\ &= \frac{2\sqrt{6}}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{n\pi}{6}\right). \end{aligned}$$

I coefficienti  $c_n$  con  $n$  pari sono nulli, come deve essere, poiché la  $\psi(x)$  è simmetrica rispetto all'asse  $x = a/2$  ed il suo sviluppo nelle autofunzioni  $\psi_n$  deve contenere solo quelle con la stessa proprietà, cioè quelle con  $n = 1, 3, 5, \dots$ . In definitiva, possiamo scrivere

$$\psi(x) = \sum_{n=1,3,5,\dots} \frac{2\sqrt{6}}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{n\pi}{6}\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (5.16)$$

nell'intervallo  $[0, a]$ , mentre  $\psi(x) = 0$  altrove.

Bisogna osservare che la funzione d'onda  $\psi(x)$  presenta discontinuità di I specie in  $x = a/3$  ed in  $x = 2a/3$ , mentre le  $\psi_n(x)$  sono funzioni continue e derivabili nell'intervallo  $(0, a)$ . La serie al II membro



dell'Eq. (5.16) converge *puntualmente* a  $\psi(x)$  per ogni  $x$  in cui  $\psi(x)$  è continua. Nei punti di discontinuità di  $\psi$  la convergenza è alla media tra il limite destro e il limite sinistro di questa funzione, cioè a  $1/2\sqrt{3/a}$ .

Ad un generico istante di tempo  $t > 0$ , la funzione d'onda  $\psi(x)$  sarà evoluta nella funzione data nell'intervallo  $[0, a]$  da

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1,3,5,\dots} \frac{2\sqrt{6}}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{n\pi}{6}\right) e^{-iE_n t/\hbar} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right),$$

dove  $E_n$  sono gli autovalori dell'energia per il sistema in esame,

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}.$$

La probabilità che una misura di energia sullo stato descritto da  $\psi(x, t)$  dia uno degli autovalori  $E_n$  è data da

$$|c_n|^2 = \begin{cases} 24/(n^2\pi^2) \sin^2(n\pi/6) & \text{per } n \text{ dispari} \\ 0 & \text{per } n \text{ pari.} \end{cases}$$

È immediato vedere che questa probabilità è massima per  $n = 1$ , per cui vale  $6/\pi^2 \simeq 60.79\%$ . Poiché sia la  $\psi(x)$ , sia le autofunzioni  $\psi_n(x)$  sono normalizzate, deve valere

$$\sum_{n=1,3,5,\dots} \frac{24}{n^2\pi^2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{6}\right) = 1.$$

Se si effettua sullo stato  $\psi$  una misura di energia e come risultato dell'operazione si ottiene il valore più probabile,  $E_1$ , *dopo* l'operazione di misura lo stato della particella sarà un nuovo stato  $\Psi$ , descritto dalla funzione d'onda (normalizzata)  $\Psi(x) = \psi_1(x)$ .

### 5.12.3 Riflessione da barriera di potenziale rettangolare

Consideriamo il potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < 0 \quad (\text{regione I}) \\ V_0 & \text{per } x \geq 0 \quad (\text{regione II}) \end{cases}$$

che rappresenta una **barriera di potenziale rettangolare** (si veda la Figura 5.4). Vogliamo determinare il coefficiente di riflessione per il caso di onde con energia  $E > V_0$ , incidenti da sinistra verso destra.

La soluzione cercata è della forma

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \\ \psi_{II}(x) &= Ae^{ik_2x}, \end{aligned}$$

con

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}.$$

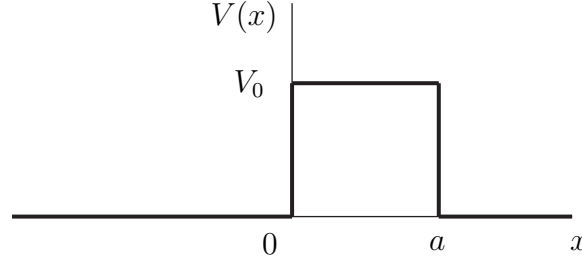


Figura 5.8: Potenziale “a dente”.

Imponendo le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima in  $x = 0$  troviamo

$$A = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \quad B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2},$$

da cui otteniamo per il coefficiente di riflessione

$$R = |B|^2 = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2.$$

Abbiamo i seguenti casi limite:

$$\begin{aligned} E \rightarrow V_0 : \quad & R \rightarrow 1, \\ E \rightarrow \infty : \quad & R \simeq \left( \frac{V_0}{4E} \right)^2 \rightarrow 0. \end{aligned}$$

#### 5.12.4 Trasmissione attraverso una barriera di potenziale “a dente”

Consideriamo il potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < 0 & \text{(regione I)} \\ V_0 & \text{per } 0 \leq x \leq a & \text{(regione II)} \\ 0 & \text{per } x > a & \text{(regione III)} \end{cases}$$

che rappresenta una **barriera di potenziale “a dente”** (si veda la Figura 5.8). Vogliamo determinare il coefficiente di riflessione per (a) onde con energia  $E > V_0$  e (b) onde con energia  $E < V_0$ , incidenti da sinistra verso destra.

(a) La soluzione cercata è della forma

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= e^{ik_1x} + Ae^{-ik_1x}, \\ \psi_{II}(x) &= Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x}, \\ \psi_{III}(x) &= Ce^{ik_1x}, \end{aligned}$$

con

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}.$$

Imponendo le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima in  $x = 0$ , abbiamo

$$1 + A = B + B' , \quad k_1(1 - A) = k_2(B - B') ,$$

mentre dalle analoghe condizioni in  $x = a$  troviamo

$$Be^{ik_2a} + B'e^{-ik_2a} = Ce^{ik_1a} , \quad k_2(Be^{ik_2a} - B'e^{-ik_2a}) = k_1Ce^{ik_1a} .$$

Da queste quattro equazioni, troviamo per il coefficiente di trasmissione

$$T = |C|^2 = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(ak_2) + 4k_1^2k_2^2} .$$

Questo risultato, ottenuto per onde di energia  $E > V_0$ , vale anche nel caso di buca di potenziale di profondità  $V_0$  ed onde di energia  $E > 0$ , pur di sostituire  $V_0$  con  $-V_0$ .

(b) Questo caso è molto interessante dal punto di vista fisico: mentre in meccanica classica non è possibile l'attraversamento di una barriera di potenziale di altezza  $V_0$  da parte di particelle con energia  $E < V_0$ , a livello quantistico esiste una probabilità non nulla che ciò avvenga. Il coefficiente di trasmissione rappresenta proprio la frazione di particelle di un fascio omogeneo che riesce ad attraversare la barriera di potenziale.

Il calcolo procede esattamente come per il caso (a), con la sola differenza che  $ik_2$  è sostituito da  $\kappa_2$ , con

$$\kappa_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} ,$$

pertanto il coefficiente di trasmissione vale

$$T = \frac{4k_1^2\kappa_2^2}{(k_1^2 + \kappa_2^2)^2 \sinh^2(a\kappa_2) + 4k_1^2\kappa_2^2} .$$

## Esercizi

1. Stimare il livello fondamentale per una particella in una buca di potenziale finita (Sezione 5.6) usando il principio di indeterminazione di Heisenberg.

[Suggerimento: si osservi che la larghezza tipica della funzione d'onda dello stato fondamentale è in generale più grande della larghezza della buca di potenziale.]

2. Determinare lo spettro energetico per il sistema di una particella in moto unidimensionale soggetta ad un potenziale di tipo  $V(x) = -k \delta(x)$ , usando il fatto che questo potenziale può essere ottenuto da quello di una buca di potenziale finita (Sezione 5.6) di profondità  $V_0 = k/a$ , facendo tendere a zero la larghezza  $a$  della buca.
3. Confrontare la probabilità *quantistica* di trovare una particella di energia  $E_n$  nel tratto  $(x, x + dx)$  con la probabilità *classica* che una particella della stessa energia si trovi nello stesso tratto nei due casi seguenti:

## 5. BIBLIOGRAFIA

---

- particella confinata da una buca di potenziale infinita unidimensionale;

- particella soggetta a potenziale armonico unidimensionale.

Si discuta in particolare il limite di grandi numeri quantici.

4. Risolvere l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per l'oscillatore armonico unidimensionale *nella rappresentazione degli impulsi*.

5. Assumendo che l'espressione per  $(\Delta x^2)_t$  trovata nel caso dell'evoluzione libera di un pacchetto gaussiano (Esercitazione 5.12.1) abbia validità generale, stimare il tempo tipico di sparpagliamento per i seguenti sistemi:

- elettrone dell'atomo di idrogeno;

- sistema macroscopico di estensione tipica  $\sigma \sim 1$  mm e massa  $m \sim 1$  mg.

6. Stimare il coefficiente di trasmissione  $T$  per l'attraversamento di una barriera di potenziale (Esercitazione 5.12.4) nei casi seguenti:

- automobile di massa  $m \sim 1000$  kg in viaggio con velocità  $v \sim 100$  km/h che incontra una collina di altezza  $a \sim 50$  m e larghezza  $l \sim 100$  m;

- elettrone con energia cinetica dell'ordine di 10 eV, cioè dell'ordine delle energie di ionizzazione atomiche, soggetto ad una barriera di potenziale di larghezza  $a \sim 10^{-8}$  cm (tipica scala di lunghezza atomica) e di altezza  $V_0 \sim 15$  eV.

7. Trovare per quali valori dell'energia  $E$  si ha trasmissione completa (coefficiente di trasmissione  $T=1$ ) in presenza di una barriera di potenziale "a dente" di larghezza  $a$  ed altezza  $V_0$  oppure di una buca di potenziale di larghezza  $a$  e profondità  $V_0$  (Esercitazione 5.12.4, caso (a)).

Questi valori dell'energia sono talvolta chiamati "livelli virtuali" e gli stati corrispondenti sono detti "stati virtuali".

Verificare che la separazione tra due livelli virtuali successivi è uguale a quella tra i livelli di una buca di potenziale di profondità infinita.

## Bibliografia

- Per tutto il Capitolo, tranne l'oscillatore armonico unidimensionale:  
L.D. Landau, E.M. Lifshits, *Meccanica quantistica non relativistica*, Editori Riuniti;  
A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod.
- Per l'oscillatore armonico unidimensionale:  
D. Griffiths, *Introduzione alla meccanica quantistica*, Casa Editrice Ambrosiana;  
E. Persico, *Fondamenti della meccanica atomica*, Zanichelli.

# Capitolo 6

## Momento angolare orbitale

### 6.1 Relazioni di commutazione e operatori di salita e di discesa

In meccanica classica, il momento angolare orbitale di una particella è definito come  $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ , le cui componenti cartesiane sono

$$\begin{aligned}l_x &= yp_z - zp_y , \\l_y &= zp_x - xp_z , \\l_z &= xp_y - yp_x .\end{aligned}\tag{6.1}$$

In meccanica quantistica il momento angolare è l'*operatore* definito come in (6.1), in termini degli *operatori* posizione ed impulso. Nella rappresentazione delle coordinate, l'operatore momento angolare prende la forma

$$\vec{l} = \vec{r} \times (-i\hbar \vec{\nabla}) ,$$

o, in componenti,

$$\begin{aligned}l_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) , \\l_y &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) , \\l_z &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) .\end{aligned}\tag{6.2}$$

È facile dimostrare, e lo lasciamo per esercizio al lettore, che il momento angolare orbitale è un **operatore hermitiano**. Le sue componenti **non** commutano tra di loro, infatti, usando le (3.18) e le proprietà del commutatore elencate alla fine della Sezione 3.12, è facile dimostrare che

$$\begin{aligned}[l_x, l_y] &= i\hbar l_z , \\[l_y, l_z] &= i\hbar l_x , \\[l_z, l_x] &= i\hbar l_y .\end{aligned}\tag{6.3}$$

## 6.1. RELAZIONI DI COMMUTAZIONE E OPERATORI DI SALITA E DI DISCESA

Le regole di commutazione (6.3) *definiscono* un momento angolare. Tutte le proprietà di un momento angolare seguono da esse. Per sottolineare il carattere generale di queste proprietà, prescindendo dalla loro applicazione al caso del momento angolare orbitale, useremo il simbolo  $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z)$  per indicare un momento angolare.

