

## IV. IL FORMALISMO ELEMENTARE DELLA MECCANICA QUANTISTICA

Nel capitolo precedente si è stabilita l'equazione di Schrödinger per determinare la funzione d'onda associata al moto di una particella. Anche se la genesi storica di questa equazione è motivata dall'idea di de Broglie che questa sia un'onda *reale* che accompagna la particella nel suo moto, ci si accorge rapidamente che l'interpretazione corretta è quella che attribuisce a tale funzione d'onda solo il significato di ausilio matematico per calcolare un valore di aspettazione dell'osservabile fisica che si desidera misurare. Da un lato si stabilisce dunque, attraverso il teorema di Ehrenfest, un legame tra la descrizione classica e la nuova formulazione ondulatoria a livello di valori medi; d'altra parte, nella trattazione matematica alle variabili fisiche vengono associati degli operatori. Occorre allora approfondire questa associazione esaminando le proprietà elementari degli operatori, in modo da riconoscere quali siano gli operatori interessanti per la teoria quantistica.

Nella primitiva formulazione della cosiddetta meccanica delle matrici di Heisenberg <sup>1</sup>, per rappresentare quantità associate alle variabili dinamiche classiche si ricorreva a degli oggetti matematici con la proprietà di soddisfare un'algebra non commutativa. Tali oggetti furono subito identificati con le matrici dell'algebra lineare da Max Born <sup>2</sup>, il quale, dapprima con l'ausilio dell'allievo Pascual Jordan <sup>3</sup> e

---

<sup>1</sup> Cfr. n. 4 p. 106.

<sup>2</sup> Born si ricordò allora delle lezioni di Jakob Rosanes (1842–1922), da lui seguite nel 1901 quand'era studente universitario a Breslau, (Breslavia), l'odierna Wroclaw (Polonia). Rosanes, che fu anche rettore dell'Università di Breslau negli anni 1903–1904, era un esperto di geometria algebrica e diede importanti contributi alla teoria degli invarianti.

<sup>3</sup> Cfr. n. 5 p. 106.

A Göttingen, prima di lavorare con Born e Heisenberg, Jordan era stato allievo di David Hilbert (1862–1943) e si era familiarizzato con le matrici a numero finito di dimensioni aiutando Richard Courant (1888–1972) nella redazione di alcune parti del primo volume del testo di metodi matematici che Courant stava scrivendo con lo stesso Hilbert. Tuttavia, le matrici necessarie a Born e Jordan hanno dimensionalità infinita e le loro proprietà non sono sempre un'ovvia estensione di quelle a numero finito di dimensioni

poi del matematico americano Norbert Wiener<sup>4</sup>, cercò di dare veste matematica più generale alla meccanica delle matrici ricorrendo agli operatori lineari.

Anche Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984), nello sviluppare indipendentemente la sua formulazione della meccanica quantistica, si era reso conto della necessità di distinguere tra quelli che lui chiamava *c*-numeri, corrispondenti ai moltiplicatori classici, e i *q*-numeri della meccanica quantistica, con proprietà di operatori<sup>5</sup>. La sua formulazione risulta oggi più elegante e semplice e verrà introdotta in un successivo capitolo (cap. VI). Essa è comunque equivalente all'approccio di Göttingen, così come equivalente apparve subito anche la meccanica ondulatoria di Schrödinger<sup>6</sup>.

In questo capitolo ci si limita a sviluppare il formalismo elementare della meccanica quantistica, esaminando gli operatori che intervengono in meccanica quantistica e studiando le soluzioni dell'equazione agli autovalori da essi soddisfatta. Si mostra quindi che il problema centrale di risolvere l'equazione di Schrödinger può essere ricondotto allo studio di un'equazione agli autovalori per l'operatore che corrisponde alla hamiltoniana del sistema.

La connessione tra variabile fisica e operatore e un esame delle proprietà algebriche degli operatori fanno scoprire una fondamentale differenza tra la descrizione classica e quella quantistica. Classicamente non esistono limitazioni di principio nell'ottenere valori precisi da misurazioni successive di diverse variabili dinamiche; anzi, misurazioni successive arricchiscono la conoscenza del sistema. Invece non tutte le osservabili fisiche risultano tra di loro compatibili se il sistema viene descritto in termini quantistici. Questo fatto è una conseguenza del principio di indeterminazione, scoperto nel 1927 da Heisenberg<sup>7</sup> attraverso un esame critico delle operazioni di misurazione delle variabili di posizione e di impulso. Anche se le relazioni che esistono tra le indeterminazioni delle misure di osservabili incompatibili sono direttamente derivabili dal formalismo, le limitazioni imposte dal principio di indeterminazione sono un fatto della natura dei fenomeni fisici e scaturiscono dagli effetti sconvolgenti che il processo di misurazione può avere in certi casi sul sistema fisico allo studio: non si può più prescindere, come in fisica classica, dall'interazione

---

(cfr. App. C).

R. Courant e D. Hilbert: *Methoden der mathematischen Physik*, Springer, Berlino, 1924, 2 voll.; trad. inglese della seconda edizione (1931): *Methods of Mathematical Physics*, Interscience, New York, 1953.

<sup>4</sup> Cfr. n. 32 p. 128.

<sup>5</sup> P.A.M. Dirac: *Quantum Mechanics and a Preliminary Investigation of the Hydrogen Atom [Meccanica quantistica e uno studio preliminare dell'atomo di idrogeno]*, Proceedings of the Royal Society of London **A110** (1926) 561–579, ricevuto dalla rivista il 22 gennaio 1926.

<sup>6</sup> E. Schrödinger: *Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen [Relazione tra la meccanica quantistica di Heisenberg-Born-Jordan e la mia]*, Annalen der Physik **79** (1926) 734–756, ricevuto dalla rivista il 18 marzo 1926.

<sup>7</sup> W. Heisenberg: *Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik [Il contenuto intuitivo della cinematica e della meccanica nella teoria quantistica]*, Zeitschrift für Physik **43** (1927) 172–198, ricevuto dalla rivista il 23 marzo 1927. Traduzione italiana nel libro di L. de Broglie, E. Schrödinger, W. Heisenberg: *Onde e particelle in armonia. Alle sorgenti della meccanica quantistica*, introduzione e cura di S. Boffi, Jaca Book, Milano, 1991.

### Operatori quantistici

perturbatrice introdotta sul sistema da parte dello strumento di osservazione. La descrizione quantistica, mediante un insieme di postulati coerenti nell'interpretare il formalismo sviluppato, permette di tenere conto di ciò, superando quelli che a prima vista potrebbero essere ritenuti aspetti paradossali.

#### IV.1. Operatori quantistici

È stato riconosciuto che le funzioni fisicamente interessanti per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger per una particella sono le funzioni a valori complessi appartenenti a  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ . Tale spazio è uno spazio vettoriale (lineare) complesso, in accordo col principio di sovrapposizione lineare adottato nella descrizione ondulatoria. Identificando funzioni quasi-ovunque uguali, lo spazio  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  può essere strutturato in uno *spazio di Hilbert*, definendo il *prodotto interno* (o *prodotto scalare*) tra due classi di funzioni  $f(\mathbf{r}), g(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ :

$$\langle f|g \rangle \equiv \int d\mathbf{r} f^*(\mathbf{r})g(\mathbf{r}). \quad (1.1)$$

Il prodotto scalare (1.1) gode delle seguenti proprietà:

$$\langle f|g \rangle = \langle g|f \rangle^*, \quad (1.2)$$

$$\langle f|ag_1 + bg_2 \rangle = a\langle f|g_1 \rangle + b\langle f|g_2 \rangle, \quad (1.3)$$

$$\langle af_1 + bf_2|g \rangle = a^*\langle f_1|g \rangle + b^*\langle f_2|g \rangle, \quad (1.4)$$

essendo  $f_1, f_2, g_1, g_2 \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  e  $a, b$  numeri complessi. Pertanto il prodotto scalare è lineare nella funzione di destra e antilineare nella funzione (complessa coniugata) di sinistra. Se

$$\langle f|g \rangle = 0, \quad (1.5)$$

si dice che  $f$  e  $g$  sono tra di loro *ortogonali*. Inoltre la *norma* di  $f$  è un numero reale non negativo:

$$\langle f|f \rangle \geq 0, \quad (1.6)$$

con il segno di uguale che vale se e solo se  $f \equiv 0$ .

*Esercizio 1.1*

Utilizzando le proprietà (1.2), (1.3) e (1.6), dimostrare la disuguaglianza

$$|\langle f|g \rangle| \leq \sqrt{\langle f|f \rangle} \sqrt{\langle g|g \rangle}, \quad (1.7)$$

dove il segno di uguale si verifica se e solo se  $f$  e  $g$  sono tra di loro proporzionali.

La (1.7) è nota come disuguaglianza di Schwarz<sup>8</sup>. Essa garantisce la convergenza dell'integrale (1.1) quando  $f, g \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ .

Sulle funzioni  $f$  è necessario agire con *operatori*:

$$f' = Af. \quad (1.8)$$

In generale, oltre alla sua espressione esplicita<sup>9</sup>, la completa definizione dell'operatore  $A$  richiede anche la definizione del *dominio*  $\mathcal{D}(A)$  delle funzioni  $f$  su cui  $A$  opera. L'insieme di funzioni,  $\mathcal{R}(A)$ , tale che a ogni sua funzione  $f'$  corrisponda almeno una funzione  $f \in \mathcal{D}(A)$ , è detto *rango* o *immagine* di  $A$ : in generale il dominio  $\mathcal{D}(A)$  non coincide con la sua immagine  $\mathcal{R}(A)$ .

Nel seguito il dominio  $\mathcal{D}(H)$  dell'operatore hamiltoniano  $H$  verrà indicato con  $\mathcal{H}$  e avranno interesse operatori  $A$  con dominio  $\mathcal{D}(A)$  denso<sup>10</sup> in  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ . Dato che la hamiltoniana contiene l'energia cinetica, che nello spazio delle posizioni è rappresentata da un laplaciano, gli elementi dello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  sono funzioni  $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  tali da potersi anche derivare due volte (eventualmente nel senso delle distribuzioni, cfr. Appendice A). Inoltre sarà opportuno che gli elementi di  $\mathcal{R}(H)$  siano ancora in  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ . Tuttavia, con opportune cautele si renderà necessario utilizzare anche operatori con un dominio più ampio.

Per salvaguardare il principio di sovrapposizione lineare occorre considerare *operatori lineari*:

$$A(af_1 + bf_2) = aAf_1 + bAf_2. \quad (1.9)$$

Si possono ricordare alcune definizioni riferite a operatori lineari<sup>11</sup>:

1) *operatore aggiunto*  $A^\dagger$  (o *coniugato hermitiano*) di  $A$ :

$$\langle A^\dagger f|g \rangle = \langle f|Ag \rangle, \quad \forall g \in \mathcal{D}(A). \quad (1.10)$$

<sup>8</sup> Hermann Amandus Schwarz (1843–1921).

<sup>9</sup>  $A$  può essere, per esempio, di tipo moltiplicativo (per un numero o una funzione), derivativo oppure integrale.

<sup>10</sup> Un insieme  $I \subset X$  è detto *denso* in  $X$  se l'intersezione di tutti gli insiemi chiusi contenenti  $I$  è uguale a  $X$ . Ne segue che  $I$  è denso in  $X$  se e solo se  $f$  ortogonale a  $I$  per  $f \in X$  implica  $f = 0$ .

<sup>11</sup> Frigyes Riesz e Béla Sz.-Nagy: *Leçons d'analyse fonctionnelle*, Académie des Sciences de Hongrie, 1955 [traduzione inglese della seconda edizione francese a cura di Leo F. Boron: *Functional Analysis*, Frederick Ungar Publ. Co., New York, 1955].

Guido Fano: *Metodi matematici della meccanica quantistica*, Zanichelli, Bologna, 1967.

Il dominio  $\mathcal{D}(A^\dagger)$  di  $A^\dagger$  è implicitamente definito come l'insieme di funzioni  $f$  in corrispondenza delle quali è univocamente determinata la funzione  $A^\dagger f$  che soddisfa la (1.10).

2) *operatore hermitiano*<sup>12</sup>:

$$\langle Af|g\rangle = \langle f|Ag\rangle, \quad \forall f, g \in \mathcal{D}(A). \quad (1.11)$$

Se  $A$  è hermitiano e  $\mathcal{D}(A)$  è denso in  $\mathcal{H}$ ,  $A$  è detto *simmetrico*. In tal caso  $A^\dagger$  costituisce un'estensione di  $A$ : infatti la (1.11) implica che le funzioni  $\in \mathcal{D}(A)$  appartengano anche a  $\mathcal{D}(A^\dagger)$  ( $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(A^\dagger)$ ) e in generale  $\mathcal{D}(A) \neq \mathcal{D}(A^\dagger)$ .

3) *operatore autoaggiunto*:

$$A^\dagger = A, \quad \mathcal{D}(A^\dagger) = \mathcal{D}(A). \quad (1.12)$$

Nel caso di spazi a numero *finito* di dimensioni non c'è distinzione tra operatori hermitiani e operatori autoaggiunti. D'altra parte, in generale per un  $A$  simmetrico esiste sempre un'estensione chiusa ( $A^\dagger$ ), ma non è detto che questa estensione sia un operatore autoaggiunto<sup>13</sup>.

4) *operatore essenzialmente autoaggiunto*:

$$(A^\dagger)^\dagger = A^\dagger, \quad \mathcal{D}(A^{\dagger\dagger}) = \mathcal{D}(A^\dagger). \quad (1.13)$$

Se l'applicazione dell'operatore  $A$  provoca la moltiplicazione per un numero complesso  $a$ , risultano:

$$A = a, \quad A^\dagger = a^*. \quad (1.14)$$

In questo caso il coniugato hermitiano  $A^\dagger$  dell'operatore  $A$  è semplicemente ottenuto prendendo il complesso coniugato di  $A$ . L'operazione di coniugazione hermitiana è dunque un'estensione agli operatori della complessa coniugazione sui numeri.

Per gli sviluppi successivi, quando si abbia a che fare con operatori autoaggiunti ( $A = A^\dagger$ ), può essere utile introdurre la seguente notazione:

$$\begin{aligned} \langle f|A|g\rangle &= \langle Af|g\rangle \\ &= \langle f|Ag\rangle, \quad \text{per } A = A^\dagger. \end{aligned} \quad (1.15)$$

In questo caso il valore medio dell'operatore  $A$ ,

$$\langle A \rangle \equiv \langle f|A|f\rangle, \quad (1.16)$$

<sup>12</sup> Il nome deriva dal matematico francese Charles Hermite (1822–1901) che utilizzò tali operatori nello studio delle forme quadratiche.

<sup>13</sup> Spesso nel linguaggio gergale dei fisici *hermitiano* e *autoaggiunto* vengono considerati impropriamente sinonimi.

risulta reale. Infatti, ricorrendo alle proprietà (1.2), (1.11) e (1.12), si verifica che è

$$\begin{aligned}\langle A \rangle^* &\equiv \langle f|A|f \rangle^* = \langle f|Af \rangle^* \\ &= \langle Af|f \rangle \\ &= \langle f|Af \rangle = \langle f|A|f \rangle \equiv \langle A \rangle.\end{aligned}\tag{1.17}$$

Perciò gli operatori autoaggiunti sono una generalizzazione dei numeri reali.

La misura di un'osservabile è sempre un numero reale; se si vogliono associare degli operatori alle variabili dinamiche, la (1.17) suggerisce che si debbano scegliere operatori autoaggiunti. Si vedrà al paragrafo IV.2 che la (1.17) è solo una conseguenza di proprietà generali che rendono gli operatori autoaggiunti particolarmente adatti ad essere associati alle variabili fisiche osservabili <sup>14</sup>.

*Esempio 1.1*

Si può verificare che l'operatore di posizione è autoaggiunto. Mettendosi in una sola dimensione spaziale per semplicità, la condizione

$$x^\dagger = x\tag{1.18}$$

segue dalle relazioni di definizione (1.11) e (1.12). Infatti,  $\forall f, g \in \mathcal{D}(x)$ , si ha:

$$\int dx f^*(x) x g(x) = \int dx [x f(x)]^* g(x).\tag{1.19}$$

Inoltre è immediato verificare che è  $\mathcal{D}(x) = \mathcal{D}(x^\dagger)$ .

*Esempio 1.2*

L'operatore di derivazione rispetto a  $x$  non è autoaggiunto. Infatti,  $\forall f, g \in \mathcal{D}(d/dx)$ , risulta

$$\begin{aligned}\int dx f^*(x) \frac{dg(x)}{dx} &= - \int dx \frac{df^*(x)}{dx} g(x) \\ &= \int dx \left( -\frac{df(x)}{dx} \right)^* g(x)\end{aligned}\tag{1.20}$$

e quindi

$$\left( \frac{d}{dx} \right)^\dagger = -\frac{d}{dx},\tag{1.21}$$

cioè l'operatore di derivazione è antihermitiano.

---

<sup>14</sup> Non esiste però una corrispondenza biunivoca tra osservabili fisiche e operatori autoaggiunti, perché si possono inventare operatori autoaggiunti cui non corrispondono osservabili fisiche. Per una discussione su questo punto si veda per esempio il testo di Bernard d'Espagnat: *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics*, Addison Wesley, Redwood City, Cal., seconda edizione, 1976 (rist. 1989), cap. 7 [traduzione italiana di Eugenio Galzenati: *I fondamenti concettuali della meccanica quantistica*, Bibliopolis, Napoli, 1980].

