Problemi di Meccanica Quantistica nelle formulazioni di Bohr-Sommerfeld e di Schrödinger

Problemi di Meccanica Quantistica nelle formulazioni di Bohr-Sommerfeld e di Schrödinger

Amelia Carolina Sparavigna
Politecnico di Torino

Si discutono alcuni calcoli proposti nel testo Problems in Theoretical Physics, di L. G. Grechko e altri autori, edito da MIR. Ulteriori calcoli saranno aggiunti a questi problemi.

Prima di affrontare i problemi di Meccanica Quantistica, facciamo un ripasso di calcolo vettoriale. Tale calcolo propone infatti definizioni e formule utili in generale per affrontare qualsiasi problema di fisica, compresi quelli di meccanica quantistica. Il ripasso si trova nella Sezione A. Si proseguirà con la discussione di alcuni calcoli in quantizzazione di Bohr-Sommerfeld, fatta nella Sezione B. In tale sezione si trova anche un piccolo ripasso di teoria. Nella Sezione C si affronta il calcolo con gli operatori. Il calcolo di alcune autofunzioni e di autovalori viene esposto nella Sezione D. Poi si faranno calcoli di valori di aspettazione e di correnti secondo Schrödinger nella Sezione E.

Torino 23 Settembre 2020. DOI: 10.5281/zenodo.3706628

Sezione A: Vettori

Alcune formule dell'analisi vettoriale sono molto utili in fisica. Abbiamo ad esempio le ben note:

$$\mathrm{rot}\,\mathrm{grad}\, f = 0 \quad (1) \quad ; \quad \mathrm{div}\,\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = 0 \quad (2)$$

La (1) è evidentemente importante per i campi conservativi (f è uno scalare), la (2) per i campi solenoidali, quali il campo magnetico. Altre relazioni le troviamo in [1].

$$\mathrm{rot}\,\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = \mathrm{grad}\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A} - \Delta\,\boldsymbol{A} \quad (3)$$

$$\mathrm{div}(f\,\boldsymbol{A}) = f\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A} + \mathrm{grad}\,f\cdot\boldsymbol{A} \quad (4)$$
$$\mathrm{div}[\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}] = \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{rot}\,\boldsymbol{B} \quad (5)$$
$$\mathrm{rot}(f\,\boldsymbol{A}) = [\mathrm{grad}\,f\times\boldsymbol{A}] + f\,\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} \quad (6)$$
$$\Delta(\varphi\,\psi) = \psi\,\Delta\,\varphi + \varphi\,\Delta\,\psi + 2\,\mathrm{grad}\,\varphi\cdot\mathrm{grad}\,\psi \quad (7)$$

φ,ψ sono scalari. Ricordiamo anche che $\Delta\,\varphi = \mathrm{div}\,\mathrm{grad}\,\varphi$.

La relazione (3) è quella che si incontra quando si studia come ricavare l'equazione delle onde elettromagnetiche dalle equazioni di Maxwell. La (5) è alquanto interessante per l'utilizzo che ne possiamo fare col vettore di Poynting (si veda [2]). Tenendo presente anche queste utili relazioni (1-7), possiamo risolvere i problemi posti in [3]. Questi calcoli sono proposti nel capitolo sullo studio dell'elettromagnetismo.

Aggiungiamo ancora alcune relazioni dall'appendice del riferimento [3].

$$\mathrm{grad}(\varphi\,\psi) = \varphi\,\mathrm{grad}\,\psi + \psi\,\mathrm{grad}\,\varphi \quad (8)$$
$$\mathrm{grad}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\boldsymbol{B} + (\boldsymbol{B}\cdot\nabla)\boldsymbol{A} + [\boldsymbol{A}\times\mathrm{rot}\,\boldsymbol{B}] + [\boldsymbol{B}\times\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}] \quad (9)$$
$$\frac{1}{2}\mathrm{grad}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}) = (\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{A} + [\boldsymbol{A}\times\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}] \quad (10)$$
$$\mathrm{rot}[\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}] = (\boldsymbol{B}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{A} - (\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{B} + \boldsymbol{A}\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A} \quad (11)$$

Facciamo anche un esempio di relazione del secondo ordine.

$$\Delta(f\,\boldsymbol{A}) = \Delta(f\,A_x\boldsymbol{i} + f\,A_y\boldsymbol{j} + f\,A_z\boldsymbol{k}) = \Delta(f\,A_x)\boldsymbol{i} + \Delta(f\,A_y)\,\boldsymbol{j} + \Delta(f\,A_z)\boldsymbol{k}$$

Utilizzo la (7), applicandola a $\Delta(f\,A_x), \Delta(f\,A_y), \Delta(f\,A_z)$:

$$\Delta(f\,\boldsymbol{A}) = f\,\Delta\,\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\,\Delta\,f + 2(\mathrm{grad}\,f\cdot\nabla)\,\boldsymbol{A}$$

Altre relazioni del secondo ordine sono utili nella teoria elastica dei cristalli liquidi nematici [4].

Poi ci sono le relazioni integrali [1]:

$$\oiint \varphi\,\boldsymbol{n}\,dS = \iiint \mathrm{grad}\,\varphi\;dV \quad (12)$$

$\boldsymbol{n}$ è il vettore unitario normale alla superficie e diretto verso l'esterno.

$$\oiint (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{n})\, dS = \iiint \operatorname{div}\boldsymbol{A}\, dV \quad (13) \quad ; \quad \oiint [\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{A}]\, dS = \iiint \operatorname{rot}\boldsymbol{A}\, dV \quad (14)$$

$$\oint A_l\, dl = \iint \operatorname{rot}_n \boldsymbol{A}\, dS \quad (15) \quad ; \quad \oint \varphi\, dl = \iint [\boldsymbol{n}\times\operatorname{grad}\varphi]\, dS \quad (16)$$

Iniziamo con i problemi dal [3].

1) **Calcolare il gradiente di una funzione** $f(r)$, funzione che dipende solo dal valore assoluto del modulo del vettore posizione $\boldsymbol{r}$. Risultato: $\operatorname{grad} f(r) = \frac{df}{dr}\frac{\boldsymbol{r}}{r}$.

Esprimiamo l'espressione del gradiente:

$$\operatorname{grad} f(r) = \frac{\partial f(r)}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial f(r)}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial f(r)}{\partial z}\mathbf{k} = \frac{df}{dr}\left\{\frac{\partial r}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial r}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial r}{\partial z}\mathbf{k}\right\} = \frac{df}{dr}\left\{\frac{x}{r}\mathbf{i} + \frac{y}{r}\mathbf{j} + \frac{z}{r}\mathbf{k}\right\}$$

$$\operatorname{grad} f(r) = \frac{df}{dr}\frac{\boldsymbol{r}}{r} \quad (17)$$

Vediamo un esempio. $\operatorname{grad}\frac{1}{r^3} = -3\frac{1}{r^4}\frac{\boldsymbol{r}}{r} = -3\frac{\boldsymbol{r}}{r^5}$

Aggiungiamo anche un calcolo simile per la divergenza di una funzione $\boldsymbol{A}(r)$, funzione che dipende solo dal valore assoluto del modulo del vettore posizione $\boldsymbol{r}$.

$$\operatorname{div}\boldsymbol{A}(r) = \frac{\partial A_x(r)}{\partial x} + \frac{\partial A_y(r)}{\partial y} + \frac{\partial A_z(r)}{\partial z} =$$

$$\frac{dA_x}{dr}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{dA_y}{dr}\frac{\partial r}{\partial y} + \frac{dA_z}{dr}\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{dA_x}{dr}\frac{x}{r} + \frac{dA_y}{dr}\frac{y}{r} + \frac{dA_z}{dr}\frac{z}{r} = \frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\frac{d\boldsymbol{A}}{dr} \quad (18)$$

2) **Calcolare** (a) $\operatorname{div}\boldsymbol{r}$, (b) $\operatorname{rot}\boldsymbol{r}$, (c) $\operatorname{rot} f(r)\boldsymbol{r}$.

Ricordiamo che $\boldsymbol{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$. Quindi:

(a) $$\operatorname{div}\boldsymbol{r}=\frac{\partial x}{\partial x}\mathbf{i}+\frac{\partial y}{\partial y}\mathbf{j}+\frac{\partial z}{\partial z}\mathbf{k}=3$$

(b) $$\operatorname{rot}\boldsymbol{r}=(\frac{\partial z}{\partial y}-\frac{\partial y}{\partial z})\mathbf{i}+(-\frac{\partial z}{\partial x}+\frac{\partial x}{\partial z})\mathbf{j}+(\frac{\partial y}{\partial x}-\frac{\partial x}{\partial y})\mathbf{k}=0$$

(c) Per il calcolo di $\operatorname{rot} f(r)\boldsymbol{r}$ uso la (6) e poi la (17):

$$\operatorname{rot} f\,\boldsymbol{r}=[\operatorname{grad} f\times\boldsymbol{r}]+f\operatorname{rot}\boldsymbol{r}=[\operatorname{grad} f\times\boldsymbol{r}]=\frac{df}{dr}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times\boldsymbol{r}=0$$

3) **Calcolare** (a) $\operatorname{grad}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r})$, (b) $\operatorname{grad}[(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r})/r^3]$, (c) $(\boldsymbol{P}\cdot\nabla)\boldsymbol{r}$, (d) $\operatorname{div}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{r})$, ed infine (e) $\operatorname{rot}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{P})$ dove $\boldsymbol{P}$ è un vettore costante.

(a) $$\operatorname{grad}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r})=\frac{\partial P_x x}{\partial x}\mathbf{i}+\frac{\partial P_y y}{\partial y}\mathbf{j}+\frac{\partial P_z z}{\partial z}\mathbf{k}=P_x\frac{\partial x}{\partial x}\mathbf{i}+P_y\frac{\partial y}{\partial y}\mathbf{j}+P_z\frac{\partial z}{\partial z}\mathbf{k}=\boldsymbol{P}$$

(b) Uso questo risultato per calcolare $\operatorname{grad}[(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r})/r^3]$, insieme alla (8) e alla (17).

$$\operatorname{grad}[(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r})/r^3]=\frac{1}{r^3}\operatorname{grad}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r})+(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r})\operatorname{grad}\frac{1}{r^3}$$
$$\operatorname{grad}[(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r})/r^3]=\boldsymbol{P}/r^3-(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r})(3\boldsymbol{r}/r^5)$$

(c) $$(\boldsymbol{P}\cdot\nabla)\boldsymbol{r}=(P_x\frac{\partial}{\partial x}+P_y\frac{\partial}{\partial y}+P_z\frac{\partial}{\partial z})\boldsymbol{r}=P_x\frac{\partial x}{\partial x}\mathbf{i}+P_y\frac{\partial y}{\partial y}\mathbf{j}+P_z\frac{\partial z}{\partial z}\mathbf{k}=\boldsymbol{P}$$

(d) Per il calcolo di $\operatorname{div}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{r})$ uso la (5) e ricordo che il vettore $\boldsymbol{P}$ è costante:

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{r})=\boldsymbol{r}\cdot\operatorname{rot}\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}\cdot\operatorname{rot}\boldsymbol{r}=0$$

(e) Infine per $\operatorname{rot}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{P})$ applico le definizioni di prodotto vettoriale e rotore. Si ottiene $\operatorname{rot}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{P})=-2\boldsymbol{P}$.