La prima proprietà che segue dalle regole di commutazione (6.3) è l'esistenza di un operatore

$$\vec{J}^2 \equiv J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 ,$$

che commuta con ciascuna delle componenti  $J_i$ :

$$[\vec{J}^2, J_i] = 0 .$$

Verifichiamo questa proprietà nel caso  $i = 3$ :

$$\begin{aligned} [J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z, J_z] &= J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_y, J_z] + [J_y, J_z] J_y \\ &= J_x (-i\hbar J_y) + (-i\hbar J_y) J_x + J_y (i\hbar J_x) + (i\hbar J_x) J_y = 0 . \end{aligned}$$

Una conseguenza importante di questa proprietà è che ciascuna delle coppie di operatori  $\{\vec{J}^2, J_x\}$ ,  $\{\vec{J}^2, J_y\}$ ,  $\{\vec{J}^2, J_z\}$  forma un insieme completo di osservabili compatibili, che ammettono, quindi, una base comune di autofunzioni.

Convenzionalmente, si sceglie come base dello spazio degli stati di momento angolare di un sistema, la base comune di autostati di  $\{\vec{J}^2, J_z\}$ . Ci proponiamo ora di determinare queste autofunzioni ed i relativi autovalori.

Chiamiamo  $\psi_{a,b}$  un autostato (simultaneo) di  $\vec{J}^2$  e di  $J_z$  con autovalori, rispettivamente,  $a$  e  $b$ , cioè

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 \psi_{a,b} &= a \psi_{a,b} , \\ J_z \psi_{a,b} &= b \psi_{a,b} . \end{aligned}$$

È conveniente introdurre gli operatori di **salita** e **discesa**

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm i J_y , \tag{6.4}$$

che sono l'uno l'hermitiano coniugato dell'altro,

$$J_+^\dagger = J_- , \quad J_-^\dagger = J_+ .$$

Questi operatori soddisfano le regole di commutazione

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z , \quad [J_{\pm}, J_z] = \mp \hbar J_{\pm} , \quad [\vec{J}^2, J_{\pm}] = 0 . \tag{6.5}$$

Il motivo per il quale gli operatori  $J_{\pm}$  prendono il nome di operatori di salita e di discesa è chiaro se ne consideriamo l'effetto su un autostato  $\psi_{a,b}$ :

$$J_z (J_{\pm} \psi_{a,b}) = (J_z J_{\pm}) \psi_{a,b} = ([J_z, J_{\pm}] + J_{\pm} J_z) \psi_{a,b} = (\pm \hbar + b) (J_{\pm} \psi_{a,b}) .$$

Questo risultato significa che se si applica  $J_+$  o  $J_-$  ad un autostato di  $J_z$  con autovalore  $b$ , l'effetto è di ottenere un nuovo autostato di  $J_z$  con autovalore aumentato o diminuito di  $\hbar$ . In altri termini, l'applicazione di  $J_+$  o  $J_-$  comporta un passo  $\hbar$  in salita o in discesa nella scala degli autovalori di  $J_z$ . Invece, poiché

$$\vec{J}^2 (J_{\pm} \psi_{a,b}) = (\vec{J}^2 J_{\pm}) \psi_{a,b} = (J_{\pm} \vec{J}^2) \psi_{a,b} = a (J_{\pm} \psi_{a,b}) ,$$

$J_{\pm} \psi_{a,b}$  continua a rimanere autostato di  $\vec{J}^2$  con autovalore  $a$ .

## 6.2 Autovalori e autostati del momento angolare

Nella Sezione precedente abbiamo visto che, applicando  $n$  volte  $J_{\pm}$  ad un autostato simultaneo  $\psi_{a,b}$  di  $\vec{J}^2$  e  $J_z$ , si ottiene un autostato di  $J_z$  con autovalore aumentato o diminuito di  $n\hbar$ . Tuttavia, questo procedimento non può essere applicato indefinitamente, perché per ogni dato autovalore  $a$  di  $\vec{J}^2$  esiste un limite superiore (ed uno inferiore) per l'autovalore  $b$  di  $J_z$ . Ciò segue dal fatto che  $\vec{J}^2 - J_z^2 = J_x^2 + J_y^2$  è un operatore definito positivo e quindi

$$(\psi_{a,b}, (\vec{J}^2 - J_z^2)\psi_{a,b}) = (a - b^2) \geq 0 ,$$

dove abbiamo supposto che gli autostati  $\psi_{a,b}$  siano normalizzati ad uno. Questa condizione indica che il valore assoluto di  $b$  non può crescere indefinitamente. Quindi, deve esistere un valore massimo di  $b$ , detto  $\bar{b}$ , tale che

$$J_+\psi_{a,\bar{b}} = 0 ,$$

con  $\psi_{a,\bar{b}}$  stato non-nullo. Da questa segue che

$$J_-J_+\psi_{a,\bar{b}} = 0 ,$$

ma, poiché

$$J_-J_+ = J_x^2 + J_y^2 - i(J_yJ_x - J_xJ_y) = \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z ,$$

abbiamo che

$$(\vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)\psi_{a,\bar{b}} = (a - \bar{b}^2 - \hbar\bar{b})\psi_{a,\bar{b}} = 0 ,$$

cioè

$$a - \bar{b}^2 - \hbar\bar{b} = 0 , \tag{6.6}$$

poiché  $\psi_{a,\bar{b}}$  non è nullo. In modo analogo, deve esistere un valore minimo di  $b$ , detto  $\underline{b}$ , tale che

$$J_-\psi_{a,\underline{b}} = 0 ,$$

con  $\psi_{a,\underline{b}}$  stato non-nullo. Da questa segue che

$$J_+J_-\psi_{a,\underline{b}} = 0 ,$$

ma, poiché

$$J_+J_- = \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z ,$$

abbiamo che

$$(\vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z)\psi_{a,\underline{b}} = (a - \underline{b}^2 + \hbar\underline{b})\psi_{a,\underline{b}} = 0 ,$$

cioè

$$a - \underline{b}^2 + \hbar\underline{b} = 0 , \tag{6.7}$$

poiché  $\psi_{a,\underline{b}}$  non è nullo. Confrontando (6.6) e (6.7) si deduce  $\bar{b} = -\underline{b}$ , con  $\bar{b}$  positivo, quindi

$$-\bar{b} \leq b \leq \bar{b} .$$

## 6.2. AUTOVALORI E AUTOSTATI DEL MOMENTO ANGOLARE

---

Inoltre, deve essere possibile raggiungere  $\psi_{a,\bar{b}}$  applicando un numero *finito* di volte  $J_+$  a  $\psi_{a,\underline{b}}$ , perciò si deve avere

$$\bar{b} = \underline{b} + n\hbar ,$$

con  $n$  intero. Da questo deduciamo che

$$\bar{b} = \frac{n\hbar}{2} .$$

Detto  $j \equiv \bar{b}/\hbar$ , abbiamo  $j = n/2$ , quindi il massimo autovalore di  $J_z$  è  $j\hbar$ , con  $j$  intero o semi-intero. Dall'Eq. (6.6) troviamo

$$a = \hbar^2 j(j+1) .$$

Definiamo anche  $b \equiv m\hbar$ ; abbiamo allora che, se  $j$  è un intero, tutti i valori di  $m$  sono interi, se  $j$  è un semi-intero, tutti i valori di  $m$  sono semi-interi. Per un dato  $j$ , i valori di  $m$  permessi sono

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (6.8)$$

che fa in tutto  $(2j+1)$  autovalori.

Invece di utilizzare la notazione  $\psi_{a,b}$ , indichiamo gli autostati simultanei di  $\vec{J}^2$  e di  $J_z$  con  $\psi_{j,m}$ . Abbiamo allora, in definitiva,

$$\vec{J}^2 \psi_{j,m} = \hbar^2 j(j+1) \psi_{j,m} , \quad (6.9)$$

$$J_z \psi_{j,m} = \hbar m \psi_{j,m} , \quad (6.10)$$

con

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

ed  $m$  dato da (6.8).

Le  $\psi_{j,m}$  autofunzioni degli operatori hermitiani  $\vec{J}^2$  e  $J_z$ , quindi sono ortogonali tra loro; inoltre, possiamo imporre che siano normalizzate ad uno, cosicché abbiamo

$$(\psi_{j,m}, \psi_{j',m'}) = \delta_{jj'} \delta_{mm'} .$$

Poiché  $J_+$  applicato ad una  $\psi_{j,m}$  deve essere autostato di  $J_z$  con autovalore  $m+1$ , dobbiamo avere

$$J_+ \psi_{j,m} = c_{jm}^+ \psi_{j,m+1} .$$

Per fissare  $c_{jm}^+$ , osserviamo che

$$\begin{aligned} |c_{jm}^+|^2 &= (J_+ \psi_{j,m}, J_+ \psi_{j,m}) = (\psi_{j,m}, J_- J_+ \psi_{j,m}) = (\psi_{j,m}, (\vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z) \psi_{j,m}) \\ &= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m] = \hbar^2 (j-m)(j+m+1) , \end{aligned}$$

da cui segue che  $c_{jm}^+$  può essere determinato, a meno di un fattore di fase arbitrario, e si ha

$$J_+ \psi_{j,m} = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \psi_{j,m+1} . \quad (6.11)$$

In modo analogo, si può trovare che

$$J_- \psi_{j,m} = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \psi_{j,m-1} . \quad (6.12)$$



## 6.3 Il momento angolare orbitale

In questa Sezione vogliamo specializzare i risultati ottenuti in quella precedente nel caso in cui l'operatore momento angolare sia il momento angolare orbitale di una particella,  $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ . Innanzitutto, adottiamo una notazione più appropriata, indicando gli autostati  $\psi_{j,m}$  con  $\psi_{l,m}$ . Ricordiamo che valgono le seguenti equazioni agli autovalori:

$$\vec{l}^2 \psi_{l,m} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{l,m} , \quad (6.13)$$

$$l_z \psi_{l,m} = \hbar m \psi_{l,m} . \quad (6.14)$$

Ci proponiamo di trovare per  $\psi_{l,m}$  la forma funzionale esplicita nella rappresentazione delle coordinate. È conveniente lavorare in coordinate polari sferiche

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi , \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi , \\ z &= r \cos \theta . \end{aligned}$$

È facile trovare che, in queste coordinate, si ha

$$l_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} , \quad (6.15)$$

$$l_{\pm} = -i\hbar e^{\pm i\varphi} \left( \pm i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) , \quad (6.16)$$

$$\vec{l}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] . \quad (6.17)$$

Gli operatori differenziali nelle equazioni agli autovalori (6.13) e (6.14) non coinvolgono la coordinate radiale  $r$ , quindi nella forma esplicita delle autofunzioni  $\psi_{l,m}(r, \theta, \varphi)$  la dipendenza da  $r$  apparirà in una funzione moltiplicativa arbitraria  $R(r)$  che ignoreremo in quanto segue:

$$\psi_{l,m}(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_m^l(\theta, \varphi) .$$

Il compito che ci proponiamo è quello di determinare la forma delle  $Y_m^l(\theta, \varphi)$ . La condizione di ortonormalizzazione si scrive

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta (Y_{m'}^l(\theta, \varphi))^* Y_m^l(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} . \quad (6.18)$$

Cominciamo la discussione dall'equazione (6.14) che, in rappresentazione delle coordinate, si scrive

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_m^l(\theta, \varphi) = \hbar m Y_m^l(\theta, \varphi) , \quad (6.19)$$

la cui soluzione è della forma

$$Y_m^l(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} f_l(\theta) , \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi .$$

### 6.3. IL MOMENTO ANGOLARE ORBITALE

---

La condizione di periodicità  $Y_m^l(\theta, \varphi + 2\pi) = Y_m^l(\theta, \varphi)$  impone che  $m$  sia un intero; da ciò segue che anche  $l$  deve essere un intero. Quindi, nel caso del momento angolare orbitale solo i valori interi di  $j$  (che qui abbiamo chiamato  $l$ ) sono permessi. Per ciascun valore di  $l = 0, 1, 2, \dots$ , si ha che  $m$  può prendere i  $(2l + 1)$  valori interi  $-l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ . L'autofunzione con il valore massimo di  $m$ , cioè  $m = l$ , deve soddisfare

$$l_+ Y_l^l(\theta, \varphi) = 0 \quad \rightarrow \quad -i\hbar e^{i\varphi} \left( i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{il\varphi} f_l(\theta) = 0 \quad \rightarrow \quad \left( \frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) f_l(\theta) = 0 .$$

Questa equazione può essere risolta per separazione delle variabili ed ha soluzione della forma

$$f_l(\theta) = C_l \sin^l \theta ,$$

quindi

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = C_l \sin^l \theta e^{il\varphi} .$$

La condizione di normalizzazione (6.18) per  $Y_l^l$  fissa la costante  $C_l$ :

$$C_l = \left[ \frac{(-1)^l}{2^l l!} \right] \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}} .$$