*Esempio 1.3*

L'operatore associato alla variabile classica impulso (cfr. Tab. III.1) risulta un operatore autoaggiunto. Mettendosi sempre in una sola dimensione spaziale per semplicità, la condizione

$$p^\dagger = p \quad (1.22)$$

segue ancora dalle definizioni (1.11) e (1.12). Infatti,  $\forall f, g \in \mathcal{D}(p)$ , si ha:

$$\begin{aligned} \int dx f^*(x) \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) g(x) &= i\hbar \int dx \frac{df^*(x)}{dx} g(x) \\ &= \int dx \left( -i\hbar \frac{df(x)}{dx} \right)^* g(x). \end{aligned} \quad (1.23)$$

Nel primo passaggio il contributo dei limiti nell'integrazione per parti si azzerà grazie al fatto che  $f$  e  $g$  sono  $\in \mathcal{D}(p)$  e quindi svaniscono all'infinito. Inoltre è anche  $\mathcal{D}(p) = \mathcal{D}(p^\dagger)$ .

*Esercizio 1.2*

L'operatore di posizione nello spazio degli impulsi (cfr. Tab. III.1) è un operatore autoaggiunto?

Si definisce prodotto  $C$  di due operatori  $A$  e  $B$ ,

$$C = AB, \quad (1.24)$$

l'applicazione successiva dei due operatori:

$$Cf = A(Bf), \quad (1.25)$$

con  $f \in \mathcal{D}(B)$  e  $Bf \in \mathcal{D}(A)$ . Risulta  $\mathcal{D}(C) \subseteq \mathcal{D}(B)$ . L'operatore coniugato hermitiano di  $C$  è

$$C^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \quad (1.26)$$

Infatti, siccome  $f \in \mathcal{D}(B)$  e  $Bf \in \mathcal{D}(A)$ , per  $g \in \mathcal{D}(A^\dagger)$  e  $A^\dagger g \in \mathcal{D}(B^\dagger)$  si può scrivere

$$\begin{aligned} \langle C^\dagger g | f \rangle &\equiv \langle B^\dagger A^\dagger g | f \rangle = \langle A^\dagger g | Bf \rangle \\ &= \langle g | ABf \rangle, \end{aligned}$$

cioè

$$\langle C^\dagger g | f \rangle = \langle g | Cf \rangle.$$

Ciò implica in generale  $C^\dagger \neq C$ , in quanto:

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \neq AB. \quad (1.27)$$

Questa conclusione vale anche quando  $A$  e  $B$  sono operatori autoaggiunti. In questo caso, per ottenere  $C^\dagger = C$ , cioè

$$(AB)^\dagger = AB. \quad (1.28)$$

occorre che sia anche

$$AB - BA = 0. \quad (1.29)$$

Si dice allora che  $A$  e  $B$  *commutano* e si scrive:

$$[A, B] = 0, \quad (1.30)$$

dove si è introdotto il simbolo di *commutatore*  $[\dots, \dots]$  per indicare il primo membro della (1.29).

*Esercizio 1.3*

Controllare se l'operatore  $xp$  è un operatore autoaggiunto.

*Esercizio 1.4*

Costruire l'operatore autoaggiunto corrispondente alla variabile dinamica classica  $xp$ .

*Esercizio 1.5*

Definito l'operatore di momento angolare,

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad (1.31)$$

di componenti cartesiane

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x, \quad (1.32)$$

controllare se è un operatore autoaggiunto.

*Esercizio 1.6*

Costruire l'operatore autoaggiunto corrispondente alla variabile dinamica classica individuata dal vettore di Laplace–Runge–Lenz  $\mathbf{R} = (1/m)\mathbf{p} \times \mathbf{L} - (e^2/r)\mathbf{r}$  (cfr. Esercizio I.1.15).

È importante riconoscere che non sempre si verifica la proprietà (1.30) per due operatori autoaggiunti. Infatti se si considerano l'operatore di posizione  $x$  e l'operatore di impulso  $p$ , per ogni  $\Psi(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  e derivabile, si ottiene:

$$\begin{aligned}(xp - px)\Psi(x) &= x\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\Psi(x) - \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)x\Psi(x) \\ &= i\hbar\Psi(x).\end{aligned}$$

Pertanto risulta

$$[x, p] = i\hbar. \quad (1.33)$$

Il commutatore (1.33) di  $x$  con  $p$  è il  $c$ -numero  $i\hbar$ .

È da rilevare che il commutatore non dipende dalla rappresentazione della funzione d'onda scelta. Se, invece di considerare funzioni  $\Psi(x)$  per valutare l'effetto del commutatore  $[x, p]$  nello spazio delle posizioni, si utilizzano funzioni  $A(k)$  (sempre  $\in \mathcal{L}^2$  e derivabili) nello spazio degli impulsi come nel paragrafo III.7, si ottiene infatti:

$$\begin{aligned}[x, p]A(k) &= i\frac{d}{dk}\hbar kA(k) - \hbar ki\frac{d}{dk}A(k) \\ &= i\hbar A(k).\end{aligned}$$

Altre proprietà del commutatore di operatori lineari sono le seguenti:

$$\begin{aligned}[a, A] &= 0, \\ [aA + bB, C] &= a[A, C] + b[B, C], \\ [AB, C] &= A[B, C] + [A, C]B,\end{aligned} \quad (1.34)$$

dove  $a, b$  sono numeri complessi. Queste proprietà per i commutatori sono le stesse proprietà formali (I.1.13) delle parentesi di Poisson, così come la (1.33) è l'analoga della terza delle (I.1.15)<sup>15</sup>.

Se  $[A, B] = c$ -numero, vale anche la relazione

$$[F(A), B] = \frac{dF(A)}{dA}[A, B], \quad (1.35)$$

e, in particolare,

$$[A^n, B] = nA^{n-1}[A, B]. \quad (1.36)$$

Infine si può verificare la seguente identità:

$$[[A, B], C] + [[B, C], A] + [[C, A], B] = 0 \quad (1.37)$$

che è l'analoga dell'identità di Jacobi (I.1.14).

<sup>15</sup> Il commutatore a livello di matrici fu introdotto in meccanica quantistica da M. Born e P. Jordan (cfr. n. 5 p. 106).

L'approccio algebrico agli operatori e il legame tra commutatori e parentesi di Poisson fu introdotto da P.A.M. Dirac: *The fundamental equations of quantum mechanics [Le equazioni fondamentali della meccanica quantistica]*, Proceedings of the Royal Society of London **A109** (1925) 642–653.

*Esercizio 1.7*

Valutare i commutatori tra gli operatori di posizione in tre dimensioni spaziali  $x, y, z$ .

*Esercizio 1.8*

Valutare i commutatori tra gli operatori di impulso in tre dimensioni spaziali  $p_x, p_y, p_z$ .

*Esercizio 1.9*

Valutare i commutatori tra gli operatori di posizione  $x, y, z$  e gli operatori di impulso  $p_x, p_y, p_z$ .

*Esercizio 1.10*

Verificare i seguenti risultati:

$$[H, x] = -\frac{i\hbar}{m}p_x, \quad (1.38)$$

$$[H, p_x] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}, \quad (1.39)$$

dove  $H = H^\dagger = p^2/(2m) + V(\mathbf{r})$ .

*Esercizio 1.11*

Verificare i seguenti risultati per le componenti dell'operatore di momento angolare:

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k, \quad (1.40)$$

dove  $\epsilon_{ijk}$  è il tensore totalmente antisimmetrico, eq. (I.1.18),

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & (i, j, k) = (x, y, z) \text{ ciclici,} \\ -1, & (i, j, k) = (y, x, z) \text{ ciclici,} \\ 0, & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (1.41)$$

*Operatori quantistici*

*Esercizio 1.12*

Definito il quadrato del momento angolare,

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, \quad (1.42)$$

verificare il risultato:

$$[L^2, L_i] = 0. \quad (1.43)$$

*Esercizio 1.13*

Verificare le seguenti regole di commutazione:

$$\begin{aligned} [x_i, L_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}x_k, \\ [p_i, L_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}p_k \end{aligned} \quad (1.44)$$

tra le componenti di  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{p}$  e le componenti di  $\mathbf{L}$ .

*Esercizio 1.14*

Definito l'operatore corrispondente al vettore di Laplace–Runge–Lenz,

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \frac{e^2}{r}\mathbf{r}, \quad (1.45)$$

verificare le seguenti regole di commutazione:

$$\begin{aligned} [L_i, R_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}R_k, \\ [R_i, R_j] &= -\frac{2H}{m}i\hbar\epsilon_{ijk}L_k, \end{aligned} \quad (1.46)$$

dove

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}.$$

*Esercizio 1.15*

Dimostrare l'identità

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \dots, \quad (1.47)$$

dove l'operatore  $e^A$ , quando  $A$  è continuo, va inteso nel senso di uno sviluppo in serie,

$$e^A = \mathbb{1} + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \dots, \quad (1.48)$$

dove  $\mathbb{1}$  è l'operatore identità.

[Suggerimento: si faccia uno sviluppo in serie di Taylor dell'operatore  $f(\lambda) = e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}$  intorno a  $f(0) = B$  e si ponga alla fine  $\lambda = 1$ .]

*IV.2. Equazione agli autovalori*

Si definisce equazione agli autovalori l'equazione:

$$Au = \alpha u. \quad (2.1)$$

Essa determina una o più funzioni  $u$ , diverse da zero e  $\in \mathcal{D}(A)$ , che, per l'applicazione dell'operatore  $A$ , risultano semplicemente moltiplicate per un numero, indicato genericamente con  $\alpha$ . Si dice che la funzione  $u$  è l'*autofunzione propria* di  $A$  appartenente all'*autovalore proprio*  $\alpha$ .

Per un operatore simmetrico  $A$  (e quindi in particolare per un operatore autoaggiunto,  $A = A^\dagger$ ) gli autovalori  $\alpha$  sono *reali* e due funzioni  $u$  e  $u'$  che soddisfano la (2.1) per autovalori diversi,  $\alpha \neq \alpha'$ , risultano tra di loro *ortogonali*:

$$\langle u | u' \rangle = 0. \quad (2.2)$$

Infatti, per definizione di operatore simmetrico e dalle ipotesi

$$Au = \alpha u, \quad Au' = \alpha' u',$$

segue

$$\begin{aligned} 0 &= \langle u' | Au \rangle - \langle Au' | u \rangle \\ &= \alpha \langle u' | u \rangle - \alpha'^* \langle u' | u \rangle \\ &= (\alpha - \alpha'^*) \langle u' | u \rangle, \end{aligned}$$

cioè si deve avere  $\alpha = \alpha^*$ , se  $u = u'$ , oppure la (2.2), se  $\alpha \neq \alpha'$ .

Se per un particolare autovalore  $\alpha$  la (2.1) è soddisfatta da una unica autofunzione  $u$ , si dice che l'autovalore  $\alpha$  è *semplice*. Può succedere però che per un certo  $\alpha$  la

(2.1) sia soddisfatta da più funzioni  $u \in \mathcal{D}(A)$ . In tal caso si dice che  $\alpha$  è *molteplice* o *degenere*: se le autofunzioni proprie linearmente indipendenti sono  $r$ , questo è l'ordine di degenerazione dell'autovalore  $\alpha$  e l'insieme di tutte le autofunzioni di  $A$  appartenenti allo stesso autovalore  $\alpha$  costituisce un sottospazio  $\mathcal{D}_\alpha$  a  $r$  dimensioni. Inoltre, per la (2.2) ogni sottospazio  $\mathcal{D}_\alpha$  è ortogonale ad ogni sottospazio  $\mathcal{D}_{\alpha'}$  con  $\alpha \neq \alpha'$ .

Per uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  separabile<sup>16</sup> l'insieme di sottospazi  $\mathcal{H}_\alpha$  mutuamente ortogonali è al più numerabile. Ciò significa che l'insieme degli autovalori propri di  $A$  è in tal caso numerabile e può essere contrassegnato con indici interi:

$$\{\alpha_n\} = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots\}. \quad (2.3)$$

L'insieme degli autovalori (2.3) costituisce lo spettro *puntuale* (o *discreto*) dell'operatore  $A$ . Lo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  risulta la *somma diretta* dei sottospazi  $\mathcal{H}_\alpha$ :  $\mathcal{H} = \sum_\alpha \oplus \mathcal{H}_\alpha$ .

Corrispondentemente, le autofunzioni  $u_n(\mathbf{r})$  costituiscono un insieme numerabile di funzioni in  $\mathcal{H}$ , che può essere *ortonormalizzato* secondo la relazione

$$\begin{aligned} \langle u_m | u_n \rangle &\equiv \int d\mathbf{r} u_m^*(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}) \\ &= \delta_{nm}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

La normalizzazione ( $n = m$ ) è sempre possibile per funzioni  $u_n \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  e l'ortogonalità ( $n \neq m$ ) è garantita nel caso  $\alpha_n \neq \alpha_m$ . Nel caso di degenerazione ( $\alpha_n = \alpha_m$ ) tutte le funzioni appartenenti al sottospazio degenerare sono autofunzioni proprie dell'operatore  $A$ , ma non sono in generale ortogonali tra di loro. Però si può sempre ricorrere a un opportuno insieme di  $r$  autofunzioni appartenenti al sottospazio degenerare, linearmente indipendenti e ortogonali tra di loro come nella (2.4), in modo che ogni altra funzione del sottospazio possa essere espressa come combinazione lineare dell'insieme prescelto.

L'insieme di tutte le autofunzioni proprie dell'operatore  $A$  è *completo*, nel senso che una qualsiasi  $f \in \mathcal{H}$  può essere costruita come combinazione lineare delle  $u_n$ ,

$$f(\mathbf{r}) = \sum_n c_n u_n(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

con  $c_n$  coefficienti complessi<sup>17</sup>. L'insieme  $\{u_n\}$  pertanto costituisce una *base* in  $\mathcal{H}$  su cui sviluppare una qualsiasi  $f \in \mathcal{H}$ , esattamente allo stesso modo in cui i versori di base di un sistema di riferimento ortogonale cartesiano sono utilizzati in uno spazio vettoriale a numero finito di dimensioni per esprimere un qualunque altro vettore. Grazie alla (2.4), i coefficienti  $c_n$  si possono esplicitare:

<sup>16</sup> Si dice separabile lo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  per il quale si può trovare una successione di funzioni  $\{f_n^{(\epsilon)}\}$  tale che le sfere di centro  $f_n^{(\epsilon)}$  e raggio  $\epsilon$  ricoprano  $\mathcal{H}$ .

<sup>17</sup> La completezza è diretta conseguenza del fatto che lo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  è separabile.

$$\begin{aligned}\langle u_m | f \rangle &= \sum_n c_n \langle u_m | u_n \rangle \\ &= c_m.\end{aligned}\tag{2.6}$$

In analogia ancora col caso di uno spazio a numero finito di dimensioni, i coefficienti  $c_n$  si possono dunque interpretare come le componenti di  $f$  secondo gli elementi  $u_n$  della base in  $\mathcal{H}$ . Inoltre la normalizzazione di  $f$  impone

$$1 = \langle f | f \rangle = \sum_n |c_n|^2.\tag{2.7}$$

*Esercizio 2.1*

Date due funzioni  $u$  e  $v$  normalizzate, ma non ortogonali tra di loro, costruire, a partire dalla  $u$ , la funzione  $f$  ortogonale a  $v$ .

*Esercizio 2.2*

Date due autofunzioni proprie  $v_1$  e  $v_2$ , normalizzate, ma non ortogonali tra di loro e appartenenti allo stesso autovalore  $\alpha$  doppiamente degenerato dell'operatore  $A$ , costruire le due autofunzioni proprie  $u_1$  e  $u_2$ , linearmente indipendenti e tra di loro ortogonali.

Se  $f, g \in \mathcal{H}$ , con  $f$  data dalla (2.5) e  $g$  da una analoga relazione con coefficienti  $b_n$ , grazie alla (2.4) il prodotto scalare tra  $f$  e  $g$  risulta

$$\begin{aligned}\langle f | g \rangle &= \sum_n \sum_m c_n^* b_m \langle u_n | u_m \rangle \\ &= \sum_n c_n^* b_n.\end{aligned}\tag{2.8}$$

La (2.8) giustifica l'uso della denominazione di prodotto scalare tra due funzioni  $\in \mathcal{H}$  per analogia con la definizione del prodotto scalare tra due vettori in uno spazio a numero finito di dimensioni.

La condizione, perché valga la (2.5) o, equivalentemente, perché l'insieme  $\{u_n\}$  costituisca una base in  $\mathcal{H}$ , si chiama proprietà di *chiusura* per l'insieme  $\{u_n\}$  e si scrive:

$$\sum_n u_n(\mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').\tag{2.9}$$

Infatti è identicamente

$$f(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f(\mathbf{r}').\tag{2.10}$$

D'altra parte, per la (2.6), il secondo membro della (2.5) diventa

Equazione agli autovalori

$$\begin{aligned} \sum_n c_n u_n(\mathbf{r}) &= \sum_n \left[ \int d\mathbf{r}' u_n^*(\mathbf{r}') f(\mathbf{r}') \right] u_n(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r}' \left[ \sum_n u_n(\mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{r}') \right] f(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Dal confronto tra (2.10) e (2.11) segue la (2.9).