Prima di proseguire coi problemi in [3], accenniamo alla legge di Gauss in forma locale.
Prendiamo $\boldsymbol{A}(r)=\boldsymbol{r}/r^3$ e calcoliamo $\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}(r)$, usando la (4).

$$\mathrm{div}(\boldsymbol{r}/r^3)=\frac{1}{r^3}\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{r}+\mathrm{grad}\frac{1}{r^3}\cdot\boldsymbol{r}=\frac{3}{r^3}-3\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}}{r^5}=0$$

Infatti, come già visto: $\mathrm{grad}\frac{1}{r^3}=-3\frac{\boldsymbol{r}}{r^5}$. Quindi, il campo Coulombiano ha divergenza nulla, tranne nel punto ove è presenta la carica.

4) **Calcolare** (a) $\mathrm{grad}(\boldsymbol{A}(r)\cdot\boldsymbol{B}(r))$, (b) $\mathrm{div}(\varphi(r)\boldsymbol{A}(r))$, (c) $\mathrm{rot}(\varphi(r)\boldsymbol{A}(r))$. Le funzioni $\varphi(r),\boldsymbol{A}(r),\boldsymbol{B}(r)$ dipendono solo dal valore del modulo del vettore posizione.

(a) Per calcolare $\mathrm{grad}(\boldsymbol{A}(r)\cdot\boldsymbol{B}(r))$ possiamo fare riferimento al risultato del problema 1, ossia che si ha $\mathrm{grad}\,f(r)=\frac{df}{dr}\frac{\boldsymbol{r}}{r}$. Si ha che:

$$\mathrm{grad}(\boldsymbol{A}(r)\cdot\boldsymbol{B}(r))=\frac{d}{dr}(\boldsymbol{A}(r)\cdot\boldsymbol{B}(r))\,\frac{\boldsymbol{r}}{r}=(\frac{d\boldsymbol{A}}{dr}\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot\frac{d\boldsymbol{B}}{dr})\,\frac{\boldsymbol{r}}{r}$$

(b) Per calcolare $\mathrm{div}(\varphi(r)\boldsymbol{A}(r))$ uso la (4) , la (17) e la (18).

$$\mathrm{div}(\varphi\,\boldsymbol{A})=\varphi\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+\mathrm{grad}\,\varphi\cdot\boldsymbol{A} \quad = \quad \frac{\varphi}{r}\,\boldsymbol{r}\cdot\frac{d\boldsymbol{A}}{dr} \;+\; \frac{1}{r}\frac{d\varphi}{dr}\,\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{A}$$

(c) Per calcolare $\mathrm{rot}(\varphi(r)\boldsymbol{A}(r))$, parto dalla (6) e uso le definizioni:

$$\mathrm{rot}(\varphi\,\boldsymbol{A})=\mathrm{grad}\,\varphi\times\boldsymbol{A}+\varphi\,\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} \quad = \quad \frac{1}{r}\frac{d\varphi}{dr}\,\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{A} \;+\; \frac{\varphi}{r}\,\boldsymbol{r}\times\frac{d\boldsymbol{A}}{dr}$$

5) **Usando il teorema di Ostrogradski,** calcolare gli integrali $\boldsymbol{I}=\oiint\boldsymbol{r}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{n})dS$ e $\boldsymbol{I}=\oiint(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{n}\,dS$, se il volume racchiuso dalla superficie è V e se il vettore $\boldsymbol{A}$ è costante.

Si prenda un generico vettore $\boldsymbol{p}$ costante:

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{I}=\boldsymbol{p}\cdot\oint\!\!\!\oint \boldsymbol{r}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{n})\,dS=\oint\!\!\!\oint(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{n})\,dS \quad = \quad \oint\!\!\!\oint(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\,A_n)\,dS=\iiint \operatorname{div}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{A})\,dV$$

Uso la relazione $\operatorname{div}(f\,\boldsymbol{A})=f\operatorname{div}\boldsymbol{A}+\operatorname{grad} f\cdot\boldsymbol{A}$, che nel caso di vettore costante diventa: $\operatorname{div}(f\,\boldsymbol{A})=\operatorname{grad} f\cdot\boldsymbol{A}$.

$$\iiint \operatorname{div}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{A})\,dV=\iiint \boldsymbol{A}\cdot\operatorname{grad}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\,dV \qquad (19)$$

Siccome $\operatorname{grad}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})=\boldsymbol{p}$: $\iiint \boldsymbol{A}\cdot\operatorname{grad}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\,dV=\iiint \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\;dV=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})\,V$

Dato che il vettore $\boldsymbol{p}$ è generico: $\boldsymbol{I}=\boldsymbol{A}\,V$.

Passiamo ora al calcolo dell'integrale $\boldsymbol{I}=\oint\!\!\!\oint(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{n}\,dS$ nelle stesse condizioni del calcolo precedente.

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{I}=\boldsymbol{p}\cdot\oint\!\!\!\oint(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{n}\,dS=\oint\!\!\!\oint(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r})\,dS \quad = \quad \oint\!\!\!\oint(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r}\,p_n)\,dS=\iiint \operatorname{div}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{p})\,dV$$

Uso la (4): $\iiint \operatorname{div}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{p})\,dV=\iiint \boldsymbol{p}\cdot\operatorname{grad}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r})\,dV$

E poi ricordo che: $(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\boldsymbol{r}=\boldsymbol{A}$. Si ha per la (9) che:

$$\operatorname{grad}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r})=(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\boldsymbol{r}+(\boldsymbol{r}\cdot\nabla)\boldsymbol{A}+[\boldsymbol{A}\times\operatorname{rot}\boldsymbol{r}]+[\boldsymbol{r}\times\operatorname{rot}\boldsymbol{A}]=\boldsymbol{A} \quad .$$

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{I} \quad = \quad \iiint \boldsymbol{p}\cdot\operatorname{grad}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r})\,dV=\iiint \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}\;dV$$

Si ricade nel caso precedente.

6) **Si dimostri che** $\iiint \boldsymbol{A}\;dV=0$ se dentro il volume si ha che $\operatorname{div}\boldsymbol{A}=0$ e sulla superficie di

contorno $A_n = 0$.

Come fatto nel calcolo precedente, prendiamo un generico vettore $\boldsymbol{p}$ costante. Questa volta, vediamo il vettore costante come il gradiente: $\boldsymbol{p} = \text{grad}\,\varphi$.

$$\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{I} = \iiint \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{A} \; dV$$

Usiamo le relazione vettoriali precedentemente viste: $\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{A} = \text{grad}\,\varphi \cdot \boldsymbol{A} = \text{div}\,\varphi\,\boldsymbol{A}$.

$$\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{I} = \iiint \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{A} \; dV = \iiint \text{div}\,\varphi\,\boldsymbol{A} \; dV = \oiint \varphi\,A_n\,dS$$

Sulla superficie di contorno $A_n = 0$ ed essendo $\boldsymbol{p} = \text{grad}\,\varphi$ generico, segue $\iiint \boldsymbol{A}\;dV = 0$.

In fondo, se noi pensiamo che i campi a divergenza nulla, come nel caso discusso $\text{div}\,\boldsymbol{A} = 0$, possono essere campi elettrici e magnetici, e che noi li rappresentiamo con linee di campo chiuse, il risultato non ci sorprende. Pensiamo al campo magnetico indotto in un condensatore o al campo elettrico indotto da un campo magnetico variabile come nei due esempi dati in [2]; il volume da considerare è un cilindro con le linee di campo parallele alla sua superficie, da cui la condizione sulla superficie di contorno $A_n = 0$.

7) **Mostrare che la divergenza** del vettore seguente è nulla:

$$\boldsymbol{A} + \frac{1}{4\pi}\,\text{grad} \iiint \frac{\text{div}\,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}\,dV' \quad (20)$$

Chiamiamo $\text{div}\,\boldsymbol{A} = \rho(\boldsymbol{r})$, si ha quindi che l'integrale sul volume assume una forma più familiare, quella del potenziale di una distribuzione continua di cariche (a parte l'assenza di costante dielettrica):

$$\varphi = \frac{1}{4\pi} \iiint \frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}\,dV'$$

Se usiamo il segno negativo:

$$\varphi = -\frac{1}{4\pi} \iiint \frac{\rho(\boldsymbol{r}\,')}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}\,'|}\, dV\,'$$

La funzione data sopra è la soluzione dell'equazione di Poisson: $\Delta\varphi = \text{div}\,\text{grad}\,\varphi = 0$. Abbiamo quindi immediatamente che la divergenza di (20) deve essere nulla.

Sezione B: La quantizzazione di Bohr-Sommerfeld

Lo stato di una particella microscopica in un potenziale $V(\boldsymbol{r}, t)$ è descritto dalla funzione d'onda $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ soluzione dell'equazione:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\boldsymbol{r}, t) + V(\boldsymbol{r}, t) \Psi(\boldsymbol{r}, t)$$

Usando la funzione complessa coniugata:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 + \text{div}\left[\frac{i\hbar}{2m}(\Psi\,\text{grad}\,\Psi^* - \Psi^*\,\text{grad}\,\Psi)\right] = 0$$

Questa è la legge di conservazione, in forma differenziale, che permette di interpretare $|\Psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$ come densità di probabilità.

$$\boldsymbol{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\,\text{grad}\,\Psi^* - \Psi^*\,\text{grad}\,\Psi)$$

è la densità di corrente di probabilità.

Data questa interpretazione, ci devono essere delle condizioni a cui la funzione deve soddisfare. Essa deve essere ad un sol valore, finita in tutti i punti dello spazio, e continua, insieme alla sua derivata prima. Questa condizione – continuità della derivata prima - è violata solo nei punti dove il potenziale ha una discontinuità di seconda specie.