Per trovare  $Y_{l-1}^l, Y_{l-2}^l$ , ecc. si applica ripetutamente l'operatore  $l_-$  definito in (6.16) a  $Y_l^l$  e si fa uso di (6.12). La forma generale delle  $Y_m^l$  per  $m \geq 0$  è

$$Y_m^l(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi (l-m)!}} e^{im\varphi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} , \quad (6.20)$$

mentre

$$Y_{-m}^l(\theta, \varphi) = (-1)^m [Y_m^l(\theta, \varphi)]^* .$$

Le autofunzioni  $Y_m^l$  si chiamano **armoniche sferiche**. In accordo con il postulato 3 enunciato nella Sezione 3.15, esse sono una base (ortonormale) completa per tutte le funzioni quadrato-sommabili delle variabili angolari  $\theta$  e  $\varphi$ , cioè per tutte le funzioni  $L^2$  su un dominio costituito dalla superficie di una sfera di raggio unitario. In altri termini, ogni funzione  $f(\theta, \varphi)$  per cui

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta |f(\theta, \varphi)|^2 < \infty ,$$

si può scrivere nella forma

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm} Y_m^l(\theta, \varphi) . \quad (6.21)$$

I coefficienti  $c_{lm}$  possono essere determinati con la procedura consueta, cioè si moltiplica il I e il II membro della (6.21) per  $(Y_{m'}^l)^*$  e si integra su tutto l'angolo solido con misura di integrazione  $d\varphi \sin \theta d\theta$ :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta (Y_{m'}^l(\theta, \varphi))^* f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta (Y_{m'}^l(\theta, \varphi))^* Y_m^l(\theta, \varphi) = c_{l'm'} ,$$

dove nell'ultimo passaggio si è fatto uso della proprietà di ortonormalizzazione (6.18). Se la funzione  $f(\theta, \varphi)$  è normalizzata, cioè se

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta |f(\theta, \varphi)|^2 = 1 ,$$

allora  $|c_{lm}|^2$  rappresenta la probabilità che una misura di  $\vec{l}^2$  e di  $l_z$  sullo stato la cui funzione d'onda è della forma  $R(r)f(\theta, \varphi)$  dia come risultato  $\hbar^2 l(l+1)$  e  $\hbar m$ , rispettivamente.

Per convenienza, riportiamo qui di seguito le armoniche sferiche corrispondenti ai valori di  $l$  più bassi:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} ,$$

$$Y_0^1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta , \quad Y_{\pm 1}^1 = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (\sin \theta) e^{\pm i\varphi} ,$$

$$Y_0^2 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) , \quad Y_{\pm 1}^2 = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} (\sin \theta \cos \theta) e^{\pm i\varphi} , \quad Y_{\pm 2}^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (\sin^2 \theta) e^{\pm 2i\varphi} .$$

## Esercizi

1. Verificare le (6.3) e le (6.5).
2. Verificare le (6.15)-(6.17).

## Bibliografia

- Seppure con qualche adattamento della notazione, la fonte è stata J.J. Sakurai, *Modern quantum mechanics*, Addison-Wesley.

---

# Capitolo 7

## Il potenziale centrale e l'atomo di idrogeno

### 7.1 Moto in un campo a simmetria centrale

La soluzione dell'equazione di Schrödinger agli autovalori per sistemi con dimensione maggiore di uno è molto più difficile che nel caso unidimensionale. In quest'ultimo caso, infatti, si tratta di un'equazione differenziale del II ordine alle derivate *ordinarie*, mentre per sistemi multidimensionali si ha a che fare con un'equazione differenziale del II ordine alle derivate *parziali*.

Esistono tuttavia dei casi per i quali il problema si semplifica notevolmente. Uno di essi, già discusso alla fine del Capitolo 5, è quello di una Hamiltoniana separabile in Hamiltoniane dipendenti da una sola variabile, per il quale il problema agli autovalori si riduce, come abbiamo visto, alla soluzione di problemi unidimensionali.

Un altro caso nel quale ha luogo la riduzione a problema unidimensionale è quello del sistema di una particella di massa  $\mu$  soggetta ad un potenziale centrale, cioè ad un potenziale  $V(r)$  che dipende solo dal *modulo* del vettore posizione rispetto al centro di forza. L'Hamiltoniana classica di questo sistema è

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) \quad (7.1)$$

e lo studio del problema agli autovalori per l'operatore Hamiltoniano corrispondente a (7.1) nella rappresentazione delle coordinate sarà l'oggetto di questo Capitolo.

Una situazione in cui entrano in gioco entrambi i meccanismi di riduzione a problemi unidimensionali è quella di un sistema di due particelle che interagiscono con un potenziale  $V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$  che dipende solo dal *modulo* del vettore posizione relativa delle due particelle. L'Hamiltoniana classica di questo sistema è della forma

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) . \quad (7.2)$$

Introducendo al posto delle variabili posizione  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$  e impulso  $\vec{p}_1$  e  $\vec{p}_2$  le nuove variabili

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 , \quad \vec{p} = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2} ,$$

## 7.1. MOTO IN UN CAMPO A SIMMETRIA CENTRALE

---

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2,$$

che rappresentano rispettivamente posizione ed impulso del moto relativo e posizione ed impulso nel sistema del centro di massa<sup>1</sup>, l'Hamiltoniana del sistema diventa

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r), \quad M = m_1 + m_2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (7.3)$$

con  $M$  la massa totale del sistema e  $\mu$  la massa ridotta. Questa Hamiltoniana contiene la somma di due termini, il primo dei quali,

$$H_R = \frac{\vec{P}^2}{2M},$$

rappresenta l'Hamiltoniana di una particella *libera* con massa pari alla massa totale del sistema, il secondo,

$$H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r),$$

rappresenta l'Hamiltoniana di una particella di massa  $\mu$  soggetta a potenziale centrale. Poiché l'operatore Hamiltoniano si scrive come la somma di due termini indipendenti, la soluzione del problema agli autovalori è della forma di prodotto tra autofunzioni  $\Psi_{E_R}(\vec{R})$  della Hamiltoniana del centro di massa e autofunzioni  $\psi_{E_r}(\vec{r})$  della Hamiltoniana del moto relativo.

L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per il sistema descritto dalla Hamiltoniana classica (7.1) è

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}). \quad (7.4)$$

È conveniente lavorare in coordinate polari sferiche, nelle quali l'operatore Laplaciano si scrive

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right), \quad (7.5)$$

la cui parte angolare coincide, a parte un fattore  $-\hbar^2$ , con l'espressione di  $\vec{l}^2$  in coordinate polari sferiche, data in (6.17). Possiamo pertanto scrivere

$$-\hbar^2 \vec{\nabla}^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{l}^2}{r^2}$$

e l'Eq. (7.4) diventa

$$\frac{1}{2\mu} \left[ -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{l}^2}{r^2} \right] \psi(\vec{r}) + V(r) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}). \quad (7.6)$$

Se si introduce l'operatore  $p_r$  definito da

$$p_r \psi = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \psi) = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi,$$

---

<sup>1</sup>Si può verificare facilmente che  $\vec{r}$  e  $\vec{p}$  sono variabili coniugate canoniche; lo stesso vale per  $\vec{R}$  e  $\vec{P}$ .

l'Hamiltoniana si può scrivere

$$H = \frac{1}{2\mu} \left( p_r^2 + \frac{\vec{l}^2}{r^2} \right) + V(r) . \quad (7.7)$$

L'operatore  $p_r$  soddisfa la regola di commutazione  $[r, p_r] = i\hbar$ , pertanto esso è il momento coniugato alla coordinata radiale  $r$ . Si può verificare che  $p_r$  è un operatore hermitiano nello spazio delle funzioni quadrato-sommabili che soddisfano la condizione  $\lim_{r \rightarrow 0} r\psi(\vec{r}) = 0$ , ma che **non** è associabile ad una osservabile.<sup>2</sup>

Il termine  $p_r^2/(2\mu)$  dell'Hamiltoniana (7.7) corrisponde all'energia cinetica del moto radiale, mentre  $\vec{l}^2/(2\mu r^2)$  all'energia cinetica di rotazione o **potenziale centrifugo**.

In un problema a simmetria centrale il momento angolare si conserva. È possibile cercare pertanto le autofunzioni della Hamiltoniana tra le funzioni con **definito** valore del momento angolare  $l$  e della sua componente,  $m$ , lungo la direzione  $z$ . Ciò comporta che le autofunzioni siano cercate della forma

$$\psi(\vec{r}) = \chi_l(r) Y_m^l(\theta, \varphi) , \quad (7.8)$$

dove le  $Y_m^l$  sono le armoniche sferiche introdotte nel Capitolo precedente. Alternativamente, si può dire che gli operatori  $\vec{l}^2$  ed  $l_z$  **commutano** con l'Hamiltoniana, quindi gli operatori  $\{H, \vec{l}^2, l_z\}$  ammettono una base comune di autofunzioni. Poiché sappiamo già che le autofunzioni di  $\vec{l}^2$  ed  $l_z$  sono le  $Y_m^l$ , le autofunzioni di  $H$  devono essere necessariamente della forma (7.8).

Sostituendo la (7.8) nell'Eq. (7.4), si ottiene

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) - E \right] \chi_l(r) = 0 . \quad (7.9)$$

Questa equazione non dipende dall'autovalore  $m$  di  $l_z$ , ciò significa che a ciascun autovalore  $E$  corrispondono  $(2l+1)$  autofunzioni indipendenti, tante quanti sono i possibili valori che, per un certo  $l$  fissato, può prendere l'autovalore  $m$  di  $l_z$ . In altri termini, ogni autovalore  $E$  è  $(2l+1)$  volte degenerare.

Se si introduce la **funzione d'onda ridotta**  $y_l(r)$  definita da

$$\chi_l(r) = \frac{y_l(r)}{r} , \quad (7.10)$$

l'Eq. (7.9) diventa

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) - E \right] y_l(r) = 0 . \quad (7.11)$$

Se l'energia potenziale  $V(r)$  è ovunque finita, deve essere finita anche la funzione d'onda  $\chi_l(r)$ . Ciò implica che sia

$$y_l(0) = 0 . \quad (7.12)$$

<sup>2</sup>Per una approfondimento sulle proprietà di  $p_r$ , si veda, A. Messiah, *op. cit.*.

## 7.1. MOTO IN UN CAMPO A SIMMETRIA CENTRALE

Questa condizione vale in realtà anche per potenziali che tendono all'infinito per  $r \rightarrow 0$ .<sup>3</sup>

L'Eq. (7.11), supplementata dalla condizione (7.12), rappresenta l'equazione agli autovalori per una particella in moto *unidimensionale* sotto l'azione del potenziale efficace

$$V_{\text{eff}}(r) \equiv \begin{cases} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) & \text{per } r > 0 \\ \infty & \text{per } r \leq 0. \end{cases}$$

La barriera infinita in  $r = 0$  simula il fatto che la coordinata radiale  $r$  varia nell'intervallo  $(0, +\infty)$ , quindi il moto può avvenire solo per  $r > 0$ . La condizione (7.12) è perfettamente compatibile con l'esistenza di questa barriera fittizia. La norma delle autofunzioni è

$$(\psi, \psi) = \int_0^\infty r^2 dr |\chi_l(r)|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta |Y_m^l(\theta, \varphi)|^2 = \int_0^\infty dr |y_l(r)|^2,$$

in virtù della (6.18). Anche questa espressione per la norma della funzione d'onda ha carattere unidimensionale.

Possiamo applicare al problema in esame tutte le proprietà del moto unidimensionale studiate nel Capitolo 5. In particolare, l'annullamento della funzione d'onda ridotta in  $r = 0$  è sufficiente per farci concludere che l'autovalore  $E$  del problema unidimensionale di Eq. (7.11) **non è degenerare**. Inoltre, *per un dato  $l$*  e limitatamente al caso di spettro discreto, vale il teorema di oscillazione, cioè, disponendo gli autovalori dell'energia in ordine crescente e numerandoli con i numeri  $n_r$  a partire dal livello più basso a cui si assegna  $n_r = 0$ , il numero  $n_r$  definisce il numero di nodi della corrispondente autofunzione (escluso il punto  $r = 0$ ). Il numero  $n_r$  è detto **numero quantico radiale**. Per completezza, diciamo anche che  $l$  è chiamato **numero quantico azimutale** ed  $m$  **numero quantico magnetico**.