*Esercizio 2.3*

Per una funzione  $f(\mathbf{r})$  sviluppata secondo la (2.5) verificare la relazione

$$\int d\mathbf{r}' u_n(\mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{r}') f(\mathbf{r}') = c_n u_n(\mathbf{r}).$$

*Esercizio 2.4*

Qual è il significato dell'applicazione dell'operatore (integrale)

$$P_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = u_n(\mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{r}') \quad (2.12)$$

alla funzione  $f(\mathbf{r})$  nell'Esercizio precedente?

*Esercizio 2.5*

Qual è il significato dell'applicazione dell'operatore (integrale)

$$\sum_n P_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n u_n(\mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{r}') \quad (2.13)$$

alla funzione  $f(\mathbf{r})$ ?

Ortonormalizzazione (2.4), completezza (2.5) e chiusura (2.9) sono caratteristiche fondamentali dell'insieme di autofunzioni proprie di un qualsiasi operatore simmetrico che abbia solo uno spettro discreto.

È importante riconoscere che l'equazione agli autovalori (2.1) può essere soddisfatta anche per funzioni  $\notin \mathcal{H}$ . In tal caso si parla di *autofunzioni improprie* e *autovalori impropri*. Tali autofunzioni appartengono a uno spazio più ampio di  $\mathcal{H}$ , in cui però  $\mathcal{H}$  è denso secondo un'appropriata topologia<sup>18</sup>. Gli autovalori impropri costituiscono uno spettro *continuo*, variano cioè entro un intervallo continuo di numeri reali. Pertanto le corrispondenti autofunzioni (improprie)  $u_\alpha(\mathbf{r})$  possono essere caratterizzate da un indice continuo  $\alpha$ .

<sup>18</sup> Se  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ , tale spazio più ampio può essere identificato con lo spazio delle distribuzioni temperate (cfr. paragrafo A.1). Però per una larga classe di operatori differenziali le autofunzioni improprie si riducono a funzioni ordinarie: si vedano i successivi Esempi 2.5 e 2.6.

Anche se non appartengono a  $\mathcal{H}$ , le autofunzioni improprie permettono di costruire funzioni che vi appartengono, come nel caso delle onde piane che si possono combinare in un pacchetto di onde. In presenza di spettro puramente continuo, le autofunzioni improprie costituiscono un insieme completo su cui sviluppare una qualsiasi  $f \in \mathcal{H}$ :

$$f(\mathbf{r}) = \int d\alpha c(\alpha) u_\alpha(\mathbf{r}), \quad (2.14)$$

dove i coefficienti di sviluppo  $c(\alpha)$  sono in generale complessi e dipendono dall'indice continuo  $\alpha$ . La condizione di ortonormalizzazione è ora

$$\int d\mathbf{r} u_\alpha^*(\mathbf{r}) u_{\alpha'}(\mathbf{r}) = \delta(\alpha - \alpha'), \quad (2.15)$$

che garantisce per i coefficienti  $c(\alpha)$  un'ovvia estensione della (2.6),

$$c(\alpha) = \langle u_\alpha | f \rangle = \int d\mathbf{r} u_\alpha^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}), \quad (2.16)$$

e della (2.7):

$$1 = \langle f | f \rangle = \int d\alpha |c(\alpha)|^2. \quad (2.17)$$

Infine la relazione di chiusura (2.9) diventa in questo caso:

$$\int d\alpha u_\alpha^*(\mathbf{r}) u_\alpha(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.18)$$

In generale però lo spettro può contenere sia una parte di spettro discreto, sia una parte di spettro continuo. Di conseguenza, l'insieme completo delle autofunzioni contiene sia autofunzioni proprie, sia autofunzioni improprie. Con ovvia estensione dai casi precedenti, l'ortonormalizzazione deve riguardare tutte le autofunzioni, proprie ed improprie:

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} u_m^*(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}) &= \delta_{nm}, \\ \int d\mathbf{r} u_{\alpha'}^*(\mathbf{r}) u_\alpha(\mathbf{r}) &= \delta(\alpha - \alpha'), \\ \int d\mathbf{r} u_\alpha^*(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}) &= 0. \end{aligned} \quad (2.19)$$

La completezza implica che lo sviluppo per ogni  $f \in \mathcal{H}$  sia fatto coinvolgendo sia le autofunzioni proprie, sia quelle improprie:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_n c_n u_n(\mathbf{r}) + \int d\alpha c(\alpha) u_\alpha(\mathbf{r}), \quad (2.20)$$

*Equazione agli autovalori*

con

$$1 = \langle f|f \rangle = \sum_n |c_n|^2 + \int d\alpha |c(\alpha)|^2. \quad (2.21)$$

I coefficienti complessi sono dati dalle relazioni

$$\begin{aligned} c_n &= \langle u_n|f \rangle = \int d\mathbf{r} u_n^*(\mathbf{r})f(\mathbf{r}), \\ c(\alpha) &= \langle u_\alpha|f \rangle = \int d\mathbf{r} u_\alpha^*(\mathbf{r})f(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Infine la proprietà di chiusura risulta

$$\sum_n u_n(\mathbf{r})u_n^*(\mathbf{r}') + \int d\alpha u_\alpha^*(\mathbf{r})u_\alpha(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.23)$$

*Esempio 2.1*

L'operatore

$$L_z = xp_y - yp_x, \quad (2.24)$$

corrispondente alla componente del momento angolare lungo l'asse  $z$ , nello spazio delle posizioni diventa

$$L_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (2.25)$$

L'equazione agli autovalori per  $L_z$  assume una forma più semplice se si passa a coordinate polari sferiche:

$$\begin{cases} x = r \cos \phi \sin \theta, \\ y = r \sin \phi \sin \theta, \\ z = r \cos \theta. \end{cases} \quad (2.26)$$

Infatti le derivazioni rispetto a  $x$ ,  $y$ , e  $z$  diventano

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \cos \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \phi \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \frac{\partial}{\partial y} = \sin \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin \phi \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}. \end{cases} \quad (2.27)$$

Allora l'operatore  $L_z$  opera solo sulla variabile  $\phi$ :

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (2.28)$$

L'equazione agli autovalori per  $L_z$ ,

$$L_z \Psi = \alpha \Psi, \quad (2.29)$$

diventa

$$-i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} = \alpha \Psi. \quad (2.30)$$

La sua soluzione è del tipo

$$\Psi = c e^{i\alpha\phi/\hbar}. \quad (2.31)$$

Non tutti i valori di  $\alpha$  però sono fisicamente accettabili, in quanto si deve imporre alla (2.30) la condizione al contorno:

$$\Psi(\phi) = \Psi(\phi + 2\pi), \quad (2.32)$$

che corrisponde all'indistinguibilità del sistema rispetto a una rotazione completa intorno all'asse  $z$ . Questa condizione implica nella (2.31)

$$\alpha = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.33)$$

L'insieme dei numeri interi  $\{m\}$  pertanto costituisce (in unità  $\hbar$ ) lo spettro discreto dell'operatore  $L_z$  e le corrispondenti autofunzioni (2.31) possono essere normalizzate:

$$\int_0^{2\pi} d\phi |\Psi(\phi)|^2 = |c|^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1. \quad (2.34)$$

Il valore della costante di normalizzazione è dunque

$$c = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \quad (2.35)$$

Il procedimento seguito nell'Esempio 2.1 è tipico. L'equazione agli autovalori (eq. (2.29)) viene risolta in una certa rappresentazione, per esempio nello spazio delle posizioni, in cui dare forma analitica esplicita all'operatore e all'autofunzione (eq. (2.30)); in questo modo l'equazione agli autovalori diventa in generale un'equazione differenziale che esige, per la sua soluzione, delle condizioni al contorno; la condizione al contorno (eq. (2.32)) determina la discretizzazione dello spettro degli autovalori propri e quindi l'appartenenza delle autofunzioni proprie allo spazio  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ . Perciò infine si può normalizzare l'autofunzione e fissare la costante di normalizzazione (eq. (2.35))<sup>19</sup>.

---

<sup>19</sup> Per un breve riassunto riguardante la teoria delle equazioni differenziali si veda l'Appendice B.

*Esercizio 2.6*

Verificare le espressioni:

$$L_x = i\hbar \left( \sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \quad (2.36)$$

$$L_y = i\hbar \left( -\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right). \quad (2.37)$$

*Esercizio 2.7*

Verificare che l'operatore corrispondente al modulo quadrato del momento angolare,

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, \quad (2.38)$$

in coordinate polari sferiche ha l'espressione seguente

$$L^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right\}, \quad (2.39)$$

con  $0 \leq \theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ .

*Esempio 2.2*

L'equazione agli autovalori per l'operatore corrispondente al modulo quadrato del momento angolare (2.38) è bene studiata in analisi<sup>20</sup>. Le autofunzioni di  $L^2$  solitamente vengono indicate  $Y(\theta, \phi)$  e gli autovalori sono della forma  $\hbar^2 l(l+1)$ , con  $l = 0, 1, 2, \dots$ . Pertanto è

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (2.40)$$

dove l'indice  $l$  affisso alle autofunzioni serve a distinguerle in base all'autovalore corrispondente e  $m$  rappresenta un ulteriore numero intero che può assumere i seguenti valori:

$$|m| \leq l, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.41)$$

Le autofunzioni  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  vengono chiamate *armoniche sferiche* e sono un esempio di autofunzioni degeneri: per ogni  $l$  ce ne sono  $2l+1$  tra di loro indipendenti e corrispondenti ai  $2l+1$  valori possibili di  $m$ .

Esplicitamente risulta

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad (2.42)$$

dove, per  $m \geq 0$ , è

<sup>20</sup> Si veda ad es. il testo di E.T. Whittaker e G.N. Watson: *A Course of Modern Analysis*, The University Press, Cambridge, 1902, e successive edizioni (la quarta, del 1927, è stata più volte ristampata).

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-)^m \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!} \right]^{1/2} \sin^m \theta \frac{\partial^m}{(\partial \cos \theta)^m} P_l(\cos \theta). \quad (2.43)$$

Nella (2.43) le funzioni  $P_l(x)$  sono i *polinomi di Legendre*,

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} \left[ (x^2 - 1)^l \right], \quad (2.44)$$

le cui espressioni esplicite per  $l \leq 4$  sono riportate in Tab. 1.

Tab. 1. Polinomi di Legendre per  $l \leq 4$ .

$P_0(x) = 1$
$P_1(x) = x$
$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$
$P_3(x) = \frac{1}{2}x(5x^2 - 3)$
$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$

Per valori di  $m$  negativi si ricorre alla relazione

$$Y_{l,-m}(\theta, \phi) = (-)^m Y_{lm}^*(\theta, \phi). \quad (2.45)$$

Le armoniche sferiche sono un insieme completo ortonormale:

$$\int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (2.46)$$

Inoltre valgono i seguenti casi particolari:

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta), \quad (2.47)$$

$$Y_{lm}(0, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0}, \quad (2.48)$$

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-)^l Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (2.49)$$

In quest'ultima relazione, il primo membro è ottenuto applicando l'operatore di parità  $P$ , che ha l'effetto di invertire simultaneamente tutti e tre gli assi coordinati del sistema di riferimento cartesiano, mandando  $\theta$  in  $\pi - \theta$  e  $\phi$  in  $\phi + \pi$ :

Equazione agli autovalori

$$PY_{lm}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi). \quad (2.50)$$

Pertanto la (2.49) indica che le armoniche sferiche per  $l$  pari sono funzioni pari, per  $l$  dispari sono funzioni dispari; quindi, oltre ad essere autofunzioni di  $L^2$ , sono anche autofunzioni di  $P$  appartenenti all'autovalore  $(-)^l$ :

$$PY_{lm}(\theta, \phi) = (-)^l Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (2.51)$$

Le armoniche sferiche sono inoltre autofunzioni di  $L_z$ ,

$$L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (2.52)$$

come si può facilmente verificare ricordando la loro definizione (2.42) e la (2.28).

L'espressione esplicita delle armoniche sferiche in coordinate polari sferiche e in coordinate cartesiane è riportata in Tab. 2 per  $l \leq 3$ .

---

Tab. 2. Armoniche sferiche  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  per  $l \leq 3$ .

---

$Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$= \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$
$Y_{10}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	$= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{1}{r} z,$
$Y_{1,\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$	$= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{1}{r} (x \pm iy),$
$Y_{20}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{1}{r^2} (3z^2 - r^2),$
$Y_{2,\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$	$= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{1}{r^2} z (x \pm iy),$
$Y_{2,\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$	$= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{1}{r^2} (x \pm iy)^2,$
$Y_{30}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^2 \theta - 3) \cos \theta$	$= \sqrt{\frac{7}{16\pi}} \frac{1}{r^3} z (5z^2 - 3r^2),$
$Y_{3,\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta e^{\pm i\phi}$	$= \mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \frac{1}{r^3} (x \pm iy) (5z^2 - r^2),$
$Y_{3,\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi}$	$= \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \frac{1}{r^3} z (x \pm iy)^2,$
$Y_{3,\pm 3}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi}$	$= \mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \frac{1}{r^3} (x \pm iy)^3.$

---

*Esercizio 2.8*

Utilizzando la Tab. 2 verificare che per  $l = 1, 2, 3$  vale la relazione

$$\frac{4\pi}{2l+1} \sum_m Y_{lm}(\theta_1, \phi_1) Y_{lm}^*(\theta_2, \phi_2) = P_l(\cos \theta_{12}), \quad (2.53)$$

dove  $\theta_{12} = \theta_1 - \theta_2$ . Tale relazione non è accidentale: si può dimostrare valida in generale per qualsiasi  $l$  (cfr. Esercizio VI.6.1).

*Esercizio 2.9*

Per un corpo rigido in rotazione con velocità angolare  $\omega$  e momento d'inerzia  $I$  il momento angolare classico ha modulo  $L = I\omega$  e la hamiltoniana classica è

$$H = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I}. \quad (2.54)$$

Risolvere l'equazione agli autovalori per la hamiltoniana quantistica corrispondente.

*Esempio 2.3*

Si consideri l'equazione agli autovalori per l'impulso,

$$p \Psi = \hbar k \Psi, \quad (2.55)$$

cercandone le soluzioni nell'insieme delle funzioni  $\Psi(x)$  continue e derivabili nell'intervallo finito  $-a \leq x \leq a$ :

$$-i \hbar \frac{d\Psi}{dx} = \hbar k \Psi, \quad |x| \leq a. \quad (2.56)$$

Ovviamente funzioni del tipo

$$\Psi(x) = c e^{ikx} \quad (2.57)$$

risolvono la (2.56). Però qui si vuole che  $p$  sia un operatore autoaggiunto,

$$\left\langle -i \hbar \frac{df}{dx} \middle| g \right\rangle = \left\langle f \middle| -i \hbar \frac{dg}{dx} \right\rangle. \quad (2.58)$$

Con ragionamenti analoghi a quelli nell'Esempio 1.3 si devono ora limitare gli integrali nella (2.58) a  $|x| \leq a$ :

$$\begin{aligned} \left\langle f \middle| -i \hbar \frac{dg}{dx} \right\rangle &= -i \hbar \int_{-a}^a dx f^*(x) \frac{dg}{dx} \\ &= -i \hbar \left[ f^*(x)g(x) \right]_{-a}^a + \int_{-a}^a dx \left( -i \hbar \frac{df}{dx} \right)^* g(x) \\ &= -i \hbar \left[ f^*(x)g(x) \right]_{-a}^a + \left\langle -i \hbar \frac{df}{dx} \middle| g \right\rangle. \end{aligned}$$

*Equazione agli autovalori*

Per eliminare il contributo dei limiti nell'integrazione per parti e far coincidere il dominio di  $p$  col dominio di  $p^\dagger$ , si deve imporre la condizione di periodicit :

$$\Psi(a) = \Psi(-a). \quad (2.59)$$

La pi  particolare condizione,

$$\Psi(a) = \Psi(-a) = 0, \quad (2.60)$$

a priori ipotizzabile per garantire l'eliminazione di un contributo dei limiti, non pone nessuna condizione sulle funzioni del dominio di  $p^\dagger$ : perci     $\mathcal{D}(p) \subseteq \mathcal{D}(p^\dagger)$ . D'altra parte funzioni del tipo (2.57) non soddisfano la (2.60), che va quindi scartata.

Invece per la (2.59) deve essere

$$\sin ka = 0,$$

cio 

$$k \rightarrow k_n = n \frac{\pi}{a}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.61)$$

La costante  $c$  nella (2.57) viene fissata per normalizzazione della  $\Psi(x)$ :

$$c = \frac{1}{\sqrt{2a}}. \quad (2.62)$$

Questo caso   sostanzialmente analogo a quello trattato nell'Esempio 2.1: la (2.56) con la condizione (2.59) equivale alla (2.30) con la (2.32), cos  come lo spettro discreto (2.61) corrisponde a quello in (2.33). La condizione al contorno in ogni caso garantisce la hermiticit  dell'operatore e ne discretizza lo spettro.

