SCUOLA SUPERIORE DI UDINE UNIVERSITÀ DI UDINE

Tesina di marzo Corso di Laurea in Matematica

L'Oscillatore Armonico Quantistico

Relatore:

Prof. Sebastiano Sonego

Presentata da:

Nicola Dal Cin

Anno Accademico 2019 - 2020

Indice

1	Fon	damenti di Meccanica Quantistica	3
	1.1	Esempi	3
	1.2	Probabilità - definizione pratica e implicita	7
	1.3	Spazio degli stati	8
	1.4	Descrizione in una dimensione di una particella quantistica .	14
		1.4.1 Autostati di posizione e operatore di traslazione	15
		1.4.2 Il generatore di traslazioni	16
	1.5	L'equazione di Schrödinger	18
2	L'o	scillatore armonico quantistico	20
	2.1	L'importanza dell'oscillatore armonico	20
	2.2	Il caso unidimensionale	21
	2.3	L'energia di punto zero	25
	2.4	Il limite classico	27
3	Ope	eratori di creazione e distruzione	29
	3.1	Sistemi composti da più particelle	29
	3.2	Sistemi bosonici	32
	3.3	Sistemi fermionici	34
4	Acc	enno alla teoria quantistica dei campi	37
	4.1	L'Hamiltoniana del campo elettromagnetico	37
	4.2	Quantizzazione del campo elettromagnetico	43
	4.3	Quantizzazione di un campo scalare	45
		4.3.1 Seconda quantizzazione	45
		4.3.2 L'equazione di Klein-Gordon	48

Introduzione

In questo elaborato verrà data una descrizione della *meccanica quantistica*, una delle branche più recenti della fisica; essa si occupa dello studio di fenomeni microscopici detti appunto quantistici.

Nella parte iniziale del primo capitolo vedremo alcuni esempi ed esperimenti a cui non è possibile dare un spiegazione per mezzo della fisica classica. Quest'ultima è infatti caratterizzata da un approccio deterministico, descrive precisamente l'evoluzione di un fenomeno, con un incertezza che dipende solamente dallo strumento di misura dei dati e che è teoricamente eliminabile. Vedremo che questo approccio non è adatto a trattare fenomeni microscopici. Infatti è possibile conoscere e determinare lo stato di un sistema quantistico solo in modo probabilistico. Questa natura statistica e non deterministica è una caratteristica fondamentale della teoria quantistica ed emerge, anche nella formulazione matematica, del principio di sovrapposizione.

Nel paragrafo 1.3 vedremo appunto una descrizione matematica dello *spazio degli stati* di un sistema quantistico ed enunceremo alcuni principali postulati della teoria. Nella parte finale del capitolo analizzeremo la dinamica di una particella quantistica unidimensionale e introdurremo gli strumenti per lo studio dell'oscillatore armonico.

Nel secondo capitolo esporremo quindi i principali risultati sull'oscillatore armonico quantistico unidimensionale, vedremo le sue principali proprietà e confronteremo l'analisi fatta con la teoria classica.

Nel terzo capitolo vedremo com'è possibile descrivere un sistema di più particelle quantistiche; analizzando in particolare il caso in cui queste siano bosoni (particelle con spin intero) o fermioni (particelle con spin semi-intero).

Nel quarto capitolo accenneremo alla teoria quantistica dei campi. Vedremo prima una descrizione quantistica della radiazione elettromagnetica, che si rivelerà essere la collezione di oscillatori armonici indipendenti. Infine grazie all'equazione di Klain-Gordon e a una procedura di seconda quantizzazione, tratteremo il caso di un campo scalare e potremmo accennare quindi all'ipotesi dell'antimateria.

Capitolo 1

Fondamenti di Meccanica Quantistica

In questo capitolo è esposta una piccola parte dell'apparato matematico che è necessario a descrivere un sistema fisico secondo la meccanica quantistica. La trattazione segue un approccio deduttivo provvedendo ad elencare gli strumenti matematici necessari, le loro proprietà e asserire i postulati che caratterizzano un sistema fisico (i quali hanno una natura prettamente empirica).

La descrizione delle particelle fornita dalla meccanica quantistica è di fatto probabilistica: stabilisce quali eventi sono possibili (algoritmo di quantizzazione) e con che probabilità possono verificarsi (algoritmo statistico), richiameremo perciò nel secondo paragrafo alcuni concetti di probabilità anche per chiarire meglio in che connotazione la intenderemo.

Nell'ultima parte del capitolo verranno studiate brevemente alcune caratteristiche del moto unidirezionale di una particella quantistica, le quali saranno poi riprese nel secondo capitolo per lo studio dell'oscillatore armonico unidimensionale.

1.1 Esempi

In questo primo paragrafo vediamo una breve rassegna di alcuni fenomeni fisici che non vengono ben spiegati dalla fisica classica e fanno intuire come sia necessaria l'introduzione di un modello più raffinato e controintuitivo per lo studio della realtà (microscopica).

Esempi di fenomeni fisici che appaiono richiedere questo approccio statistico e misero in crisi la fisica classica non adatta a darne una spiegazione, sono ad esempio:

 Radioattività: non si può determinare quando un nucleo decadrà ma solo qual è la probabilità che lo faccia in un dato lasso di tempo. • Effetto Compton: Il comportamento di un elettrone sottoposto all'azione di un'onda piana, uniformemente diffusa, di campo elettromagnetico è imprevedibile.

Nel 1922 il fisico A. Compton osservò che bersagliando una lastra di grafite con un fascio collimato di raggi X, nello spettro della radiazione diffusa si rilevavano, oltre alla lunghezza d'onda originaria, anche lunghezze d'onda maggiori. Inoltre, questo comportamento era indipendente dalla lunghezza d'onda del fascio incidente.

Riprendendo l'ipotesi avanzata da Einstein nel 1905, Compton interpretò la radiazione elettromagnetica come composta da quanti energetici, i fotoni, visti come particelle prive di massa ma dotate di una certa quantità di moto. L'esperimento si riconduceva così all'urto tra particelle: gli elettroni e i fotoni. L'imprevedibilità del risultato di questa collisione è perciò perfettamente coerente con l'impossibilità di conoscere la precisa posizione dei fotoni.

Tuttavia considerando la radiazione come un campo, la natura probabilistica dell'effetto sembra più profonda.

• Diffrazione dell'elettrone: Nel 1937 l'esperimento di Davisson-Germer diede conferma dell'ipotesi del dualismo onda-particella formulata dal fisico de Broglie già nel 1924. Egli riteneva che non soltanto le onde potessero essere considerate come l'insieme di particelle, ma che anche la materia avesse una natura ondulatoria.

Davisson e Germer spararono un fascio di elettroni attraverso un bersaglio di nichel cristallino e riuscirono a determinare lo schermo di diffrazione. Esso era costituito da un gran numero di punti corrispondenti ai singoli elettroni, tuttavia appariva perfettamente analogo a quello prodotto dai un fascio di raggi X.

Questo comportamento è una conseguenza dell'effetto statistico dell'insieme degli elettroni: ciascuno di essi si muove come una singola particella, ma il suo moto può essere predetto soltanto tenendo conto del comportamento della totalità delle particelle, attraverso una distribuzione di probabilità. Un elettrone avrà quindi una maggiore probabilità di muoversi verso una certa zona, quelle che nello spettro di diffrazione appaiono più chiare, rispetto che ad altre, le quali appaiono più scure.

Vediamo ora nello specifico due casi particolarmente rilevanti e a cui faremo riferiremo anche in seguito.

Esempio 1.1.1. Esaminiamo il fenomeno dell'interferenza.

Consideriamo un'onda (perturbazione) di frequenza ν e ampiezza A, fase ϕ che possono variare nei diversi punti dello spazio. Nel punto ${\bf r}$ all'istante t

l'onda può essere rappresentata nella nota forma

$$f(\mathbf{r},t) = A(\mathbf{r})\cos(\omega t + \phi(\mathbf{r})), \tag{1.1}$$

dove $\omega=2\pi\nu$. Quest'ultima può essere scritta equivalentemente in forma complessa

$$f(\mathbf{r},t) = \Re[\psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t}],\tag{1.2}$$

dove $\psi(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r})e^{-i\phi(\mathbf{r})}$.

L'intensità dell'onda è proporzionale al quadrato dell'ampiezza

$$I(\mathbf{r}) = kA(\mathbf{r})^2 = k|\psi(\mathbf{r})|^2. \tag{1.3}$$

Ora se due onde con la stessa frequenza interferiscono tra loro, la perturbazione totale è

$$f(\mathbf{r},t) = A_1(\mathbf{r})\cos(\omega t + \phi_1(\mathbf{r})) + A_2(\mathbf{r})\cos(\omega t + \phi_2(\mathbf{r}))$$
$$= \Re[(\psi_1(\mathbf{r}) + \psi_2(\mathbf{r}))e^{-i\omega t}], \tag{1.4}$$

e l'intensità totale è $I(\mathbf{r}) = k|\psi_1(\mathbf{r}) + \psi_2(\mathbf{r})|^2$ descrive da un punto di vista matematico il fenomeno dell'interferenza. Si osservi che quest'ultima non coincide con la somma delle singole intensità delle onde, infatti

$$I(\mathbf{r}) = k|\psi_1(\mathbf{r}) + \psi_2(\mathbf{r})|^2 = k|\psi_1(\mathbf{r})|^2 + k|\psi_2(\mathbf{r})|^2 + 2k(\psi_1(\mathbf{r}) \cdot \psi_2(\mathbf{r}))$$
$$= I_1(\mathbf{r}) + I_2(\mathbf{r}) + 2k(\psi_1(\mathbf{r}) \cdot \psi_2(\mathbf{r}))$$
(1.5)

e dipende dunque dalla fase delle due perturbazioni nel punto \mathbf{r} : se il prodotto scalare tra i due vettori complessi è positivo si ha *interferenza costruttiva* e $I(\mathbf{r})$ è maggiore di $I_1(\mathbf{r}) + I_2(\mathbf{r})$, altrimenti vi è *interferenza distruttiva* e $I(\mathbf{r})$ è minore.

Il fatto che anche gli elettroni mostrino un pattern di interferenza suggerisce che dietro alla distribuzione di probabilità $p(\mathbf{r})$ a cui prima si accennava ci possano essere due funzioni di "ampiezza" e "fase" che possono essere combinate in una funzione complessa $\psi(\mathbf{r}): \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$, detta **funzione d'onda** dell'elettrone.