Se il potenziale non dipende esplicitamente dal tempo, la soluzione ha la forma stazionaria:

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\Psi(\boldsymbol{r})\exp(-iEt/\hbar)$$

Così $\rho=|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ e $\boldsymbol{j}$ non dipendono dal tempo. L'equazione di Schrödinger si riduce a:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})]\Psi(\boldsymbol{r})=E\,\Psi(\boldsymbol{r})$$

In tanti casi, la soluzione dell'equazione di Schrödinger non dipendente dal tempo ha la forma:

$$\Psi(\boldsymbol{r})=\exp(iS(\boldsymbol{r})/\hbar)$$

che è nota come approssimazione di Wentzel-Krames-Brillouin, ossia l'approssimazione WKB.

$$\frac{1}{2m}(\mathrm{grad}\,S)^2+\frac{i\hbar}{2m}\Delta S+V(\boldsymbol{r})=E \quad \text{ove} \quad S=S^0+i\hbar S'+\ldots$$

All'approssimazione di ordine zero, si ha l'equazione di Hamilton-Jacoby. Di conseguenza, la soluzione, nel caso di variabili separabili, è:

$$S^0=\sum_i S_i^0(q_i)$$

ove $S_i^0(q_i)=\int p_i\,dq_i$ e p_i, q_i sono i momenti coniugati e le variabili generalizzate.
Se la microparticella è in moto periodico in una buca di potenziale, allora, nell'approssimazione WKB si ha la condizione:

$$\oint p_i\,dq_i=n_i h \quad (1)$$

dove $\oint p_i\,dq_i=n_i h$ ed n_i sono interi positivi compreso lo zero. La (1) è conosciuta come la regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld. Usando tale regola di quantizzazione, proviamo a risolvere i seguenti problemi [3,5,6].

1) Buca di potenziale. Determinare i livelli di energia di una particella in una buca di potenziale unidimensionale con pareti di altezza infinita alle coordinate 0 ed *a*.

Questa è una quantizzazione di un moto traslatorio. La particella è libera ma limitata a rimbalzare da una parete all'altra della buca. E' quindi un moto periodico, con la particella che ha una quantità di moto (momento) pari a p in mezzo periodo e poi pari a $-p$ nel successivo mezzo periodo. Notate che si intende l'urto elastico. In effetti la buca ha pareti infinite.

$$\oint p\,dx = 2p\int_0^a dx = 2pa = nh$$

da cui $p=\frac{nh}{2a}$ ed infine:

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{n^2h^2}{8ma^2} \qquad (2)$$

Facciamo la verifica dimensionale:

$$[E]=[\frac{h^2}{ma^2}]=[energia^2\ tempo^2\ massa^{-1}\ lunghezza^{-2}]=[energia]$$

Il problema di questo calcolo è nel fatto che esistono due punti, in cui la quantità di moto non viene definita e sono quelli dell'urto contro la parete a massa infinita. Per questo problema, è stato proposto il metodo di Einstein–Brillouin–Keller, dove la quantizzazione è espressa come:

$$\oint p\,dx = 2p\int_0^a dx = 2pa = (n+b/2)h$$

dove *b* è il numero delle riflessioni su parete rigida. In questo caso, se *n* è grande, il risultato non cambia. Il risultato in (2) è il medesimo che si ha se si tratta l'equazione di Schrödinger stazionaria.

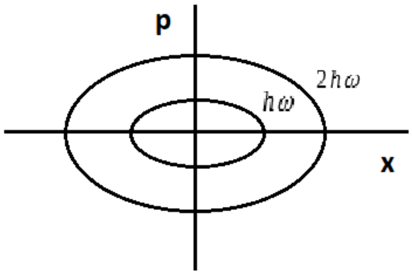
2) Oscillatore armonico. Si quantizzi il moto dell'oscillatore armonico secondo Bohr.

Dell'oscillatore armonico si conosce un integrale del moto, che è l'energia: $E=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2 x^2}{2}$,

dove la pulsazione è data da $\omega=(k/m)^{1/2}$.

$$1=\frac{p^2}{2mE}+\frac{m\omega^2 x^2}{2E}=\frac{p^2}{a^2}+\frac{x^2}{b^2} \quad (3)$$

La (3), nello spazio delle fasi, rappresenta una ellissi.



La figura mostra due ellissi a diversi valori dell'energia nel piano delle fasi. Consociamo i semiassi dell'ellisse $a=(2mE)^{1/2}$, $b=(2E/m\omega^2)^{1/2}$. L'area dell'ellisse è $A=\pi ab$. Quindi:

$$S=\oint p\,dx=\oint \sqrt{2mE}\sqrt{1-\frac{x^2}{2E/m\omega^2}}dx=nh$$

Non c'è bisogno di calcolare l'integrale perché basta prendere l'area nello spazio delle fasi:

$$S=\pi(2mE)^{1/2}(2E/m\omega^2)^{1/2}=\pi(4E^2/\omega^2)^{1/2}=nh$$

da cui: $2E=nh\omega/\pi$ ed infine $E=n\hbar\omega$.

In questo caso, il risultato della soluzione dell'equazione di Schrödinger stazionaria per l'oscillatore armonico nella rappresentazione delle coordinate porta al risultato:

$$2E/\omega=(n+1/2)h \quad \text{ovvero} \quad E=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega \quad .$$

La differenza proviene dall'esistenza di punti di inversione del moto, dove il momento è nullo. Intorno a questi punti, l'approssimazione semiclassica non è certamente applicabile [6]. Per essere valida, si deve avere:

$$\hbar \frac{|\partial p / \partial x|}{p^2} \ll 1 \quad ;$$

questa relazione è palesemente violata. L'approssimazione semiclassica è applicabile lontano dai punti di inversione.
Si può operare come nel caso della buca, ossia assumere una quantizzazione con:

$$\oint p\, dx = 2p \int_0^a dx = 2pa = (n + w/4) h$$

dove *w* è il numero di inversioni.

3) Rigid plane rotator. Trovare i livelli d'energia di una particella di massa *m* che ruota libera su una circonferenza di raggio *r* (rigid plane rotator).

In questo caso, la variabile generalizzata è un angolo, e il momento coniugato è il momento angolare.

$$\oint p_\alpha\, d\alpha = 2L \int_0^{2\pi} d\alpha = 2\pi L = nh$$

Essendo *L*, il momento angolare costante, esso è stato portato fuori l'integrale.
Di conseguenza:

$$L = n\hbar$$

4) Elettrone attorno al nucleo. Trovare i livelli d'energia di un elettrone che si muove in orbita ellittica attorno ad un nucleo di carica *Ze*.

Il moto dell'elettrone è descritto da due coordinate, r, ϕ con momenti generalizzati

$$p_r = m\dot{r}\,,\, p_\phi = m r^2 \dot{\phi}$$

In un campo centrale si hanno due integrali del moto, il momento angolare nel piano di rotazione e l’energia totale:

$$p_\phi = m r^2 \dot{\phi} = L$$

$$E = \frac{m\dot{r}^2}{2} + \frac{mr^2\dot{\phi}^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} \quad = \quad \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}$$

Da questa relazione si ha che:

$$p_r = \sqrt{2mE + \frac{2mZe^2}{r} - \frac{L^2}{r^2}}$$

I valori estremi del raggio sono quelli per cui $\dot{r}$ è nullo. Sono r_{min}, r_{max}

La quantizzazione di Bohr-Sommerfeld diventa:

$$\oint p_\phi \, d\phi = 2\pi L = n_\phi h \quad \text{da cui:} \quad L = n_\phi h / 2\pi = n_\phi \hbar \quad \text{e} \quad \oint p_r \, dr = 2\int_{r_{min}}^{r_{max}} p_r \, dr = n_r h$$

Il secondo integrale è del tipo: $I = \int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{A + \frac{2B}{r} + \frac{C}{r^2}}\, dr$, dove $B = me^2$ con Z=1, $A = 2mE$, $C = -L^2$. Introduciamo la funzione complessa:

$$f = \sqrt{A + \frac{2B}{z} + \frac{C}{z^2}}$$

dove *z* è la variabile complessa, e calcoliamo l’integrale (si veda la discussione seguente). Si ha che:

$$\oint p_r \, dr = 2\int_{r_{min}}^{r_{max}} p_r \, dr = 2\pi\, i \left(B/\sqrt{(A)} - \sqrt{(C)} \right) = n_r h$$

da cui:

$$2\pi i\ \left(\frac{m e^2}{i\sqrt{(2m|E|)}}+i n_\phi \hbar\right)=n_r h$$

da cui, introducendo la quantità $n=n_\phi+n_r$, si ha $E_n=-\frac{m e^4}{2\hbar^2 n^2}$.

Verifichiamo dimensionalmente il risultato trovato:

$$[E]=[\frac{m e^4}{\hbar^2}]=[massa\ energia^2\ lunghezza^2\ energia^{-2}\ tempo^{-2}]=[energia]$$

5) Rimbalzo elastico. Una particella di massa *m* cade da una altezza *H*, su un piano orizzontale e rimbalza elasticamente. Quantizzare il moto della particella. Determinate le altezze ammissibili H_n e calcolare i livelli d'energia del sistema.

La particella ha posizione *z* e momento *p*, con:

$$E=\frac{p^2}{2m}+mgz=mgH$$

Quindi:

$$p=\pm\sqrt{2m(E-mgz)}$$

Quantizziamo:

$$\oint p\,dz=2\int_0^H\sqrt{2m(E-mgz)}\,dz=n h$$

da cui ricaviamo H_n ed E_n . L'integrale da calcolare è $\int_0^H\sqrt{A-Bz}\,dz$.

In [7] lo troviamo risolto come: $\int_0^H\sqrt{A-Bz}\,dz=-\frac{2}{3B}(A-BH)^3+\frac{2}{3B}(A)^3$.

Poiché $A-BH=2mE-2m^2gH=2m(mgH)-2m^2gH=0$ allora:

$$\int_0^H \sqrt{A-Bz}\,dz=\frac{2}{3B}(A)^3$$

Si ricava che:

$$H_n=\left(\frac{3nh}{4m\sqrt{2g}}\right)^{2/3} \quad ; \quad EH_n=\left(\frac{3\sqrt{m}\;gnh}{4\sqrt{2}}\right)^{2/3}$$

Discussione. La soluzione del problema di quantizzazione dell'elettrone in orbita attorno al nucleo richiede lo studio di un integrale molto interessante dal punto di vista didattico. L'integrale è il seguente (discusso anche in [8]):

$$\int_{z'}^{z} \sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\;dz \quad (*)$$

La funzione da integrare è polidroma. Si suppone che i coefficienti del trinomio:

$$A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}$$

siano reali e le radici distinte e reali, con $0<z_1<z_2$. Sia $A<0$, siccome $A=2mE$ allora vuol dire che $E<0$ e che il sistema deve essere legato. Ne segue che il trinomio è positivo per $z_1<z<z_2$.