*Esempio 2.4*

Una particella libera   confinata a muoversi in una dimensione tra pareti rigide di altezza infinita poste in  $x = -a$  e  $x = a$ . Essa pu  essere descritta con la seguente hamiltoniana:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad (2.63)$$

con

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a, \\ +\infty, & |x| > a. \end{cases} \quad (2.64)$$

L'equazione agli autovalori per  $H$ ,

$$H u = E u, \quad (2.65)$$

pu  essere risolta considerando funzioni  $u = u(x)$ , continue insieme con le loro derivate prime e seconde in  $(-a, a)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = E u(x), \quad |x| \leq a. \quad (2.66)$$

Le soluzioni dell'equazione agli autovalori (2.66) si ottengono in forma esplicita secondo la teoria delle equazioni differenziali lineari a coefficienti costanti:

$$u(x) = c_1 e^{\alpha x} + c_2 e^{-\alpha x}, \quad (2.67)$$

dove si è posto

$$\alpha^2 \equiv -\frac{2mE}{\hbar^2} \equiv -k^2. \quad (2.68)$$

Naturalmente si vuole che  $H$  sia autoaggiunta, cioè per ogni  $f, g \in \mathcal{D}(H)$  deve essere

$$\left\langle -\frac{d^2 f}{dx^2} \middle| g \right\rangle = \left\langle f \middle| -\frac{d^2 g}{dx^2} \right\rangle. \quad (2.69)$$

Ciò significa

$$\begin{aligned} \left\langle f \middle| -\frac{d^2 g}{dx^2} \right\rangle &\equiv - \int_{-a}^a dx f^* \frac{d^2 g}{dx^2} \\ &= - \left[ f^* \frac{dg}{dx} \right]_{-a}^a + \int_{-a}^a dx \frac{df^*}{dx} \frac{dg}{dx} \\ &= - \left[ f^* \frac{dg}{dx} \right]_{-a}^a + \left[ \frac{df^*}{dx} g \right]_{-a}^a - \int_{-a}^a dx \frac{d^2 f^*}{dx^2} g \\ &= - \left[ f^* \frac{dg}{dx} \right]_{-a}^a + \left[ \frac{df^*}{dx} g \right]_{-a}^a + \left\langle -\frac{d^2 f}{dx^2} \middle| g \right\rangle. \end{aligned}$$

Perché valga la (2.69) si possono a priori seguire due vie: la prima, ispirata dall'Esempio 2.3, consiste nell'imporre una condizione di periodicità sia sulla funzione ( $f$  o  $g$ ), sia sulla sua derivata, in modo da annullare il contributo dei limiti nell'integrazione per parti. In questo caso la (2.66) va corredata con le condizioni:

$$u(a) = u(-a), \quad \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=-a}. \quad (2.70)$$

Alternativamente si può restringere il dominio di  $H$ , imponendo le condizioni:

$$u(a) = u(-a) = 0. \quad (2.71)$$

Se si utilizzano le condizioni al contorno (2.70) si riconosce subito che non si realizzano soluzioni né per  $E < 0$ , né per  $E > 0$ , in quanto si dovrebbe avere contemporaneamente  $c_1 = c_2$  e  $c_1 = -c_2$ .

Se si utilizzano le condizioni (2.71) per le soluzioni della (2.66) nella forma (2.67), ancora non si realizzano le condizioni di solubilità per  $E < 0$ , perché risulta  $c_1 = c_2 = 0$ . E questo risultato è previsto anche dalla fisica classica. Per  $E > 0$  la (2.67) diventa

$$u(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}. \quad (2.72)$$

*Equazione agli autovalori*

Sostituendo la (2.72) nelle condizioni (2.71), si trova:

$$\begin{aligned} e^{ika} (c_1 + c_2 e^{-2ika}) &= 0, \\ e^{-ika} (c_1 + c_2 e^{2ika}) &= 0, \end{aligned}$$

cioè

$$\sin 2ka = 0, \quad (2.73)$$

$$c_1 + c_2 \cos 2ka = 0. \quad (2.74)$$

La (2.73) viene soddisfatta per

$$k \rightarrow k_n = n \frac{\pi}{2a}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.75)$$

I valori (2.75) riflettono la condizione che gli estremi  $|x| = a$  siano punti di nodo per la funzione d'onda, corrispondenti all'ipotesi iniziale che in  $|x| = a$  vi siano pareti rigide che fanno rimbalzare la particella all'interno dell'intervallo  $(-a, a)$ . Lo spettro degli autovalori di energia risulta dunque discreto:

$$E \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.76)$$

Corrispondentemente, in conseguenza della (2.75) i coefficienti  $c_1$  e  $c_2$  nella (2.74) risultano legati dalla relazione

$$c_1 = (-)^{n+1} c_2. \quad (2.77)$$

Senza perdita di generalità la costante  $c_2$  si può scegliere reale. Essa viene fissata, a meno del segno, dalla condizione di normalizzazione

$$\int_{-a}^a dx |u(x)|^2 = 4ac_2^2 = 1. \quad (2.78)$$

Il segno di  $c_2$  resta arbitrario, ma è inessenziale. Invece il segno relativo tra  $c_1$  e  $c_2$  nella (2.77), dipendente da  $n$ , trasforma la (2.72) in una funzione coseno (seno) per  $n$  dispari (pari), corrispondente a una funzione pari (dispari) per lo scambio  $x \rightarrow -x$ . Le soluzioni sono dunque anche autofunzioni dell'operatore di parità  $P$  che scambia  $x$  in  $-x$ .

*Esercizio 2.10*

Perché manca la soluzione per  $n = 0$  nell'equazione (2.76) dell'Esempio 2.4?

*Esercizio 2.11*

Si confronti il risultato (2.76) con quello dell'Esercizio II.5.4.

*Esercizio 2.12*

Utilizzando il teorema di Ehrenfest, determinare il potenziale che classicamente darebbe origine allo stesso tipo di moto che risulta dall'Esempio 2.4.

*Esercizio 2.13*

Verificare che se la buca di potenziale dell'Esempio 2.4 è definita dalla condizione

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, \\ +\infty, & x < 0, x > L, \end{cases} \quad (2.79)$$

con  $L = 2a$ , lo spettro di autovalori (2.76) resta inalterato, mentre le autofunzioni risultano

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x, \quad (2.80)$$

con  $k_n = n\pi/L$ ,  $n = 1, 2, \dots$

*Esempio 2.5*

Si riconsideri l'equazione (2.56) estendendo la libertà di moto su tutto l'asse  $x$ :

$$-i\hbar \frac{d\Psi}{dx} = \hbar k \Psi. \quad (2.81)$$

Non ci sono condizioni da imporre alla  $\Psi$ , che deve comunque essere del tipo (2.57) con  $x$  compreso in  $(-\infty, +\infty)$ . In tal caso però le autofunzioni non sono a quadrato sommabile e quindi sono autofunzioni improprie. Il numero d'onda  $k$  che le caratterizza, non essendo più condizionato, può variare in modo continuo in  $(-\infty, +\infty)$ . Questo è un esempio di spettro continuo associato a funzioni  $\notin \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ .

D'altra parte, per la (III.3.32), le autofunzioni della (2.81) sono localmente integrabili e quindi con esse si possono costruire pacchetti di onde  $\in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ .

*Esempio 2.6*

La hamiltoniana della particella libera di muoversi lungo tutto l'asse  $x$  è

$$H = \frac{p^2}{2m}, \quad (2.82)$$

e la relativa equazione agli autovalori è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = E u. \quad (2.83)$$

Le soluzioni  $u = u(x)$ , continue e derivabili fino alla derivata seconda per  $x$  in  $(-\infty, +\infty)$ , sono della forma

$$u(x) = c_1 e^{ikx} \pm c_2 e^{-ikx}, \quad (2.84)$$

con

Equazione agli autovalori

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (2.85)$$

Non essendoci condizioni al contorno, non risultano limitazioni per  $k$ , che è una variabile reale continua. Di conseguenza, le funzioni (2.84) sono autofunzioni improprie ( $\notin \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ ) e quindi  $\notin \mathcal{H}$ .

Le due autofunzioni (2.84) appartengono allo stesso autovalore di energia  $E$ , ma corrispondono anche a due combinazioni lineari diverse delle autofunzioni improprie,  $\exp(\pm ikx)$ , appartenenti agli autovalori  $\pm k$  dell'operatore impulso dell'Esempio 2.5.

Funzioni non a quadrato sommabile, che siano autofunzioni improprie di un operatore autoaggiunto, come le autofunzioni  $\exp(\pm ikx)$  dell'operatore impulso, ripropongono problemi interpretativi, perché il loro modulo quadrato non può essere assimilato a una densità di probabilità di presenza. La difficoltà può essere superata considerando la densità di corrente, che per una funzione del tipo

$$u(x) = c e^{ikx}, \quad (2.86)$$

risulta:

$$\begin{aligned} j &= -\frac{i\hbar}{2m} \left[ u^*(x) \frac{du}{dx} - \frac{du^*}{dx} u(x) \right] \\ &= |c|^2 \frac{\hbar k}{m}. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Se si assume che  $j$  descriva il flusso di particelle lungo l'asse  $x$  con velocità  $v = p/m = \hbar k/m$ , allora la (2.87) deve interpretarsi come il numero di particelle incidenti lungo l'asse  $x$  che passano nell'unità di tempo per il punto  $x$ . Perciò  $\rho = |c|^2$  rappresenta il numero di particelle per unità di lunghezza dell'asse  $x$ . In tre dimensioni si avrebbe

$$\rho = |c|^2 = \text{densità di particelle}. \quad (2.88)$$

Questo tipo di interpretazione è dovuto a Born<sup>21</sup> ed è utile nello studio dei processi d'urto (cap. XII), in cui occorre considerare flussi di particelle incidenti ed emergenti rispetto a un bersaglio. In tal caso può essere comodo usare funzioni  $\notin \mathcal{L}^2$ , come per esempio le onde piane, anche se la teoria può essere sviluppata utilizzando esclusivamente funzioni  $\in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ , costruite con pacchetti di onde, e conservando le stesse convenzioni interpretative finora proposte. L'interpretazione di Born, associando una densità di particelle al modulo quadrato della funzione d'onda impropria e un flusso di particelle alla densità di corrente, consente l'uso equivalente di funzioni  $\notin \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ , come quelle in (2.86) che, per altro, sono localmente integrabili.

---

<sup>21</sup> Cfr. n. 18 p. 109.

*IV.3. Soluzione generale dell'equazione di Schrödinger*

Il problema di determinare la funzione d'onda che risolve l'equazione di Schrödinger si semplifica nel caso in cui la hamiltoniana non dipende dal tempo. In questo caso infatti si può cercare la soluzione dell'equazione

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (3.1)$$

nella forma detta a *variabili separate*, in cui la parte temporale della  $\Psi$  viene fattorizzata. Nello spazio delle posizioni, si pone:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{r})T(t). \quad (3.2)$$

Sostituendo la (3.2) nella (3.1) e dividendo per  $\Psi$ , si ottiene

$$i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{u} H u(\mathbf{r}) \equiv E. \quad (3.3)$$

Nella (3.3) si è riconosciuto che ogni membro dell'equazione è funzione di una sola variabile ( $\mathbf{r}$  oppure  $t$ ) e quindi deve essere una costante, che si è chiamata  $E$ . La (3.3) si può perciò separare nelle due equazioni:

$$i\hbar \frac{dT}{dt} = E T(t), \quad (3.4)$$

$$H u(\mathbf{r}) = E u(\mathbf{r}). \quad (3.5)$$

La (3.4) si risolve subito:

$$T(t) = c e^{-iEt/\hbar}, \quad (3.6)$$

dove  $c$  è una costante di integrazione.

La (3.5) è l'equazione agli autovalori per l'operatore hamiltoniano  $H$ . Siccome  $H$  per ipotesi non dipende dal tempo, la (3.5) è pure indicata come *equazione di Schrödinger degli stati stazionari*. La conoscenza delle sue soluzioni  $u(\mathbf{r})$  permette infatti di riscrivere la (3.2) nella forma

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = c u(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}, \quad (3.7)$$

dove la costante  $c$  viene fissata per normalizzazione della  $\Psi$ , e la corrispondente densità di probabilità,

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |c|^2 |u(\mathbf{r})|^2, \quad (3.8)$$

risulta indipendente dal tempo.

L'equazione agli autovalori (3.5) acquista dunque un ruolo centrale nella ricerca delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger.

Scelto lo spazio delle posizioni e nell'ipotesi che il potenziale sia una funzione solo di  $\mathbf{r}$ ,  $V(\mathbf{r})$ , l'equazione di Schrödinger degli stati stazionari (3.5) risulta un'equazione differenziale lineare del secondo ordine nelle derivate spaziali:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] u(\mathbf{r}) = E u(\mathbf{r}). \quad (3.9)$$

Se inoltre  $V(\mathbf{r})$  è una funzione regolare ovunque, l'equazione di Schrödinger (3.9) è risolubile con funzioni che siano continue con le loro derivate fino alla derivata seconda, cioè funzioni  $u(\mathbf{r}) \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^3)$ . Il requisito di funzioni  $u(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  impone una restrizione sullo spettro di valori di  $E$ , che diventa uno spettro discreto. La condizione di appartenenza a  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  si traduce infatti in opportune condizioni al contorno che determinano gli autovalori  $E$ , come negli esempi del paragrafo IV.2. Se per esempio  $\mathbf{r}$  percorre tutto lo spazio  $\mathbb{R}^3$ , tali condizioni sono fissate dal corretto andamento asintotico della  $u(\mathbf{r})$  per  $r \rightarrow \infty$ .

Se invece  $V(\mathbf{r})$  presenta singolarità o discontinuità, occorre studiare caso per caso. Si può comunque considerare un potenziale della forma

$$V(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{a_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} + W(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

dove  $a_i$  sono costanti reali e  $W(\mathbf{r})$  è una funzione continua di  $\mathbf{r}$ , limitata inferiormente, con al più delle superfici di discontinuità finita e con un comportamento all'infinito con divergenza non superiore a quella di un polinomio. Si può dimostrare<sup>22</sup> che in tal caso la hamiltoniana  $H$  risulta un operatore essenzialmente autoaggiunto sul dominio delle funzioni a quadrato sommabile e  $\in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^3)$ .

La (3.10) è sufficientemente generale per comprendere i casi di interesse pratico che verranno considerati in seguito.

La strategia per risolvere allora la (3.9) con la (3.10) è la seguente:

- a) al di fuori delle singolarità, le soluzioni vanno cercate  $\in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^3)$ ;
- b) sulle superfici di discontinuità si impone la continuità della funzione e della sua derivata normale alla superficie;
- c) nei punti di singolarità si richiede che la funzione non diverga.

In tal modo si ottengono soluzioni della (3.9) che sono almeno localmente integrabili e si garantisce il rispetto dell'equazione di continuità per la funzione d'onda. Imponendo l'appartenenza a  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  si ottiene anche lo spettro degli autovalori, che risulta discreto.

Non sempre questa strategia può essere seguita fino in fondo: può succedere che lo spettro discreto sia un insieme vuoto e che ci siano solo valori di  $E$  che soddisfano la (3.9) appartenendo ad autofunzioni improprie, oppure che accanto ad autovalori discreti  $E_n$  si presentino anche autovalori continui  $E$ .

---

<sup>22</sup> Tosio Kato: *Fundamental Properties of Hamiltonian Operators of Schrödinger type* [Proprietà fondamentali di operatori hamiltoniani del tipo di Schrödinger], Transactions of the American Mathematical Society **70** (1951) 195–211; *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer, Berlino, 1966, §V.5.

La conoscenza delle autofunzioni della hamiltoniana permette di esprimere in forma esplicita la soluzione particolare dell'equazione di Schrödinger nella forma a variabili separate, data dalla (3.7). Ogni funzione spaziale  $u(\mathbf{r})$  va moltiplicata per la parte dipendente dal tempo,  $T(t) = \exp(-iEt/\hbar)$ , costruita con il corrispondente autovalore di energia  $E$ . D'altra parte l'equazione di Schrödinger è un'equazione lineare, per la quale vale il principio di sovrapposizione lineare. Ne segue che anche una combinazione lineare di soluzioni particolari è ancora soluzione. Perciò, supponendo di essere in presenza di spettro della hamiltoniana sia discreto, sia continuo, la più generale funzione  $\Psi$  che risolve l'equazione di Schrödinger (3.1) è del tipo

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n u_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar} + \int dE c(E) u_E(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}, \quad (3.11)$$

con le funzioni  $u_n$  e  $u_E$  normalizzate in accordo con la (2.19). I coefficienti  $c_n$  e  $c(E)$  della sovrapposizione costituiscono il peso con cui i vari autostati della hamiltoniana intervengono nella formazione dello stato all'istante  $t$ , ciascuno pesato ancora con il fattore di fase temporale regolato dall'autovalore corrispondente.

#### IV.4. Stati stazionari e stati quasi-stazionari

La soluzione particolare (3.7) rappresenta uno stato del sistema con una ben definita energia  $E$  e il valore di aspettazione della hamiltoniana  $H$  sulla (3.7) fornisce un valore medio dell'energia che coincide esattamente con l'autovalore  $E$  corrispondente: se il sistema si trova nello stato (3.7), si ha la *certezza* di trovare  $E$  come risultato della misura di energia. Questa certezza di ottenere un preciso valore per la misura di un'osservabile si verifica ogni volta che il sistema si trova in un autostato dell'operatore associato all'osservabile stessa: lo spettro degli autovalori di questo operatore costituisce l'insieme di valori che si possono presentare come risultato di una misurazione di quell'osservabile. Da questo punto di vista la meccanica quantistica impone una limitazione ai valori che possono assumere le quantità fisiche: anche se nella descrizione classica la quantità fisica in esame ammette una continuità di valori, l'operatore autoaggiunto associato possiede solo un insieme di autovalori discreto, con la conseguenza di permettere solo questi valori discreti come risultato di una misurazione. Tipico esempio di questa situazione è l'energia di un oscillatore armonico di frequenza  $\nu$ , che risulta quantizzata con valori multipli del quanto elementare  $h\nu$ , come postulato da Planck nella sua spiegazione della radiazione di corpo nero (cfr. paragrafo V.4.).