In completa analogia con l'intensità di una perturbazione, la probabilità è definita come

$$p(\mathbf{r}) = k|\psi(\mathbf{r})|^2. \tag{1.6}$$

La probabilità che un elettrone si trovi in una regione V è $k \int_V |\psi(\mathbf{r})|^2 dV$, perciò integrando su tutto lo spazio, in cui la probabilità di trovare l'elettrone è 1, si trova $k = (\int |\psi(\mathbf{r})|^2 dV)^{-1}$, quindi:

$$p(\mathbf{r}) = \frac{|\psi(\mathbf{r})|^2}{\int_{V_{tot}} |\psi(\mathbf{r})|^2 dV}.$$
 (1.7)

Imponiamo le seguenti condizioni su ψ :

W1 ψ è a quadrato sommabile, ossia $\int |\psi|^2 dV < \infty$.

W2 ψ ha derivate parziali uniformemente continue di tutti gli ordini e che sono a quadrato sommabile.

W3 Se $f(\mathbf{r})$ è un polinomio nelle coordinate di \mathbf{r} , allora $f\psi$ è a quadrato sommabile.

Per funzione d'onda si intenderà sempre una funzione ψ soddisfacente le tre precedenti proprietà.

Si osservi che una particella con funzione d'onda $c\psi$ ha la stessa densità di probabilità di quella considerata in (1.7), perciò talvolta tornerà utile normalizzare la funzione d'onda assumendo che $\int |\psi|^2 dV = 1$.

Esempio 1.1.2. Un altro fenomeno in cui si può osservare un comportamento probabilistico è la polarizzazione di un fotone. Si consideri un raggio di luce polarizzata longitudinalmente che attraversa un filtro polaroid, costituito da cristalli allineati lungo una certa direzione detta asse del filtro. Questo permette il passaggio solo alla componente del campo elettrico parallela all'asse.

Quindi se prima del passaggio il campo elettrico è

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \cos \omega t,\tag{1.8}$$

questo poi diventa

$$\mathbf{E}_1(t) = \mathbf{E}_0 \cos \omega t \cos \theta, \tag{1.9}$$

dove θ è l'angolo minore compreso tra l'asse del filtro e la direzione lungo cui il campo oscilla.

Osserviamo che il rapporto tra le intensità dei due raggi (uscente e entrante) è $|E_1|^2/|E|^2 = \cos^2 \theta$. Siccome il numero di fotoni è direttamente proporzionale all'intensità luminosa si ha che la probabilità di passaggio per un fotone è $\cos^2 \theta$. Ciascun fotone può essere quindi assorbito dal filtro o passarci attraverso tuttavia, dato che essi sono indistinguibili, non è possibile determinarne singolarmente il comportamento.

Il caso più generale di polarizzazione per una radiazione monocromatica è la **polarizzazione ellittica**. Prendendo un riferimento cartesiano con assi x e y nel piano perpendicolare alla direzione di propagazione, le direzioni del campo elettrico lungo le due componenti oscillano indipendentemente e con fasi (in generale) diverse:

$$E_x(t) = E_{x_0} \cos(\omega t + \phi_x), \quad E_y(t) = E_{y_0} \cos(\omega t + \phi_y)$$
 (1.10)

Il vettore **E** descrive un'ellisse (che è degenere nel caso $\phi_x = \phi_y$ in cui si ha polarizzazione piana). Riscrivendo le equazioni in forma complessa:

$$\mathbf{E}(t) = \Re[\boldsymbol{\psi}e^{-i\omega t}],\tag{1.11}$$

dove

$$\boldsymbol{\psi} = E_{x_0} e^{-i\phi_x} \mathbf{i} + E_{y_0} e^{-i\phi_y} \mathbf{j} = c_1 \mathbf{i} + c_2 \mathbf{j}. \tag{1.12}$$

L'intensità dell'onda è $I(t) \propto |\psi|^2 = |c_1|^2 + |c_2|^2$.

La polarizzazione di un fotone è descritta dal vettore $\mathbf{E}(t)$ o dal vettore costante ψ . Se si moltiplica quest'ultima per un numero complesso, la parte reale modifica l'intensità e quella complessa la fase dell'oscillazione, ma la forma dell'ellisse resta invariata. Siccome quest'ultima descrive la polarizzazione di un fotone possiamo concludere che la polarizzazione di un fotone in moto lungo l'asse z è rappresentabile come un vettore ψ del tipo (1.12), detto **vettore di polarizzazione**.

Osserviamo che se tale vettore è moltiplicato per un complesso c, allora $c\psi$ descrive lo stesso stato di polarizzazione di ψ .

1.2 Probabilità - definizione pratica e implicita

Come già accennato, in questo paragrafo daremo una definizione *probabilità* parziale, assiomatica e relativa al contesto specifico che tratteremo.

Indicheremo la probabilità che si verifichi un dato fenomeno fisico α , risultato di un esperimento E, date le condizioni iniziali dell'esperimento (stato del sistema) ψ con $p_E(\alpha|\psi)$.

Elenchiamone le proprietà caratterizzanti:

P1 Sia E un esperimento con possibili risultati $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ i quali sono esaustivi ed $esclusivi^1$; allora la probabilità del risultato α_i è un numero reale $p_E(\alpha_i|\psi)$ tale che:

(i)
$$0 \le p_E(\alpha_i | \psi) \le 1$$
;

(ii)
$$\sum_{i=1}^{n} p_E(\alpha_i | \psi) = 1;$$

P2 Se $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$ sono possibili risultati dell'esperimento E, la probabilità che uno di loro si verifichi dato uno stato iniziale ψ è

$$p_E(\alpha_1 \vee \alpha_2 \vee \cdots \vee \alpha_r | \psi) = \sum_{i=1}^r p_E(\alpha_i | \psi)$$

P3 Se E e F sono esperimenti indipendenti, $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$ sono possibili risultati di E e β_1, \ldots, β_m di F allora la probabilità che α_i si verifichi con stato iniziale ψ e β_j si verifichi con stato iniziale ϕ è

$$p_{E\&F}(\alpha_i \wedge \beta_j | \psi \wedge \phi) = p_E(\alpha_i | \psi) \ p_F(\beta_j | \phi).$$

¹In altri termini: uno e soltanto uno di questi risultati dove verificarsi.

²Non c'è influenza causale di uno sull'altro né influenza causale di entrambi su tutti e due.

P4 Se l'esito di E influenza quello di F chiamiamo ψ lo stato di E e ϕ_{α} quello di F che segue dal risultato α di E. La probabilità che E abbia il risultato α e F abbia β dato ψ è

$$p_{E\&F}(\alpha \wedge \beta|\psi) = p_E(\alpha|\psi) \ p_F(\beta|\phi_\alpha).$$

In fisica spesso si tende ad adottare maggiormente la definizione frequentista di probabilità, è così infatti che viene empiricamente determinata la probabilità che un evento fisico si verifichi.

In meccanica quantistica la probabilità del risultato di un esperimento influenza sia il grado di credibilità di un evento che la frequenza di questo in una serie di esperimenti ripetuti, tuttavia essa non si può ridurre a nessuna delle due definizioni.

In altri termini, la probabilità che un sistema quantistico, partendo da un dato stato iniziale, si trovi in un determinato stato finale, rispecchia sia l'aspettativa che questo si verifichi, sia la sua frequenza (nel caso l'esperimento si possa ripetere molte volte). Tuttavia tale probabilità ha un significato fisico, e una traduzione in linguaggio matematico, più profondo e legato alla descrizione di un sistema quantistico, nello specifico al *principio di sovrapposizione*.

1.3 Spazio degli stati

Nella precedente sezione abbiamo parlato di *stato* di un sistema quantistico, sebbene questo concetto non è stato definito e chiarito possiamo per ora intenderlo come un ente che riassume e descrive un sistema in un dato istante.

Diamo ora una descrizione matematica dell'insieme degli stati di un sistema quantistico. Vedremo che questo potrà essere definito in generale e indipendentemente dalle proprietà fisiche degli stati che caratterizzano il generico sistema, si noti ad esempio come nei casi esaminati in (1.1.1) e (1.1.2) questi fossero descritti da oggetti anche matematicamente molto differenti.

Diremo particella semplice un corpo dotato di posizione e senza altre proprietà. Seguendo il formalismo di Dirac indicheremo con $|\cdot\rangle$ un oggetto che descrive lo stato di un sistema quantistico. I **vettori di stato** $|\psi\rangle$ formano uno spazio di Hilbert ${\mathscr S}$ detto **spazio degli stati**, uno spazio vettoriale (complesso) con prodotto interno hermitiano, completo rispetto alla distanza indotta da quest'ultimo. Sono perciò possibili le seguenti operazioni:

S1 Moltiplicazione per uno scalare

S2 Addizione

Il vettore nullo ${\bf 0}$ ottenuto moltiplicando uno stato per zero è l'unico elemento di ${\mathscr S}$ che non rappresenta alcuno stato quantistico. Infatti assumendo

che dati $c \in \mathbb{C}$ e $|\psi\rangle \in \mathscr{S}$ allora $c|\psi\rangle$ descriva lo stesso stato quantistico di $|\psi\rangle$, si osserva che **0** non può essere effettivamente considerato un vettore di stato in quanto, come multiplo di ogni elemento di \mathscr{S} , dovrebbe rappresentare tutti gli stati del sistema.

La proprietà S2 caratterizza il comportamento dei sistemi quantistici ossia rappresenta la possibilità di sovrapporre due stati quantistici ed è perciò chiamata **principio di sovrapposizione**.

Più nel dettaglio, il vettore $c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ descrive lo stato di un sistema quantistico in cui quest'ultimo si può comportare come se si trovasse nello stato $|\psi_1\rangle$ oppure $|\psi_2\rangle$, con una probabilità data dai coefficienti complessi della combinazione lineare.

Esempio 1.3.1. Nello studio del fenomeno dell'interferenza tra perturbazioni, esaminato nell'esempio (1.1.1), il prodotto interno tra due funzioni d'onda è definito come

$$\langle \psi | \phi \rangle := \int_{V_{tot}} \overline{\phi(\mathbf{r})} \, \psi(\mathbf{r}) \, dV,$$

notiamo che se ϕ e ψ sono a quadrato sommabile è immediato, applicando la disuguaglianza di Cauchy-Schwartz, mostrare che questo integrale è finito. Nel caso della polarizzazione dei fotoni i vettori di stato sono vettori di polarizzazione della forma $\psi = c_1 \mathbf{i} + c_2 \mathbf{j}$; il prodotto interno è $\langle \psi | \phi \rangle := \phi \cdot \psi$.