La notazione per gli stati con differenti valori di  $l$  è la seguente:

$$\begin{aligned} l &= 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots \\ &s, p, d, f, g, h, i, k, \dots \end{aligned}$$

Osserviamo inoltre che lo stato fondamentale di una particella in un campo a simmetria centrale è sempre lo stato  $s$ ; per  $l \neq 0$ , infatti, la parte angolare della funzione d'onda avrebbe dei nodi, mentre la funzione d'onda dello stato fondamentale non ne deve avere. Inoltre, l'autovalore dell'energia minimo per un dato  $l$  cresce all'aumentare di  $l$ . Ciò si può capire dal fatto che il termine  $\hbar^2 l(l+1)/(2\mu r^2)$  cresce al crescere di  $l$ .

Occupiamoci adesso del comportamento della funzione d'onda radiale  $y_l(r)$  per  $r \rightarrow 0$  e per  $r \rightarrow \infty$ . Se il potenziale  $V(r)$  è limitato dappertutto, salvo andare all'infinito in  $r = 0$  meno velocemente di  $1/r^2$ , allora per  $r \rightarrow 0$  si possono trascurare  $V(r)$  ed  $E$  in (7.11) ed abbiamo

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] y_l(r) = 0,$$

<sup>3</sup>Si veda L.D. Landau, E.M. Lifshits, *op. cit.*, per la dimostrazione di questa affermazione. Si osservi, inoltre, che la condizione (7.12) equivale alla condizione di hermiticità dell'operatore  $p_r$ .



la cui soluzione può essere cercata della forma  $y_l(r) = r^s$ , con il risultato

$$s = l + 1, \quad s = -l.$$

La seconda soluzione non è accettabile, perché viola la condizione  $y_l(0) = 0$ , quindi deve essere necessariamente

$$y_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr^{l+1}. \quad (7.13)$$

Per quanto riguarda il comportamento all'infinito, se  $V(r)$  tende a zero per  $r \rightarrow \infty$  più velocemente di  $1/r$ , allora se

(a)  $E < 0$ : la soluzione esiste solo per certi valori **discreti** di  $E$  ed ha la forma

$$y_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{-2\mu E}{\hbar^2}},$$

lo spettro è **non-degenere**;

(b)  $E > 0$ : lo spettro è **continuo** e **non-degenere** e

$$y_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), \quad k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}.$$

Se  $V(r)$  tende a zero meno velocemente di  $1/r$  cambiano le forme asintotiche, ma non le conclusioni sulla natura dello spettro.

Volendo ricapitolare brevemente quanto detto in questa Sezione, abbiamo che le soluzioni dell'equazione agli autovalori (7.4) sono della forma

$$\psi(\vec{r}) = \chi_l(r) Y_m^l(\theta, \varphi) \equiv \frac{y_l(r)}{r} Y_m^l(\theta, \varphi),$$

con  $l = 0, 1, \dots$ . Se  $V(r)$  tende a zero per  $r \rightarrow \infty$ , per ogni  $l$  fissato tutti i valori di  $E > 0$  sono possibili e per ciascuno di essi abbiamo  $(2l + 1)$  valori possibili per  $m$ . Ciò equivale a dire che lo spettro è continuo per  $E > 0$  e che ogni autovalore  $E > 0$  è realizzato per tutti gli  $l = 0, 1, \dots$  e, per ciascuno di essi, per tutti gli  $m = -l, \dots, l$ . Se invece  $E < 0$ , per ogni  $l$  fissato abbiamo un insieme **discreto** di autovalori  $E_{nl}$  distinti, ciascuno realizzato  $(2l + 1)$  volte. Se consideriamo tutti insieme i possibili valori di  $l$ , può accadere che uno stesso autovalore  $E$  sia realizzato per due o più valori diversi di  $l$ . In questo caso si parla di **degenerazione accidentale**. Vedremo nella prossima Sezione un esempio di degenerazione accidentale nel caso dell'atomo di idrogeno.

## 7.2 Atomo di idrogeno

L'atomo di idrogeno è un sistema a due corpi, il protone e l'elettrone, soggetti all'interazione coulombiana. L'Hamiltoniana del moto relativo del sistema è

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r}, \quad (7.14)$$

## 7.2. ATOMO DI IDROGENO

---

dove  $e$  è la carica del protone e  $\mu$  è la *massa ridotta* del sistema elettrone-protone. Dal momento che la massa dell'elettrone  $m_e$  è circa 1800 volte più piccola di quella del protone, si ha

$$\frac{m_e - \mu}{m_e} \simeq 5 \times 10^{-4} ,$$

quindi è possibile confondere  $\mu$  con  $m_e$  entro una accuratezza di circa 0.5 per mille.

Il problema di Schrödinger agli autovalori per questo sistema è

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}^2 - \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r} \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) , \quad (7.15)$$

la cui soluzione va cercata tra le autofunzioni della forma

$$\psi(\vec{r}) = \frac{y_l(r)}{r} Y_m^l(\theta, \varphi) ,$$

che conduce a risolvere l'equazione

$$y_l'' + \left[ \varepsilon + \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_l = 0 , \quad \varepsilon \equiv \frac{2m_e E}{\hbar^2} . \quad (7.16)$$

Ricordando la discussione nella Sezione precedente, abbiamo che questo problema ammette soluzione per

(a)  $E > 0$ , dove abbiamo spettro **continuo**, soluzione oscillatoria all'infinito, stati non-legati; in questo caso non si può parlare più di atomo di idrogeno, ma di un sistema non-legato elettrone-protone;

(b)  $E < 0$ , ma solo per alcuni valori **discreti**; in questo caso abbiamo soluzioni esponenzialmente decrescenti all'infinito, quindi stati legati.

Per risolvere l'Eq. (7.16), facciamo innanzitutto il cambio di variabile

$$x \equiv 2\kappa r , \quad \kappa \equiv \sqrt{\frac{-2m_e E}{\hbar^2}} , \quad (7.17)$$

poi poniamo

$$\nu \equiv \frac{1}{\kappa a} = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c} \sqrt{\frac{m_e c^2}{-2E}} , \quad (7.18)$$

dove abbiamo indicato con  $a$  il raggio di Bohr. L'Eq. (7.16) diventa allora

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\nu}{x} - \frac{1}{4} \right] y_l = 0 , \quad (7.19)$$

in cui tutte le costanti fisiche rilevanti del sistema sono racchiuse nell'unico parametro del problema,  $\nu$ .

Sappiamo già che nel limite  $r \rightarrow 0$ , che implica  $x \rightarrow 0$ , la soluzione deve essere della forma

$$y_l \sim x^{l+1} ,$$

mentre per  $x \rightarrow \infty$  si possono trascurare i termini in  $1/x$  e  $1/x^2$  nella parentesi quadra dell'Eq. (7.19), cosicché la soluzione (fisicamente accettabile) di questa equazione è della forma

$$y_l \sim e^{-x/2} .$$

In considerazione di questi comportamenti asintotici, cerchiamo la soluzione dell'Eq. (7.19) della forma

$$y_l = x^{l+1} e^{-x/2} v_l(x) , \quad (7.20)$$

con una  $v_l(x)$  che **non** deve crescere per  $x \rightarrow \infty$  più velocemente di  $e^{+x/2}$ . L'equazione che  $v_l$  deve risolvere è

$$\left[ x \frac{d^2}{dx^2} + (2l+2-x) \frac{d}{dx} - (l+1-\nu) \right] v_l = 0 . \quad (7.21)$$

Questo tipo di equazione si chiama **equazione di Laplace** ed ammette una soluzione regolare nell'origine.

Posto

$$\alpha \equiv l+1-\nu , \quad \beta \equiv 2l+2 ,$$

cerchiamo la soluzione di

$$\left[ x \frac{d^2}{dx^2} + (\beta-x) \frac{d}{dx} - \alpha \right] v_l = 0 . \quad (7.22)$$

nella forma di una serie di potenze,

$$v_l(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n .$$

Sostituendo, si trova

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) c_n x^{n-1} + \beta \sum_{n=1}^{\infty} n c_n x^{n-1} - \sum_{n=1}^{\infty} n c_n x^n - \alpha \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n = 0 .$$

Imponendo l'annullamento del coefficiente di ciascuno degli  $x^n$ , si giunge alle seguenti relazioni ricorsive

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{\alpha}{\beta} c_0 , \\ c_2 &= \frac{1}{2} \frac{\alpha+1}{\beta+1} c_1 , \\ c_3 &= \frac{1}{3} \frac{\alpha+2}{\beta+2} c_2 , \\ &\dots \end{aligned}$$

cosicché abbiamo

$$v_l(x) = F(\alpha, \beta, x) \equiv 1 + \frac{\alpha}{\beta} x + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)} \frac{x^2}{2!} + \dots$$

## 7.2. ATOMO DI IDROGENO

La funzione  $F(\alpha, \beta, x)$  si chiama **funzione ipergeometrica confluyente**. Ricordando le definizioni di  $\alpha$  e  $\beta$ , abbiamo che la soluzione del problema (7.21) è data da  $F(l+1-\nu, 2l+2, x)$ . Il comportamento asintotico di tale funzione per  $x \rightarrow \infty$  è

$$F(l+1-\nu, 2l+2, x) \sim x^{-l-1-\nu} e^x ,$$

che non è accettabile, perché condurrebbe ad una  $y_l(x)$  che cresce indefinitamente per  $x \rightarrow \infty$  (si veda la (7.20)). Tuttavia, per certi valori particolari di  $\nu$ , i coefficienti di  $F(l+1-\nu, 2l+2, x)$  si annullano da un certo ordine in poi, cioè la serie di potenze che definisce  $F(l+1-\nu, 2l+2, x)$  diventa una *serie troncata*, cioè un polinomio. Questi valori *privilegiati* di  $\nu$  sono quelli per cui si ha

$$l+1-\nu = -n' , \quad \longrightarrow \quad n \equiv \nu = l+1+n' , \quad n' = 0, 1, 2, \dots ,$$

infatti se  $l+1-\nu$  è un intero negativo o nullo, tutti i coefficienti di  $F(l+1-\nu, 2l+2, x)$  da un certo ordine in poi si annullano, cioè  $F(l+1-\nu, 2l+2, x)$  è un polinomio ed il comportamento asintotico di (7.20) diventa

$$y_l(x) \sim x^n e^{-x/2} ,$$

che è accettabile.

In definitiva, le funzioni d'onda radiali degli stati legati dell'atomo di idrogeno sono (a meno di una costante moltiplicativa arbitraria)

$$y_l = x^{l+1} e^{-x/2} \sum_{p=0}^{n'} (-1)^p \frac{n'!(2l+1)!}{(n'-p)!(2l+1+p)!} \frac{x^p}{p!} . \quad (7.23)$$

L'espressione con la sommatoria prende il nome di **polinomio generalizzato di Laguerre** e si indica con  $L_{n'}^{2l+1}(x)$ .

| $n$ | $n'$ | $l$ | numero di autostati | notazione spettroscopica | degenerazione totale | $E_n$         |
|-----|------|-----|---------------------|--------------------------|----------------------|---------------|
| 1   | 0    | 0   | 1                   | 1s                       | 1                    | $E_1 = -R$    |
| 2   | 1    | 0   | 1                   | 2s                       | 4                    | $E_2 = E_1/4$ |
|     | 0    | 1   | 3                   | 2p                       |                      |               |
| 3   | 2    | 0   | 1                   | 3s                       | 9                    | $E_3 = E_1/9$ |
|     | 1    | 1   | 3                   | 3p                       |                      |               |
|     | 0    | 2   | 5                   | 3d                       |                      |               |
| ... |      |     |                     |                          |                      |               |

Tabella 7.1: Prospetto dei livelli energetici più bassi dell'atomo di idrogeno ( $R$  è la costante di Rydberg, pari a circa 13.6 eV).