L'evoluzione temporale della (3.7) è semplicemente determinata dal fattore di fase dipendente dal tempo e non modifica il valore di aspettazione iniziale di  $H$ : lo stato descritto dalla (3.7) è uno *stato stazionario*, che rimane autostato di  $H$  con una energia definita dall'autovalore  $E$  corrispondente.

Nel caso della soluzione generale (3.11) il sistema *non* si trova in un autostato particolare della hamiltoniana all'istante  $t$  e quindi *non* corrisponde a un suo preciso autovalore. La (3.11) costituisce piuttosto un pacchetto di onde che si modifica nel tempo a causa della diversa variazione dei fattori di fase che pesano i vari autostati di  $H$  che concorrono alla formazione del pacchetto di onde. Però, come conseguenza del fatto che  $H$  è stata assunta indipendente dal tempo, il suo valore di aspettazione sullo stato (3.11) non dipende dal tempo:

$$\begin{aligned}\langle H \rangle &\equiv \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) H \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \sum_n |c_n|^2 E_n + \int dE |c(E)|^2 E.\end{aligned}\quad (4.1)$$

Il risultato più probabile di una misurazione di energia è dunque una media di tutti i valori di energia possibili, forniti dagli autovalori: la media è pesata con le rispettive probabilità con cui i vari autostati intervengono nella costruzione dello stato  $\Psi$  nella (3.11). Acquistano così significato i coefficienti  $c_n$  e  $c(E)$  dello sviluppo (3.11). Precisamente,  $|c_n|^2$  e  $|c(E)|^2 dE$  forniscono la probabilità di trovare il sistema in uno stato di energia  $E_n$  e, rispettivamente, di energia compresa tra  $E$  e  $E + dE$ .

*Esercizio 4.1*

Quale condizione sui coefficienti  $c_n$  e  $c(E)$  va imposta affinché la (3.11) sia normalizzata?

*Esercizio 4.2*

Come si modifica l'espressione (4.1) se la  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  non è normalizzata?

Si supponga per semplicità che la hamiltoniana abbia solo lo spettro continuo. Allora la (3.11) all'istante  $t = 0$  risulta

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \int dE c(E) u_E(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

con

$$\int d\mathbf{r} u_{E'}^*(\mathbf{r}) u_E(\mathbf{r}) = \delta(E - E'). \quad (4.3)$$

Inoltre i coefficienti  $c(E)$  siano tali che  $|c(E)|^2$  abbia un profilo lorentziano in energia,

$$|c(E)|^2 = \frac{1}{2\pi} \frac{\epsilon}{(E - E_0)^2 + \frac{1}{4}\epsilon^2}, \quad (4.4)$$

dove  $\epsilon$  rappresenta la larghezza a mezza altezza della lorentziana centrata in  $E_0$ , determinando quindi la dispersione in energia intorno al valore  $E_0$  (fig. 4.1). Così come è scritta, la lorentziana è opportunamente normalizzata:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE |c(E)|^2 = 1. \quad (4.5)$$

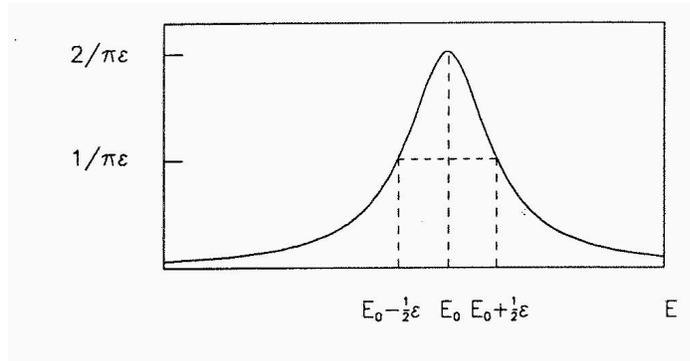


Fig. 4.1. Profilo lorentziano.

Infatti, continuando analiticamente  $|c(E)|^2$  nel piano  $E$  complesso, la (4.5) può essere riscritta

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dE |c(E)|^2 &= \frac{\epsilon}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{1}{(E - E_0 - i\frac{1}{2}\epsilon)(E - E_0 + i\frac{1}{2}\epsilon)} \\ &= \frac{\epsilon}{2\pi} \oint dE \frac{1}{(E - E_0 - i\frac{1}{2}\epsilon)(E - E_0 + i\frac{1}{2}\epsilon)}, \end{aligned}$$

dove il cammino di integrazione lungo l'asse reale di  $E$  è chiuso con una semicirconferenza di raggio infinito nel semipiano  $\text{Im } E < 0$ , lungo il quale l'integrando non contribuisce. Al circuito, percorso in senso orario, si può applicare il teorema di Cauchy:

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty} dE |c(E)|^2 \\ &= \frac{\epsilon}{2\pi} (-1) 2\pi i \lim_{E \rightarrow E_0 - i\epsilon/2} \left( E - E_0 + i\frac{1}{2}\epsilon \right) \frac{1}{(E - E_0 - i\frac{1}{2}\epsilon)(E - E_0 + i\frac{1}{2}\epsilon)} \\ &= \frac{\epsilon}{2\pi} (-1) 2\pi i \frac{1}{-i\epsilon} = 1. \end{aligned}$$

Con la (4.4) dunque la (4.2) risulta normalizzata.

**Esercizio 4.3**

Calcolare il valore di aspettazione  $\langle H \rangle$  della hamiltoniana  $H$  sullo stato (4.2) con il profilo (4.4).

Riduzione del pacchetto di onde

All'istante  $t$  il pacchetto di onde (4.2) è evoluto secondo l'equazione di Schrödinger e ha acquistato la forma seguente:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int dE c(E) u_E(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}. \quad (4.6)$$

Il fattore di fase, dipendente dal tempo, altera i pesi con cui le varie autofunzioni  $u_E(\mathbf{r})$  intervengono sotto il segno di integrale. Perciò l'evoluzione temporale ha modificato la  $\Psi$  ruotandola nello spazio  $\mathcal{H}$ . Rispetto a  $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ , la  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  ha una componente data dal prodotto scalare tra  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  e  $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ . Tale componente, nello schema interpretativo della meccanica quantistica, è un'ampiezza di probabilità. La quantità

$$W(t) = \left| \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, 0) \right|^2 \quad (4.7)$$

rappresenta la probabilità che all'istante  $t$  lo stato del sistema sia ancora descritto da  $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ . Esplicitamente si ha

$$\begin{aligned} W(t) &= \left| \int dE |c(E)|^2 e^{iEt/\hbar} \right|^2 \\ &= e^{-\epsilon t/\hbar}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

dove nell'ultimo passaggio si è ancora utilizzato il teorema di Cauchy. Per la (4.8) la probabilità di ritrovare lo stato iniziale decresce nel tempo; pertanto lo stato iniziale non è uno stato stazionario. Il suo *tempo di vita medio* è definito da

$$T = \frac{\hbar}{\epsilon}, \quad (4.9)$$

pari al tempo occorrente per ridurre a  $1/e$  la probabilità  $W(t)$ : quanto minore è  $\epsilon$ , tanto maggiore risulta  $T$  e viceversa.

Se  $\epsilon \ll E_0$ , cioè il pacchetto di onde (4.6) è molto concentrato intorno al valore centrale di energia  $E_0$ , lo stato (4.6) può scriversi nella forma approssimata

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \simeq \Psi(\mathbf{r}, 0) e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-\epsilon t/2\hbar}, \quad (4.10)$$

che ancora rispetta la (4.8). Si può interpretare la (4.10) come uno stato stazionario modificato dal fattore esponenziale in  $\epsilon$  che ne rende finita, anche se molto lunga, la vita media. Equivalentemente, si può pensare a uno stato stazionario con energia complessa  $E = E_0 - i\frac{1}{2}\epsilon$ . Lo stato (4.10) viene detto *stato quasi-stazionario*.

Esercizio 4.4

Giustificare la (4.10).

IV.5. Riduzione del pacchetto di onde

Quando l'energia del sistema non è definita perché il suo stato è costituito da un pacchetto di onde e non da un singolo autostato della hamiltoniana, esiste la possibilità di una certa dispersione dei valori di energia intorno a quello più probabile come esito di una misurazione. In analogia con quanto fatto in meccanica statistica (cfr. Esempio I.2.4, eq. (I.2.76)), le fluttuazioni di energia intorno al valore più probabile sono misurate dallo scarto quadratico medio definito dalla relazione:

$$(\Delta H)^2 = \langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle,$$

cioè

$$(\Delta H)^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2. \quad (5.1)$$

Se lo stato del sistema è in un autostato di  $H$ ,

$$\langle H \rangle = E, \quad \langle H^2 \rangle = E^2.$$

Allora non ci sono fluttuazioni,  $\Delta H = 0$ . Se invece il sistema si trova in uno stato di tipo (3.11),  $\langle H^2 \rangle \neq \langle H \rangle^2$  e  $\Delta H$  dà un'indicazione della *dispersione* di valori di energia che intervengono nella sovrapposizione (3.11).

*Esercizio 5.1*

La condizione di assenza di dispersione d'energia,  $\Delta H = 0$ , si può mettere sotto la forma

$$\langle \Psi | \Psi \rangle \langle H \Psi | H \Psi \rangle = [\langle \Psi | H \Psi \rangle]^2,$$

dove  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ . Utilizzando la disuguaglianza di Schwarz (1.7), verificare che la condizione  $\Delta H = 0$  equivale a imporre:  $H | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle$ .

*Esercizio 5.2*

Valutare esplicitamente  $\Delta H$  per uno stato di tipo (3.11).

*Esercizio 5.3*

Se nella (4.2)  $E$  varia in  $(-\infty, +\infty)$ , è possibile calcolare lo scarto quadratico medio  $(\Delta H)^2$ ?

Di fronte a un sistema quantistico, in assenza di ulteriori informazioni si può solo ipotizzare che lo stato del sistema sia del tipo (3.11). Perciò si è costretti a parlare in termini probabilistici invocando il valore di aspettazione dell'energia e lo scarto quadratico medio. Tuttavia, quando si compie davvero una misurazione sul sistema, a meno degli errori intrinseci strumentali dell'apparato sperimentale, è possibile in linea di principio ottenere valori precisi delle osservabili che si misurano. Una volta

trovato allora un certo valore di energia,  $E$ , la teoria fin qui sviluppata suggerisce che il sistema si debba trovare nel corrispondente autostato della hamiltoniana appartenente all'autovalore  $E$ . Questo significa che, per effetto dell'interazione tra sistema e apparato di osservazione, la conoscenza del sistema da parte dell'osservatore ha subito una brusca transizione: prima della misurazione lo stato del sistema è del tipo (3.11) e si può solo inferire una certa probabilità di trovare un dato valore di energia, mentre dopo la misurazione il valore  $E$  trovato indica con certezza in quale autostato della hamiltoniana è disposto il sistema.

Il processo di osservazione ha l'effetto *improvviso e irreversibile* di far precipitare la  $\Psi$ , originariamente costruita come una sovrapposizione di stati nella forma (3.11), nella particolare autofunzione corrispondente all'autovalore misurato: questo processo, è indicato come la *riduzione* del pacchetto di onde provocata dalla misurazione. In realtà, durante la misurazione, c'è stata un'interazione tra sistema e apparato di osservazione; ma questa interazione non è descritta (e non è neppure descrivibile) mediante l'equazione di Schrödinger, che invece riguarda esclusivamente l'evoluzione temporale del sistema lasciato a se stesso. La definizione dell'energia in seguito alla misurazione ha semplicemente permesso di decidere quale sia lo stato del sistema che successivamente evolverà nel tempo secondo l'equazione di Schrödinger. Perciò la misurazione ha *preparato* lo stato iniziale del sistema: siccome questo è un autostato della hamiltoniana con energia  $E$ , una nuova misura dell'energia non può che identificarsi con il valore  $E$  già misurato, senza più ridurre lo stato che all'istante  $t$  sarà evoluto nella forma (3.7).

Quanto illustrato nel caso della hamiltoniana può essere esteso a una qualunque altra osservabile, pur di ricondursi a uno sviluppo della  $\Psi$  sulla base delle autofunzioni dell'operatore corrispondente. Si supponga che la misura della variabile dinamica associata all'operatore  $A$  sia uguale a un suo autovalore  $a_\alpha$  semplice. Allora la riduzione della  $\Psi$  comporta che immediatamente dopo la misurazione lo stato del sistema sia descritto dalla corrispondente autofunzione  $v_\alpha$ . Qualora però l'autovalore  $a_\alpha$  sia degenere, si può solo dire che lo stato del sistema dopo la misura si trova nel sottospazio delle autofunzioni degeneri appartenenti all'autovalore  $a_\alpha$ . Perciò in generale la riduzione del pacchetto di onde iniziale  $\Psi$  ha l'effetto di *proiettare* la  $\Psi$  nel sottospazio appartenente all'autovalore misurato.

È impossibile prevedere quale sarà la proiezione corrispondente a una certa misurazione, perché la perturbazione introdotta dall'apparato sperimentale dipende in linea di principio dal risultato della misurazione e non può essere nota con certezza prima di avere effettuato la misurazione. L'origine di questo problema sta nella descrizione separata del sistema e dell'apparato sperimentale: l'equazione di Schrödinger governa il sistema quantistico, mentre le leggi della fisica classica governano l'apparato macroscopico di osservazione. L'interazione tra sistema e apparato, essenziale nel corso del processo di osservazione, solleva problemi delicati del meccanismo dettagliato della misurazione che esulano da una trattazione elementare

e che non sono del tutto risolti<sup>23</sup>. Qui pertanto la riduzione del pacchetto di onde per effetto di una misurazione deve essere accettata come un *postulato* della teoria<sup>24</sup>. Occorre però tenere presente che la teoria, fondata sull'interpretazione della funzione d'onda come ausilio matematico per il calcolo di valori di aspettazione da confrontare con le misure delle osservabili, è perfettamente coerente: il problema non è quello di soddisfare la pretesa di sapere in anticipo il preciso valore di un'osservabile del particolare sistema allo studio. Piuttosto, la teoria è in grado di predire la probabilità di trovare una certa misura, qualora si ripeta la misurazione di quell'osservabile su numerose repliche identiche dello stesso sistema, tutte preparate nello stesso modo all'istante iniziale. Una volta che il sistema è stato osservato, se ne conosce lo stato e l'equazione di Schrödinger ne dà l'evoluzione temporale in modo deterministico fino a una successiva misurazione.

#### *Esempio 5.1*

Questo esempio illustra le conseguenze di osservazioni ripetute sull'evoluzione temporale del sistema. Siano dati gli autostati della hamiltoniana e per semplicità li si suppongano discreti e non degeneri:

$$Hu_n = E_n u_n. \quad (5.2)$$

Nello stesso spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  anche l'operatore (autoaggiunto)  $A$  associato a una variabile dinamica del sistema possiede uno spettro discreto e non degeneri:

$$Av_\alpha = a_\alpha v_\alpha. \quad (5.3)$$

Sia l'insieme  $\{u_n\}$  che l'insieme  $\{v_\alpha\}$ , in generale distinti, sono per ipotesi insiemi completi ortonormali nello spazio  $\mathcal{H}$ :

---

<sup>23</sup> Per una raccolta di scritti relativi ai problemi della misurazione in una teoria quantistica, si veda il testo edito da John Archibald Wheeler e Wojcieck Hubert Zurek: *Quantum Theory and Measurement*, Princeton University Press, Princeton, N.J., 1983.

<sup>24</sup> Questo aspetto era insoddisfacente anche per lo stesso Schrödinger che aveva perciò proposto l'esempio del gatto racchiuso in una scatola: "si possono anche costruire casi del tutto burleschi. Si rinchiuda un gatto in una scatola d'acciaio insieme con la seguente macchina infernale (che occorre proteggere dalla possibilità d'essere afferrata direttamente dal gatto): in un contatore di Geiger si trova una minuscola porzione di sostanza radioattiva, così poca che nel corso di un'ora forse uno dei suoi atomi si disintegra, ma anche in modo parimente verisimile nessuno; se ciò succede, allora il contatore lo segnala e aziona un relais di un martelletto che rompe una fiala con del cianuro. Dopo avere lasciato indisturbato questo intero sistema per un'ora, si direbbe che il gatto è ancora vivo se nel frattempo nessun atomo si è disintegrato. La prima disintegrazione atomica lo avrebbe avvelenato. La funzione  $\psi$  dell'intero sistema porta ad affermare che in essa il gatto vivo e il gatto morto non sono stati puri, ma miscelati con uguale peso". È solo aprendo la scatola che si può decidere il destino del gatto "riducendo" la sua funzione d'onda: la consapevolezza dell'osservatore determina la realtà del gatto.

E. Schrödinger: *Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik [La situazione attuale della meccanica quantistica]*, Die Naturwissenschaften **23** (1935) 807–812, 823–828, 844–849; l'esempio citato è a p. 812.

Per una divertente discussione su questo e altri simili aspetti paradossali della fisica quantistica, si veda il libro di John Gribbon: *In Search of Schrödinger's Cat. The Startling Word of Quantum Physics Explained*, Wildwood House, Londra, 1984.