Vediamo ora una serie di postulati che assiomatizzano quanto fin qui accennato.

Postulato I (Principio di sovrapposizione). I vettori di stato di un sistema quantistico appartengono a uno spazio vettoriale complesso con un prodotto interno che è una forma sesquilineare, hermitiana, definita positiva. Ogni vettore non nullo $|\psi\rangle$ descrive uno stato del sistema e ogni multiplo scalare (non nullo) di $|\psi\rangle$ descrive lo stesso stato. Ogni stato del sistema è descritto da un vettore non nullo e dai suoi multipli, ma non da altri vettori di stato.

Definizione 1.3.2. Un vettore di stato è detto **normalizzato** se $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, si osservi che esistono infiniti vettori normalizzati per un singolo stato quantistico, basta moltiplicarne uno per un **fattore di fase** $e^{i\phi}$. Due vettori $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ si dicono **ortogonali** se $\langle \phi | \psi \rangle = 0$.

Un inseme - non necessariamente finito - di vettori $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$ si dice **ortonormale** se

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$$
.

Un insieme di vettori $|\psi_i\rangle$ è **completo** se ogni vettore di stato $|\psi\rangle$ può essere espresso come una loro combinazione lineare, si osservi che se $|\psi_i\rangle$ sono ortonormali, i coefficienti di tale combinazione sono $c_i = \langle \psi_i | \psi \rangle$.

Il numero di elementi in un insieme completo e ortonormale è detta **dimensione** dello spazio.

Definizione 1.3.3. Un **autostato** di un esperimento su un sistema quantistico è uno stato del sistema in cui si può prevedere con certezza il risultato dell'esperimento.

L'autostato è **non degenere** se è l'unico stato in cui si verifica questo determinato risultato.

Postulato II Sia α un risultato non degenere di un esperimento E su un sistema quantistico, sia $|\phi_{\alpha}\rangle$ un vettore di stato normalizzato che descrive l'autostato associato ad α ; la probabilità che l'esperimento abbia esito α è

$$p_E(\alpha|\psi) = \frac{|\langle\psi_\alpha|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$
 (1.13)

Osservazione 1.3.4. L'insieme \mathscr{S}_{α} formato dagli autostati di α è un sottospazio vettoriale di \mathscr{S} , se \mathscr{S}_{α} contiene almeno due autostati indipendenti allora α è degenere.

Preso un insieme $(|\psi_i\rangle)$ ortonormale di \mathscr{S}_{α} la proiezione di un generico elemento $|\psi\rangle$ su \mathscr{S}_{α} è

$$\hat{P}_{\alpha}|\psi\rangle = \sum_{i} |\psi_{i}\rangle\langle\psi_{i}|\psi\rangle. \tag{1.14}$$

 \hat{P}_{α} viene detto operatore di proiezione ortogonale su \mathscr{S}_{α} .

Si noti che $\langle \hat{P}_{\alpha} | \psi \rangle | \hat{P}_{\alpha} | \psi \rangle \rangle = \sum_{i} |\langle \psi_{i} | \psi \rangle|^{2} = \langle \psi | \hat{P}_{\alpha} | \psi \rangle$. Da P2 si ha $p_{E}(\alpha | \psi) = \sum_{i} p_{E}(\alpha_{i} | \psi)$ e quindi la (1.13) può essere riscritta anche come

$$p_E(\alpha|\psi) = \sum_i \frac{|\langle \psi_i | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \psi | \hat{P}_\alpha | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}.$$
 (1.15)

Proposizione 1.3.5. Se l'esperimento E fornisce risultati non ambigui

- (i) I vettori autostati associati con diversi risultati sono ortogonali;
- (ii) I vettori autostati formano un insieme completo di E.

Dimostrazione. (i) Siano $|\psi_{\alpha}\rangle$ e $|\psi_{\beta}\rangle$ vettori associati a diversi risultati α e β , supposti inizialmente non degeneri. Allora se il sistema si trova nell'autostato descritto da $|\psi_{\beta}\rangle$ allora l'esperimento darà come risultato β e quindi probabilità che α si verifichi è nulla, cioè

$$p_E(\alpha|\psi_\beta) = \frac{|\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle|^2}{\langle\psi_\beta|\psi_\beta\rangle} = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = 0. \tag{1.16}$$

Se il risultato α è degenere, allora dalla (1.15) si ha $\langle \psi_{\beta} | \hat{P}_{\alpha} | \psi_{\beta} \rangle = 0$, dunque

$$\langle \psi_{\beta} | \hat{P}_{\alpha} | \psi_{\beta} \rangle = \langle \hat{P}_{\alpha} | \psi_{\beta} \rangle | \hat{P}_{\alpha} | \psi_{\beta} \rangle \Rightarrow \hat{P}_{\alpha} | \psi_{\beta} \rangle = 0;$$
 (1.17)

cioè $|\psi_{\beta}\rangle$ è ortogonale a ogni vettore di \mathscr{S}_{α} .

(ii) Siano ora $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ tutti i possibili risultati di E. Se sono non degeneri, siano $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots$ i vettori di stato normalizzati che descrivono i corrispondenti autostati. Sia $|\psi\rangle$ un generico vettore di stato e

$$|\psi'\rangle := |\psi\rangle - \sum_{i} c_{i} |\psi_{i}\rangle, \quad c_{i} := \langle \psi_{i} | \psi\rangle.$$
 (1.18)

Allora se $|\psi'\rangle$ fosse non nulla allora, per il Postulato I, dovrebbe descrivere uno stato del sistema. Tuttavia siccome gli $|\psi_i\rangle$ sono normalizzati e mutualmente ortogonali, per il punto (i), $\langle \psi_i | \psi' \rangle = 0$ per ogni i = 1, 2, ...

In altri termini la probabilità che un risultato α_i si verifichi è nulla, ma poiché essi rappresentavano tutti i possibili risultati di E, sempre per il Postulato I, segue che $|\psi'\rangle$ non descrive alcuno stato del sistema ed è quindi il vettore nullo, perciò $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle$.

Nel caso generale, in cui gli α_i non sono necessariamente non degeneri, si procede analogamente utilizzando gli operatori di proiezione \hat{P}_i . Scriviamo

$$|\psi'\rangle := |\psi\rangle - \sum_{i} \hat{P}_{i} |\psi\rangle,$$
 (1.19)

dal primo punto segue che i $\hat{P}_i | \psi \rangle$ sono fra loro ortogonali, perciò

$$\hat{P}_i \hat{P}_j |\psi\rangle = 0 \quad \text{se } i \neq j, \qquad \hat{P}_i^2 |\psi\rangle = \hat{P}_i |\psi\rangle,$$
 (1.20)

l'uguaglianza di destra segue direttamente dalla definizione (1.14).

Usando la (1.20) abbiamo che $\hat{P}_i|\psi'\rangle = 0$ per ogni i e perciò per considerazioni analoghe a quelle fatte sopra $\psi'\rangle = \mathbf{0}$. Possiamo quindi scrivere $|\psi\rangle$ come combinazione di vettori di autostati.

Definizione 1.3.6. Un osservabile è una quantità fisica che può essere misurata da un esperimento, i cui risultati sono numeri reali chiamati autovalori. Ciascun autovalore è associato a uno o più autostati.

Per ogni osservabile A, a partire dai suoi autovalori e autostati si può costruire, grazie alla Proposizione 1.2.5, il corrispondente operatore lineare \hat{A}

Definizione 1.3.7. Se $(|\psi_i\rangle)$ è un insieme completo di autostati dell'osservabile A e α_i sono i corrispondenti autovalori, definiamo \hat{A} come

$$\hat{A}|\psi\rangle := \sum_{i} \alpha_{i} |\psi_{i}\rangle \langle \psi_{i}|\psi\rangle, \qquad (1.21)$$

ossia

$$\hat{A} = \sum_{\alpha} \alpha \, \hat{P}_{\alpha}. \tag{1.22}$$

Osservazione 1.3.8. Si noti che l'operatore appena definito è hermitiano

Dimostrazione. Possiamo assumere che gli autostati $|\psi_i\rangle$ siano ortogonali fra loro per la 1.3.5. Siano $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ due stati allora

$$\overline{\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle} = \overline{\sum_{i} \alpha_{i} \langle \phi | \psi_{i} \rangle \langle \psi_{i} | \psi \rangle}$$

$$= \sum_{i} \overline{\alpha_{i}} \overline{\langle \phi | \psi_{i} \rangle} \overline{\langle \psi_{i} | \psi \rangle}$$

$$= \sum_{i} \overline{\alpha_{i}} \overline{\langle \psi_{i} | \psi \rangle} \overline{\langle \phi | \psi_{i} \rangle} = \sum_{i} \alpha_{i} \langle \psi | \psi_{i} \rangle \langle \psi_{i} | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle, \quad (1.23)$$

poiché $\alpha_i \in \mathbb{R}$.

Se f è una funzione polinomiale di variabile reale e A un'osservabile di un sistema quantistico allora f(A) è calcolato misurando A e applicando la funzione f al risultato. Ne segue che f(A) e A hanno gli stessi autovalori, quindi

$$\widehat{f(A)}|\psi_i\rangle = \alpha_i|\psi_i\rangle = f(\hat{A}) \tag{1.24}$$

e siccome gli autovalori sono un insieme completo vale:

$$\widehat{f(A)} = f(\widehat{A}). \tag{1.25}$$

Gli osservabili e i loro operatori sono spesso chiamati **q-numeri** per sottolineare il fatto che non sono scalari complessi e in particolare non commutano. Ossia la misura di un'osservabile sul sistema, che ne provoca una proiezione in uno dei sui autostati³, può compromettere la misura di un diverso osservabile sul sistema.

Definizione 1.3.9. Dato un operatore lineare X sullo spazio degli stati, definiamo l'operatore X^{\dagger} chiamato **coniugato hermitiano** di X:

$$\langle \phi | X^{\dagger} | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | X | \phi \rangle}.$$
 (1.26)

X è detto hermitiano se $X=X^{\dagger}$, e unitario se $X^{\dagger}X=1$.