In conclusione, per ogni valore di  $l$  fissato, gli stati stazionari dell'atomo di idrogeno sono realizzati per le energie per le quali

$$\nu = \frac{1}{\kappa a} = l+1+n' , \quad \longrightarrow \quad E_{l,n'} = -\frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 (l+1+n')^2} ,$$

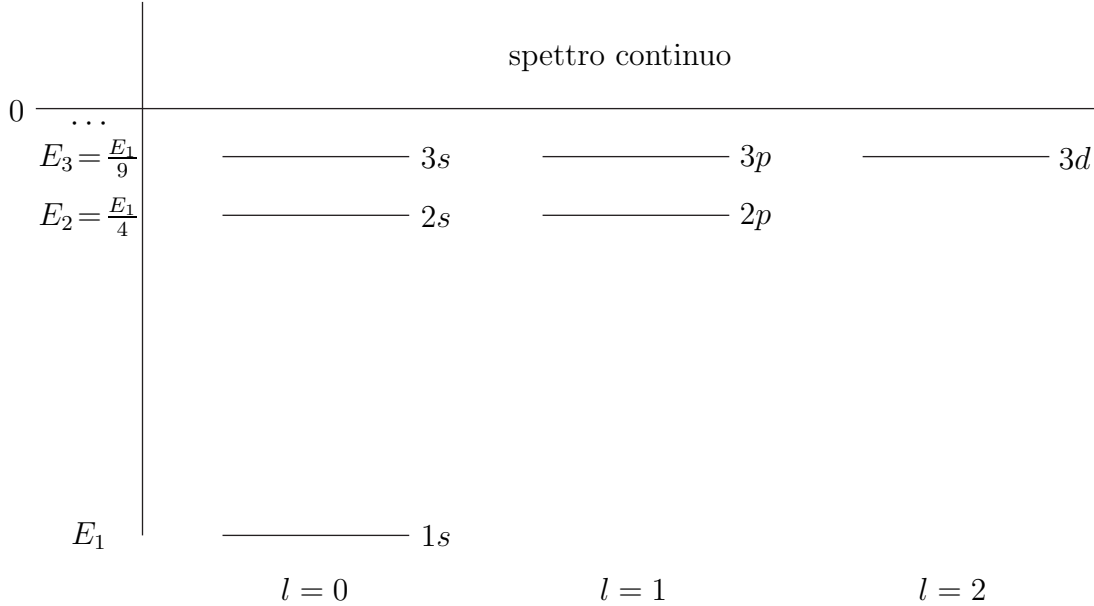


Figura 7.1: Schema della distribuzione dei livelli energetici di un atomo di idrogeno ( $E_1$  è pari a circa  $-13.6$  eV).

con  $n' = 0, 1, 2, \dots$ . Per ogni valore *fissato* di  $l$ , abbiamo pertanto una infinità numerabile di livelli, etichettata dal **numero quantico radiale**  $n'$ , che rappresenta anche il numero di nodi della parte radiale della funzione d'onda, in accordo con il teorema delle oscillazioni.

Se si tiene conto di *tutti* i valori di  $l$ , si ha lo **spettro completo**

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2n^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad n = l + n' + 1. \quad (7.24)$$

Il livello con  $n = 1$  può essere realizzato solo per  $l = 0$  ed  $n' = 0$ ; il livello con  $n = 2$  può essere realizzato per  $l = 0$  ed  $n' = 1$  oppure per  $l = 1$  ed  $n' = 0$ , ecc.. (si vedano la Tabella 7.1 e la Figura 7.1). In generale, per un fissato valore del **numero quantico principale**  $n$ , il numero quantico azimutale  $l$  può prendere valori  $l = 0, 1, \dots, n - 1$ . Poichè per ciascun valore di  $l$  abbiamo  $(2l + 1)$  stati indipendenti al variare del **numero quantico magnetico**  $m$ , la degenerazione totale per ogni livello è

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n(n - 1) + n = n^2.$$

La struttura dello spettro è in perfetto accordo con l'antica teoria dei quanti. La trattazione dell'atomo di idrogeno che abbiamo fatto qui non tiene conto degli **effetti relativistici**. Inoltre, essa ignora lo **spin** dell'elettrone e gli effetti ad esso collegati.

L'espressione completa delle autofunzioni degli stati legati dell'atomo di idrogeno è (a meno di una costante moltiplicativa arbitraria)

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = \frac{y_l(r)}{r} Y_m^l(\theta, \varphi), \quad (7.25)$$

con  $y_l(r)$  dato da (7.23), ricordando che  $r = x/(2\kappa) = xa/(2n)$ , che segue da (7.17) e (7.18).

Concludiamo questa Sezione con la discussione sui **nodi** delle autofunzioni  $\psi_{nlm}$ . Abbiamo già visto che i nodi della parte radiale della funzione d'onda sono numerati da  $n' = n - l - 1$ . I nodi della parte angolare dipendono dalle  $Y_m^l$ : esse si annullano sia su **coni nodali**, cioè superfici della forma  $\theta = \text{costante}$ , sia su **piani nodali**, cioè superfici della forma  $\varphi = \text{costante}$ . Si può dimostrare che il numero di nodi di  $Y_m^l$  è pari ad  $l$ . Perciò, il numero totale di nodi di una autofunzione  $\psi_{nlm}$  è  $(n - l - 1) + l = n - 1$ .

## A Appendice: formule utili

Per convenienza, riportiamo la forma normalizzata della parte radiale delle autofunzioni  $\psi_{nlm}(\vec{r})$  per  $n = 1$  ed  $n = 2$ :

$$\psi(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_m^l(\theta, \varphi), \quad \int_0^\infty dr r^2 [R_{nl}(r)]^2 = 1,$$

$$R_{10}(r) = \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} 2e^{-r/a},$$

$$R_{20}(r) = \left(\frac{1}{2a}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/(2a)},$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{1}{2a}\right)^{3/2} \frac{r}{\sqrt{3}a} e^{-r/(2a)}.$$

È possibile calcolare i seguenti valori medi su una generica autofunzione  $\psi_{nlm}(\vec{r})$ :

$$\langle r \rangle = \frac{a}{2} [3n^2 - l(l+1)],$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{a^2 n^2}{2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)],$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2 a},$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{n^3 a^2 (l + 1/2)}.$$

## Esercizi

1. Verificare la (7.5).
2. Verificare la (7.23).
3. Calcolare  $\langle r \rangle$ ,  $\langle r^2 \rangle$ ,  $\langle 1/r \rangle$  e  $\langle 1/r^2 \rangle$  sulle autofunzioni  $\psi_{nlm}(\vec{r})$  dell'atomo di idrogeno (Appendice A) con  $n=1$  ed  $n=2$ .

## Bibliografia

- L.D. Landau, E.M. Lifshits, *Meccanica quantistica non relativistica*, Editori Riuniti;  
A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod.

---



# Appendici generali

## A Costanti fisiche

| Quantità                                          | Simbolo                                        | Valore                                                                                  |
|---------------------------------------------------|------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| Velocità della luce                               | $c$                                            | 299 792 458 m/s                                                                         |
| Costante di Planck                                | $h$                                            | $6.626\,0693(11) \times 10^{-34}$ J s                                                   |
| Costante di Planck ridotta                        | $\hbar \equiv h/(2\pi)$                        | $1.054\,571\,68(18) \times 10^{-34}$ J s                                                |
| Carica elettrica                                  | $e$                                            | $1.602\,176\,53(14) \times 10^{-19}$ C<br>$= 4.803\,204\,41(41) \times 10^{-10}$ u.e.s. |
| Massa dell'elettrone                              | $m_e$                                          | $9.109\,3826(16) \times 10^{-31}$ kg<br>$= 0.510\,998\,918(44)$ MeV/ $c^2$              |
| Massa del protone                                 | $m_p$                                          | $1.672\,621\,71(29) \times 10^{-27}$ kg<br>$= 938.272\,029(80)$ MeV/ $c^2$              |
| Costante dielettrica del vuoto                    | $\varepsilon_0$                                | $8.854\,187\,817 \dots \times 10^{-12}$ C <sup>2</sup> /(N m <sup>2</sup> )             |
| Permeabilità magnetica del vuoto                  | $\mu_0$                                        | $4\pi \times 10^{-7}$ N/A <sup>2</sup>                                                  |
| Costante di struttura fine                        | $\alpha = e^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar c)$      | 1/137.035 999 11(46)                                                                    |
| Raggio classico dell'elettrone                    | $r_e = e^2/(4\pi\varepsilon_0 m_e c^2)$        | $2.817\,940\,325(28) \times 10^{-15}$ m                                                 |
| Lunghezza d'onda Compton (ridotta) dell'elettrone | $\lambda_e/(2\pi) = \hbar/(m_e c)$             | $3.861\,592\,678(26) \times 10^{-13}$ m                                                 |
| Raggio di Bohr                                    | $a = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$       | $0.529\,177\,2108(18) \times 10^{-10}$ m                                                |
| Costante di Rydberg                               | $R = m_e e^4/(2(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2)$ | 13.605 6923(12) eV                                                                      |
| Costante di Avogadro                              | $N_A$                                          | $6.022\,1415(10) \times 10^{23}$                                                        |
| Costante di Boltzmann                             | $k$                                            | $1.380\,6505(24) \times 10^{-23}$ J/K                                                   |
| Legge di spostamento di Wien                      | $b = \lambda_{\max} T$                         | $2.897\,7685(51) \times 10^{-3}$ m K                                                    |

## Bibliografia

- *Particle Physics Booklet*, July 2004, estratto da S. Eidelman *et al.*, Physics Letters **B 592**, 1 (2004).

## B Onde piane nel vuoto

Le equazioni di Maxwell nel vuoto hanno, nel sistema MKSA, la forma seguente:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \quad (\text{B.1})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{B.2})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{B.3})$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0 . \quad (\text{B.4})$$

Prendendo il rotore del I e del II membro dell'Eq. (B.2), si ottiene

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) + \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \times \vec{B} = 0 , \quad (\text{B.5})$$

da cui, usando l'identità  $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \vec{\nabla}^2 \vec{E}$  e le Eqq. (B.1) e (B.4), si ricava

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 . \quad (\text{B.6})$$

Procedendo in modo del tutto analogo a partire dall'Eq. (B.4), si ottiene invece

$$\vec{\nabla}^2 \vec{B} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = 0 . \quad (\text{B.7})$$

Le Eqq. (B.6) e (B.7) sono le **equazioni d'onda di D'Alembert** per le componenti dei campi elettrico e magnetico. Si tratta di sei equazioni alle derivate parziali, aventi tutte la forma

$$\vec{\nabla}^2 u - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 , \quad (\text{B.8})$$

dove  $u$  rappresenta una delle componenti dei campi elettrico e magnetico e si è posto  $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ . Le soluzioni dell'Eq. (B.8) possono essere trovate con il metodo della separazione delle variabili. Per illustrare questo metodo, supponiamo per semplicità che  $u$  dipenda da una sola delle coordinate spaziali oltre che dal tempo, ad esempio  $u = u(x, t)$ . Si ha allora

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 . \quad (\text{B.9})$$

Cerchiamo soluzioni della forma di un prodotto tra una funzione di  $x$  per una funzione di  $t$ , cioè  $u(x, t) = X(x)T(t)$ . L'Eq. (B.9) conduce allora a

$$X''T - \frac{1}{c^2} XT'' = 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{X''}{X} = \frac{1}{c^2} \frac{T''}{T} , \quad (\text{B.10})$$

dove l'apice sul simbolo di una funzione sta ad indicare la derivata di quella funzione rispetto al suo argomento. Ora, poiché  $X''/X$  è una funzione della sola variabile  $x$ , mentre  $T''/T$  è una funzione

della sola variabile  $t$ , l'unico modo in cui la (B.10) può essere soddisfatta è che queste espressioni siano costanti, cioè

$$\frac{X''}{X} = -k^2, \quad \frac{T''}{T} = -k^2 c^2 \equiv \omega^2, \quad (\text{B.11})$$

con  $k^2$  costante (positiva se si vogliono ottenere soluzioni fisicamente accettabili). La soluzione di queste equazioni differenziali è immediata:

$$X(x) = ae^{ikx} + a^* e^{-ikx}, \quad (\text{B.12})$$

$$T(t) = be^{i\omega t} + b^* e^{-i\omega t}, \quad (\text{B.13})$$

dove è stata imposta la condizione di **realità** di  $X(x)$  e  $T(t)$  (in effetti, bastava imporre quella di  $u(x, t)$ , cioè del prodotto  $X(x)T(t)$ , ma si può far vedere che ciò non cambia le conclusioni). In definitiva, abbiamo

$$u(x, t) = (A' e^{ikx+i\omega t} + \text{c.c.}) + (B' e^{ikx-i\omega t} + \text{c.c.}), \quad (\text{B.14})$$

dove “c.c.” sta per “complesso coniugato” e  $A'$ ,  $B'$  sono costanti complesse che possiamo sempre scrivere nella forma

$$A' = \frac{A}{2} e^{i\varphi_A}, \quad B' = \frac{B}{2} e^{i\varphi_B}, \quad (\text{B.15})$$

con  $A$ ,  $B$ ,  $\varphi_A$  e  $\varphi_B$  costanti reali. In virtù delle Eqq. (B.15), l'Eq. (B.14) può essere riscritta nella forma seguente:

$$u(x, t) = A \cos(kx + \omega t + \varphi_A) + B \cos(kx - \omega t + \varphi_B), \quad (\text{B.16})$$

da cui emerge che la più generale soluzione dell'Eq. (B.9) è una combinazione lineare di un termine della forma

$$u_-(x, t) = A \cos(kx + \omega t + \varphi_A), \quad (\text{B.17})$$

che rappresenta un'onda **regressiva** con velocità di fase  $-\omega/k = -c$  e di un termine della forma

$$u_+(x, t) = B \cos(kx - \omega t + \varphi_B), \quad (\text{B.18})$$

che rappresenta un'onda **progressiva** con velocità di fase  $+\omega/k = +c$ . D'ora in poi, ci limiteremo a considerare la sola componente di onda progressiva. Le considerazioni che seguono possono essere facilmente estese al caso dell'onda regressiva. Nelle applicazioni pratiche, può essere comodo usare la notazione

$$u_+(x, t) = \text{Re} \left[ \mathcal{B} e^{i(kx - \omega t)} \right], \quad \mathcal{B} \equiv B e^{i\varphi}, \quad (\text{B.19})$$

dove “Re” sta per “parte reale di”. Inoltre, ricordando che  $u$  rappresenta una componente dei campi elettrico e magnetico, si può omettere “Re” in tutte i passaggi intermedi che coinvolgano combinazioni **lineari** dei campi, lavorando cioè direttamente con gli esponenziali complessi, salvo prendere la parte reale dei risultati finali. Ciò comporta una notevole semplificazione dei calcoli, evitando il ricorso continuo alle formule trigonometriche di addizione e di sottrazione.