*Riduzione del pacchetto di onde*

$$\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}, \quad \langle v_\alpha | v_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}. \quad (5.4)$$

Perciò in generale si può esprimere un autostato  $u_m$  di  $H$  sulla base completa  $\{v_\alpha\}$  di  $A$ :

$$u_m = \sum_{\alpha} c_{\alpha} v_{\alpha}, \quad (5.5)$$

dove i coefficienti  $c_{\alpha}$  si ottengono facendo il prodotto scalare della (5.5) con  $v_{\alpha}$  e sfruttando le relazioni di ortonormalità (5.4):

$$c_{\alpha} = \langle v_{\alpha} | u_m \rangle. \quad (5.6)$$

Il sistema si trovi all'istante  $t = 0$  nello stato  $u_m$ . Il valore di aspettazione di  $A$  su questo stato è

$$\langle A \rangle \equiv \langle u_m | A | u_m \rangle = \sum_{\alpha\alpha'} c_{\alpha'}^* \langle v_{\alpha'} | A | v_{\alpha} \rangle c_{\alpha},$$

cioè

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 a_{\alpha}. \quad (5.7)$$

Questo risultato è in accordo col fatto che inizialmente il sistema è descritto dal pacchetto di onde (5.5) che non è un autostato di  $A$ : così si può solo parlare di valore medio della variabile dinamica associata ad  $A$ , con una probabilità di trovare il valore  $a_{\alpha}$  pari a  $|c_{\alpha}|^2$ .

Si supponga di avere trovato all'istante  $t_0$  il valore  $a_{\beta}$ . Allora il sistema, che per  $0 \leq t < t_0$  era descritto da uno stato del tipo

$$e^{-iE_m t/\hbar} u_m = e^{-iE_m t/\hbar} \sum_{\alpha} c_{\alpha} v_{\alpha} \quad (0 \leq t < t_0), \quad (5.8)$$

viene precipitato all'istante  $t_0$  nello stato  $v_{\beta}$ . Questo è il nuovo stato che deve evolvere per  $t > t_0$  secondo l'equazione di Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi, \quad (5.9)$$

e di cui rappresenta la condizione iniziale:  $\psi = v_{\beta}$  per  $t = t_0$ . Per risolvere la (5.9) conviene tenere presente che sia lo stato  $\psi$ , sia lo stato  $v_{\beta}$  possono essere espressi in termini di autofunzioni di  $H$ . In particolare,

$$v_{\beta} = \sum_n b_n u_n, \quad (5.10)$$

dove i coefficienti  $b_n$  si possono ottenere, in modo simile al caso della (5.6), moltiplicando scalarmente con  $u_n$ :

$$b_n = \langle u_n | v_{\beta} \rangle. \quad (5.11)$$

Per quanto riguarda la  $\psi$ , dato che  $H$  non dipende esplicitamente dal tempo, si può adottare lo stesso metodo della separazione delle variabili che ha permesso la soluzione della (3.1). Tenendo conto della condizione iniziale per  $t = t_0$ , si ottiene così:

$$\psi = \sum_n b_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} u_n. \quad (5.12)$$

L'evoluzione temporale, introducendo i fattori di fase dipendenti dai vari autovalori di energia nello sviluppo (5.12), ha trasformato lo stato iniziale  $v_\beta$  del sistema in uno stato che non è più in generale autostato di  $A$ . L'ampiezza di probabilità di trovare all'istante  $t$  lo stato  $\psi$  ancora diretto come  $v_\beta$  è rappresentata dal prodotto scalare

$$\langle v_\beta | \psi \rangle = \sum_n |b_n|^2 e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}. \quad (5.13)$$

Perciò la probabilità di trovare ancora l'autovalore  $a_\beta$  per  $A$  all'istante  $t$  risulta pari a  $|\langle v_\beta | \psi \rangle|^2$ . Corrispondentemente, il valore di aspettazione di  $A$  all'istante  $t$  è

$$\langle A \rangle \equiv \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{nn'} b_{n'}^* \langle u_{n'} | A | u_n \rangle b_n e^{-i(E_n - E_{n'})(t-t_0)/\hbar}. \quad (5.14)$$

*Esercizio 5.4*

Ripercorrere le linee dell'Esempio 5.1 nel caso di  $A = H$ , verificando l'affermazione che la seconda misurazione di energia produce lo stesso autovalore prodotto dalla prima.

*Esercizio 5.5*

Che cosa succede al valore di aspettazione  $\langle A \rangle$  all'istante  $t = 0$  e all'istante  $t > t_0$  se  $A$  e  $H$  nell'Esempio 5.1 hanno lo stesso insieme di autostati?

*IV.6. Il principio di indeterminazione*

La discussione, fatta nel paragrafo precedente, sulla riduzione del pacchetto di onde per effetto di una misurazione, aiuta a comprendere l'incompatibilità che può esistere tra le misurazioni successive di due diverse osservabili  $A$  e  $B$ . La prima misurazione prepara il sistema in un autostato di  $A$ . Quando però si procede a misurare  $B$ , in generale non ci si può aspettare che lo stato del sistema sia anche autostato di  $B$ : perciò la seconda misurazione può modificare sostanzialmente lo stato del sistema, proiettandolo in un autostato di  $B$ . In questo modo l'informazione su  $A$ , ottenuta con la prima misurazione, va completamente distrutta a causa della seconda. Contrariamente a quanto avviene in fisica classica, dove successive osservazioni arricchiscono sempre la conoscenza del sistema, in meccanica quantistica si incontrano dei limiti all'informazione ottenibile sul sistema. Questi limiti, che per ora sembrano legati al postulato della riduzione del pacchetto di onde per effetto di una misurazione, sono in realtà dei limiti di principio, legati alla natura stessa del processo di osservazione

e al tipo di descrizione matematica mediante funzioni d'onda, resosi necessario per aderire alla fenomenologia della fisica quantistica. Questi limiti costituiscono il *principio di indeterminazione*.

Per un'introduzione intuitiva al principio di indeterminazione si consideri una particella vincolata a muoversi lungo l'asse  $x$  all'interno dell'intervallo  $(0, L)$ . La corrispondente funzione d'onda deve essere un pacchetto di onde costruito in modo da avere

$$\Psi(x, t) \begin{cases} \neq 0, & 0 \leq x \leq L, \\ = 0, & x < 0, x > L. \end{cases} \quad (6.1)$$

Con questa funzione d'onda si ha la certezza di trovare la particella in  $(0, L)$ ; però, prima dell'osservazione, la sua localizzazione è affetta da una dispersione di valori di posizione pari a

$$\Delta x = L. \quad (6.2)$$

La (6.1) si può pensare come un pacchetto di onde costruito mediante la sovrapposizione di onde piane,  $e^{ikx}$ , autofunzioni dell'operatore impulso come nell'Esempio 2.3. Per poter limitare  $\Psi$  secondo la (6.1), le varie onde del pacchetto devono interferire costruttivamente nell'intervallo  $(0, L)$  e distruttivamente all'esterno. Per permettere l'annullamento di  $\Psi$  agli estremi dell'intervallo  $(0, L)$  occorre dunque che, accanto a un'onda di lunghezza d'onda  $\lambda = 2\pi/k$ , compaia nel pacchetto anche un'altra onda con lunghezza d'onda  $\lambda' = 2\pi/k'$ , tale da interferire con la precedente in modo distruttivo in  $x = 0$  e  $x = L$ . Siccome il numero  $n$  di lunghezze d'onda  $\lambda$  che cadono nell'intervallo  $\Delta x$  è (cfr. eq. (2.61))

$$n = \frac{\Delta x}{\lambda} = \frac{k}{2\pi} \Delta x, \quad (6.3)$$

la condizione si realizza se nello stesso intervallo  $\Delta x$  cadono almeno  $n + 1$  lunghezze d'onda  $\lambda'$ , cioè

$$n + 1 \lesssim \frac{\Delta x}{\lambda'} = \frac{k'}{2\pi} \Delta x. \quad (6.4)$$

Da (6.3) e (6.4) segue

$$\Delta x \Delta k \gtrsim 2\pi, \quad (6.5)$$

dove

$$\Delta k = k' - k. \quad (6.6)$$

La (6.5) indica che, nel pacchetto di onde piane che costruisce la (6.1), alla dispersione  $\Delta x$  per la posizione deve accompagnarsi un'analogha dispersione di valori di  $k$ . Con  $p_x = \hbar k$ , ciò implica una dispersione per l'impulso lungo  $x$ :

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim h. \quad (6.7)$$

Questa relazione è una forma approssimata e intuitiva del principio di indeterminazione di Heisenberg: accanto all'indeterminazione finita  $\Delta x$  nella localizzazione della particella, esiste sempre anche una dispersione nei valori di  $k$  che intervengono nella costruzione del pacchetto di onde (6.1), quando lo si pensi come sviluppo di Fourier del tipo (III.7.1) nello spazio degli impulsi. Di conseguenza il pacchetto di onde (6.1) risulta una sovrapposizione di onde piane e non può essere un autostato dell'impulso. Perciò una misura d'impulso è a priori affetta da un'indeterminazione  $\Delta p_x$  legata, attraverso la (6.7), all'indeterminazione  $\Delta x$  della posizione.

Se si usasse una singola onda piana monocromatica,  $k$  risulterebbe perfettamente definito, ma si avrebbe  $|\Psi|^2 = 1$ , costante su tutto lo spazio, con la conseguenza che  $\Delta x \rightarrow \infty$  per  $\Delta k \rightarrow 0$ . Viceversa, se si restringe  $\Delta x \rightarrow 0$ , occorre un numero via via crescente di onde piane per comporre un pacchetto sempre più concentrato spazialmente, col risultato che  $\Delta k \rightarrow \infty$ . È dunque impossibile realizzare una funzione d'onda che permetta di ottenere contemporaneamente un'informazione assolutamente precisa sulla posizione e sul vettore d'onda (o impulso), in contrasto con i postulati della meccanica classica.

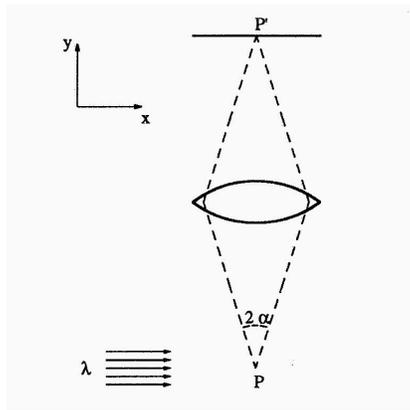


Fig. 6.1. Localizzazione di un elettrone col microscopio.

L'impossibilità di conoscere simultaneamente con estrema precisione ( $\Delta x = \Delta p_x = 0$ ) il valore di posizione e impulso è intrinseca al formalismo, ma è in accordo con i risultati dell'analisi approfondita dei metodi di misura di queste osservabili che fu alla base della scoperta di Heisenberg. Infatti, se si osserva per esempio un elettrone con un microscopio illuminandolo con luce monocromatica di lunghezza d'onda  $\lambda$ , la posizione  $P$  dell'elettrone è nota dalla rilevazione del fotone che rimbalza per effetto Compton dopo aver urtato l'elettrone (fig. 6.1). Se  $2\alpha$  è l'angolo sotto il

quale l'elettrone vede la lente del microscopio, il potere risolutivo di questo permette di definire la posizione dell'elettrone con un'accuratezza pari a

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \alpha}. \quad (6.8)$$

D'altra parte, a causa dell'apertura finita del microscopio, il fotone di rinculo vi entra con una direzione indefinita all'interno dell'angolo  $\alpha$ . Perciò il suo impulso, di modulo  $p = h\nu/c = h/\lambda$ , resta indeterminato nella direzione  $x$ , trasversa a quella di osservazione, della quantità

$$\Delta p_x \sim p \sin \alpha = \frac{h}{\lambda} \sin \alpha. \quad (6.9)$$

Per la conservazione dell'impulso, questa indeterminazione è anche l'indeterminazione dell'impulso dell'elettrone che ha interagito col fotone. Combinando allora la (6.8) con la (6.9), si verifica di restare nei limiti imposti dalla (6.7).

Non è pensabile di violare la (6.7) migliorando la definizione della posizione, con una riduzione per esempio della lunghezza d'onda della radiazione per migliorare il potere risolutivo del microscopio, perché parimente si finisce per aumentare l'indeterminazione dell'impulso.

È chiaro che in questo modo perde significato il concetto classico di traiettoria di una particella: accertata a un determinato istante la posizione della particella, la conseguente indeterminazione del suo impulso impedisce di conoscere la sua posizione immediatamente successiva.

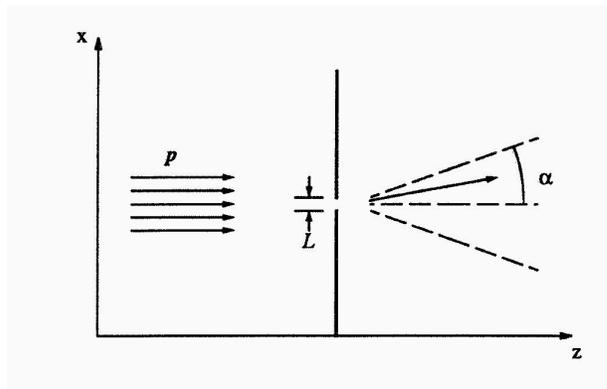


Fig. 6.2. Diffrazione di elettroni da parte di una fenditura e principio di indeterminazione.

Questa difficoltà è connessa con il comportamento ondulatorio ed è coerente con risultati già noti in ottica. Si considerino infatti elettroni, tutti con lo stesso impulso diretto lungo l'asse  $z$ , che subiscono diffrazione attraversando una fenditura quadrata di lato  $L$ , disposta parallelamente al piano  $(x, y)$  (fig. 6.2). Secondo l'ottica, il primo minimo di diffrazione rilevabile su uno schermo successivo si presenta a un angolo  $\alpha$  rispetto alla direzione dell'asse  $z$ , dato dalla relazione:

$$\sin \alpha \sim \frac{\lambda}{L}. \quad (6.10)$$

D'altra parte gli elettroni, descritti da onde piane monocromatiche prima della fenditura ( $p = p_z$ ), hanno un impulso definito con estrema precisione,

$$\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = 0, \quad (6.11)$$

ma non sono affatto localizzati:

$$\Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow \infty. \quad (6.12)$$

Il passaggio attraverso la fenditura rappresenta un'osservazione dell'elettrone, che permette di delimitarne la posizione nel piano  $(x, y)$ :

$$\Delta x = \Delta y = L, \quad \Delta z \rightarrow \infty. \quad (6.13)$$

La diffrazione provocata dalla fenditura indica che gli elettroni acquistano una componente dell'impulso trasversale al loro moto, con una indeterminazione stimabile pari a

$$\begin{aligned} \Delta p_x = \Delta p_y &\sim p \sin \alpha \\ &= \frac{h}{\lambda} \sin \alpha, \end{aligned} \quad (6.14)$$

mentre si continua ad avere  $\Delta p_z = 0$ . Per la (6.10) questo risultato è in accordo con quanto previsto in una dimensione dalla (6.7), cioè

$$\Delta p_x = \Delta p_y \sim \frac{h}{L}, \quad \Delta p_z = 0. \quad (6.15)$$

La presenza della costante  $h$  nella (6.7) definisce l'ammontare dell'azione caratteristica per la quale diventano apprezzabili le conseguenze del principio di indeterminazione: per osservare un sistema occorre entrare in interazione con esso mediante lo strumento che misura i valori delle grandezze che lo caratterizzano. Perciò diventa importante valutare l'entità della perturbazione introdotta dall'osservatore sul sistema. Se la perturbazione è trascurabile, siamo nella situazione consueta della meccanica classica: il processo di misurazione arricchisce la conoscenza che si ha del sistema, migliora la definizione del complesso di parametri (per esempio posizione e velocità delle particelle) che intervengono nelle equazioni del moto e aiuta a determinare in modo causale l'evoluzione futura. Ma su un sistema "piccolo" la perturbazione associata a uno strumento di misura macroscopico può risultare determinante nel processo di formazione del fenomeno osservato: anche se in linea di principio si può sempre immaginare di diminuire l'effetto della perturbazione, questo non è mai rigorosamente nullo. Le esperienze eseguite per determinare una grandezza

*Il principio di indeterminazione*

fisica rendono allora illusoria la conoscenza di altre grandezze acquisita precedentemente, perché le alterazioni introdotte dall'osservazione sono incontrollabili. Nella teoria, Heisenberg ha mostrato che questa limitazione di principio è collegata al valore minimo dell'azione, cioè al valore della costante di Planck  $h$ : fintanto che l'indagine sperimentale non è in grado di apprezzare valori d'azione confrontabili con  $h$ , l'efficacia delle relazioni di indeterminazione è nulla. Perciò il principio di indeterminazione risulta legato alla stessa costante universale che caratterizza i fenomeni quantistici <sup>25</sup>.