É possibile anche definire il coniugato hermitiano di un vettore di stato $|\psi\rangle$: una funzione che associa $|\phi\rangle$ a $\langle\psi|\phi\rangle$. Tale mappa è denotata con $\langle\psi|$ ed è detta **bra**, mentre $|\phi\rangle$ **ket**, per motivi intuitivi.

Quando il sistema è in uno stato $|\psi\rangle$ il valore ottenuto da una misura su un osservabile A è una variabile casuale con probabilità di distribuzione

 $^{^3}$ Nell'interpretazione della scuola di Copenaghen questo è chiamato collasso della funzione d'onda.

data da (1.13), dove α è inteso come valore di A.

Il valor medio ottenuto da un elevato numero di misure effettuate con fissate condizioni iniziali è chiamato **valore atteso** di A e si denota con $\langle A \rangle$. La deviazione standard è chiamata **incertezza** su A e si denota ΔA , ed è la radice quadrata del valore atteso di $(A - \langle A \rangle)^2$.

Proposizione 1.3.10. Se $|\psi\rangle$ è un vettore di stato normalizzato, allora

$$i) \langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle,$$

ii)
$$\Delta A^2 = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2$$

Dimostrazione. Sia $|\psi_i\rangle$ un insieme completo di autostati di A con rispettivi autovalori α_i , allora ciascuno stato $|\psi\rangle$ può essere scritto come $|\psi\rangle = \sum c_i |\psi_i\rangle$ dove $c_i = \langle \psi_i | \psi \rangle$. Perciò la probabilità che una misura di A restituisca il valore α_i è $|c_i|^2$ (o la relativa somma se ci sono autovalori con molteplicità maggiore di uno); allora il valore medio di A è

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} \alpha \ p_A(\alpha | \psi) = \sum_{i} \alpha_i |c_i|^2$$
$$= \sum_{i} \alpha_i \langle \psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle . \tag{1.27}$$

Possiamo utilizzare i) appena dimostrato per provare il secondo punto, infatti

$$\Delta A^{2} = \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^{2} | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \hat{A}^{2} | \psi \rangle - 2 \langle A \rangle \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle + \langle \hat{A} \rangle^{2} \langle \psi | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \hat{A}^{2} | \psi \rangle - \langle \hat{A} \rangle^{2}$$
(1.28)

siccome $|\psi\rangle$ è normalizzato abbiamo la tesi.

Definizione 1.3.11. Dati due osservabili $A \in B$ se viene effettuata una misura su A, poi su B, infine su A, e questa dà lo stesso risultato della prima (e viceversa scambiando gli osservabili) allora $A \in B$ sono detti **compatibili**.

Proposizione 1.3.12. Due osservabili A e B sono compatibili se e solo se \hat{A} e \hat{B} commutano.

Dimostrazione. Mostreremo che entrambe le condizioni sono equivalenti all'asserto che esista un insieme completo di stati che sono simultaneamente autostati di A e di B. Innanzitutto supponiamo che A e B siano compatibili e siano eseguite tre misurazioni come descritto nella Definizione 1.3.11. Dopo la prima misurazione il sistema sarà nell'autostato $|\psi_{\alpha}\rangle$ di A con autovalore α ; dopo la misurazione di B il sistema si troverà in un autostato di B, ma poiché i due osservabili sono compatibili e la terza misurazione deve dare come risultato α , esso è anche autostato di A, con relativo autovalore α .

Siano $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \ldots$ un insieme completo di autostati di B, per la 1.3.5 possiamo scrivere $|\psi_{\alpha}\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle$, dove ciascun c_i è diverso da zero se è possibile che una misura di B lasci il sistema nello stato $|\phi_i\rangle$. In tal caso $|\phi_i\rangle$ dovrà, per quanto detto sopra, essere un autostato di A con autovalore α . Perciò il sottospazio \mathscr{S}_{α} degli autostati di A con autovalore α contiene un insieme completo di stati che sono anche autostati di B.

Poiché è possibile scrivere ogni vettore come combinazione degli elementi dei sottospazi \mathscr{S}_{α} corrispondenti agli autovalori di A, \mathscr{S} contiene un insieme completo di vettori che sono autostati sia di A che di B.

D'altro canto se esiste un insieme di questo tipo, ogni sottospazio \mathscr{S}_{α} contiene un insieme completo di autostati di B; dunque ogni stato di \mathscr{S}_{α} resta in \mathscr{S}_{α} dopo essere proiettato in un sottospazio di autostati di B tramite una misurazione. Perciò se esiste un insieme con queste caratteristiche A e B sono compatibili.

Quindi se $\hat{A}\hat{B}$ e $\hat{B}\hat{A}$ hanno lo stsesso effetto su ogni vettore che sia autostato sia di A che di B, e quindi avendo un insieme completo di autostati così si conclude $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Viceversa supponendo $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, dato $|\psi_{\alpha}\rangle \in \mathscr{S}_{\alpha}$ si ha

$$\hat{A}\hat{B}|\psi_{\alpha}\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi_{\alpha}\rangle = \alpha\hat{B}|\psi_{\alpha}\rangle,\tag{1.29}$$

ossia $\hat{B}|\psi_{\alpha}\rangle$ è anch'esso un autostato di A con autovalore α . Perciò \hat{B} agisce come un operatore hermitiano in \mathscr{S}_{α} e perciò quest'ultimo contiene un insieme completo di autostati di B^4 . Dunque anche in questo caso \mathscr{S} contiene un insieme completo di vettori che sono autostati sia di A che di B.

Abbiamo visto l'importanza di stabilire se due operatori commutano o meno. Vediamo ora due importanti operazioni di commutazione che saranno impiegati in seguito.

Definizione 1.3.13. Siano \hat{A} e \hat{B} due operatori. Diremo **commutatore** di \hat{A} e \hat{B} l'operatore

$$[\hat{A}, \, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$
 (1.30)

Chiameremo invece anticommutatore tra \hat{A} e \hat{B} l'operatore

$$\{\hat{A}, \, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$$
 (1.31)

1.4 Descrizione in una dimensione di una particella quantistica

In quest'ultima sezione del capitolo introduciamo alcuni strumenti di base per la descrizione di una particella quantistica lungo l'asse x e dimostre-

⁴Nel caso \mathcal{S}_{α} sia finito dimensionale.

remo alcune importanti proprietà che saranno utili in seguito nello studio dell'oscillatore armonico quantistico.

1.4.1 Autostati di posizione e operatore di traslazione

Nello studio del moto unidimensionale di una particella quantistica è naturale introdurre l'operatore di posizione \hat{x} e gli stati di posizione $|x\rangle$ soddisfacenti

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad x \in \mathbb{R}.$$
 (1.32)

Tuttavia questi autostati di posizione sono più che altro un'astrazione matematica, in quanto non è possibile ottenere un singolo valore misurando la posizione di una particella (cosa che ad esempio accade nella misura dello spin intrinseco di una particella con spin $\frac{1}{2}$). Inoltre tali autostati non sono normalizzati.

Ancora una volta possiamo pensare gli stati fisici - quelli che si verificano in natura - come sovrapposizione di questi autostati di posizione. Siccome la variabile posizione è espressa mediante un intervallo continuo di valori, il generico stato $|\psi\rangle$ è espresso mediante l'integrale

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |x\rangle\langle x|\psi\rangle;$$
 (1.33)

si osservi inoltre che valutando la (1.33) in un autostato $|x'\rangle$ si ottiene

$$|x'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |\psi\rangle\langle x|x'\rangle \tag{1.34}$$

che implica $\langle x|x'\rangle=\delta(x-x')$, dove quest'ultima è la funzione delta di Dirac. Introduciamo ora l'operatore di traslazione (agente sulla base degli autostati) come

$$\hat{T}(a)|x\rangle = |x+a\rangle, \quad a \in \mathbb{R};$$
 (1.35)

quest'ultimo cambia lo stato in cui la particella ha la posizione x in un altro in cui essa occupa la posizione x+a.

L'azione di T(a) sul generico $|\psi\rangle$ diventa

$$\hat{T}(a)|\psi\rangle = \hat{T}(a) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, |x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, |x'+a\rangle\langle x'|\psi\rangle, \qquad (1.36)$$

da quest'ultima segue che la funzione d'onda ψ' dello stato traslato è quella iniziale ψ traslata di a ossia $\psi'(x) = \psi(x - a)$. Infatti

$$\psi'(x) = \langle x | \hat{T}(a) | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, \langle x | x' + a \rangle \, \psi(x')$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, \delta(x' + a - x) \, \psi(x') = \psi(x - a). \tag{1.37}$$

Inoltre, siccome la norma della funzione d'onda traslata non varia si ha

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{T}(a)^{\dagger} \hat{T}(a) | \psi \rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{T}(a)^{\dagger} \hat{T}(a) = 1;$$
 (1.38)

dal fatto che \hat{T} è unitario e dalla (1.35) si ha che

$$\langle x | \hat{T}(a) = \langle x - a |. \tag{1.39}$$

Infatti dato che l'inverso di $\hat{T}(a)$ è $\hat{T}(a)^{\dagger}$, quest'ultimo trasla un vettore bra di -a:

$$\hat{T}(a)^{\dagger}|x'+a\rangle = \hat{T}(a)^{\dagger}\,\hat{T}(a)|x'\rangle = |x'\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{T}(a)^{\dagger}|x\rangle = |x-a\rangle \tag{1.40}$$

e quindi

$$\langle x|\hat{T}(a) = (\hat{T}(a)^{\dagger}|x\rangle)^{\dagger} = \langle x-a|.$$
 (1.41)

Possiamo ora introdurre l'operatore del momento $\hat{\mathbf{p}}$ corrispondente al-l'osservabile \mathbf{p} , il momento lineare, come

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \tag{1.42}$$

Nel caso unidimensionale si ha

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.\tag{1.43}$$

1.4.2 Il generatore di traslazioni

Definiamo l'operatore di traslazione infinitesimale:

$$\hat{T}(\delta x) = 1 - \frac{i}{\hbar} \,\hat{p}_x \,\delta x,\tag{1.44}$$

la cui azione sulla base dei ket è

$$\hat{T}(\delta x)|x\rangle = |x + \delta x\rangle. \tag{1.45}$$

Ogni operatore di traslazione può essere espresso come un numero infinito di traslazioni infinitesime, infatti

$$\hat{T}(a) = \lim_{N \to \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \, \hat{p}_x \, \frac{a}{N} \right)^N = e^{-i \, \hat{p}_x a/\hbar}; \tag{1.46}$$

e perciò dalla (1.44) e (1.38) si ha che $\hat{p}_x = \hat{p}_x^{\dagger}$, quindi è hermitiano.