L'integrazione (*) viene fatta sull'asse reale. Il radicando è supposto positivo su questo intervallo:

$$A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}=\frac{A(z-z_1)(z-z_2)}{z}=C\left(\frac{1}{z}-\frac{1}{z_1}\right)\left(\frac{1}{z}-\frac{1}{z_2}\right)$$

Si avrà in z_1, z_2 i punti di ramificazione del primo ordine. Tagliando il piano lungo il segmento

(z_1, z_2) dell'asse reale, la funzione diventa olomorfa e monodroma nel piano T , ossia tagliato. Supponiamo che sia il radicale positivo sul bordo inferiore del taglio. Per passare al bordo superiore dobbiamo girare attorno ad uno dei punti di ramificazione. Sopra il taglio, il radicando sarà negativo. Calcoliamo l'integrale (*) facendo un cammino chiuso Γ che contorni il taglio, girando in senso positivo, ossia antiorario. Da z_1 a z_2 , si ha la prima parte dell'integrale; da z_2 a z_1 ho la seconda parte che ha verso opposto alla prima. L'integrale cambia quindi segno, ma la funzione è negativa. Quindi i due pezzi dell'integrale contribuisco con una quantità uguale.

$$\oint_\Gamma \sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\ dz = 2\int_{z_1}^{z_2} \sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\ dz$$

A questo punto ci si aiuta col teorema di Cauchy, che vale per le funzioni olomorfe. Senza cambiare il valore dell'integrale, deformiamo Γ in modo continuo in Γ' , senza abbandonare il dominio dove la funzione è olomorfa. Calcoliamo il seguente integrale:

$$I = \frac{1}{2}\oint_{\Gamma'} \sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\ dz$$

Consideriamo gli intorni di $z=\infty$ e $z=0$, e i relativi sviluppi in serie locali.
Intorno a $z=\infty$:

$$\sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}} = \sqrt{A}\ \left[1+\left(2\frac{B}{Az}+\frac{C}{Az^2}\right)\right]^{1/2}$$

Con la formula del binomio di Newton:

$$\sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}} = \sqrt{A}\ \left(1+\frac{B}{Az}+\ldots\right) \ .$$

Discutiamo $\sqrt{A}$ come fatto in [3]. Prendiamo la funzione della forma: $f = \frac{\sqrt{A(z-z_1)(z-z_2)}}{z}$.

Quando si passa da $z<r_2$, dove la funzione f è > 0 ed ha argomento nullo, ad un punto $z>r_2$, il fattore $(z-z_2)$ ha l'argomento che varia di π , mentre quello di $(z-z_1)$ resta invariato. L'argomento di f cambia di $\pi/2$. Per i punti dell'asse (z_2,∞) la funzione ha valori immaginari positivi. Di conseguenza $\sqrt{A}$ deve essere un immaginario positivo. Dato che l'argomento di $(1+\frac{B}{Az}+\ldots)$ è nullo, allora $\sqrt{A}=+i|\sqrt{A}|$.

Si sviluppa poi la funzione attorno allo zero.

$$\sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}=\frac{\sqrt{C}}{z}\,[1+2\frac{Bz}{C}+\frac{Az^2}{C}]^{1/2}=\frac{\sqrt{C}}{z}\,(1+\frac{Bz}{C}+\ldots)$$

Quando passiamo dai punti $z>r_1$ sul lato inferiore del taglio, ai punti $z<r_1$, l'argomento decresce di π , dato che il moto avviene nella direzione positiva (oraria). L'espressione della funzione è un immaginario negativo sul segmento $(0,z_1)$: $\sqrt{C}=-i|\sqrt{C}|$.

Per il teorema di Cauchy:

$$\oint_L\sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\,dz=\oint_{\Gamma'}\sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\,dz+\oint_{L'}\sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\,dz$$

L,L' sono curve chiuse percorse in senso antiorario attorno all'infinito ed allo zero, rispettivamente. Usando la teoria dei residui si ha che:

$$\oint_L\sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\,dz=\sqrt{A}\,\oint_L(1+\frac{B}{Az}+\ldots)dz=i2\pi\frac{B}{\sqrt{A}}$$

$$\oint_{L'}\sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\,dz=\sqrt{C}\,\oint_{L'}(1+\frac{Bz}{C}+\ldots)dz=i2\pi\sqrt{C}$$

In definitiva:

$$J=\frac{1}{2}\{\oint_L\sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\,dz-\oint_{L'}\sqrt{A+\frac{2B}{z}+\frac{C}{z^2}}\,dz\}=i\pi(\frac{B}{\sqrt{A}}-\sqrt{C})\;.$$

Ricordiamo che, nel problema quantistico, $B=me^2$ **,** $A=2mE$ **,** $C=-L^2$ **.**

Sezione C: Calcoli con gli operatori

Si propongono ora alcuni problemi legati al calcolo con operatori, molti da [3].

1) Trovate le espressioni esplicite dei seguenti operatori:

(a) $\left(\frac{d}{dx}+x\right)^2$; (b) $\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)^3$; (c) $\left(x\frac{d}{dx}\right)^2$; (d) $\left(\frac{d}{dx}x\right)^2$;

(e) $(i\hbar\nabla+\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2$; (f) $(\hat{L}-\widehat{M})(\hat{L}+\widehat{M})$; (g) $(\hat{L}-\widehat{M})(\widehat{M}-\hat{L})$; (h) $(\hat{L}-\widehat{M})^2$

Sia ψ una funzione arbitraria. A tale funzione applichiamo gli operatori.

(a)
$$\left(\frac{d}{dx}+x\right)\left(\frac{d}{dx}+x\right)\psi=\left(\frac{d}{dx}+x\right)\left(\frac{d\psi}{dx}+x\psi\right)$$

$$=\frac{d^2\psi}{dx^2}+\psi+x\frac{d\psi}{dx}+x\frac{d\psi}{dx}+x^2\psi=\left(\frac{d^2}{dx^2}+2x\frac{d}{dx}+x^2\frac{d}{dx}+1\right)\psi$$

Calcoliamo ora: $\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)^2\psi$. Si ha: $\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)^2\psi=\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)\psi=\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)\left(\frac{d\psi}{dx}+\frac{\psi}{x}\right)$

$$=\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx}-\frac{\psi}{x^2}+\frac{\psi}{x^2}+\frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx}=\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d\psi}{dx}$$

(b) Calcoliamo $\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)^3\psi$.

$$\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)^3\psi=\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)\left(\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d\psi}{dx}\right) = \left(\frac{d^3}{dx^3}+\frac{3}{x}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi$$

(c) $$(x\frac{d}{dx})(x\frac{d}{dx})\psi=(x\frac{d}{dx})(x\frac{d\psi}{dx})=x\frac{d\psi}{dx}+x^2\frac{d^2\psi}{dx^2}=(x^2\frac{d^2}{dx^2}+x\frac{d}{dx})\psi$$

(d) $$(\frac{d}{dx}x)^2\psi=(\frac{d}{dx}x)(\frac{d}{dx}(x\psi))=(\frac{d}{dx}x)(\psi+x\frac{d\psi}{dx})=\frac{d}{dx}(x\psi+x^2\frac{d\psi}{dx})$$

$$=\quad \psi+x\frac{d\psi}{dx}+2x\frac{d\psi}{dx}+x^2\frac{d^2\psi}{dx^2}=x^2\frac{d^2\psi}{dx^2}+3x\frac{d\psi}{dx}+\psi=(x^2\frac{d^2}{dx^2}+3x\frac{d}{dx}+1)\psi$$

(e) $$(i\hbar\nabla+\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2\psi=(i\hbar\nabla+\mathbf{A}(\mathbf{r}))\cdot(i\hbar\nabla+\mathbf{A}(\mathbf{r}))\psi$$

$$=\quad (i\hbar\nabla+\mathbf{A}(\mathbf{r}))\cdot(i\hbar\nabla\psi+\mathbf{A}(\mathbf{r})\psi)=-\hbar^2\Delta\psi+i\hbar\nabla\cdot(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\psi)+i\hbar(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\psi+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}\psi$$

$$=\quad -\hbar^2\Delta\psi+i\hbar\psi\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+2i\hbar(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\psi+\boldsymbol{A}^2\psi$$

Si ha che (Sezione A):

$$i\hbar\nabla\cdot(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\psi)=i\hbar(\psi\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi)$$

Quindi

$$(e)=-\hbar^2\Delta+i\hbar\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+2i\hbar(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)+\boldsymbol{A}^2$$

(f) $$(\hat{L}-\widehat{M})(\hat{L}+\widehat{M})=\hat{L}^2+\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}-\hat{M}^2=\hat{L}^2-\hat{M}^2+(\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L})$$

(g) $$(\hat{L}-\widehat{M})(\widehat{M}-\hat{L})=\hat{L}\hat{M}-\hat{L}^2+\hat{M}\hat{L}-\hat{M}^2=-\hat{M}^2-\hat{L}^2+(\hat{L}\hat{M}+\hat{M}\hat{L})$$

(h) $$(\hat{L}-\widehat{M})(\hat{L}-\widehat{M})=\hat{L}^2-\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}+\hat{M}^2$$

Dato che gli operatori sono legati alle grandezze fisiche corrispondenti, le espressioni date sopra devono essere dimensionalmente corrette. Vuol dire che nel caso (a), con x si intende variabile adimensionale.

2) Discutere le dimensioni di $(e)=-\hbar^2\Delta+i\hbar\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+2i\hbar(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)+\boldsymbol{A}^2$.

La costante di Planck ridotta $\hbar$ ha le dimensioni di energia x tempo, oppure lunghezza x quantità di moto. L'espressione *(e)* deve essere quindi una quantità di moto al quadrato. Di conseguenza anche $\boldsymbol{A}$ deve rappresentare una quantità di moto.

Più avanti incontriamo proprio la quantità di moto (momento) $\hat{p}=-i\hbar\frac{d}{dx}$.

3) Trovare le espressioni degli operatori: $(\hat{L}-\hat{M})^2$, $(\hat{L}-\hat{M})^3$, dove *L* ed *M* sono grandezze omogenee (se così non fosse, avremmo problemi con le dimensioni).

$$(\hat{L}-\hat{M})^2=(\hat{L}-\hat{M})(\hat{L}-\hat{M})=\hat{L}^2-\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}+\hat{M}^2$$

$$(\hat{L}-\hat{M})^3=(\hat{L}-\hat{M})^2(\hat{L}-\hat{M})=(\hat{L}^2-\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}+\hat{M}^2)(\hat{L}-\hat{M})$$

$$=\ \hat{L}^3-\hat{L}\hat{M}\hat{L}-\hat{M}\hat{L}^2+\hat{M}^2\hat{L}-\hat{L}^2\hat{M}+\hat{L}\hat{M}^2+\hat{M}\hat{L}\hat{M}-\hat{M}^3$$

Oppure: $(\hat{L}-\hat{M})^3=(\hat{L}-\hat{M})(\hat{L}-\hat{M})^2=(\hat{L}-\hat{M})(\hat{L}^2-\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}+\hat{M}^2)$

$$=\ \hat{L}^3-\hat{L}^2\hat{M}-\hat{L}\hat{M}\hat{L}+\hat{L}\hat{M}^2-\hat{M}\hat{L}^2+\hat{M}\hat{L}\hat{M}+\hat{M}^2\hat{L}-\hat{M}^3$$

4) Sia noto il commutatore $[\hat{L},\hat{M}]=c$ **, si calcoli** $(\hat{L}-\hat{M})(\hat{L}+\hat{M})$.

$$(\hat{L}-\hat{M})(\hat{L}+\hat{M})=\hat{L}^2+\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}-\hat{M}^2=\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}+\hat{L}^2-\hat{M}^2=c+\hat{L}^2-\hat{M}^2$$

Nota

Il commutatore riveste un ruolo fondamentale nella meccanica quantistica. I commutatori godono delle seguenti proprietà:

$$[\hat{A},\hat{A}]=0 \quad ; \quad [\hat{A},\hat{B}]=-[\hat{B},\hat{A}]$$

$$[\hat{A},c]=0, \forall c\in C \quad ; \quad [\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}]$$

$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}-\hat{B}\hat{A}\hat{C}+\hat{B}\hat{A}\hat{C}=[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}+\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$$

$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]=0 \quad \text{identità di Jacobi}$$

Da queste proprietà si ha che l'insieme dei commutatori è un'algebra sugli spazi di Hilbert. Questa è un'algebra di derivazione che ha come prodotto il commutatore. Ricordiamo che un anello differenziale è un anello *R* equipaggiato di una operazione di derivazione, cioè di una funzione *D*, tale che soddisfi le proprietà di additività e la regola di Leibniz:

$$D(r+s)=D(r)+D(s)$$
$$D(rs)=D(r)s+r\,D(s)$$

Occorre fare attenzione alla scrittura della seconda identità, in quanto l'anello potrebbe non essere commutativo.