In una forma matematicamente corretta, il principio di indeterminazione per le osservabili di posizione e di impulso si traduce nelle seguenti relazioni:

$$\begin{cases} \Delta x \Delta p_x \gtrsim \frac{1}{2} \hbar, \\ \Delta y \Delta p_y \gtrsim \frac{1}{2} \hbar, \\ \Delta z \Delta p_z \gtrsim \frac{1}{2} \hbar. \end{cases} \quad (6.16)$$

A questo risultato si arriva riconoscendo che le relazioni di indeterminazione sono una conseguenza del fatto che gli operatori di posizione e di impulso *non commutano* tra di loro. Siano  $A$  e  $B$  due operatori autoaggiunti che non commutano. Si definiscano  $\langle A \rangle$  e  $\langle B \rangle$  i valori medi di  $A$  e  $B$  sullo stato  $\Psi$  del sistema e gli scarti quadratici medi da tali valori:

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &\equiv \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle, \\ (\Delta B)^2 &\equiv \langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Allora vale il seguente *teorema* <sup>26</sup>:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|. \quad (6.18)$$

Infatti, posti

$$a = A - \langle A \rangle, \quad b = B - \langle B \rangle \quad (6.19)$$

e costruita la funzione

---

<sup>25</sup> L'impossibilità di definire una traiettoria della particella è solo il sintomo di una più ampia limitazione nella descrizione dei fenomeni fisici, che in ultima analisi è collegata con la rinuncia al determinismo classico. Per superare questa difficoltà si sono succeduti vari tentativi, da un lato alla ricerca di situazioni che invalidassero i limiti imposti dal principio di indeterminazione, dall'altro con il ricorso a una descrizione basata su *variabili nascoste* nella meccanica quantistica, ma in grado di recuperare il determinismo a un livello più microscopico.

Una situazione apparentemente capace di aggirare il principio di indeterminazione fu proposta da Einstein, Podolski e Rosen (cfr. n. 16 p. 109) e all'idea delle variabili nascoste si è già accennato nell'introduzione del capitolo III. Questi tentativi però non hanno avuto finora successo, in quanto tutti gli esperimenti proposti per falsificare la meccanica quantistica non hanno avuto esito favorevole.

<sup>26</sup> H.P. Robertson: *The uncertainty principle [Il principio di indeterminazione]*, Physical Review **34** (1929) 163-164.

$$\Phi = (a + ib\lambda)\Psi, \quad (6.20)$$

dove  $\lambda$  è un numero reale e  $\Psi$  è normalizzata a 1, si ha

$$\begin{aligned} 0 &\leq \int dx \Phi^* \Phi \\ &= (\Delta A)^2 + \lambda^2 (\Delta B)^2 + i\lambda \langle [A, B] \rangle \\ &\equiv F(\lambda). \end{aligned} \quad (6.21)$$

Siccome

$$\langle [A, B] \rangle^* = -\langle [A, B] \rangle \quad (6.22)$$

è una quantità puramente immaginaria, si può porre

$$\langle [A, B] \rangle \equiv i\langle C \rangle, \quad (6.23)$$

con  $\langle C \rangle$  reale, e riconoscere che la funzione  $F(\lambda)$  è reale. Affinché sia soddisfatta la disuguaglianza (6.21) per qualsiasi  $\lambda$ , occorre che il discriminante del trinomio di secondo grado  $F(\lambda)$  non sia positivo:

$$(\langle C \rangle)^2 - 4(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \leq 0. \quad (6.24)$$

Con ciò resta dimostrata la (6.18).

*Esercizio 6.1*

Si ritrovi la (6.16) ponendo nella (6.18)  $A = x$  e  $B = p_x$ .

*Esercizio 6.2*

Verificare che per le componenti dell'operatore momento angolare vale la relazione

$$\Delta L_i \Delta L_j \geq \frac{1}{2} \hbar |\epsilon_{ijk} \langle L_k \rangle|, \quad (6.25)$$

mentre per il modulo quadrato del momento angolare si ha:

$$\Delta L^2 \Delta L_i = 0. \quad (6.26)$$

*Esempio 6.1*

Si consideri una particella confinata all'interno di una buca di potenziale di dimensioni lineari  $d$ . L'indeterminazione della sua posizione è dunque  $\Delta x = d$  e l'indeterminazione  $\Delta p$  del suo impulso deve essere almeno dell'ordine di  $\hbar/d$ . Allora, anche se il valor medio del suo impulso è zero, l'energia cinetica media della particella risulta almeno dell'ordine di

*Pacchetto di minima indeterminazione*

$$\overline{T} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2md^2}. \quad (6.27)$$

*IV.7. Pacchetto di minima indeterminazione*

Ha interesse costruire il pacchetto di onde corrispondente alla situazione in cui si realizza la condizione di minima indeterminazione <sup>27</sup>. Nel caso che gli operatori  $A$  e  $B$  nella (6.18) siano, rispettivamente, gli operatori di posizione  $x$  e di impulso  $p = \hbar k$ , per lo stato in questione deve essere:

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{2}. \quad (7.1)$$

La condizione di minima indeterminazione si realizza quando la funzione  $F(\lambda)$  definita nella (6.21) raggiunge il suo minimo. Ciò avviene per

$$\lambda = \lambda_{min} = -\frac{i}{2} \frac{\langle [A, B] \rangle}{(\Delta B)^2}. \quad (7.2)$$

Lo stato di minima indeterminazione è allora descritto da una  $\Psi$  che soddisfa la (6.21) con  $\lambda = \lambda_{min}$ , cioè

$$(a + ib\lambda_{min})\Psi = 0. \quad (7.3)$$

Si assumano

$$\langle A \rangle = \langle x \rangle = 0, \quad \langle B \rangle = \langle p \rangle = \hbar k_0 \quad (7.4)$$

e quindi

$$a = x, \quad b = p - \hbar k_0. \quad (7.5)$$

Perciò dalla (7.2), con la (7.1), risulta

$$\begin{aligned} \lambda_{min} &= -\frac{i}{2} \frac{\langle [x, p] \rangle}{(\Delta p)^2} \\ &= \frac{\hbar}{2(\Delta p)^2} = \frac{2}{\hbar} (\Delta x)^2. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Nello spazio delle posizioni la (7.3) diventa un'equazione differenziale per la  $\Psi(x)$  ( $\Psi(x) \equiv \Psi(x, t = 0)$ ):

---

<sup>27</sup> E.H. Kennard: *Zur Quantenmechanik einfacher Bewegungstypen [Meccanica quantistica di tipi semplici di moto]*, Zeitschrift für Physik **44** (1927) 326–352.

$$\left[ x + \frac{2i}{\hbar}(\Delta x)^2 \left( -i\hbar \frac{d}{dx} - \hbar k_0 \right) \right] \Psi(x) = 0, \quad (7.7)$$

che ha per soluzione

$$\Psi(x) = c \exp \left[ -\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + ik_0 x \right]. \quad (7.8)$$

La costante  $c$  si determina per normalizzazione della  $\Psi$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x)|^2 = 1. \quad (7.9)$$

Utilizzando l'integrale di Poisson,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (7.10)$$

si ottiene

$$c = [\sqrt{2\pi}(\Delta x)]^{-\frac{1}{2}}. \quad (7.11)$$

La funzione d'onda (7.8) corrisponde effettivamente all'ipotesi (7.4) di una particella con impulso medio pari a  $\hbar k_0$  e con posizione media nell'origine. La densità di probabilità che ne risulta,

$$\rho(x) \equiv |\Psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\Delta x)} \exp \left[ -\frac{x^2}{2(\Delta x)^2} \right], \quad (7.12)$$

è infatti di tipo gaussiano centrata intorno a  $x = 0$  e con larghezza  $\Delta x$ .

*Esercizio 7.1*

Utilizzando la funzione (7.8) si verifichino le relazioni

$$\langle x \rangle = 0,$$

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = (\Delta x)^2,$$

in accordo con le premesse (7.4).

La  $\rho(x)$  data dalla (7.12) è del tipo di funzioni che permettono di definire la delta di Dirac (cfr. eq. (A.26)). Pertanto è

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \rho = \delta(x). \quad (7.13)$$

Ciò corrisponde alla situazione di una particella perfettamente localizzata in  $x = 0$  con  $\Delta x = 0$ .

*Esercizio 7.2*

Che cosa succede alla (7.8) e quanto vale  $\Delta k$ , se  $\Delta x \rightarrow \infty$ ?

Si consideri ora la situazione nello spazio degli impulsi, prendendo la trasformata di Fourier della (7.8):

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi(x) e^{-ikx}.$$

Utilizzando la (7.1), la (7.11) e l'integrale derivato da quello di Poisson (7.10),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2+ibx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-b^2/4a}, \quad (7.14)$$

si ottiene

$$A(k) = \frac{1}{[\sqrt{2\pi}(\Delta k)]^{1/2}} \exp \left[ -\frac{(k - k_0)^2}{4(\Delta k)^2} \right]. \quad (7.15)$$

Il pacchetto di minima indeterminazione ha dunque forma gaussiana anche nello spazio degli impulsi: esso risulta centrato intorno al valore  $k_0$ , come nelle ipotesi (7.4).

*Esercizio 7.3*

Verificare che il pacchetto di onde (7.15) è normalizzato:

$$\int dk |A(k)|^2 = 1.$$

*Esercizio 7.4*

Per il pacchetto di onde (7.15) verificare che sussistono le relazioni seguenti:

$$\langle k \rangle = k_0.$$

$$\langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle = (\Delta k)^2.$$

*Esercizio 7.5*

Se  $\Delta k \rightarrow 0$  nella (7.15), che espressione acquista la  $\Psi$ ? Confrontare il risultato con quello dell'Esercizio 7.2.

La relazione di indeterminazione (7.1) viene modificata durante l'evoluzione temporale del pacchetto di onde. Se la (7.8) è la funzione d'onda di una particella libera all'istante  $t = 0$ ,

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk A(k) e^{ikx}, \quad (7.16)$$

a un istante  $t$  successivo si ha

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk A(k, t) e^{ikx} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk A(k) e^{i(kx - \omega t)}, \end{aligned}$$

dove  $\omega = \hbar k^2/2m$  (cfr. eq. (III.7.1)). Utilizzando la (7.15) per  $A(k)$  e con la sostituzione  $k \rightarrow k - k_0$ , si ha

$$\Psi(x, t) = c \sqrt{\alpha(t)} \exp \left[ -\alpha(t) (\Delta k)^2 \left( x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2 \right] e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}, \quad (7.17)$$

dove  $\omega_0 = \hbar k_0^2/2m$  e

$$\alpha(t) = \left[ 1 + i \frac{2\hbar(\Delta k)^2}{m} t \right]^{-1}. \quad (7.18)$$

La (7.17) è un'onda piana monocromatica, di vettore d'onda  $k_0$ , con un'ampiezza gaussiana nella variabile  $x - (\hbar k_0/m)t$ .

La densità di probabilità di presenza della particella all'istante  $t$  è

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &\equiv |\Psi(x, t)|^2 \\ &= c^2 |\alpha(t)| \exp \left[ -[\alpha(t) + \alpha^*(t)] (\Delta k)^2 \left( x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (7.19)$$

La  $\rho(x, t)$  è ancora una distribuzione gaussiana in  $x$ , ma è centrata intorno al valore di  $x$  raggiunto nel tempo  $t$  dalla particella che si muove dall'origine con velocità  $v_0 = \hbar k_0/m$ .

*Esercizio 7.6*

Verificare che all'istante  $t$  risulta

$$\langle x \rangle_t = \frac{\hbar k_0}{m} t. \quad (7.20)$$

*Esercizio 7.7*

Qual è il significato fisico della (7.20)?

Lo scarto quadratico medio per la variabile di posizione all'istante  $t$  risulta:

$$\begin{aligned}
 (\Delta x)_t^2 &\equiv \langle (x - \langle x \rangle_t)^2 \rangle \\
 &= \langle x^2 \rangle_t - \langle x \rangle_t^2 \\
 &= \frac{1}{4(\Delta k)^2} \left[ 1 + \left( \frac{2\hbar(\Delta k)^2}{m} \right)^2 t^2 \right].
 \end{aligned} \tag{7.21}$$

Lo scarto quadratico medio aumenta nel tempo, indicando un allargamento del pacchetto di onde, con conseguente diminuzione della precisione con cui risulta determinata la posizione della particella. Anche se si è partiti all'istante  $t = 0$  con il pacchetto di minima indeterminazione (7.1), il termine dipendente dal tempo nella (7.21) impone all'istante  $t$ :

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}. \tag{7.22}$$

Naturalmente lo sparpagliamento del pacchetto diventa sensibile per tempi

$$t \gtrsim \frac{m}{2\hbar(\Delta k)^2}.$$

In tali condizioni la (7.21) diventa

$$(\Delta x)_t \simeq \frac{\hbar \Delta k}{m} t. \tag{7.23}$$

D'altra parte in una descrizione classica non si avverte lo sparpagliamento del pacchetto, perché  $(\Delta x)_t$  resta piccolo rispetto allo spostamento del baricentro del pacchetto:

$$(\Delta x)_t \ll \frac{\hbar k_0}{m} t.$$

Per la (7.23) ciò implica anche una buona definizione dell'impulso:

$$(\Delta k) \ll k_0. \tag{7.24}$$

Combinando allora la (7.22) e la (7.23), perché valga una descrizione classica si deve avere

$$(\Delta x)_t \geq \frac{1}{2\Delta k} \gg \frac{1}{2k_0} \equiv \frac{1}{4\pi} \lambda_0, \tag{7.25}$$

dove  $\lambda_0$  è la lunghezza d'onda di de Broglie associata al moto del pacchetto (o della particella). Questo risultato mette in evidenza ancora una volta il ruolo della lunghezza d'onda di de Broglie della particella: fintanto che questa rimane piccola rispetto all'indeterminazione di posizione, non si è sensibili agli effetti quantistici e si può procedere tranquillamente secondo la fisica classica. Si impone invece la descrizione quantistica quando si riesce ad apprezzare uno sparpagliamento del

pacchetto di onde confrontabile con la lunghezza d'onda di de Broglie, come succede in fisica atomica e nucleare.

*IV.8. Relazione di indeterminazione per energia e tempo*

La relazione di indeterminazione valida per due operatori che non commutano corrisponde, a livello di funzione d'onda, a una proprietà degli sviluppi di Fourier. Una funzione periodica, per esempio della variabile  $x$ , viene sviluppata in serie di funzioni della variabile coniugata  $k$ ; più essa è concentrata nello spazio delle posizioni, più numerosi sono i valori di  $k$  che entrano nello sviluppo di Fourier, e viceversa. Nello stabilire la relazione di indeterminazione era inteso finora che le due variabili coniugate fossero associate a operatori che non commutano e quindi a osservabili fisiche incompatibili dal punto di vista di una loro precisa misurazione. Però la proprietà matematica è di tipo generale e riguarda qualunque tipo di funzione sviluppabile in serie di Fourier. Perciò, anche se in meccanica quantistica, come in fisica classica, il tempo  $t$  viene assunto quale parametro di evoluzione, senza essere associato ad alcuna osservabile, si può lo stesso stabilire una sorta di principio di indeterminazione anche per la variabile tempo,  $t$ , e la sua coniugata,  $\omega$ , che rappresenta una frequenza.

Sia dunque data una funzione periodica del tempo  $\Psi(t)$  e la si sviluppi in serie di Fourier:

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega A(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (8.1)$$

Come per la (III.7.4), se è

$$\int dt |\Psi(t)|^2 = 1, \quad (8.2)$$

è anche

$$\int d\omega |A(\omega)|^2 = 1. \quad (8.3)$$

Si consideri ad esempio il caso di un segnale costante di durata limitata (fig. 8.1):

$$\Psi(t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{t_0}}, & -\frac{1}{2}t_0 \leq t \leq \frac{1}{2}t_0, \\ 0, & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (8.4)$$

Si ottiene:

$$A(\omega) = \sqrt{\frac{t_0}{2\pi}} \frac{\sin \frac{1}{2}\omega t_0}{\frac{1}{2}\omega t_0}. \quad (8.5)$$

*Relazione di indeterminazione per energia e tempo*

La distribuzione in frequenze del segnale è dunque concentrata, con un picco pronunciato intorno al valore  $\omega = 0$ . Siccome deve valere sempre la normalizzazione (8.3), al variare di  $t_0$  varia la larghezza del picco di  $A(\omega)$  all'origine e di conseguenza anche la sua altezza. La larghezza,  $\Delta\omega$ , può essere stimata dalla posizione degli zeri di  $A(\omega)$  più vicini all'origine:

$$\Delta\omega = 4\pi/t_0. \quad (8.6)$$

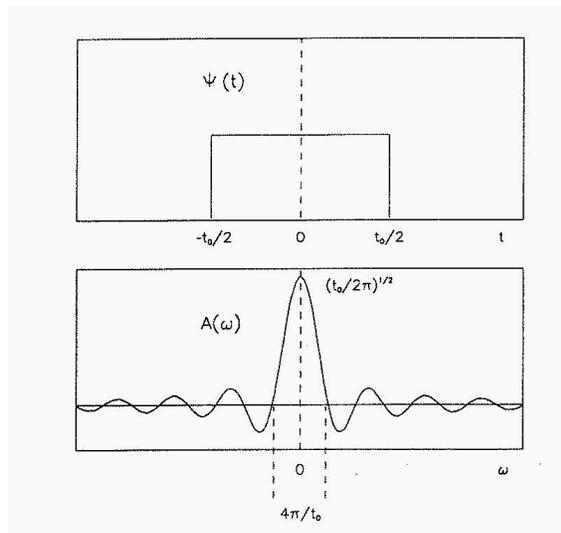


Fig. 8.1. Segnale costante di durata limitata e suo spettro di frequenze.