Possiamo mostrare ora che l'operatore di posizione e del momento non commutano.

Proposizione 1.4.1. Tra l'operatore di posizione e quello del momento vale la relazione di commutazione

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \tag{1.47}$$

Dimostrazione. Consideriamo una traslazione infinitesima di δx , allora

$$[\hat{x}, \hat{T}(\delta x)] = \hat{x} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \, \hat{p}_x \, \delta x \right) - \left(1 - \frac{i}{\hbar} \, \hat{p}_x \, \delta x \right) \hat{x}$$
$$= \frac{-i \, \delta x}{\hbar} \, [\hat{x}, \, \hat{p}_x]. \tag{1.48}$$

Perciò per ogni stato $|\psi\rangle$ vale

$$\left(\hat{x}\,\hat{T}(\delta x) - \hat{T}(\delta x)\,\hat{x}\right)|\psi\rangle = \frac{-i\,\delta x}{\hbar}\,\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]|\psi\rangle,\tag{1.49}$$

usando la (1.33) il termine a sinistra diventa

$$\left(\hat{x}\,\hat{T}(\delta x) - \hat{T}(\delta x)\,\hat{x}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|x\rangle\langle x|\psi\rangle
= \hat{x} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|x + \delta x\rangle\langle x|\psi\rangle - \hat{T}(\delta x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,x|x\rangle\langle x|\psi\rangle
= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,(x + \delta x)\,|x + \delta x\rangle\langle x|\psi\rangle - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,x|x + \delta x\rangle\langle x|\psi\rangle
= \delta x \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|x + \delta x\rangle\langle x|\psi\rangle = \delta x \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\,|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \delta x\,|\psi\rangle, \quad (1.50)$$

dove nel penultimo passaggio abbiamo cambiato la variabile di integrazione x con $x' - \delta x$ e tenuto conto soltanto dell'ordine di infinitesimo maggiore di $\langle x' - \delta x | \psi \rangle = \psi(x' - \delta x)$; quest'ultimo sviluppato in serie di Taylor al prim'ordine è infatti

$$\psi(x' - \delta x) = \psi(x') - \delta x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x'). \tag{1.51}$$

Sostituendo nella (1.49) e ordinando abbiamo la tesi.

Infine dimostriamo un'altra importante relazione di cui ci avvarremo in seguito.

Proposizione 1.4.2. Sia $|\psi\rangle$ uno stato arbitrario $e |x\rangle$ un autostato della posizione, allora vale l'importante uquaglianza:

$$\langle x|\hat{p}_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle.$$
 (1.52)

Dimostrazione. Possiamo scrivere

$$\begin{split} \hat{T}(\delta x)|\psi\rangle &= \hat{T}(\delta x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |x\rangle \langle x|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, |x + \delta x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, |x'\rangle \langle x' - \delta x|\psi\rangle, \end{split}$$

in virtù della (1.51) possiamo scrivere

$$\hat{T}(\delta x)|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle \left(\langle x'|\psi\rangle - \delta x \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\psi\rangle \right)$$

$$= |\psi\rangle - \delta x \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\psi\rangle$$

$$= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \delta x \right) |\psi\rangle. \tag{1.53}$$

Sostituendo quest'ultima nella (1.23) otteniamo

$$\hat{p}_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\psi\rangle. \tag{1.54}$$

Infine abbiamo

$$\langle x|\,\hat{p}_{x}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\,\langle x|x'\rangle \,\frac{\partial}{\partial x'}\,\langle x'|\psi\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\,\delta(x-x')\,\frac{\partial}{\partial x'}\,\langle x'|\psi\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\langle x|\psi\rangle \tag{1.55}$$

e quindi la tesi.

1.5 L'equazione di Schrödinger

Lo sviluppo nel tempo di un sistema quantistico è descritto attraverso la modalità in cui il vettore di stato varia in funzione del tempo. Ciò sarà l'equivalente quantistico delle equazioni classiche del moto.

Per ricavare l'equazione del moto quantistica è conveniente partire dall'equazione fondamentale di Plank:

$$E = h\nu. (1.56)$$

Essa può essere infatti applicata a qualsiasi sistema e letta come una relazione tra la sua energia E e la frequenza ν di un oscillazione associata al sistema. Nella prima parte della trattazione, già nell'esempio 1.1.1, abbiamo visto come la dipendenza dal tempo dell'oscillazione è data da un fattore $e^{-2\pi i\nu t}$. Perciò la (1.56) implica che, se un sistema ha energia E, allora il suo vettore di stato $|\psi(t)\rangle$ al tempo t deve contenere un fattore $e^{-2\pi i\nu t}=e^{-iEt/\hbar}$. Ossia

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar}|\psi(0)\rangle.$$
 (1.57)

Ora, l'energia è un osservabile, perciò la caratteristica del sistema di avere una data energia E dev'essere un autostato di questo osservabile.

Si osservi che il vettore di stato al tempo t è un multiplo scalare di $|\psi(0)\rangle$ e perciò descrive lo stesso stato quantistico di quest'ultimo. Perciò gli autostati dell'energia descrivono lo stesso stato fisico del sistema al variare del tempo e sono chiamati stati stazionari.

Assumiamo ora che, nelle ipotesi che il sistema non sia perturbato da esperimenti, l'evoluzione degli stati sia lineare. Ossia, se $|\psi(0)\rangle = \sum_i c_i |\psi_i(0)\rangle$ e dopo il tempo t l'i-esimo stato evolve a $|\psi_i(t)\rangle$, allora $|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i |\psi_i(t)\rangle$. Possiamo quindi scrivere

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t),\tag{1.58}$$

dove $\hat{U}(t)$ è un operatore lineare. Poiché la (1.57) vale nel caso $|\psi(0)\rangle$ sia un autostato dell'energia, possiamo scrivere $\hat{U}(t)$ in funzione dell'operatore \hat{H} rappresentante l'energia:

$$\hat{U}(t) = e^{-iHt/\hbar}. (1.59)$$

Possiamo enunciare questa legge in forma differenziale come nel seguente postulato.

Postulato III Sia $|\psi(t)\rangle$ lo stato del sistema al tempo t. Allora, fintanto che il sistema non è perturbato da esperimenti, $|\psi(t)\rangle$ soddisfa

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle,$$
 (1.60)

dove \hat{H} è l'operatore che descrive l'energia totale del sistema.

Definizione 1.5.1. L'equazione del moto (1.60) è chiamata **equazione di Schrödinger** dipendente dal tempo. L'operatore \hat{H} è detto **Hamiltoniana** del sistema.

Abbiamo quindi definito tutti i principali strumenti necessari per analizzare e descrivere il moto di un oscillatore armonico unidimensionale.

Capitolo 2

L'oscillatore armonico quantistico

Nella prima parte di questo capitolo ci concentreremo sullo studio del moto armonico dal punto di vista quantistico, determineremo gli autovalori dell'energia e i rispettivi autovettori. Di questi infatti si potranno scrivere le funzioni d'onda e analizzarne le proprietà.

Nell'ultimo paragrafo utilizzeremo alcuni strumenti già introdotti nello studio dell'oscillatore armonico per descrivere dei sistemi quantistici in cui il numero di particelle è variabile.

2.1 L'importanza dell'oscillatore armonico

Consideriamo una particella in una dimensione con una funzione di energia potenziale V(x) avente minimo in un punto x_0 . Sviluppando la funzione in serie di Taylor con centro x_0 otteniamo

$$V(x) = V(x_0) + \left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dx^2}\right)_{x=x_0} (x - x_0)^2 + \dots (2.1)$$

e poiché x_0 è punto di minimo si ha che

$$V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2}k(x - x_0)^2 + o((x - x_0)^2), \tag{2.2}$$

dove $k := (d^2V/dx^2)_{x=x_0}$.

Siccome per l'indagine di un sistema fisico sono rilevanti soltanto le differenze di energia potenziale possiamo porre $V(x_0) = 0$ e quindi, purché il sistema sia sottoposto a oscillazioni sufficientemente piccole vicino al suo punto di equilibrio, possiamo trascurare i termini di ordine superiore e dalla (2.2) ottenere l'equazione $V(x) = \frac{1}{2}k(x-x_0)^2$.

Ci si riconduce così allo studio di un oscillatore armonico di frequenza $\omega = \sqrt{k/m}$, dove m è la massa della particella.

Buoni esempi di moti armonici in sistemi microscopici sono, ad esempio, le oscillazioni dei nuclei di molecole diatomiche che oscillano e le vibrazioni degli atomi nei solidi cristallini.

Sperando di aver dato un'idea della rilevanza di questo tipo di moto, provvediamo nel prossimo paragrafo a darne una descrizione nell'ambito della meccanica quantistica, che ci sarà anche sorprendentemente utile per studiare la radiazione elettromagnetica e riformularla nei termini della teoria quantistica.

2.2 Il caso unidimensionale

Studiamo una particella quantistica che si muove di moto armonico unidirezionale (lungo l'asse x) con l'equazione del moto

$$\frac{d^2\hat{x}}{dt^2} = -\omega^2\hat{x},\tag{2.3}$$

dove ω è la frequenza angolare dell'oscillatore. L'Hamiltoniana della particella è

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\,\omega^2\,\hat{x}^2,\tag{2.4}$$

poiché $p_x \to \mathbf{p}$ ovunque.

Per trovare gli autovalori di quest'ultima introduciamo i seguenti operatori:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \, \hat{p}_x \right), \qquad \hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \, \hat{p}_x \right).$$
 (2.5)

Utilizzando

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \tag{2.6}$$

si mostra facilmente che

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1. \tag{2.7}$$

Dalla (2.5) si ottengono

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}), \qquad \hat{p}_x = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^{\dagger}),$$

possiamo quindi riscrivere la (2.4) come

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^{\dagger}) = \hbar\omega \left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$
 (2.8)

$$=\hbar\omega\bigg(\hat{a}\hat{a}^{\dagger} - \frac{1}{2}\bigg),\tag{2.9}$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo usato la (2.7).