Il commutatore compare anche nell'algebra di Lie. Essa è un'algebra non associativa a cui obbediscono gli oggetti che sono le parentesi di Lie (il commutatore $[a,b]=ab-ba$ corrisponde al prodotto di Lie).

5) Sia l'operatore momento dato da $\hat{p}=-i\hbar\frac{d}{dx}$ **, trovare il commutatore** con $\hat{x}$.

$$[\hat{x},\hat{p}]=x(-i\hbar\frac{d}{dx})-(-i\hbar\frac{d}{dx})x$$

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi=x(-i\hbar\frac{d}{dx})\psi-(-i\hbar\frac{d}{dx})x\psi \;=\; -i\hbar x\frac{d\psi}{dx}+i\hbar\frac{dx}{dx}\psi+i\hbar x\frac{d\psi}{dx}=i\hbar\psi$$

Come già detto, la costante di Planck ridotta ha le dimensioni energia x tempo. Ed in effetti, anche il prodotto $x\,p$ ha le stesse dimensioni.

$$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$$

Altre relazioni importanti sono:

$$[\hat{x},\hat{p}^n]=i\hbar n\hat{p}^{n-1} \qquad [\hat{x}^n,\hat{p}]=i\hbar n\hat{x}^{n-1}$$

$$[\hat{x},f(\hat{p})]=i\hbar\frac{\partial f}{\partial p} \qquad [g(\hat{x}),\hat{p}]=i\hbar\frac{\partial g}{\partial x}$$

6) Verificare che $[\hat{x},\hat{p}^2]=i\hbar 2\hat{p}$.

$$[\hat{x},\hat{p}\,\hat{p}]=\hat{x}\,\hat{p}\,\hat{p}-\hat{p}\,\hat{p}\,\hat{x}+\hat{p}\,\hat{x}\,\hat{p}-\hat{p}\,\hat{x}\,\hat{p}=[\hat{x},\hat{p}]\,\hat{p}+\hat{p}[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar 2\,\hat{p}$$

7) Verificare che $[\hat{x}^2,\hat{p}]=i\hbar 2\hat{x}$.

$$[\hat{x}\,\hat{x},\hat{p}]=\hat{x}\,\hat{x}\,\hat{p}-\hat{p}\,\hat{x}\,\hat{x}+\hat{x}\,\hat{p}\,\hat{x}-\hat{x}\,\hat{p}\,\hat{x}=\hat{x}[\hat{x},\hat{p}]+[\hat{x},\hat{p}]\,\hat{x}=i\hbar 2\,\hat{x}$$

Queste relazioni sono state dedotte nel caso unidimensionale. Altrimenti: $[\hat{x}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij}$
dove *i, j, k = x, y, z* , e δ_{ij} è la delta di Kronecker;

8) **Sia** $f(\boldsymbol{r})$ **una funzione del vettore posizione.** Trovare il commutatore tra $\hat{\boldsymbol{p}}$ e $f(\boldsymbol{r})$ [9].

$$(\hat{\boldsymbol{p}}f-f\,\hat{\boldsymbol{p}})\psi=-i\hbar[\nabla f\,\psi-f\,\nabla\,\psi]=-i\hbar\psi\,\nabla f \quad \text{quindi} \quad [\hat{\boldsymbol{p}},f]=-i\hbar\nabla f$$

Analogamente:
$$[f(\hat{\boldsymbol{p}}),\boldsymbol{r}]=-i\hbar\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}$$

9) Trovare le relazioni di commutazione tra i seguenti operatori:

(a) $\dfrac{d}{dx}$ e x ; (b) $i\hbar\nabla$ e $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$; (c) $\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ e $f(r,\theta,\phi)$.

(a) $$(\frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx})\psi = \frac{d}{dx}(x\psi) - x\frac{d\psi}{dx} = \psi \quad \text{quindi} \quad [\frac{d}{dx}, x] = (\frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx}) = 1$$

(b) $$(i\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) - i\hbar\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\psi = i\hbar\nabla\cdot(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\psi) - i\hbar\boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi$$

$$= \quad i\hbar\psi\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) + i\hbar\boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi - i\hbar\boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi = i\hbar\psi\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}$$

$$\text{da cui} \quad [i\hbar\nabla, \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})] = i\hbar\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}$$

dove si è usato $i\hbar\nabla\cdot(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\psi) = i\hbar(\psi\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\cdot\nabla\psi)$.

(c) $$\frac{\partial}{\partial\phi}(f\psi) - f\frac{\partial}{\partial\phi}(\psi) = \frac{\partial f}{\partial\phi}\psi + f\frac{\partial\psi}{\partial\phi} - f\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = \frac{\partial f}{\partial\phi}\psi$$

$$[\frac{\partial}{\partial\phi}, f] = \frac{\partial f}{\partial\phi}$$

Nota I commutatori compaiono nelle soluzioni della seguente equazione: $e^X e^Y = e^Z$ dove X,Y sono due elementi non commutativi dell'algebra del gruppo di Lie. La più nota formula di soluzione viene detta di Baker-Campbell-Hausdorff.

$$Z = X + Y + \frac{1}{2}[X,Y] + \frac{1}{12}[X,[X,Y]] + \frac{1}{12}[Y,[Y,X]] - \frac{1}{24}[Y,[X,[X,Y]]] + \ldots$$

Supponiamo che Y sia un operatore di creazione e X di distruzione della stessa particella.
Si ha $[X,Y] = 1$, ed allora: $Z = X + Y + \frac{1}{2}$. Caso analogo possiamo ottenere con gli operatori momento e posizione.

10) Trovare gli operatori traslazione che mappano (a) $\psi(x)$ in $\psi(x+a)$ e (b) $\psi(\boldsymbol{r})$ in $\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a})$. Trovare l'operatore che ruota lo spazio di un angolo α .

(a) $$\hat{T}_\alpha \psi(x)=\psi(x+a)$$

Sviluppo in serie di *a*: $\psi(x+a)=\psi(x)+a\frac{d\psi}{dx}+\frac{1}{2}a^2\frac{d^2\psi}{dx^2}+...=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\frac{d^n\psi}{dx^n}$

Poiché $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}=e^x$ si ha che $\hat{T}_a=\exp(a\frac{d}{dx})$.

Si procede nella stessa maniera per gli altri due casi: $\hat{T}_{\boldsymbol{a}}=\exp(\boldsymbol{a}\cdot\nabla)$, $\hat{T}_\alpha=\exp(\alpha\frac{d}{d\phi})$

11) Trovare l'operatore che è hermitiano coniugato a (a) $\frac{d}{dx}$ e (b) $\frac{d^n}{dx^n}$.

L'operatore hermitiano coniugato è quell'operatore tale che:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1{}^*\frac{d\psi_2}{dx}dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^+\psi_1\right]^*dx$$

dove gli integrali: $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_1|^2dx$; $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_2|^2dx$ si intende che esistano.

Vuol dire che ψ_1 e ψ_2 vanno a zero se $x\rightarrow\pm\infty$.

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1{}^*\frac{d\psi_2}{dx}dx=\psi_1^*\psi_2\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2\frac{d\psi_1^*}{dx}dx$$

ossia:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2\left(-\frac{d\psi_1}{dx}\right)^*dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^+\psi_1\right]^*dx$$

Si ha quindi che: $(\frac{d}{dx})^+=-\frac{d}{dx}$. L'hermitiano coniugato di (b) è pari a $(-1)^n\frac{d^n}{dx^n}$.

Zenodo - 2020 - DOI 10.5281/zenodo.3706628

12) Trovare l'operatore che è hermitiano coniugato all'operatore della traslazione nello spazio del vettore **a**.

Applico la definizione:

$$\int \psi_1^*(\vec{r})\, \hat{T}_{\vec{a}}\, \psi_2(\vec{r})\, d\tau = \int \psi_2(\vec{r})\, \hat{T}_{\vec{a}}^{+}\, \psi_1(\vec{r})\, d\tau$$

Usiamo un cambiamento di variabile: $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}=\boldsymbol{r}'$.

$$
\begin{aligned}
I &= \int \psi_1^*(\vec{r})\, \hat{T}_{\vec{a}}\, \psi_2(\vec{r})\, d\tau = \int \psi_1^*(\vec{r})\, \psi_2(\vec{r}+\vec{a})\, d\tau \\
&= \int \psi_1^*(\vec{r}\,'-\vec{a})\, \psi_2(\vec{r}\,')\, d\tau' \\
&= \int \left[\hat{T}_{-\vec{a}}\, \psi_1(\vec{r}\,')\right]^* \psi_2(\vec{r}\,')\, d\tau' \\
&= \int \psi_2(\vec{r}) \left[\hat{T}_{-\vec{a}}\, \psi_1(\vec{r})\right]^* d\tau \\
&= \int \psi_2(\vec{r}) \left[\hat{T}_{\vec{a}}^{+}\, \psi_1(\vec{r})\right]^* d\tau
\end{aligned}
$$

Abbiamo che l'operatore è pari a $\hat{T}_{-\vec{a}}$. E' quindi l'operatore che comporta la traslazione del vettore opposto ad **a**.

13) Trovare l'operatore hermitiano coniugato di $i\frac{d}{dx}$.

Seguo la stessa via fatta in precedenza per l'operatore $\frac{d}{dx}$. Si trova che: $(i\frac{d}{dx})^{+}=i\frac{d}{dx}$.

Inoltre, l'hermitiano coniugato di $(i\frac{d}{dx})^{n}$ è pari a $(i\frac{d}{dx})^{n}$.

Nota

Un operatore $\hat{O}$ che goda della proprietà di coincidere con $\hat{O}^+$ è definito hermitiano [10]. Gli operatori $\hat{q},\hat{p}$ sono hermitiani.