Nel caso generale  $u = u(\vec{x}, t)$ , procedendo in modo del tutto analogo, si trova che la componente d'onda progressiva della soluzione dell'Eq. (B.8) è della forma

$$u(\vec{x}, t) = \text{Re} \left[ \mathcal{A} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right], \quad \mathcal{A} \equiv A e^{i\varphi}, \quad (\text{B.20})$$

con  $\vec{k} = k\vec{n}$ ,  $\vec{n}^2 = 1$ , chiamato **vettore d'onda** e  $\omega/c = k$ . La soluzione (B.20) rappresenta un'onda che si propaga lungo la direzione  $\vec{n}$  con velocità di fase  $c$  (si osservi che qui la distinzione tra onda progressiva e regressiva non ha senso, poiché equivale alla sostituzione  $\vec{n} \rightarrow -\vec{n}$  che non cambia la forma generale dell'equazione data). L'onda (B.20) è periodica nella variabile  $\vec{n} \cdot \vec{x}$  con periodo  $\lambda = 2\pi/k$ ;  $\lambda$  è chiamata **lunghezza d'onda**. Inoltre, l'onda è periodica nella variabile  $t$  con periodo  $T \equiv 1/\nu = 2\pi/\omega$ ;  $\omega$  è chiamata **pulsazione**, mentre  $\nu$  è la **frequenza** dell'onda.

Le soluzioni delle equazioni di D'Alembert per i campi elettrico e magnetico, Eqq. (B.6) e (B.7), sono, dunque, le seguenti:

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \text{Re} \left[ \vec{\mathcal{E}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right], \quad \vec{\mathcal{E}} \equiv \vec{E}_0 e^{i\varphi_E} \quad (\text{B.21})$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \text{Re} \left[ \vec{\mathcal{B}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right], \quad \vec{\mathcal{B}} \equiv \vec{B}_0 e^{i\varphi_B}. \quad (\text{B.22})$$

Dalle Eqq. (B.1) e (B.3) segue rispettivamente che  $\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{E}} = 0$ , cioè  $\vec{E}_0 \perp \vec{n}$ , e che  $\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{B}} = 0$ , cioè  $\vec{B}_0 \perp \vec{n}$ ; dall'Eq. (B.2) segue invece che  $\vec{\mathcal{B}} = (1/c) \vec{n} \times \vec{\mathcal{E}}$ , cioè che  $\vec{E}_0 \perp \vec{B}_0$  e che  $\vec{\mathcal{B}}, \vec{\mathcal{E}}$  hanno la stessa fase.

## Bibliografia

- J.D. Jackson, *Elettrodinamica classica*, Zanichelli;  
consultare, in particolare, le Tabelle 2 e 3 dell'Appendice per la conversione delle equazioni di Maxwell e delle altre formule dell'elettromagnetismo tra i vari sistemi di unità di misura.

## C Serie di Fourier

### C.1 Funzioni periodiche

Una funzione  $f(x)$  definita in  $\mathbf{R}$  si dice **periodica di periodo**  $L$  se per ogni  $x \in \mathbf{R}$  si ha  $f(x+L) = f(x)$ . È chiaro che una funzione periodica di periodo  $L$  avrà anche periodo  $2L$ ,  $3L$ , ecc., come potrebbe avere un periodo più piccolo, ad esempio  $L/3$ . A volte, quando si parla di periodo di una funzione si intende il più piccolo periodo positivo.

Una funzione periodica  $f(x)$  sarà completamente nota una volta che sia conosciuta in un intervallo  $[a, a+L)$  di ampiezza  $L$ ; viceversa, ogni funzione definita in  $[a, a+L)$  potrà essere prolungata ad una funzione periodica di periodo  $L$ . È evidente che anche nel caso che la funzione  $f$  sia regolare non è detto che la funzione prolungata sia continua; in generale, vi sarà un salto nei punti  $a$ ,  $a+L$ ,  $a+2L$ , ecc., di ampiezza

$$s = \lim_{x \rightarrow a^+} f(x) - \lim_{x \rightarrow (a+L)^-} f(x) . \quad (\text{C.1})$$

Una funzione siffatta è regolare a tratti; più in generale,

- una funzione  $f(x)$  si dirà **continua a tratti** in un intervallo  $[a, b)$  se è continua in  $[a, b)$  tranne al più in un numero finito di punti  $x_1, x_2, \dots$ , nei quali esistono finiti i limiti destro e sinistro;
- una funzione continua a tratti si dirà poi **regolare a tratti** in  $[a, b)$  se ha derivata continua eccetto che nei punti  $x_1, x_2, \dots$ , ed eventualmente in altri punti  $y_1, y_2, \dots$ , sempre in numero finito, e se in tutti questi punti esistono finiti i limiti destro e sinistro della derivata;
- una funzione definita in  $\mathbf{R}$  si dirà regolare a tratti (continua a tratti) se è regolare a tratti (continua a tratti) in ogni intervallo  $[a, b) \in \mathbf{R}$ .

Una funzione continua a tratti è integrabile in ogni intervallo; se poi  $f(x)$  è periodica di periodo  $L$ , si ha

$$\int_a^{a+L} f(x) dx = \int_0^L f(x) dx , \quad (\text{C.2})$$

come è facile verificare.

Le più semplici funzioni periodiche sono

$$a \cos \left[ \frac{2\pi}{L}(x - \xi) \right] , \quad b \sin \left[ \frac{2\pi}{L}(x - \xi) \right] . \quad (\text{C.3})$$

Il numero positivo  $a$  si chiama **ampiezza dell'oscillazione** e rappresenta il massimo della funzione, il numero  $2\pi(x-\xi)/L$  è la **fase**, mentre  $2\pi\xi/L$  è lo **spostamento di fase**. Infine, il numero  $k = 2\pi/L$  si chiama **pulsazione** dell'oscillazione e  $\nu = 1/L$  è la **frequenza**.

In seguito useremo anche le funzioni periodiche complesse

$$Ae^{ikx} , \quad (\text{C.4})$$

dove  $A$  è un numero complesso ( $A = ae^{-ik\xi}$ ) che contiene sia l'ampiezza che lo spostamento di fase e si chiama **ampiezza complessa** della vibrazione. Le funzioni (C.3) non sono altro che la parte reale e la parte immaginaria della (C.4).

## C.2 Sviluppi in serie di Fourier

Vogliamo ora studiare la possibilità di sviluppare una funzione periodica  $f(x)$  di periodo  $2L$  in **serie di Fourier**:<sup>4</sup>

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ a_n \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right]. \quad (\text{C.5})$$

I coefficienti  $a_n$  e  $b_n$  dipenderanno dalla funzione  $f(x)$  in esame. Supponiamo per un momento che la serie al II membro converga uniformemente alla funzione  $f(x)$ .<sup>5</sup> Allora, moltiplichiamo ambo i membri della (C.5) per  $\cos(m\pi x/L)$  ed integriamo tra  $-L$  ed  $L$ : in virtù della supposta convergenza uniforme della serie si può integrare termine a termine nel II membro. Usando le relazioni

$$\begin{aligned} \int_{-L}^L \cos\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx &= \begin{cases} 0 & \text{se } m \neq n \\ L & \text{se } m = n \neq 0 \end{cases} \\ \int_{-L}^L \cos\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx &= 0 \\ \int_{-L}^L \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx &= \begin{cases} 0 & \text{se } m \neq n \\ L & \text{se } m = n \neq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

si ottiene immediatamente

$$a_m = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos\left(\frac{m\pi}{L}x\right) dx, \quad (\text{C.7})$$

che vale anche per  $m = 0$  in virtù del fattore  $1/2$  che moltiplica  $a_0$  nella (C.5). Analogamente, moltiplicando per  $\sin(m\pi x/L)$  ed integrando, si ottiene

$$b_m = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) dx, \quad (\text{C.8})$$

I coefficienti  $a_n$  e  $b_n$  si chiamano **coefficienti di Fourier** relativi alla funzione  $f(x)$ .

Si possono dimostrare i seguenti teoremi:

- **teorema 1:** se  $f(x)$  è una funzione periodica di periodo  $2L$  regolare a tratti, la serie di Fourier (C.5) converge a  $f(x)$  nei punti in cui  $f$  è continua, mentre in un punto  $x_0$  di discontinuità la serie (C.5) converge alla media dei limiti destro e sinistro:

$$\frac{1}{2} \left[ f(x_0^-) + f(x_0^+) \right];$$

- **teorema 2:** se  $f(x)$  è una funzione periodica di periodo  $2L$ , continua in  $\mathbf{R}$  e regolare a tratti, la serie di Fourier (C.5) converge uniformemente a  $f(x)$ ;

---

<sup>4</sup>Si osservi che qui, per convenienza futura, si è scelto il periodo pari a  $2L$  anziché  $L$ .

<sup>5</sup>Si ricorda che una successione di funzioni  $f_n(x)$  **converge uniformemente** ad una funzione  $f(x)$  se, comunque si fissi un reale positivo  $\epsilon$  piccolo a piacere, esiste un  $\bar{n}$  tale che per ogni  $n > \bar{n}$  si abbia  $\sup |f_n(x) - f(x)| < \epsilon$ , dove il sup è preso nel dominio di definizione delle  $f_n(x)$ . La convergenza uniforme di una serie di funzioni è definita allo stesso modo, identificando la successione  $f_n(x)$  con quella delle somme parziali della serie.

- **teorema 3:** se  $f(x)$  è una funzione periodica di periodo  $2L$  regolare a tratti, la serie di Fourier (C.5) converge uniformemente in ogni intervallo chiuso  $[a, b]$  in cui la funzione  $f(x)$  è continua.

È immediato verificare che una funzione **pari** si sviluppa in serie di **solì coseni**, una funzione **dispari** in serie di **solì seni**.

**Esempio:** sia data la funzione (dispari) periodica di periodo  $2\pi$  così definita

$$f(x) = \begin{cases} -1 & \text{per } -\pi \leq x < 0 \\ +1 & \text{per } 0 \leq x \leq \pi \end{cases}$$

Vogliamo cercarne lo sviluppo in serie di Fourier. Poiché si tratta di una funzione dispari, la serie di Fourier sarà una serie di soli seni, avrà cioè la forma

$$\sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(nx) ,$$

con

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin(nx) dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \sin(nx) dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} (+1) \cdot \sin(nx) dx \\ &= -\frac{2}{n\pi} [(-1)^n - 1] = \begin{cases} 0 & \text{se } n \text{ pari} \\ 4/(n\pi) & \text{se } n \text{ dispari} \end{cases} \end{aligned}$$

La serie di Fourier in questione contiene quindi solo termini della forma  $\sin(nx)$ , con  $n = 1, 3, 5, \dots$ , con ampiezze relative  $b_n$  che decrescono come  $1/n$  all'aumentare di  $n$ . Nel punto  $x = 0$ , che è uno dei punti di discontinuità della funzione  $f(x)$ , la serie converge a 0, poiché tutti i suoi termini sono identicamente nulli in questo punto. Ciò è in accordo con il teorema 1, dal momento che la media dei limiti destro e sinistro della funzione  $f(x)$  nel punto  $x = 0$  vale proprio 0.