Per le proprietà del commutatore vale

$$[\hat{H}, \hat{a}] = [\hbar\omega(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1/2), \hat{a}] = \hbar\omega([\hat{a}^{\dagger}\hat{a}, \hat{a}] + [1/2, \hat{a}])$$
 (2.10)

$$= \hbar\omega(\hat{a}^{\dagger}[\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}]\hat{a}) = -\hbar\omega\hat{a}, \tag{2.11}$$

e con analoghi passaggi si mostra anche che

$$[\hat{H}, \hat{a}^{\dagger}] = \hbar \omega \hat{a}^{\dagger}. \tag{2.12}$$

Sia ora $|\psi\rangle$ un autostato di \hat{H} con autovalore E. Allora usando la precedente relazione ricaviamo

$$\hat{H}\,\hat{a}^{\dagger}|\psi\rangle = (\hat{a}^{\dagger}\hat{H} + \hbar\omega\hat{a}^{\dagger})|\psi\rangle = (E + \hbar\omega)\hat{a}^{\dagger}|\psi\rangle \tag{2.13}$$

ossia $\hat{a}^{\dagger}|\psi\rangle$ è un autostato di \hat{H} con autovalore associato $E + \hbar\omega$; analogamente, usando la (2.11), si mostra che $\hat{a}|\psi\rangle$ è un autostato con autovalore $E - \hbar\omega$.

Poniamo $|\phi\rangle = \hat{a}|\psi\rangle$ e supponiamo $|\psi\rangle$ normalizzato, ossia

$$\langle \phi | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | \psi \rangle = \langle \psi | \left(\frac{\hat{H}}{\hbar \omega} - \frac{1}{2} \right) | \psi \rangle = \frac{E}{\hbar \omega} - \frac{1}{2},$$
 (2.14)

dove si è usato la (2.7) per scrivere la seconda uguaglianza. Siccome il prodotto interno è definito positivo da quest'ultima si ha

$$E \ge \frac{1}{2}\hbar\omega, \qquad E = \frac{1}{2}\hbar\omega \Leftrightarrow \hat{a}|\psi\rangle = \mathbf{0}.$$
 (2.15)

Allo stesso modo imponendo $|\phi\rangle = \hat{a}^{\dagger}|\psi\rangle$, $|\psi\rangle$ normalizzato, si ottiene

$$\langle \phi | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{a} \, \hat{a}^{\dagger} | \psi \rangle = \langle \psi | \left(\frac{\hat{H}}{\hbar \omega} + \frac{1}{2} \right) | \psi \rangle = \frac{E}{\hbar \omega} + \frac{1}{2},$$
 (2.16)

dove in questo caso abbiamo sostituito la (2.8). Abbiamo dunque anche le condizioni

$$E \ge -\frac{1}{2}\hbar\omega, \qquad E = -\frac{1}{2}\hbar\omega \Leftrightarrow \hat{a}^{\dagger}|\psi\rangle = \mathbf{0}.$$
 (2.17)

Applicando in modo iterato \hat{a} otteniamo una successione di autostati $|\psi\rangle, \hat{a}|\psi\rangle, \dots$ e una di corrispondenti autovalori $E, E - \hbar\omega, \dots$ decrescente; mentre applicando \hat{a}^{\dagger} si ottiene la successione di autovalori $E, E + \hbar\omega, \dots$ crescente

La successione decrescente deve terminare altrimenti la (2.15) non è soddisfatta e ciò avviene se e solo se la catena degli autovettori termina con un vettore appartenente al nucleo di \hat{a} , il quale è associato all'autovalore $\hbar\omega/2$.

D'altro canto la successione crescente è illimitata in quanto se terminasse l'ultimo autovettore ottenuto apparterrebbe al nucleo di \hat{a}^{\dagger} e per (2.16) si avrebbe $E=-\hbar\omega/2$ e ciò è assurdo per (2.14). Gli autovalori di \hat{H} sono dunque $E_n := (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ con $n \in \mathbb{N}$; l'energia dell'oscillatore armonico è dunque quantizzata e passare dal livello energetico E_n a E_{n+1} richiede l'assorbimento di energia pari a $\hbar\omega^1$.

Denotiamo l'autostato normalizzato associato al valore E_n con $|n\rangle$ e chiameremo il ket $|0\rangle$ stato fondamentale. Dalla (2.12) si ha

$$\hat{a}|n\rangle = c_{-}|n-1\rangle, \qquad \hat{a}^{\dagger}|n\rangle = c_{+}|n+1\rangle,$$
 (2.18)

con $c_{\pm} \in \mathbb{C}$.

A questo punto, poiché

$$|c_{-}|^{2} = \langle n|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle = \langle n|\left(\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)|n\rangle = n,$$
 (2.19)

$$|c_{+}|^{2} = \langle n|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \langle n|\left(\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = n+1, \qquad (2.20)$$

possiamo porre $c_- := \sqrt{n}$ e $c_+ := \sqrt{n+1}$.

Le matrici infinito-dimensionali associate agli operatori \hat{a} e \hat{a}^{\dagger} rispetto all'insieme completo e ortonormale di autovettori $\mathcal{B} = \{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n\rangle, \dots\}$ sono quindi

$$\hat{a} \leadsto \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \\ \vdots & & & \end{pmatrix}$$
 (2.21)

е

$$\hat{a}^{\dagger} \leadsto \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \\ \vdots & & & \end{pmatrix}. \tag{2.22}$$

Osserviamo che ora è immediato costruire le matrici associate a \hat{x} e \hat{p}_x rispetto a \mathcal{B} . Si può inoltre facilmente provare per induzione che

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^{\dagger})^n}{\sqrt{n}!}|0\rangle. \tag{2.23}$$

Dai risultati ottenuti sin qui si possono ricavare le funzioni d'onda nello spazio delle posizioni e nello spazio dei momenti e il momento-spazio. Il ket

 $^{^1{\}mbox{Vedremo}}$ che un esempio di questo si trova anche nella quantizzazione della radiazione elettromagnetica.

dello stato fondamentale soddisfa $\hat{a}|0\rangle = \mathbf{0}$; proiettando l'equazione nello spazio delle posizioni si ottiene

$$\langle x|\hat{a}|0\rangle = \sqrt{\frac{m\,\omega}{2\hbar}} \langle x|\left(\hat{x} + \frac{i}{m\,\omega}\hat{p}_x\right)|0\rangle = 0.$$
 (2.24)

Siccome per la (1.4.2) valgono

$$\langle x|\hat{p}_x|0\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \langle x|0\rangle}{\partial x},$$
 (2.25)

dove $\langle x|0\rangle$ è l'ampiezza di trovare una particella nello stato fondamentale nella posizione x, e

$$\langle x|\hat{x}|0\rangle = x\langle x|0\rangle,\tag{2.26}$$

la (2.24) si può riscrivere come un'equazione differenziale del prim'ordine

$$\frac{d\langle x|0\rangle}{dx} = -\frac{m\,\omega\,x}{\hbar}\langle x|0\rangle\tag{2.27}$$

da cui si ottiene

$$\langle x|0\rangle = Ne^{-m\omega x^2/2\hbar} \tag{2.28}$$

e normalizzando si ha infine

$$\langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}.$$
 (2.29)

Una volta determinata la funzione d'onda dello stato fondamentale possiamo usare la (2.22) per determinare tutte le altre autofunzioni della spazio delle posizioni:

$$\langle x|n\rangle = \langle x|\frac{(\hat{a}^{\dagger})^n}{\sqrt{n}!}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}!}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right)^n \langle x|\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}_x\right)^n|0\rangle \qquad (2.30)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n}!} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \right)^n \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \tag{2.31}$$

dove nell'ultima uguaglianza abbiamo usato la (2.24) e (2.28).

Vediamo ora alcune proprietà di queste funzioni. Il numero di zeri (o nodi) di $\langle x|n\rangle$ è n e il numero crescente di oscillazioni all'aumentare di n riflette la maggiore energia cinetica dello stato del sistema per n più grandi. Il valore atteso dell'energia cinetica è dato da

$$\frac{1}{2m}\langle p_x^2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \langle n|x \rangle \, \frac{d^2}{dx^2} \, \langle x|n \rangle, \tag{2.32}$$

mentre quello dell'energia potenziale è

$$\langle V(x)\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \langle n|x\rangle \, x^2 \, \langle x|n\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, x^2 \, |\langle x|n\rangle|^2. \tag{2.33}$$

Osserviamo che la prima è direttamente proporzionale ad n, al crescere di questo infatti aumentano gli zeri e la derivata seconda (si veda la Figura 2.1), da questo fatto segue la diretta proporzionalità di (2.32) con n.

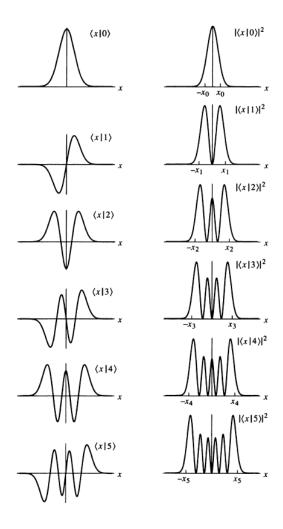


Figura 2.1: Grafico delle autofunzioni di energia $\langle x|n\rangle$ e le corrispondenti densità di probabilità $|\langle x|n\rangle|^2$ nello spazio delle posizioni per $n=0,\ldots,5$.

2.3 L'energia di punto zero

Una delle caratteristiche più importanti dell'oscillatore armonico è l'esistenza di uno stato energetico fondamentale $E_0 = \hbar \omega/2$ non nullo, noto anche come energia di punto zero. La particella nello stato fondamentale, come in ogni suo stato, ha un'incertezza sulla posizione Δx e sulla quantità di moto Δp non nulle; vediamo ora come queste incertezze influenzano il valore dell'energia allo stato fondamentale.

Per ogni stato

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{\Delta p_x^2 + \langle p_x \rangle^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x^2 + \langle x \rangle^2), \quad (2.34)$$

inoltre $\langle x \rangle$ e $\langle p_x \rangle$ si annullano entrambi in un autostato energetico del sistema, infatti

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n|(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger})|n\rangle$$
 (2.35)

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n} \langle n|n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \langle n|n+1 \rangle \right) = 0$$
 (2.36)

 \mathbf{e}

$$\langle n|\hat{p}_x|n\rangle = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\langle n|(\hat{a}-\hat{a}^{\dagger})|n\rangle$$
 (2.37)

$$=-i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\sqrt{n}\langle n|n-1\rangle-\sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle\right)=0. \qquad (2.38)$$

Si ha quindi che l'energia media in un autostato dipende soltanto dall'incertezza sulla quantità di moto e sulla posizione

$$\langle E \rangle = \frac{\Delta p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \,\Delta x^2. \tag{2.39}$$

Da quest'ultima equazione è evidente l'impossibilità di ottenere una configurazione del sistema - come nel caso classico in cui l'oscillatore è fermo e nel centro di oscillazione - in cui l'energia si annulli. Infatti per il principio di indeterminazione di Heisemberg

$$\Delta x \, \Delta p \ge \frac{\hbar}{2},\tag{2.40}$$

perciò l'energia minima del sistema è non nulla.