Essa diventa tanto più ampia quanto più breve risulta il segnale, e viceversa. Indicando con  $\Delta t = t_0$  la durata del segnale, si ha dunque

$$\Delta\omega\Delta t = 4\pi. \quad (8.7)$$

Questo risultato è in accordo con le relazioni di indeterminazione che prevedono in generale

$$\Delta\omega\Delta t \gtrsim \frac{1}{2}. \quad (8.8)$$

*Esercizio 8.1*

Verificare che per un segnale gaussiano nel tempo, del tipo

$$\Psi(t) = \frac{1}{[\sqrt{2\pi}(\Delta t)]^{1/2}} \exp \left[ -\frac{(t - t_0)^2}{4(\Delta t)^2} \right], \quad (8.9)$$

la trasformata di Fourier risulta

$$A(\omega) = \frac{1}{[\sqrt{2\pi}(\Delta \omega)]^{1/2}} \exp \left[ -\frac{\omega^2}{4(\Delta \omega)^2} + i\omega t_0 \right], \quad (8.10)$$

dove

$$\Delta \omega \Delta t = \frac{1}{2}. \quad (8.11)$$

*Esercizio 8.2*

Verificare che per il segnale gaussiano dell'Esercizio precedente si può definire la durata  $\Delta t$  del segnale in termini di scarto quadratico medio,

$$(\Delta t)^2 = \int dt (t - \langle t \rangle)^2 |\Psi(t)|^2. \quad (8.12)$$

Analogamente, verificare che la larghezza di banda  $\Delta \omega$  del segnale in  $\omega$  risulta

$$(\Delta \omega)^2 = \int d\omega (\omega - \langle \omega \rangle)^2 |A(\omega)|^2. \quad (8.13)$$

Se si trasforma la (8.8) nella descrizione ondulatoria, in cui l'energia di una particella (o di un'onda) è definita dalla relazione

$$E = \hbar \omega, \quad (8.14)$$

si ha

$$\Delta E \Delta t \gtrsim \frac{1}{2} \hbar. \quad (8.15)$$

La (8.15) rappresenta la relazione di indeterminazione per energia e tempo, la cui interpretazione deriva dalle proprietà degli sviluppi di Fourier: un pacchetto di onde deve avere una durata infinita ( $\Delta t \rightarrow \infty$ ) per rappresentare una particella con energia  $E$  ben definita ( $\Delta E = 0$ ). Altrimenti un treno di onde di durata finita  $\Delta t$  implica necessariamente una sovrapposizione di  $\omega$ . Ciò significa che se lo stato di un sistema quantistico ha vita limitata  $\Delta t$ , esso non è uno stato stazionario con una precisa energia, ma possiede una probabilità  $P = 1/\Delta t$  di decadere, legata all'indeterminazione  $\Delta E$  della sua energia:

$$P \sim \frac{2\Delta E}{\hbar}. \quad (8.16)$$

Di conseguenza, lo spettro di frequenze associato alla (8.1) ha una larghezza di riga data da  $\Delta\omega$ , in accordo con la (8.8).

In altre parole, il tempo di osservazione di un evento quantistico ne precisa la definizione energetica: se l'evento si riferisce a un sistema stabile, la definizione energetica è in linea di principio possibile con un tempo di osservazione illimitato; se il sistema è instabile, la limitazione (8.15) è di natura intrinseca ed ineliminabile. Lo stato quasi-stazionario (4.10) soddisfa la (8.15), in base alla (4.9), con  $\Delta t = T$  e  $\Delta E = \frac{1}{2}\epsilon$ .

#### IV.9. Commutabilità e compatibilità

In alcuni esempi del paragrafo 2 le autofunzioni di un operatore hermitiano risultano essere autofunzioni anche di un altro operatore autoaggiunto che commuta con il primo. Ciò avviene per esempio con le funzioni (2.42), autofunzioni di  $L^2$ , ma anche di  $L_z$ . Questa proprietà non si verifica solo per le autofunzioni proprie, ma anche per autofunzioni improprie come nel caso (2.84) dell'insieme di autofunzioni di  $p^2$  che sono combinazioni lineari di autofunzioni improprie di  $p$ .

In realtà vale il seguente *teorema*: condizione necessaria e sufficiente perché due operatori autoaggiunti  $A$  e  $B$  definiti in  $\mathcal{H}$  abbiano un insieme completo di autofunzioni simultaneo è che sia

$$[A, B] = 0. \quad (9.1)$$

Infatti la condizione è necessaria. Siano

$$\begin{aligned} Au_n &= a_n u_n, \\ Bu_n &= b_n u_n. \end{aligned}$$

Allora è anche

$$(AB - BA)u_n = 0.$$

Quindi anche per ogni  $f \in \mathcal{H}$ , che si può pensare come combinazione lineare delle  $u_n$ , risulta

$$(AB - BA)f = 0, \quad \forall f \in \mathcal{H},$$

da cui l'asserto.

La (9.1) è anche sufficiente. Si consideri dapprima il caso di spettro semplice. Allora se

$$Au_n = a_n u_n,$$

è anche

$$\begin{aligned} A(Bu_n) &= B(Au_n) = B a_n u_n \\ &= a_n (Bu_n), \end{aligned}$$

cioè  $Bu_n$  è autofunzione di  $A$  appartenente allo stesso autovalore  $a_n$ ; dato che lo spettro è semplice,  $Bu_n$  deve essere proporzionale a  $u_n$ ,

$$Bu_n = b_n u_n,$$

come dovevasi.

Nel caso di degenerazione,  $a_n$  è un autovalore con degenerazione di ordine  $r$ . Ancora si ottiene

$$A(Bu_n) = a_n (Bu_n).$$

Ora però  $Bu_n$  non è proporzionale a  $u_n$ , bensì appartiene al sottospazio  $\mathcal{H}_n$  a  $r$  dimensioni, sotteso dalle  $r$  autofunzioni  $u_n$  di  $A$  appartenenti allo stesso  $a_n$ . Pertanto è possibile esprimere  $Bu_n$  sulla base di tali autofunzioni:

$$Bu_n = \sum_{m=1}^r c_{nm} u_m.$$

D'altra parte, per ogni  $f = \sum_{n=1}^r d_n u_n \in \mathcal{H}_n$ , è

$$Bf = B \sum_{n=1}^r d_n u_n = \sum_{n=1}^r d_n (Bu_n),$$

cioè

$$Bf = \sum_{n=1}^r \sum_{m=1}^r d_n c_{nm} u_m. \quad (9.2)$$

La funzione  $f$  è autofunzione di  $A$  in quanto per costruzione è combinazione lineare di autofunzioni appartenenti allo stesso autovalore di  $A$ ; essa diventa anche autofunzione di  $B$  se nella (9.2) si riesce a porre:

$$\sum_{n=1}^r d_n c_{nm} = b d_m.$$

Questa condizione si soddisfa diagonalizzando la matrice dei coefficienti  $c_{nm}$ . A tale scopo la condizione di solubilità risulta

$$\det |c_{nm} - b\delta_{nm}| = 0,$$

che fornisce  $r$  radici per l'incognita  $b$ . In corrispondenza di ognuna delle radici  $b_n$  i coefficienti  $d_m^{(n)}$  ( $n = 1, 2, \dots, r$ ) permettono di definire

$$v_n = \sum_{m=1}^r d_m^{(n)} u_m.$$

Le  $r$  soluzioni  $v_n$  sono autofunzioni di  $B$ ,

$$\begin{aligned} Bv_n &= b_n \sum_{m=1}^r d_m^{(n)} u_m \\ &= b_n v_n, \end{aligned}$$

e anche autofunzioni di  $A$ ,

$$\begin{aligned} Av_n &= \sum_{m=1}^r d_m^{(n)} Au_m = \sum_{m=1}^r d_m^{(n)} a_n u_m \\ &= a_n \sum_{m=1}^r d_m^{(n)} u_m = a_n v_n, \end{aligned}$$

in quanto per ipotesi le  $u_n$  nel sottospazio  $\mathcal{H}_n$  appartengono tutte allo stesso autovalore  $a_n$ . Con ciò resta dimostrato il teorema.

Se un sistema si trova in un autostato simultaneo di due operatori autoaggiunti, le misure delle corrispondenti variabili dinamiche forniscono i corrispondenti autovalori. Le due variabili dinamiche sono perciò *compatibili*, nel senso che possono essere misurate con estrema precisione, simultaneamente o in rapida successione una dopo l'altra, senza produrre disturbo allo stato del sistema che continua a coincidere con un autostato simultaneo dei due operatori associati alle variabili in questione. Il teorema ora dimostrato completa il quadro offerto dal principio di indeterminazione relativo a due osservabili che invece *non* commutano e che quindi *non* sono compatibili ai fini di una misurazione precisa per entrambe.

Il presente teorema sottolinea anche la necessità di individuare l'*insieme completo di operatori che commutano* ( $A, B, C, \dots$ ), in quanto esiste un solo autostato simultaneo di questo insieme di operatori che appartiene agli autovalori corrispondenti ( $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ ) e ne viene completamente specificato. In particolare, gli autostati di  $H$  sono anche autostati degli operatori che commutano con  $H$  e che quindi sono costanti del moto. Una misurazione precisa effettuata su un insieme completo di osservabili che commutano rappresenta l'*osservazione massima* possibile sul sistema, perché fornisce il massimo di informazione che si possa ottenere simultaneamente sul sistema: ne definisce lo stato dinamico cui corrisponde la caratterizzazione della

sua funzione d'onda a un certo istante. Questa situazione è analoga a quanto succede in meccanica classica per un sistema integrabile (cfr. eq. (I.1.49)).

#### IV.10. Valori medi ed equazioni del moto

Data l'equazione di Schrödinger nella forma (III.7.25), in cui l'operatore hamiltoniano è da considerarsi autoaggiunto,

$$H = H^\dagger, \quad (10.1)$$

e data una variabile dinamica classica cui viene associato un operatore  $A$  pure autoaggiunto,

$$A = A^\dagger, \quad (10.2)$$

si definisce valore medio (o valore di aspettazione di  $A$ ) su  $\Psi$  la quantità

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &\equiv \langle \Psi | A | \Psi \rangle \\ &= \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) A \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (10.3)$$

Anche senza dipendenza esplicita dal tempo da parte di  $A$ , la (10.3) dipende dal tempo attraverso la  $\Psi$ . Pertanto si può calcolare la variazione temporale del valore medio  $\langle A \rangle$ , utilizzando l'equazione di Schrödinger:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \int d\mathbf{r} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} A \Psi + \int d\mathbf{r} \Psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \Psi + \int d\mathbf{r} \Psi^* A \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int d\mathbf{r} (H\Psi)^* A \Psi + \int d\mathbf{r} \Psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \Psi + \frac{1}{i\hbar} \int d\mathbf{r} \Psi^* A (H\Psi), \end{aligned}$$

dove l'operatore  $\partial A / \partial t$  è definito eseguendo la derivazione rispetto al parametro  $t$  nell'espressione analitica di  $A$ . In definitiva si ha

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle. \quad (10.4)$$

Questo risultato generalizza il teorema di Ehrenfest del paragrafo III.6.

*Esercizio 10.1*

Utilizzando i risultati dell'Esercizio 1.10 ritrovare dalla (10.4) gli enunciati del teorema di Ehrenfest.

Se  $A$  non dipende esplicitamente dal tempo, si ottiene:

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, A] \rangle. \quad (10.5)$$

Se inoltre  $A$  commuta con la hamiltoniana,

$$[H, A] = 0, \quad (10.6)$$

ne deriva

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = 0, \quad (10.7)$$

cioè la variabile dinamica cui è associato l'operatore  $A$  è una costante del moto.

Il risultato (10.4) può essere utilizzato per definire l'operatore  $dA/dt$  mediante la relazione:

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \int dr \Psi^* \frac{dA}{dt} \Psi. \quad (10.8)$$

Dal confronto tra (10.4) e (10.8) segue

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H, A]. \quad (10.9)$$

Questa relazione ha la stessa struttura dell'equazione di moto classica (I.1.19) pur di far corrispondere la parentesi di Poisson classica al commutatore quantistico:

$$\{A, H\} \longleftrightarrow -\frac{i}{\hbar}[A, H]. \quad (10.10)$$

La corrispondenza tra parentesi di Poisson per le variabili dinamiche classiche e commutatori per gli operatori autoaggiunti quantistici è un aspetto del principio di corrispondenza che ha ispirato tutta la costruzione della meccanica ondulatoria. In questo approccio si desiderava conservare la struttura formale della meccanica analitica e delle sue equazioni di moto, reinterprestando le variabili dinamiche classiche come operatori che dovevano soddisfare la (10.9). La (10.9) e la (10.4) erano state proposte nel 1925 da Born, Heisenberg e Jordan<sup>28</sup> in un approccio apparentemente diverso (la cosiddetta *meccanica delle matrici*). Fu lo stesso Schrödinger a riconoscerne<sup>29</sup>, tramite la (10.4), l'equivalenza della (10.9) con l'approccio proposto con la sua equazione<sup>30</sup>.

<sup>28</sup> Cfr. n. 5 e n. 6 p. 106.

<sup>29</sup> E. Schrödinger: *Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen*, loc. cit. (n. 6 p. 152).

<sup>30</sup> In un'intervista il 17 ottobre 1962 registrata in *Archive for the history of quantum mechanics*, M. Born confessa: "esprimemmo l'energia come  $d/dt$  e scrivemmo la regola di commutazione per energia e tempo applicando l'operatore  $t d/dt - d/dt t$  a una funzione di  $t$ ; era assolutamente lo stesso che per gli operatori  $q$  e  $p$ . Ma non lo vedemmo. E non potrò mai perdonarmi: se lo avessimo fatto, avremmo avuto immediatamente l'intera meccanica ondulatoria dalla meccanica quantistica alcuni mesi prima di Schrödinger".

*Esempio 10.1*

Il *teorema del viriale* in meccanica classica stabilisce una relazione generale tra il valor medio dell'energia cinetica e quello dell'energia potenziale:

$$2\langle T \rangle = \langle |\mathbf{r} \cdot \nabla V(\mathbf{r})| \rangle. \quad (10.11)$$

Esso si dimostra calcolando la *media temporale* della quantità  $d(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})/dt$ , che per moti periodici si azzera.

Il teorema del viriale vale anche in meccanica quantistica e può essere dimostrato calcolando il *valore di aspettazione* dell'operatore  $d(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})/dt$ ,

$$\left\langle \left| \frac{d}{dt} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \right| \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle |\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}| \rangle,$$

che si azzera su autostati della hamiltoniana. Infatti, se si usano autostati della hamiltoniana, si ha

$$\langle \Psi | [\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, H] | \Psi \rangle = (E - E) \langle \Psi | \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} | \Psi \rangle = 0,$$

per cui

$$\frac{d}{dt} \langle |\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}| \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle |\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, H| \rangle = 0.$$

D'altra parte

$$[\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, H] = 2i\hbar T - i\hbar [\mathbf{r} \cdot \nabla V(\mathbf{r})],$$

per cui risulta dimostrata la (10.11).

*Esercizio 10.2*

Nella dimostrazione del teorema del viriale quantistico fa differenza partire dall'operatore  $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$  o dall'operatore  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}$ ?

*Esercizio 10.3*

Verificare che anche in meccanica quantistica vale la relazione

$$2\langle T \rangle = \langle |n V| \rangle, \quad (10.12)$$

valida per un potenziale a simmetria sferica del tipo  $V(r) = r^n$ .

*IV.11. Riassunto dei postulati*

1. Ad ogni sistema fisico è associato un opportuno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ . Ogni stato del sistema è rappresentato da un elemento  $\Psi \in \mathcal{H}$ , con  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ , che contiene tutte le informazioni sul sistema.

*Riassunto dei postulati*

2. Ad ogni grandezza fisica osservabile è associato un opportuno operatore autoaggiunto  $A$  nello spazio  $\mathcal{H}$ . Per osservabili aventi analogo classico, funzioni cioè della posizione  $\mathbf{r}$  e dell'impulso  $\mathbf{p}$  (oltre che eventualmente del tempo  $t$ ), la regola per la costruzione dell'operatore  $A$  nella rappresentazione delle posizioni è:

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) \rightarrow A(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla; t).$$

3. L'evoluzione temporale di  $\Psi$  è governata dall'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi,$$

dove  $H$  è l'operatore hamiltoniano.

4. L'insieme degli autovalori  $\{\alpha\}$  dell'operatore autoaggiunto  $A$  costituisce l'insieme dei possibili risultati di una misurazione dell'osservabile del sistema associata ad  $A$ . Per effetto della misurazione, lo stato del sistema viene precipitato nel particolare autostato  $u_\alpha$  di  $A$  appartenente all'autovalore  $\alpha$  misurato.
5. Prima di ogni misurazione, lo stato del sistema è esprimibile solo come combinazione lineare degli autostati di  $A$ . Nel caso generale in cui  $A$  possiede uno spettro sia discreto, sia continuo, si ha

$$\Psi = \sum_n c_n(t)u_n + \int d\alpha c(\alpha, t)u_\alpha,$$

con

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_n |c_n(t)|^2 + \int d\alpha |c(\alpha, t)|^2 = 1.$$

La probabilità che un'osservazione di  $A$  all'istante  $t$  fornisca il valore  $\alpha_n$  o un valore compreso tra  $\alpha$  e  $\alpha + d\alpha$  è, rispettivamente,

$$|c_n(t)|^2 = |\langle u_n|\Psi\rangle|^2,$$
$$|c(\alpha, t)|^2 d\alpha = |\langle u_\alpha|\Psi\rangle|^2 d\alpha.$$