### C.3 Serie di Fourier di esponenziali complessi

Usando la rappresentazione di seni e coseni in termini di esponenziali,

$$\cos y = \frac{e^{iy} + e^{-iy}}{2} , \quad \sin y = \frac{e^{iy} - e^{-iy}}{2i} . \quad (\text{C.9})$$

la serie di Fourier (C.5) può essere riscritta nella forma seguente:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(-i \frac{n\pi}{L} x\right) , \quad (\text{C.10})$$

in cui si osserva che ora la somma è estesa su tutti gli interi relativi. I nuovi coefficienti di Fourier  $c_n$  legati ai vecchi coefficienti  $a_n$  e  $b_n$  dalle relazioni

$$\begin{cases} c_0 &= a_0/2 \\ c_n &= (a_n + ib_n)/2 , \quad n > 0 \\ c_{-n} &= c_n^* \end{cases}$$

In virtù di queste relazioni e delle Eqq. (C.7) e (C.8), si ha che i coefficienti  $c_n$  sono determinati dalla funzione  $f(x)$  mediante la formula seguente:

$$c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) \exp\left(i \frac{n\pi}{L} x\right) dx . \quad (\text{C.11})$$

## Bibliografia

- E. Giusti, *Analisi matematica 2*, Boringhieri.



## D Trasformata di Fourier

### D.1 Definizione e proprietà

Consideriamo il limite  $L \rightarrow \infty$  della serie di Fourier (C.10) e dell'espressione dei coefficienti di Fourier  $c_n$  data in (C.11). Prima di tutto, facciamo le seguenti posizioni:

$$f_n = 2L c_n , \quad k_n = \frac{n\pi}{L} ,$$

per effetto delle quali la (C.10) e la (C.11) diventano, rispettivamente,

$$f(x) = \frac{1}{2L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{-ik_n x} \quad (D.1)$$

e

$$f_n = \int_{-L}^L f(x) e^{ik_n x} dx . \quad (D.2)$$

Ora, moltiplicando e dividendo per  $\pi$  il II membro della (D.1) si ha

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{-ik_n x} \left( \frac{\pi}{L} \right) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{-ik_n x} \Delta k_n ,$$

dove  $\Delta k_n = \pi/L$  rappresenta la variazione di  $k_n$  quando  $n$  varia di una unità. Nel limite  $L \rightarrow \infty$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta k_n \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dk$$

ed abbiamo allora

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} dx , \quad (D.3)$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{-ikx} dk . \quad (D.4)$$

La funzione  $\tilde{f}(k)$  definita in (D.3) si chiama **trasformata di Fourier** di  $f(x)$ , mentre l'Eq. (D.4) definisce l'**anti-trasformata di Fourier** di  $\tilde{f}(k)$ . Mediante la sostituzione

$$f(x) \rightarrow \frac{f(x)}{\sqrt{2\pi}} ,$$

si può ottenere una definizione più simmetrica di trasformata ed anti-trasformata di Fourier:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} dx \equiv \mathcal{F}(f(x)) , \quad (D.5)$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{-ikx} dk \equiv \mathcal{F}^{-1}(\tilde{f}(k)) . \quad (D.6)$$

## D. TRASFORMATA DI FOURIER

---

Quest'ultima definizione è quella adottata in questi appunti. È evidente che lo scambio di  $e^{ikx}$  con  $e^{-ikx}$  nella definizione di trasformata ed anti-trasformata di Fourier è irrilevante.

Dopo aver ricavato la trasformata di Fourier dalla serie di Fourier, è doveroso domandarsi per quali funzioni  $f(x)$  la trasformata di Fourier è applicabile, cioè per quali funzioni  $f(x)$  esiste l'integrale al II membro della (D.5). Una condizione sufficiente è che la funzione  $f(x)$  sia in  $L^1(\mathbf{R})$ , cioè che sia

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx < \infty .$$

Osserviamo che una funzione in  $L^1(\mathbf{R})$  deve andare a zero per  $|x| \rightarrow \infty$  più velocemente di  $1/x$ , cioè deve avere per  $|x| \rightarrow \infty$  un andamento della forma  $1/x^\alpha$ , con  $\alpha > 1$ .

Enunciamo ora alcune proprietà della trasformata e della anti-trasformata di Fourier:

- **linearità:**

$$\mathcal{F}(a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x)) = a_1 \mathcal{F}(f_1(x)) + a_2 \mathcal{F}(f_2(x)) ,$$

- **teoremi di traslazione** (di facile dimostrazione): sia  $f(x)$  una funzione in  $L^1(\mathbf{R})$  ed  $\tilde{f}(k)$  la sua trasformata di Fourier, allora

$$\mathcal{F}(f(x-a)) = e^{ika} \tilde{f}(k) , \quad (D.7)$$

$$\mathcal{F}(e^{-iax} f(x)) = \tilde{f}(k-a) , \quad (D.8)$$

- se indichiamo con  $(f_1 * f_2)(x)$  la **convoluzione** di due funzioni  $f_1(x)$  e  $f_2(x)$  appartenenti ad  $L^1(\mathbf{R})$ , definita come

$$(f_1 * f_2)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x-y) f_2(y) dy ,$$

si ha che anche la funzione  $(f_1 * f_2)(x)$  è in  $L^1(\mathbf{R})$  e vale il risultato

$$\mathcal{F}(f_1 * f_2) = \tilde{f}_1(k) \tilde{f}_2(k) \sqrt{2\pi} . \quad (D.9)$$

- **teoremi di derivazione** (di facile dimostrazione):

1. se  $f(x)$  e  $xf(x)$  appartengono a  $L^1(\mathbf{R})$  e se indichiamo con  $\tilde{f}(k)$  la trasformata di Fourier di  $f(x)$ ,

$$\frac{d\tilde{f}(k)}{dk} = \mathcal{F}(ixf(x)) , \quad (D.10)$$

2. se  $f(x)$  è di classe  $C^1(\mathbf{R})$  ed appartiene a  $L^1(\mathbf{R})$  e se indichiamo con  $\tilde{f}(k)$  la sua trasformata di Fourier,

$$\mathcal{F}(f'(x)) = -ik \tilde{f}(k) . \quad (D.11)$$

Se la funzione  $f(x)$ , oltre ad appartenere a  $L^1(\mathbf{R})$ , appartiene anche a  $L^2(\mathbf{R})$  (cioè allo spazio delle funzioni il cui modulo quadrato è sommabile in  $\mathbf{R}$ ), vale anche l'**identità di Parseval**

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(k)|^2 dk . \quad (D.12)$$

Osserviamo che il *modulo quadro* di una funzione in  $L^2(\mathbf{R})$  deve andare a zero per  $|x| \rightarrow \infty$  più velocemente di  $1/x$ , cioè deve avere per  $|x| \rightarrow \infty$  un andamento della forma  $1/x^\alpha$ , con  $\alpha > 1$ .

La generalizzazione delle definizioni di trasformata ed anti-trasformata di Fourier al caso di funzioni di più variabili è immediata. Ad esempio, per una funzione  $f(\vec{x})$  delle tre coordinate spaziali la generalizzazione delle Eqq. (D.5) e (D.6) è

$$\tilde{f}(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{x}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} d^3x , \quad (D.13)$$

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} d^3k . \quad (D.14)$$

Per una funzione delle tre coordinate spaziali e del tempo avremmo, invece,

$$\tilde{f}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{x}, t) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} d^3x dt , \quad (D.15)$$

$$f(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\vec{k}, \omega) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} d^3k d\omega . \quad (D.16)$$

Dall'Eq. (D.16) risulta che una funzione  $f(\vec{x}, t)$  può essere scritta come sovrapposizione di onde piane.

## D.2 “Relazione di indeterminazione” per la trasformata di Fourier

Sia data una funzione  $f(x)$  abbastanza “regolare” da far sì che tutti gli integrali definiti sotto siano finiti e sia  $\tilde{f}(k)$  la sua trasformata di Fourier, secondo la definizione data in (D.5). Supponiamo, per fissare le idee, che  $f(x)$  sia un pacchetto d'onde ad un istante di tempo fissato. L'Eq. (D.6) suggerisce che questo pacchetto d'onde può essere ottenuto come sovrapposizione di onde piane ciascuna con il suo vettore d'onda  $k$  e con un'ampiezza data da  $\tilde{f}(k)$ . Indichiamo con  $\bar{x}$  il “baricentro spaziale” del pacchetto d'onde,

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} x |f(x)|^2 dx , \quad (D.17)$$

e con  $\Delta x^2$  l'estensione spaziale del pacchetto,

$$\Delta x^2 = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 |f(x)|^2 dx , \quad (D.18)$$

dove abbiamo posto

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(k)|^2 dk . \quad (D.19)$$

Analogamente, indichiamo con  $\bar{k}$  il “baricentro” dei vettori d'onda,

$$\bar{k} = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} k |\tilde{f}(k)|^2 dk , \quad (D.20)$$

## D. TRASFORMATA DI FOURIER

---

e con  $\Delta k^2$  l'estensione dello spettro dei vettori d'onda,

$$\Delta k^2 = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} (k - \bar{k})^2 |\tilde{f}(k)|^2 dk . \quad (\text{D.21})$$

Abbiamo allora che vale la proprietà

$$\Delta x^2 \Delta k^2 \geq \frac{1}{4} , \quad (\text{D.22})$$

a cui faremo riferimento come “**relazione di indeterminazione**”.

La dimostrazione procede in questo modo: supponiamo per semplicità che  $\bar{x} = \bar{k} = 0$ . Sia  $I(\lambda)$  l'integrale

$$I(\lambda) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \left| x f(x) + \lambda \frac{df}{dx} \right|^2 dx ,$$

che è sempre maggiore o uguale a zero, per ogni  $\lambda \in \mathbf{R}$ . Ora,

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |f|^2 dx + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \left( x f \frac{df^*}{dx} + x f^* \frac{df}{dx} \right) dx + \lambda^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{df}{dx} \right|^2 dx \\ &= N(\Delta x^2 - \lambda + \lambda^2 \Delta k^2) \geq 0 , \end{aligned}$$

dove è stata effettuata l'integrazione per parti dell'integrale con il termine con  $df^*/dx$  e si è fatto uso della proprietà (D.11) e della definizione (D.19). Il polinomio di II grado in  $\lambda$  che appare all'ultimo membro della precedente catena di equazioni non è mai negativo se e solo se il suo discriminante è negativo o nullo, cioè se

$$1 - 4\Delta x^2 \Delta k^2 \leq 0 \quad \longrightarrow \quad \Delta x^2 \Delta k^2 \geq \frac{1}{4} .$$

La dimostrazione per il caso generale  $\bar{x} \neq 0$ ,  $\bar{k} \neq 0$  è lasciata per esercizio.

### D.3 Esempi

**Esempio 1:** sia  $f(x)$  la funzione così definita:

$$f(x) = \begin{cases} h & \text{per } |x| < d/2 \\ 0 & \text{altrove} \end{cases}$$

La trasformata di Fourier  $\tilde{f}(k)$  si trova facilmente:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-d/2}^{d/2} h e^{ikx} dx = \frac{hd}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin(kd/2)}{kd/2} .$$

Osserviamo che la funzione  $f(x)$  ha un dominio di estensione  $d$  e che per essa  $\Delta x = d$ , mentre la funzione  $\tilde{f}(k)$  è apprezzabilmente diversa da zero nella regione  $|kd/2| \leq \pi$  (si veda la Figura 7.2), da cui segue  $\Delta k \sim 4\pi/d$ , quindi  $\Delta x \Delta k \sim 4\pi$ .

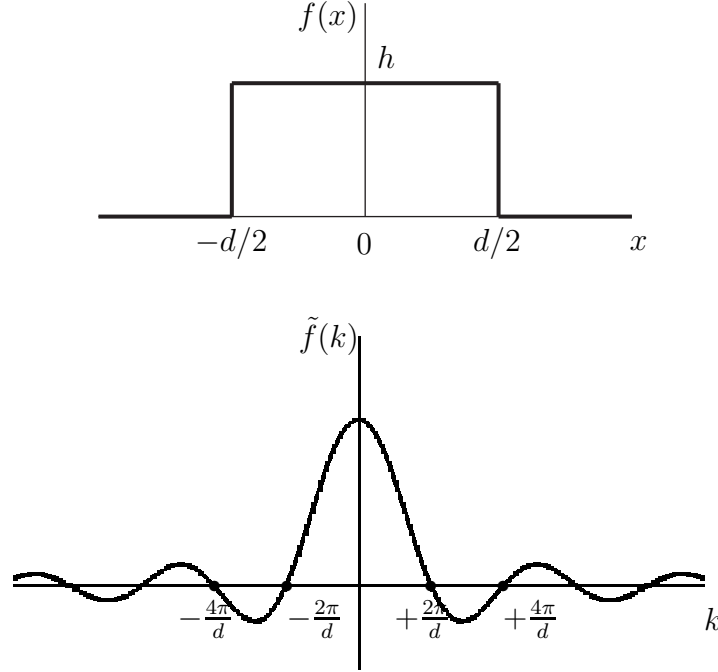


Figura 7.2: La funzione  $f(x)$  dell'esempio 1 e la sua trasformata di Fourier  $\tilde{f}(k)$ .