Calcoliamo ora Δx e Δp_x negli autostati e vediamo che, secondo le aspettative, sono direttamente proporzionali al livello energetico del sistema

$$\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^{\dagger})^2 | n \rangle$$
 (2.41)

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle + \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle \tag{2.42}$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \Big((n+1) + n \Big) \langle n|n \rangle = (n+1/2) \frac{\hbar}{m\omega}, \qquad (2.43)$$

$$\Delta p_x^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2 = \langle p_x^2 \rangle = -\frac{m\omega\hbar}{2} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^{\dagger})^2 | n \rangle \qquad (2.44)$$

$$= -\frac{m\omega\hbar}{2}\langle n| - \hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle + \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n| - \hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle \tag{2.45}$$

$$= \frac{m\omega\hbar}{2} \Big((n+1) + n \Big) \langle n|n\rangle = (n+1/2)m\omega\hbar, \tag{2.46}$$

si osservi che allo stato fondamentale si ha $\Delta x \Delta p_x = \hbar/2$ e quindi, come era lecito aspettarsi dalla (2.28), si ha il minimo di incertezza ed $\langle E \rangle = E_0$.

Un riscontro dei risultati appena ricavati si ha, ad esempio, nei cambiamenti di stato della materia. Una sostanza si trova allo stato liquido (o si liquefà) quando l'incertezza sulla posizione dei nuclei è comparabile alla loro distanza. Con la diminuzione della temperatura, diminuisce il numero di particelle con autostati vibrazionali maggiori, questo - in accordo con (2.43) - comporta una diminuzione di Δx e facilita il passaggio della sostanza dallo stato liquido a quello solido.

Tuttavia in alcuni casi (come quello dell'elio) Δx è elevata anche allo stato fondamentale, a causa della piccola massa degli atomi coinvolti e della loro debole attrazione reciproca (bassi valori di ω). Questo porta la sostanza a non solidificare anche a basse temperature; si rivela dunque necessario aumentare la pressione, la quale è direttamente proporzionale a ω .

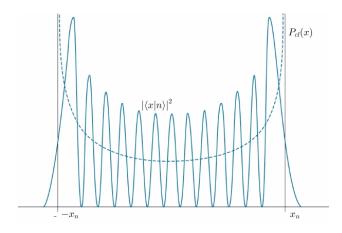
2.4 Il limite classico

Sebbene gli oscillatori armonici quantistici abbiano uno spettro energetico discreto e un energia di punto zero non nulla questo non si osserva a livello macroscopico, infatti il moto di un normale pendolo ci pare continuo e ben determinato. Come mai non notiamo questa discretizzazione a livello macroscopico?

Una risposta è possibile darla osservando le distribuzioni di probabilità previste dalle due teorie. In un moto armonico unidimensionale la particella oscilla entro i suoi *punti critici*, cioè quelli in cui la velocità è nulla e avviene un'inversione di moto:

$$x_n^2 = \frac{2E_n}{m\omega^2}. (2.47)$$

La probabilità classica che la particella si trovi nell'intervallo [x, x + dx]



con $x \in [-x_n, x_n]$ è direttamente proporzionale al tempo dt = dx/v in cui la particella si trova nell'intervallo; si ha quindi

$$P_{cl} dx \propto \frac{dx}{v} = \frac{dx}{\sqrt{2E_n/m - \omega^2 x^2}} = \frac{dx}{\omega \sqrt{x_n^2 - x^2}}.$$
 (2.48)

Imponendo che $\int_{-x_n}^{x_n} P_{cl} \, dx = 1$ si ottiene

$$P_{cl}(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x_n^2 - x^2}}. (2.49)$$

In figura sono rappresentate la densità di probabilità $|\langle x|n\rangle|^2$ (linea continua) e P_{cl} (linea tratteggiata), al crescere di n aumentano anche le oscillazioni di $|\langle x|n\rangle|^2$ e lo stato quantistico oscilla così rapidamente che a livello macroscopico si può percepire solamente il valor medio della probabilità ad esso associata, ben approssimato da P_{cl} .

Capitolo 3

Operatori di creazione e distruzione

Non tutti i sistemi quantistici possiedono un numero fissato di particelle interagenti con determinate forze tra loro; si pensi, ad esempio, al fenomeno del decadimento di un neutrone in un protone, un elettrone e un antineutrino. In questo capitolo provvederemo a definire un formalismo per descrivere questo tipo dei sistemi che, dal punto di vista matematico, si rivelerà simile a quello adottato per il caso dell'oscillatore armonico.

3.1 Sistemi composti da più particelle

Fino ad ora abbiamo analizziamo solamente il caso di una singola particella quantistica. In questa sezione consideriamo invece un sistema formato da due o più parti che, individualmente, costituiscono anch'esse un sistema quantistico; ad esempio un fascio di luce formato da diversi fotoni.

Consideriamo un sistema ST formato da due parti S e T. Vediamo com'è possibile descrivere lo spazio degli stati di ST. Supponiamo il sistema S si trovi nello stato $|\phi\rangle \in \mathscr{S}$ e T in $|\psi\rangle \in \mathscr{T}$, dove \mathscr{S} e \mathscr{T} sono rispettivamente lo spazio degli stati di S e di T. Denotiamo allora lo stato in cui si trova l'intero sistema con $|\phi\rangle|\psi\rangle$.

Se invece consideriamo fissato $|\phi\rangle$, lo stato $|\phi\rangle|\psi\rangle$ corrisponde a quello in cui il sottosistema S si trova nello stato $|\phi\rangle$ e il sottosistema T si troverà in un generico stato $|\psi\rangle \in \mathcal{F}$. Supporremo che le relazioni tra gli stati di ST siano le stesse di quelle tra gli stati di T, se $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ allora

$$|\phi\rangle(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1|\phi\rangle|\psi_1\rangle + c_2|\phi\rangle|\psi_2\rangle \tag{3.1}$$

e analogamente se $|\phi\rangle = c_1' |\phi_1\rangle + c_2' |\phi_2\rangle$:

$$(c_1'|\phi_1\rangle + c_2'|\phi_2\rangle)|\psi\rangle = c_1'|\phi_1\rangle|\psi\rangle + c_2'|\phi_2\rangle|\psi\rangle. \tag{3.2}$$

La (3.1) e (3.2) mostrano come $|\phi\rangle|\psi\rangle$ possa essere interpretato come una sorta di prodotto di $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$. Questo fatto, da un punto di vista fisico, mostra come un esperimento effettuato su un sottosistema possa essere effettuato in presenza del secondo sottosistema, senza condizionare quest'ultimo e viceversa.

Supponendo che non vi siano altri stati di ST oltre a quelli previsti dal principio di sovrapposizione, ogni stato di ST è della forma:

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle|\psi\rangle + |\phi'\rangle|\psi'\rangle + \dots \tag{3.3}$$

Definizione 3.1.1. Lo spazio degli stati di ST è denotato da $\mathscr{S} \otimes \mathscr{T}$ ed è chiamato **prodotto tensoriale** di \mathscr{S} e \mathscr{T} .

Un operatore \hat{A} definito su $\mathscr S$ e uno \hat{B} definito su $\mathscr S$ possono agire su $\mathscr S\otimes\mathscr S$ nel seguente modo:

$$\hat{A}'(|\phi\rangle|\psi\rangle) := (\hat{A} \otimes \hat{1})(|\phi\rangle|\psi\rangle) = (\hat{A}|\phi\rangle)|\psi\rangle, \tag{3.4}$$

$$\hat{B}'(|\phi\rangle|\psi\rangle) := (\hat{1} \otimes \hat{B})(|\phi\rangle|\psi\rangle) = |\phi\rangle(\hat{B}|\psi\rangle). \tag{3.5}$$

Perciò tutti gli operatori di \mathscr{S} commutano con quelli di \mathscr{T} . Si osservi che nel caso questi operatori siano relativi a degli osservabili, questo evidenzia il fatto che gli esperimenti su S non influenzino lo stato di T e viceversa.

Nel caso i due sottosistemi siano gli stessi, lo spazio $\mathscr{S} \otimes \mathscr{S}$ contiene un **operatore di scambio** \hat{X} . Quest'ultimo infatti scambia gli stati di due particelle:

$$\hat{X}(|\phi\rangle|\psi\rangle) = |\psi\rangle|\phi\rangle. \tag{3.6}$$

Ora, dato che i due sottosistemi sono identici, è impossibile distinguere lo stato $|\phi\rangle|\psi\rangle$ da $|\psi\rangle|\phi\rangle$. Perciò se $|\Psi\rangle\in\mathscr{S}\otimes\mathscr{S}$ allora $\hat{X}|\Psi\rangle$ descrive uno stato fisico indistinguibile da $|\Psi\rangle$ e quindi, per il Postulato I, è un suo multiplo scalare:

$$\hat{X}|\Psi\rangle = \varepsilon|\Psi\rangle. \tag{3.7}$$

Siccome $\hat{X}^2 = 1$ dev'essere $\varepsilon^2 = 1$ e quindi $\varepsilon = \pm 1$.

Definizione 3.1.2. Uno stato di $\mathscr{S} \otimes \mathscr{S}$ per il quale $\varepsilon = 1$ è chiamato simmetrico e dev'essere somma di stati della forma

$$|\phi\rangle|\psi\rangle + |\psi\rangle|\phi\rangle. \tag{3.8}$$

Uno stato di $\mathscr{S} \otimes \mathscr{S}$ per il quale $\varepsilon = -1$ è chiamato **antisimmetrico** e dev'essere somma di stati della forma

$$|\phi\rangle|\psi\rangle - |\psi\rangle|\phi\rangle. \tag{3.9}$$

Tuttavia ogni stato fisico dev'essere o simmetrico o antisimmetrico; non può essere una sovrapposizione di stati simmetrici e antisimmetrici. Se un sistema ammettesse stati simmetrici ed altri antisimmetrici, non potrebbe contenere una combinazione lineare di entrambi e ciò contraddirebbe il principio di sovrapposizione. Perciò per un determinato tipo di particella gli stati ammissibili o sono simmetrici o antisimmetrici.