14) Verificare che l'operatore $\exp(i\alpha\frac{\partial}{\partial\phi})$ è hermitiano.

Intanto notiamo che, dato che l'operatore è hermitiano, deve essere α reale.
Per definizione:

$$\exp(i\alpha\frac{\partial}{\partial\phi})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\alpha\frac{\partial}{\partial\phi})^n}{n!} \quad .$$

Si ha però, come visto prima:

$$[\frac{\partial^n}{\partial\phi^n}]^+=(-1)^n\frac{\partial^n}{\partial\phi^n}$$

Quindi:

$$[(i\frac{\partial}{\partial\phi})^n]^+=(-i)^n(-\frac{\partial}{\partial\phi})^n=(i\frac{\partial}{\partial\phi})^n$$

L'hermitiano coniugato è uguale all'operatore. Esso è pari a $\exp(i\alpha\frac{\partial}{\partial\phi})$, nel caso α reale. L'operatore è hermitiano.

15) Trovare l'hermitiano coniugato del prodotto degli operatori $\hat{A}$ e $\hat{B}$.

$$\int\psi_1\hat{A}\hat{B}\psi_2 d\tau=\int\psi_2[(\hat{A}\hat{B})^+\psi_1]^* d\tau$$
$$\int\psi_1\hat{A}\psi_3 d\tau=\int\psi_3(\hat{A}^+\psi_1)^* d\tau$$

dove $\psi_3=\hat{B}\psi_2$. Introduco $\psi_4=\hat{A}^+\psi_1$:

$$\int\psi_3(\hat{A}^+\psi_1)^* d\tau=\int\psi_4^*\hat{B}\psi_2 d\tau$$

$$\int \psi_2 (\hat{B}^+ \psi_4)^* d\tau = \int \psi_2 (\hat{B}^+ \hat{A}^+ \psi_1)^* d\tau$$

da cui: $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$.

16) Mostrare che, se $\hat{L}$ e $\hat{M}$ sono hermitiani, lo sono anche gli operatori:

$\hat{F} = \frac{1}{2}(\hat{L}\hat{M} + \hat{M}\hat{L})$, $\hat{f} = \frac{i}{2}(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})$.

Utilizziamo il risultato dell'esercizio precedente.
Dato che gli operatori $\hat{L}$ e $\hat{M}$ sono hermitiani, allora: $\hat{L}^+ = \hat{L}$, $\hat{M}^+ = \hat{M}$.

$$\hat{F} = \frac{1}{2}\hat{F}_1 + \frac{1}{2}\hat{F}_2 \rightarrow \hat{F}^+ = \frac{1}{2}\hat{F}_1^+ + \frac{1}{2}\hat{F}_2^+$$

Usando il risultato del calcolo precedente, ossia $(\hat{L}\hat{M})^+ = \hat{M}^+ \hat{L}^+$ e $(\hat{M}\hat{L})^+ = \hat{L}^+ \hat{M}^+$:

$$\hat{F}^+ = \frac{1}{2}\hat{M}^+ \hat{L}^+ + \frac{1}{2}\hat{L}^+ \hat{M}^+ = \frac{1}{2}\hat{L}\hat{M} + \frac{1}{2}\hat{M}\hat{L} = \hat{F}$$

Stessa cosa per l'altro operatore: $\hat{f} = \frac{1}{2}\hat{f}_1 + \frac{1}{2}\hat{f}_2 \rightarrow \hat{f}^+ = \frac{1}{2}\hat{f}_1^+ + \frac{1}{2}\hat{f}_2^+$

$$\hat{f}^+ = \frac{i^*}{2}\hat{M}^+ \hat{L}^+ - \frac{i^*}{2}\hat{L}^+ \hat{M}^+ = \frac{i}{2}\hat{L}\hat{M} - \frac{i}{2}\hat{M}\hat{L} = \hat{f}$$

17) Provare che il valore d'aspettazione del quadrato di un'osservabile è sempre positivo.

In meccanica quantistica una osservabile è una grandezza legata allo stato quantico. Nell'approccio matematico, un'osservabile viene rappresentata da un operatore lineare hermitiano, che opera su un vettore di stato del sistema.

Il valore d'aspettazione è definito come: $<\hat{O}>=\int \psi^* \hat{O} \psi \, d\tau$. Inoltre stiamo parlando del quadrato dell'osservabile. Quindi $(\hat{O}\hat{O})^+=\hat{O}^+\hat{O}^+$.

Ricordo che: $\int \psi^* \hat{O} \psi \, d\tau=\int \psi (\hat{O}^+ \psi)^* d\tau$. Uso $\psi_1=\hat{O}\psi$.

$$<\hat{O}^2>=\int \psi^* \hat{O}^2 \psi \, d\tau=\int \psi (\hat{O}^+\hat{O}^+\psi)^* d\tau$$

$$\int \psi^* \hat{O}\hat{O} \psi \, d\tau=\int \psi^* \hat{O} \psi_1 d\tau=\int \psi_1^* (\hat{O}^+\psi)^* d\tau=\int \psi_1 (\hat{O}\psi)^* d\tau=\int \psi_1 \psi_1^* d\tau>0$$

18) Per gli operatori $\hat{L}$ e $\hat{M}$ che soddisfano la condizione $\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}=1$, trovare $\hat{L}\hat{M}^2-\hat{M}^2\hat{L}$.

$$\hat{L}\hat{M}^2-\hat{M}^2\hat{L}+\hat{M}\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}\hat{M} \;=\; (\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L})\hat{M}+\hat{M}(\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L})=\hat{M}+\hat{M}=2\hat{M}$$

Passiamo a calcolare $\hat{L}\hat{M}^3-\hat{M}^3\hat{L}$, sempre nelle stesse condizioni del caso precedente.

$$\hat{L}\hat{M}^3-\hat{M}^3\hat{L}+\hat{M}^2\hat{L}\hat{M}-\hat{M}^2\hat{L}\hat{M}$$

$$= (\hat{L}\hat{M}^2-\hat{M}^2\hat{L})\hat{M}+\hat{M}^2(\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L})=2\hat{M}\hat{M}+\hat{M}^2=3\hat{M}^2$$

Iterando:

$$\hat{L}\hat{M}^4-\hat{M}^4\hat{L}+\hat{M}^3\hat{L}\hat{M}-\hat{M}^3\hat{L}\hat{M}$$

$$= (\hat{L}\hat{M}^3-\hat{M}^3\hat{L})\hat{M}+\hat{M}^3(\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L})=3\hat{M}^3+\hat{M}^3=4\hat{M}^3$$

Si arriva quindi al risultato che $\hat{L}\hat{M}^n-\hat{M}^n\hat{L}=n\hat{M}^{n-1}$.

19) Per gli operatori $\hat{L}$ e $\hat{M}$ che soddisfano la condizione $\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}=1$, trovare $f(\hat{L})\hat{M}-\hat{M}f(\hat{L})$.

Notiamo che: $\hat{M}\hat{L}^n - \hat{L}^n\hat{M} = -n\hat{L}^{n-1}$. Infatti: $\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M} = -1$. Poi:

$$\hat{M}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{M} = \hat{M}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{M} + \hat{L}\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M}\hat{L} = (\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\hat{L} + \hat{L}(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M}) = -2\hat{L}$$

e così via. Scriviamo anche: $\hat{M}\hat{L}^{n+1} - \hat{L}^{n+1}\hat{M} = -(n+1)\hat{L}^n$.

Ricordiamo che: $f(\hat{L}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!}\hat{L}^n$.

$$f(\hat{L})\hat{M} - \hat{M}f(\hat{L}) \quad = \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!}(\hat{L}^n\hat{M} - \hat{M}\hat{L}^n) \quad = \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{(n-1)!}\hat{L}^{(n-1)}$$

Se si pone $n-1 = n_1$, si scrive:

$$\sum_{n_1=0}^{\infty} \frac{f^{(n_1+1)}(0)}{(n_1)!}\hat{L}^{n_1} = \sum_{n_1=0}^{\infty} \frac{[f'(0)]^{(n_1)}}{(n_1)!}\hat{L}^{n_1} = f'(\hat{L})$$

quindi $f(\hat{L})\hat{M} - \hat{M}f(\hat{L}) = f'(\hat{L})$.

20) Per qualsiasi due operatori $\hat{A}$ e $\hat{B}$ che non commutano, provare che:

(a) $\hat{A}^{-1}\hat{B}^2\hat{A} = (\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})^2$

(b) $\hat{A}^{-1}\hat{B}^n\hat{A} = (\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})^n$ dove *n* è un intero.

(c) $\hat{A}^{-1}f(\hat{B})\hat{A} = f(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})$

Si ammetta che esiste $\hat{A}^{-1}$, dove , e *I* è l'operatore identità. Ricordiamo che: $\hat{B}^2 = \hat{B}\hat{A}\hat{A}^{-1}\hat{B}$

(a) $$\hat{A}^{-1}\hat{B}^2\hat{A}=\hat{A}^{-1}\hat{B}\,\hat{A}\hat{A}^{-1}\hat{B}\,\hat{A}=(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})^2$$

(b) Calcoliamo poi $\hat{A}^{-1}\hat{B}^3\hat{A}=\hat{A}^{-1}\hat{B}\,\hat{A}\,\hat{A}^{-1}\hat{B}\,\hat{A}\,\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}=(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})^3$

Iterando si trova: $\hat{A}^{-1}\hat{B}^n\hat{A}=(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})^n$.

Per (c) si usa $f(\hat{B})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}\hat{B}^n$ e si applicano le formule precedenti e si trova:

$$\hat{A}^{-1}f(\hat{B})\hat{A}=f(\hat{A}^{-1}\hat{B}\,\hat{A})$$

21) Provare che $\exp(\zeta\,\hat{A})\hat{B}\exp(-\zeta\,\hat{A})=\hat{B}+c\zeta$, dove $\hat{A}\,\hat{B}-\hat{B}\,\hat{A}=c$.

Ricordiamo che $\exp(-\zeta\,\hat{A})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\zeta)^n}{n!}\hat{A}^n$.

$$\hat{B}\exp(-\zeta\,\hat{A})-\exp(-\zeta\,\hat{A})\hat{B}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\zeta)^n}{n!}(\hat{B}\,\hat{A}^n-\hat{A}^n\hat{B})$$

Si ha che $\hat{B}\,\hat{A}^n-\hat{A}^n\hat{B}=n\hat{A}^{n-1}c$.

$$\hat{B}\exp(-\zeta\,\hat{A})-\exp(-\zeta\,\hat{A})\hat{B}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\zeta)^n}{n!}n\,\hat{A}^{n-1}c=c\,\zeta\exp(-\zeta\,\hat{A})$$

$$\exp(\zeta\,\hat{A})(\hat{B}\exp(-\zeta\,\hat{A})-\exp(-\zeta\,\hat{A})\hat{B})=\exp(\zeta\,\hat{A})c\,\zeta\exp(-\zeta\,\hat{A})$$
$$\exp(\zeta\,\hat{A})\hat{B}\exp(-\zeta\,\hat{A})=\hat{B}+c\zeta$$

22) Provare che: $\exp(i\zeta\,\hat{p}/\hbar)F(\hat{q})\exp(-i\zeta\,\hat{p}/\hbar)=F(\hat{q}+\zeta)$ dove $\hat{p},\hat{q}$ sono gli operatori momento e posizione.