**Esempio 2:** sia  $f(x)$  un pacchetto d'onde gaussiano

$$f(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{\sigma}} e^{-x^2/(2\sigma^2)} ,$$

con

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(k)|^2 dk = 1 .$$

Calcoliamo innanzitutto la sua trasformata di Fourier:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} dx = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/(2\sigma^2) + ikx} dx = \frac{\sqrt{\sigma}}{\pi^{1/4}} e^{-k^2\sigma^2/2} ,$$

dove si è fatto uso di

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a[x-b/(2a)]^2} e^{b^2/(4a)} dx = e^{b^2/(4a)} \sqrt{\frac{\pi}{a}} . \quad (\text{D.23})$$

Poi, osserviamo che,  $\bar{x} = \bar{k} = 0$  per parità. Infine,

$$\Delta x^2 = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |f(x)|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2/\sigma^2} dx = \frac{\sigma^2}{2}$$

e

$$\Delta k^2 = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} k^2 |\tilde{f}(k)|^2 dx = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} k^2 e^{-k^2\sigma^2} dk = \frac{1}{2\sigma^2} ,$$

#### *D. TRASFORMATATA DI FOURIER*

---

per ottenere i quali è stato usato

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} . \quad (\text{D.24})$$

Concludiamo quindi che  $\Delta x^2 \Delta k^2 = 1/4$ . Per un pacchetto d'onde gaussiano, e solo per questo, la “relazione di indeterminazione” è realizzata con il segno di uguaglianza, cioè l'indeterminazione è la minima possibile.

## E Delta di Dirac

### E.1 Definizione

Consideriamo, al variare del reale  $L$ , le seguenti funzioni

$$f_{L,x_0}(x) = \begin{cases} 1/(2L) & |x - x_0| \leq L \\ 0 & \text{altrove} \end{cases} \quad (\text{E.1})$$

Si tratta di funzioni che prendono valore costante  $1/(2L)$  su un intervallo di estensione  $2L$ , cosicch  al variare di  $L$  rimane invariato (ed uguale ad 1) il loro integrale esteso su tutto  $\mathbf{R}$ ,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{L,x_0}(x) dx = 1 .$$

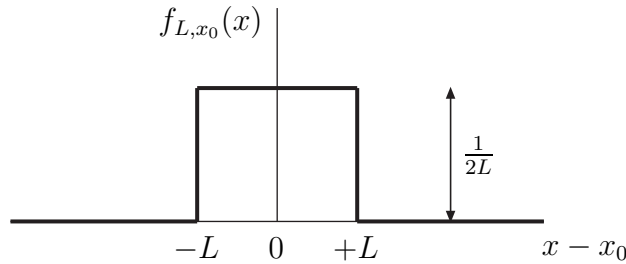


Figura 7.3: Grafico della funzione  $f_{L,x_0}(x)$ .

Uno dei modi di definire la **delta di Dirac**   quello di prendere il limite per  $L \rightarrow 0$  delle funzioni  $f_{L,x_0}(x)$ :

$$\lim_{L \rightarrow 0} f_{L,x_0}(x) = \delta(x - x_0) . \quad (\text{E.2})$$

La delta di Dirac **non**   una funzione, bens  una **distribuzione**.<sup>6</sup>

Tutte le sue propriet  possono essere derivate a partire dalla sua definizione come limite di funzioni ordinarie.

Se  $\varphi(x)$    una funzione arbitraria, regolare in  $x = x_0$ ,   facile vedere che

$$\int_I \varphi(x) \delta(x - x_0) dx = \varphi(x_0) , \quad (\text{E.3})$$

dove  $I$    un qualunque intorno del punto  $x = x_0$ .

<sup>6</sup>Per lo studio della teoria delle distribuzioni si rimanda ai corsi di Metodi matematici o, per una trattazione sintetica, all'Appendice A di A. Messiah, *op. cit.*.

## E.2 Proprietà della delta di Dirac

Le proprietà che seguono vanno considerate come proprietà della *distribuzione*  $\delta(x)$ , cioè vanno dimostrate moltiplicando per una funzione *test*<sup>7</sup> ed integrando su tutto  $\mathbf{R}$ :

1.

$$\delta(x) = \delta(-x) , \quad (\text{E.4})$$

2.

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x) , \quad (\text{E.5})$$

3.

$$\delta(f(x)) = \sum_n \frac{\delta(x - x_n)}{|f'(x_n)|} , \quad (\text{E.6})$$

dove la somma è estesa su tutti gli zeri della funzione  $f(x)$ , cioè su tutti gli  $x_n$  per cui  $f(x_n) = 0$ , purché sia  $f'(x_n) \neq 0$ .

4.

$$x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0) , \quad x\delta(x) = 0 , \quad (\text{E.7})$$

5.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - y)\delta(y - z)dy = \delta(x - z) . \quad (\text{E.8})$$

## E.3 Altre rappresentazioni della delta di Dirac

Esistono molti insiemi di funzioni dipendenti da un parametro reale che convergono alla delta di Dirac in un opportuno limite di questo parametro. Alcuni esempi sono riportati qui di seguito. Per la dimostrazione, si suggerisce di usare il metodo delle funzioni test.

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-x_0)^2/(2\sigma^2)} = \delta(x - x_0) ,$$

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{a}{\pi} \frac{1}{(x - x_0)^2 + a^2} = \delta(x - x_0) ,$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2(\alpha x)}{\alpha x^2} = \delta(x) ,$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin(\alpha x)}{x} = \delta(x) .$$

---

<sup>7</sup>Una funzione **test** è una funzione  $\mathbf{C}^\infty(\mathbf{R})$  a decrescenza rapida, cioè tale che tutte le sue derivate decrescano per  $|x| \rightarrow \infty$  più rapidamente di qualsiasi polinomio.



## E.4 Trasformata di Fourier della delta di Dirac

La trasformata di Fourier di  $\delta(x - x_0)$  può essere calcolata a partire dalla definizione (D.5) e facendo uso della relazione (E.3). Abbiamo allora che

$$\mathcal{F}(\delta(x - x_0)) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} . \quad (\text{E.9})$$

Da questo risultato segue che

$$\mathcal{F}^{-1} \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} \right) = \delta(x - x_0) ,$$

cioè, applicando la definizione di anti-trasformata di Fourier (D.6),

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x_0)} dk = \delta(x - x_0) ,$$

o, equivalentemente,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x_0)} dk = 2\pi \delta(x - x_0) . \quad (\text{E.10})$$

Questo risultato è particolarmente utile in quanto fornisce una rappresentazione integrale della delta di Dirac.

Usando la (E.10) è possibile determinare la trasformata di Fourier della funzione identità:

$$\mathcal{F}(1) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} dx = \sqrt{2\pi} \delta(k) . \quad (\text{E.11})$$

È opportuno osservare che la funzione identità, come ogni altra funzione costante, non appartiene a  $L^2(\mathbf{R})$ ; in effetti la sua trasformata di Fourier non esiste nello spazio delle funzioni ordinarie, perché l'integrale al I membro della (E.11) non è convergente. Tuttavia essa esiste nello spazio delle distribuzioni ed in questo senso va intesa la formula (E.11). Lo stesso argomento vale per la formula (E.10).

## E.5 Integrale della delta di Dirac

Consideriamo il seguente integrale

$$I \equiv \int_{-\infty}^x \delta(x' - x_0) dx' .$$

Per calcolarlo, partiamo dalla definizione (E.2) della delta di Dirac:

$$I = \lim_{L \rightarrow 0} \int_{-\infty}^x f_{L,x_0}(x') = \lim_{L \rightarrow 0} \theta_{L,x_0}(x) ,$$

dove

$$\theta_{L,x_0}(x) \equiv \int_{-\infty}^x f_{L,x_0}(x') = \begin{cases} 0 & \text{per } x < x_0 - L \\ (x - (x_0 - L))/(2L) & \text{per } x_0 - L \leq x \leq x_0 + L \\ 1 & \text{per } x > x_0 + L \end{cases}$$

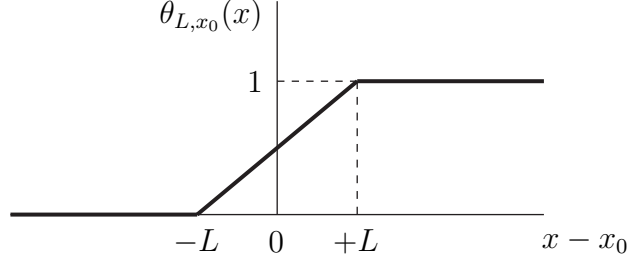


Figura 7.4: Grafico della funzione  $\theta_{L,x_0}(x)$ .

Le funzioni  $\theta_{L,x_0}(x)$  convergono (uniformemente) per  $L \rightarrow 0$  alla **funzione di Heaviside**  $\theta(x - x_0)$ ,

$$\theta(x - x_0) = \begin{cases} 0 & \text{per } x \leq x_0 \\ 1 & \text{per } x > x_0 \end{cases} \quad (\text{E.12})$$

per cui abbiamo, in definitiva,

$$\int_{-\infty}^x \delta(x' - x_0) dx' = \theta(x - x_0) . \quad (\text{E.13})$$

Invertendo il risultato ottenuto, abbiamo che la derivata della funzione di Heaviside è la delta di Dirac:

$$\frac{d}{dx} \theta(x - x_0) = \delta(x - x_0) . \quad (\text{E.14})$$

In generale, se una funzione  $f(x)$  ha una discontinuità di I specie nel punto  $x = x_0$  con salto finito

$$s = \lim_{x \rightarrow x_0^+} f(x) - \lim_{x \rightarrow x_0^-} f(x) ,$$

è possibile assegnare alla sua derivata nel punto  $x = x_0$  il valore

$$\left. \frac{d}{dx} f(x) \right|_{x=x_0} = s \delta(x - x_0) . \quad (\text{E.15})$$

## E.6 Derivate della delta di Dirac

La derivata prima  $\delta'(x - x_0)$  della  $\delta(x - x_0)$  può essere definita a partire dalla sua azione su una funzione test  $\varphi(x)$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \delta'(x - x_0) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi'(x) \delta(x - x_0) dx = -\varphi'(x_0) , \quad (\text{E.16})$$

dove la prima uguaglianza segue dall'integrazione per parti. La  $\delta'(x - x_0)$  gode delle seguenti proprietà:

1.

$$\delta'(x) = -\delta'(-x) , \quad (\text{E.17})$$

2.

$$x\delta'(x) = -\delta(x) . \quad (\text{E.18})$$

La rappresentazione integrale della  $\delta'(x - x_0)$  segue immediatamente dalla (E.10):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} ik e^{ik(x-x_0)} dk = 2\pi\delta'(x - x_0) . \quad (\text{E.19})$$

La derivata  $n$ -esima della  $\delta(x - x_0)$  è definita analogamente alla derivata prima,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x)\delta^{(n)}(x - x_0)dx = (-1)^n\varphi^{(n)}(x_0) , \quad (\text{E.20})$$

e due sue proprietà sono le seguenti:

1.

$$\delta^{(n)}(x) = (-1)^n\delta^{(n)}(-x) , \quad (\text{E.21})$$

2.

$$x\delta^{(n)}(x) = -n\delta^{(n-1)}(x) . \quad (\text{E.22})$$

## E.7 La delta di Dirac in tre dimensioni

La delta di Dirac in tre dimensioni è definita nel seguente modo:

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0) , \quad (\text{E.23})$$

dove ciascuna delle tre delta di Dirac che appaiono al II membro può essere definita in modo analogo a quanto fatto in (E.2). La generalizzazione della relazione (E.3) è

$$\int \varphi(\vec{r})\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) d\vec{r} = \varphi(\vec{r}_0) . \quad (\text{E.24})$$

Le proprietà della delta di Dirac in tre dimensioni possono essere dedotte facilmente a partire da quelle della delta di Dirac in una dimensione.