Definiamo $\hat{A}=\exp(-i\zeta\,\hat{p}/\hbar)$ e $\hat{A}^{-1}=\exp(i\zeta\,\hat{p}/\hbar)$.

Abbiamo visto che:

$$\hat{A}^{-1}F(\hat{B})\hat{A}=F(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}) \quad \text{e} \quad \exp(\zeta\hat{A})\hat{B}\exp(-\zeta\hat{A})=\hat{B}+c\zeta \quad ,$$

dove *c* è il commutatore. Quindi: $\hat{A}^{-1}F(\hat{q})\hat{A}=F(\hat{A}^{-1}\hat{q}\hat{A})$

$$\hat{A}^{-1}\hat{q}\hat{A}=\hat{q}-i\zeta[\hat{p},\hat{q}]/\hbar=\hat{q}+\zeta$$

Infatti $[\hat{p},\hat{q}]=-i\hbar$. Quindi $\exp(i\zeta\,\hat{p}/\hbar)F(\hat{q})\exp(-i\zeta\,\hat{p}/\hbar)=F(\hat{q}+\zeta)$.

23) Trovare la relazione di commutazione tra gli operatori di annichilazione e creazione di una particella.

Tali operatori siano definita da: $\hat{a}=\sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}}(\omega\hat{q}+i\frac{\hat{p}}{m})$ **;** $\hat{a}^{+}=\sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}}(\omega\hat{q}-i\frac{\hat{p}}{m})$ **.**

dove *m* è la massa e *ω* la pulsazione.

$$[\hat{a},\hat{a}^{+}]=\hat{a}\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a}$$

Calcoliamo:

$$(\omega\hat{q}+i\hat{p}/m)(\omega\hat{q}-i\hat{p}/m)-(\omega\hat{q}-i\hat{p}/m)(\omega\hat{q}+i\hat{p}/m)$$

Ricordiamo che: $[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar$. Sviluppiamo il prodotto, si trova che:

$$(\omega\hat{q}+i\hat{p}/m)(\omega\hat{q}-i\hat{p}/m)-(\omega\hat{q}-i\hat{p}/m)(\omega\hat{q}+i\hat{p}/m)=2\hbar\omega/m$$

da cui: $[\hat{a},\hat{a}^{+}]=1$.

24) Trovare la relazione di commutazione tra le componenti dell'operatore momento angolare.

Si ha che $\hat{x}\hat{y}=\hat{y}\hat{x}$; $\hat{p}_x\hat{p}_y=\hat{p}_y\hat{p}_x$; $\hat{p}_x\hat{y}-\hat{y}\hat{p}_x=-i\hbar\delta_{xy}$.

Calcolo un caso:

$$\hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y=(\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z)(\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x)-(\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x)(\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z)$$

$$= \hat{z}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_y-\hat{x}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_y-\hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_x+\hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x+\hat{y}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_x+\hat{x}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z-\hat{y}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_z$$

$$= \hat{z}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_y+\hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x-\hat{y}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_z = \hat{z}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_y-\hat{x}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x+\hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_x-\hat{y}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_z$$

$$= \hat{z}\hat{p}_y(\hat{p}_x\hat{x}-\hat{x}\hat{p}_x)-\hat{p}_z\hat{y}(\hat{p}_x\hat{x}-\hat{x}\hat{p}_x) = -i\hbar(\hat{z}\hat{p}_y-\hat{p}_z\hat{y}) = i\hbar(\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y)$$

Usando le relazioni date sopra si ha quindi:

$$\hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y=i\hbar(\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y)=i\hbar\hat{L}_x$$

e così per le altre componenti.

$$\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_x\hat{L}_y=i\hbar\hat{L}_z \quad , \quad \hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_z=i\hbar\hat{L}_y$$

25) Dimostrare che $\hat{L}^2$ commuta con ogni componente di $\hat{L}$.

Ricordiamo che $\hat{L}^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2$. Calcoliamo:

$$[\hat{L}_z^2,\hat{L}_z]=\hat{L}_z\hat{L}_z\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_z\hat{L}_z=0$$

$$[\hat{L}_y^2,\hat{L}_z]=\hat{L}_y\hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y\hat{L}_y$$

$$\hat{L}_y\hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_y\hat{L}_z\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{L}_z\hat{L}_y-\hat{L}_z\hat{L}_y\hat{L}_y=\hat{L}_y[\hat{L}_y,\hat{L}_z]+[\hat{L}_y,\hat{L}_z]\hat{L}_y=i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_x+i\hbar\hat{L}_x\hat{L}_y$$

$$[\hat{L}_x^2,\hat{L}_z]=\hat{L}_x\hat{L}_x\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_x$$

$$\hat{L}_x\hat{L}_x\hat{L}_z-\hat{L}_x\hat{L}_z\hat{L}_x+\hat{L}_x\hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_x=\hat{L}_x[\hat{L}_x,\hat{L}_z]+[\hat{L}_x,\hat{L}_z]\hat{L}_x=-i\hbar\hat{L}_x\hat{L}_y-i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_x$$

Quindi $[\hat{L}^2,\hat{L}_z]=0$.

Sezione D: Autofunzioni ed autovalori.

1) **Trovare autofunzioni ed autovalori** dei seguenti operatori: $\frac{d}{dx}$ e $i\frac{d}{dx}$.

Prendiamo una funzione arbitraria ψ e scriviamo l'equazione che ci serve per trovare l'autovalore e l'autofunzione:

$$\frac{d\psi}{dx}=\lambda\psi$$

La soluzione è data da:

$$\psi=\exp(\lambda x)$$

Siccome la funzione $\psi(x)$ deve essere finita per *x* che tende all'infinito, allora $\lambda=i\beta$, dove β è reale.

Passiamo al caso: $$i\frac{d\psi}{dx}=\lambda\psi$$

Si ha: $\psi=\exp(-i\lambda x)$, con λ reale. Facciamo la verifica:

$$i\frac{d\psi}{dx}=i(-i\lambda)\exp(-i\lambda x)=\lambda\exp(-i\lambda x)=\lambda\psi$$

2) **Trovare autofunzione ed** autovalore di $x+A\frac{d}{dx}$, dove *A* ha le dimensioni di una lunghezza al quadrato, se con *x* si intende una lunghezza.

$$x\psi + A\frac{d\psi}{dx} = \lambda\psi \quad \text{ovvero} \quad A\frac{d\psi}{dx} = (\lambda - x)\psi$$

Separando le variabili si ha: $\frac{d\psi}{\psi} = \frac{(\lambda - x)}{A}dx$

Quindi: $\psi = C\ \exp[\frac{(\lambda x - x^2/2)}{A}]$

Questa soluzione è finita e continua, a spettro ad un valore per qualsiasi λ che sia reale o complesso.

3) **Trovare autovalori ed** autofunzioni di $\frac{d}{d\phi}$.

$$\frac{d\psi}{d\phi} = \lambda\psi \rightarrow \psi = C\ \exp(\lambda\phi)$$

Dato che le autofunzioni devono essere a valor singolo: $\psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi)$.

Questo comporta che $\exp(\lambda 2\pi) = 1$ e $\lambda = im$, dove *m* è un intero. Di conseguenza:

$$\psi = C\exp(im\phi) \text{ dove } m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$$

4) **Trovare autofunzioni ed** autovalori di: (a) $\sin\frac{d}{d\phi}$ e (b) $\cos(i\frac{d}{d\phi})$.

Partiamo dal primo operatore:

(a) $(\sin\frac{d}{d\phi})\psi = \lambda\psi$

Sviluppiamo formalmente la funzione seno: $(\sin\frac{d}{d\phi})=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\frac{d^{2k+1}}{d\phi^{2k+1}}$.

Come si è visto nel caso precedente, la soluzione tipo è :

$\psi=\exp(\alpha\phi)$, con $\alpha=i\,m$ dove $m=0,\pm1,\pm2,...$

$$(\sin\frac{d\psi}{d\phi})=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\frac{d^{2k+1}\exp(im\phi)}{d\phi^{2k+1}}=(\sin\frac{d\psi}{d\phi})=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}(im)^{2k+1}\exp(im\phi)$$

$$\sin(i\,m)\exp(\lambda\phi)=\lambda\psi\rightarrow\sin(im)=\lambda$$

(b) Ripetendo lo stesso approccio di (a), $\cos(i\frac{d\psi}{d\phi})=\lambda\psi$ porta a:

$$\cos(i\,i\,m)\exp(\lambda\phi)=(\cos m)\psi=\lambda\psi\rightarrow\cos m=\lambda$$

5) **Trovare autovalore** e autofunzione di $(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d}{dx})$.

$$(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d}{dx})\psi=\lambda\psi$$

Per risolvere questa equazione, scriviamo: $U=x\,\psi\rightarrow\frac{d^2U}{dx^2}=\lambda U$, che ha soluzioni:

$$U_1=C_1\exp(\sqrt{\lambda}\,x)\quad,\quad U_2=C_2\exp(-\sqrt{\lambda}\,x)$$

Per avere una funzione finita per *x* che tende all'infinito, deve essere: $\lambda=-\beta^2<0$.

$$\psi(x)=\frac{C_1 e^{i\beta x}+C_2 e^{-i\beta x}}{x}$$

Dobbiamo avere $C_1+C_2=0$ per avere ψ finita ad x=0. Quindi: $\psi(x)=C\frac{\sin\beta x}{x}$.

Sezione E: Valori di aspettazione e correnti di probabilità

1) **Trovare la soluzione generale** dell'equazione di Schrödinger unidimensionale, per una particella libera.

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{dt}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

Separiamo le variabili: $\psi(x,t)=U(x)\phi(t)$. Quindi: $\frac{i\hbar}{\phi}\frac{d\phi}{dt}=-\frac{\hbar^2}{2mU}\frac{d^2U}{dx^2}$.

Si ha che: $\psi(x,t)=U(x)\phi(t)=\exp(-\frac{i\hbar k^2}{2m}t)\exp(ikx)=\exp(ikx-i\hbar k^2 t/2m)$. In questa espressione k è un numero reale.

La soluzione generale è:

$$\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}C(k)\exp(ikx-i\hbar k^2 t/2m)\,dk$$

2) **Che dimensioni ha** k del problema precedente?

Vediamo subito che kx deve essere adimensionale e quindi: $[k]=[lunghezza^{-1}]$. Allo stesso tempo anche $\hbar k^2 t/2m$ deve essere adimensionale. Verifichiamo.

$$[\hbar k^2 t/2m]=[energia\ tempo][k^2][tempo\ massa^{-1}]$$
$$=\ [energia\,tempo^2\ massa^{-1}][k^2]\ =\ [massa\ lunghezza^2\ massa^{-1}][k^2]$$

da cui $[k^2]=[lunghezza^{-2}]$

3) **Al tempo *t* = 0, lo stato di una** particella libera è dato dalla funzione:

$$\psi(x,0)=A\exp(ik_o x-x^2/a^2)$$

Trovare il fattore *A* e la regione dove è localizzata la particella. Trovare la densità di corrente di probabilità. Si veda anche il Rif. 6.

Per trovare *A*, calcoliamo: $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi\psi^* dx=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-2x^2/a^2)dx$. Da [6]: $A^2=\frac{\sqrt{2}}{a\sqrt{\pi}}$.

Per determinare dove la particella è localizzata, calcoliamo:

$$\rho(0)=\psi(x,0)\psi^*(x,0)=A^2\exp(-2x^2/a^2)$$

Il picco è a $x = 0$, e poi decade rapidamente. La larghezza del pacchetto d'onda rappresenta la regione occupata ed è dell'ordine di *a*. Passiamo ora a calcolare la densità di corrente di probabilità.

$$j_x=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=A^2\frac{i\hbar}{2m}(-i)2k_o\exp(-2x^2/a^2)=\frac{\hbar k_o}{m}\rho$$

Notiamo che la densità di probabilità è determinata solo dalla parte reale dell'esponente della funzione d'onda. La quantità $\hbar k_o/m$ ha le dimensioni di una velocità ed è determinata dalla sola parte immaginaria.

Discussione Vediamo di considerare più in dettaglio il calcolo integrale usato sopra, ossia un integrale che ha la forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-\alpha x^2)dx \quad \text{oppure} \quad \int_{-\infty}^{+\infty}x^2\exp(-\alpha x^2)dx$$

Si consideri che vale: $\int_0^{+\infty} x^m \exp(-\alpha x^n)\,dx = \frac{1}{n}\frac{\Gamma(\frac{m+1}{n})}{\alpha^{(\frac{m+1}{n})}}$.

Per i nostri calcoli servono i valori $\Gamma(1)=1$, $\Gamma(\frac{1}{2})=\sqrt{(\pi)}$ e $\Gamma(\frac{3}{2})=\sqrt{(\pi)}$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha x^2)\,dx = \frac{\sqrt{(\pi)}}{\alpha^{1/2}} \quad \text{da cui} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-2x^2/a^2)\,dx = \frac{\sqrt{(\pi)}a}{\sqrt{2}}$$

Inoltre: $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-2x^2/a^2)\,dx = \frac{\sqrt{(\pi)}a^3}{4\sqrt{2}}$

Se si considera: $A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-2x^2/a^2)\,dx = A^2 \frac{\sqrt{(\pi)}a}{\sqrt{2}}$, allora: $A^2 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{(\pi)}a}$ come abbiamo scritto più sopra.

4) **Trovare il valore di aspettazione** di posizione e momento per una particella che ha funzione d'onda:

$$\psi(x) = A \exp(i k_o x - x^2/a^2)$$

Calcoliamo:

$$<x> = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp(-2x^2/a^2)\,dx = 0$$

$$<p> = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x})\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\hbar k_o + 2i\hbar x/a^2)\psi\,dx = \hbar k_o = 0$$

5) **Calcolare** $<(\Delta x)^2>$ e $<(\Delta p)^2>$ per la particella dl problema precedente.

Per definizione: $<(\Delta x)> = x - <x>$

$$<\Delta x^2>=\int_{-\infty}^{+\infty} x^2|\psi|^2 dx = A^2\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-2x^2/a^2)\, dx = A^2 \frac{\sqrt{(\pi)}}{2}\frac{a^3}{(\sqrt{2})^3}$$

Quindi: $$<\Delta x^2>=\frac{a^2}{4}$$

Il resto del problema si trova discusso nel Rif.6.

6) **Una particella si trova in una buca** di potenziale unidimensionale $0 \leqslant x \leqslant a$, dove $V=0$ all'interno e $V=\infty$ fuori. Trovare l'equazione di Schrödinger in questo caso.

Nella regione dove $V=\infty$ abbiamo funzione d'onda nulla. Tra $0 \leqslant x \leqslant a$ si ha che:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$$

Si introduce $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$. Quindi $\psi=A\sin(kx+\alpha)$.

Ai confini della buca, $\psi(0)=0=\psi(a)$, allora $\alpha=0$. Poi: $\psi=A\sin(ka)=0$ impone:

$$k_n=\frac{n\pi}{a} \quad n=1,2,... \quad \text{e quindi:} \quad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m} \quad .$$

Passiamo a considerare la normalizzazione della funzione d'onda: $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2 dx$ =

$|A|^2\int_0^a \sin^2\frac{n\pi x}{a}dx=1$. L'integrale si trova risolto in [7]. Si ha che: $\psi=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$.

7) **Una particella si trova in una buca** di potenziale limitata alla regione $0 \leqslant x \leqslant a$, $0 \leqslant y \leqslant b$ e $0 \leqslant z \leqslant c$ dove $V=0$ all'interno e $V=\infty$ fuori. Trovare la funzione d'onda ed i livelli d'energia.

Separiamo le variabili: $\psi(x,y,z)=\psi(x)\psi(y)\psi(x)$ **.** La funzione d'onda diventa il prodotto di tre funzioni della forma vista nel problema precedente.

$$\psi=\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{2}{b}}\sqrt{\frac{2}{c}}\ \sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{b}\sin\frac{n_3\pi z}{c}=\sqrt{\frac{8}{abc}}\ \sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{b}\sin\frac{n_3\pi z}{c}$$

Nel resto dello spazio la funzione d'onda è nulla. I livelli d'energia sono dati da:

$$E_{n_1,n_2,n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right)$$

8) **Una particella si trova in una buca** di potenziale di profondità finita, limitata a $-a\leqslant x\leqslant a$, dove $V=-V_o$ all'interno e $V=0$ fuori. Trovare la funzione d'onda ed i livelli d'energia.

Dato che il problema è simmetrico rispetto allo 0, possiamo studiarlo per $x\geq 0$. Questa è la maniera con cui si risolve il problema in [6]. In [3], il problema è risolto nel modo seguente. Dividiamo lo spazio in tre regioni:: $x\leq -a$, $-a<x<a$, $x\geq a$. e cerchiamo gli stati legati, ossia quelli con energia $E<0$. L'equazione è:

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

Le soluzioni sono come quelle della buca infinita, e quindi, per le tre regioni si ha:

$$\begin{array}{ll} -a<x<a & \psi=C\,e^{ikx}+D\,e^{-ikx} \\ x\leq -a & \psi=A\,e^{ik'x}+B\,e^{-ik'x} \\ x\geq a & \psi=F\,e^{ik'x}+G\,e^{-ik'x}\ , \end{array}$$

Si introducano $k=\frac{\sqrt{2m(E+V_o)}}{\hbar}$, $k'=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\kappa=ik'=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$, come si trova dettagliato al

sito 406web.sbu.edu › physics › courses › physics-406 che si prega di consultare.
Le condizioni di passaggio tra le tre regioni implicano la continuità della funzione d'onda e della sua derivata. Quindi:

$$C e^{ika} + D e^{-ika} = F e^{ik'a} + G e^{-ik'a}$$
$$i k C e^{ika} - i k D e^{-ika} = ik' F e^{ik'a} - ik' G e^{-ik'a}$$
$$C e^{-ika} + D e^{ika} = A e^{-ik'a} + B e^{ik'a}$$
$$i k C e^{-ika} - i k D e^{ika} = ik' A e^{-ik'a} - i k' B e^{ik'a}$$

Eliminando i termini divergenti e riordinandoli opportunamente:

$$C e^{ika} + D e^{-ika} - F e^{\kappa a} = 0 \qquad i k C e^{ika} - i k D e^{-ika} - \kappa F e^{\kappa a} = 0$$
$$-B e^{\kappa a} + C e^{-ika} + D e^{ika} = 0 \qquad \kappa B e^{\kappa a} + i k C e^{-ika} - i k D e^{ika} = 0$$

Questo sistema ha soluzioni diverse da zero se il suo determinante è nullo. Dopo vari passaggi, si arriva a trovare una soluzione per k che deve essere fatta graficamente. Si trova che le energie permesse sono discrete. Il numero delle soluzioni è finito.

9) **Scrivere l'equazione che governa una particella** in un potenziale Coulombiano unidimensionale.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{e^2}{|x|}\psi = E\psi$$

Per $E > 0$ lo spettro d'energia è continuo. Diventa discreto per $E < 0$. Il calcolo, abbastanza lungo, è svolto in [3].

10) **Scrivere l'equazione che governa il** problema bidimensionale di Keplero. Ossia, trovare l'equazione d'onda per una particella nel potenziale $V = -Ze^2/\rho$, dove $\rho = \sqrt{(x^2 + y^2)}$.

In questo caso si usa: $\Delta=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$. Dato che il potenziale non dipende dall'angolo ϕ , allora possiamo cercare delle soluzioni del tipo:

$$\psi(\rho,\phi)=e^{im\phi}U(\rho)$$

dove *m* è un intero. L'equazione da risolvere è quindi (μ è la massa ridotta):

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial U}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}U\right)-\frac{Ze^2}{\rho}U=EU$$

Questo ed altri problemi riguardanti l'approccio di Schrödinger alla meccanica quantistica sono discussi in [3].

References

[1] Smirnov V. I., Corso di Matematica Superiore, Editori Riuniti, 1978, Volume 2, Pagina 391.
[2] Sparavigna, Amelia Carolina. (2019, December 18). La divergenza del prodotto vettoriale ed il vettore di Poynting. Zenodo. http://doi.org/10.5281/zenodo.3583296
[3] Grechko, L.G., Sugakov, V.I., Tomasevich, O.F., & Fedorchenko, A.M. (1977). Problems in Theoretical Physics. Mir Publishers, Moscow.
[4] Barbero, G., Sparavigna, A., & Strigazzi, A. (1990). The structure of the distortion free-energy density in nematics: second-order elasticity and surface terms. Il Nuovo Cimento D, 12(9), 1259-1272.
[5] Mircea S. Rogalski, Stuart B. Palmer (1999). Quantum Physics. CRC Press.
[6] C. Rossetti (1978). Istituzioni di Fisica Teorica. Levrotto & Bella.
[7] B. Demidovič (1975). Esercizi e problemi di analisi matematica. Editori Riuniti. Edizioni Mir.
[8] Vladimir I. Smirnov (1978). Corso di Matematica Superiore III. Editori Riuniti.
[9] Lev D. Landau, Evgenij M. Lifšits (1976). Meccanica quantistica. Teoria non relativistica. Edizioni Mir.
[10] Cesare Rossetti (1978). Metodi matematici della fisica. Levrotto & Bella.