In altri termini lo spazio degli stati per un sistema di due particelle non è $\mathscr{S} \otimes \mathscr{S}$, ma uno tra il suo sottospazio formato dagli stati simmetrici - il sottospazio simmetrico - e quello formato dagli stati antisimmetrici - il sottospazio antisimmetrico.

Queste due possibilità si verificano in base al tipo di particella in questione: le "particelle di materia" (leptoni, barioni e quarks) dette **fermioni**, possiedono sempre stati antisimmetrici; mentre le "particelle di forza" (fotoni, gluoni e particelle W e Z) i **bosoni**, hanno sempre stati simmetrici.

É facile ora estendere quanto detto a un sistema di n particelle. Il prodotto tensoriale n-esimo $\otimes^n \mathscr{S} = \mathscr{S} \otimes \cdots \otimes \mathscr{S}$ possiede, per ogni coppia (i,j) con $i,j=1,\ldots,n$, un operatore di scambio \hat{X}_{ij} tale che:

$$\hat{X}_{ij}(|\psi_1\rangle \dots |\psi_i\rangle \dots |\psi_j\rangle \dots |\psi_n\rangle) = |\psi_1\rangle \dots |\psi_j\rangle \dots |\psi_i\rangle \dots |\psi_n\rangle. \tag{3.10}$$

Allora se $|\Psi\rangle \in \otimes^n \mathscr{S}$ è lo stato di n bosoni

$$\hat{X}_{ij}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle, \quad , j = 1, \dots, n \tag{3.11}$$

Un vettore di stato di questo tipo è detto **totalmente simmetrico**. Mentre se $|\Psi\rangle$ è lo stato di n fermioni,

$$\hat{X}_{ij}|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle, \quad , j = 1, \dots, n \tag{3.12}$$

e in questo caso $|\Psi\rangle$ è detto **totalmente antisimmetrico.**

Definizione 3.1.3. Se $\otimes^n \mathscr{S}$ è lo spazio degli stati di n particelle, il suo sottospazio formato dagli stati totalmente simmetrici è detto **sottospazio simmetrico**. Il sottospazio di $\otimes^n \mathscr{S}$ formato dai vettori totalmente antisimmetrici è detto **sottospazio antisimmetrico**.

Possiamo quindi riassumere quanto detto nel seguente postulato

Postulato IV Se due sistemi S e T combinati formano un sistema ST, lo spazio degli stati di ST è detto prodotto tensoriale degli spazi degli stati di S e di T.

Ogni particella elementare è o un fermione o un bosone. Lo stato di un gruppo di particelle identiche è totalmente antisimmetrico se sono fermioni, totalmente simmetrico se sono bosoni.

3.2 Sistemi bosonici

Sia dato un sistema formato da un numero variabile di bosoni - particelle con spin intero - indistinguibili.

Sia \mathscr{S} lo spazio degli stati di una particella. Lo che descrive gli stati di due particelle è il sottospazio simmetrico di $\mathscr{S} \otimes \mathscr{S}$. In generale, r particelle uguali sono descritte dal sottospazio simmetrico di $\otimes^r \mathscr{S}$, che denoteremo con $\vee^r \mathscr{S}$.

Lo spazio totale degli stati del sistema considerato è quindi

$$\mathscr{U} = \mathscr{V} \oplus \mathscr{S} \oplus \vee^2 \mathscr{S} \oplus \vee^3 \mathscr{S} \oplus \dots, \tag{3.13}$$

dove \mathscr{V} è un sottospazio uno-dimensionale contenente soltanto lo stato $|0\rangle$ in cui non sono presenti particelle, chiamato perciò **stato di vuoto**.

Dato $|\psi\rangle \in \mathcal{S}$ sia \mathcal{U}_{ψ} il sottospazio di \mathcal{U} costituito dagli stati in cui ogni particella è nello stato $|\psi\rangle$; se denotiamo

$$|r\psi\rangle := |\psi\rangle|\psi\rangle\dots|\psi\rangle \in \vee^n\mathscr{S}$$
 (3.14)

allora $\mathcal{A} = \{|0\rangle, |\psi\rangle, |2\psi\rangle, \dots\}$ è una base di \mathscr{U}_{ψ} .

Come avevamo anticipato, il sottospazio \mathscr{U}_{ψ} ha la stessa struttura dello spazio degli stati dell'oscillatore armonico. Possiamo quindi introdurre l'operatore di distruzione \hat{a}_{ψ} :

$$\hat{a}_{\psi}|n\psi\rangle = \sqrt{n} |(n-1)\psi\rangle, \tag{3.15}$$

e l'operatore di creazione \hat{a}_{ψ}^{\dagger} :

$$\hat{a}_{\psi}^{\dagger}|n\psi\rangle = \sqrt{n+1}|(n+1)\psi\rangle. \tag{3.16}$$

Questi operatori possono essere estesi a tutto $\mathscr U$ nel seguente modo. Fissato

$$|n\psi,\phi_1,\ldots,\phi_m\rangle:=|\psi\rangle\ldots|\psi\rangle|\phi_1\rangle\ldots|\phi_m\rangle\in\vee^{n+m}\mathscr{S}$$

lo stato contenente n particelle nello stato $|\psi\rangle$ e m particelle rispettivamente negli stati $|\phi_i\rangle$ ortogonali a $|\psi\rangle$, \hat{a}_{ψ} e \hat{a}_{ψ}^{\dagger} agiscono su questo elemento lasciando invariati gli stati diversi da $|\psi\rangle$. Si ha quindi

$$\hat{a}_{\psi} = |n\psi, \phi_1, \dots, \phi_m\rangle = \sqrt{n} |(n-1)\psi, \phi_1, \dots, \phi_m\rangle$$
(3.17)

$$\hat{a}_{\psi}^{\dagger} = |n\psi, \phi_1, \dots, \phi_m\rangle = \sqrt{n+1} |(n+1)\psi, \phi_1, \dots, \phi_m\rangle$$
 (3.18)

Sia ora $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$... un insieme completo di stati di \mathscr{S} . Ciascuno di questi possiede un "sottospazio armonico" \mathscr{U}_i con annessi operatori \hat{a}_i , \hat{a}_i^{\dagger} , dove \mathscr{U}_i è il sottospazio di \mathscr{U} formato dagli stati in cui ogni particella si trova nello stato $|\psi_i\rangle$.

Osservazione 3.2.1. Si noti che il sottoinsieme \mathcal{B} di \mathscr{U} formato dagli stati $|n_1 n_2 \ldots\rangle$ contenenti n_i particelle dello stato $|\psi_i\rangle$ è anch'esso completo. Infatti ciascun $|\psi\rangle \in \mathscr{S}$ può essere scritto come $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle$, perciò un generico $|r\psi\rangle \in \vee^n \mathscr{S}$ è

$$|r\psi\rangle = \sum_{i} c_{i} |\psi_{i}\rangle \cdots \sum_{i} c_{i} |\psi_{i}\rangle = c_{1}^{r} |r_{1}\rangle + c_{1}^{r-1} c_{2} |(r-1)_{1} 1_{2}\rangle + \dots$$
 (3.19)

Perciò ogni stato di \mathscr{U}_{ψ} può essere scritto come combinazione di vettori del tipo $|n_1 n_2 ...\rangle$ e conseguentemente anche ogni vettore di \mathscr{U}_{ψ} può esserlo.

Proposizione 3.2.2. Se $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle...\}$ è ortonormale allora \mathcal{B} è ortonormale. Inoltre dall'osservazione precedente segue che se $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle...\}$ è una base ortonormale di \mathscr{S} allora \mathcal{B} è una base ortonormale di \mathscr{U} .

Dimostrazione. Scriviamo $|n_1 n_2 ...\rangle$ come

$$|n_1 n_2 \ldots\rangle = |\psi_1\rangle \ldots |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \ldots |\psi_2\rangle \ldots$$

Se $|n_1 n_2 \ldots\rangle \in \mathcal{B}$ allora

$$\langle \dots n_3 \, n_2 \, n_1 | n_1 \, n_2 \, n_3 \dots \rangle = \langle \dots n_3 \, n_2 | \langle \psi_1 | \dots \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \dots | \psi_1 \rangle | n_2 \, n_3 \dots \rangle$$
$$= \langle \dots n_3 \, n_2 | n_2 \, n_3 \dots \rangle,$$

poiché gli $(|\psi_i\rangle)$ sono ortonormali. Per induzione segue che

$$\langle \dots n_3 \, n_2 \, n_1 | n_1 \, n_2 \, n_3 \dots \rangle = 1.$$
 (3.20)

Siano $|n_1 n_2 ...\rangle$, $|n'_1 n'_2 ...\rangle \in \mathcal{B}$. Allora essendo stati diversi esiste i tale che $n_i \neq n'_i$, perciò chiamando j il minimo indice di questo tipo $(n_j > n'_i)$:

$$\langle \dots n_2 \, n_1 | n'_1 \, n'_2 \dots \rangle = \langle \dots n_{j+1} \, n_j | n'_j \, n'_{j+1} \dots \rangle$$

= $\langle \dots n_{j+1} \, (n_j - n'_j) | n'_{j+1} \dots \rangle = 0,$ (3.21)

poiché $|\psi_j\rangle$ e $|\psi_{j+1}\rangle$ sono ortogonali. Dunque \mathcal{B} è ortonormale.

Dalla proposizione precedente si ricava direttamente il seguente teorema.

Teorema 3.2.3. Lo spazio degli stati di un numero variabile di bosoni di un dato tipo può essere identificato come lo spazio di un fissato numero di oscillatori armonici distinguibili, uno per ogni stato indipendente dei bosoni.

Dimostrazione. Sia $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \dots\}$ una base ortonormale di \mathscr{L} . Per la proposizione precedente, \mathcal{B} (definita in 2.5.1) è una base di \mathscr{U} . Definiamo allora

$$\Phi:\mathscr{U}\to\bigotimes_{:}\mathscr{U}_{i}$$

come $\Phi(|n_1 n_2 \ldots\rangle) = |n_1\rangle |n_2\rangle \ldots$ con $|n_i\rangle \in \mathscr{U}_i$, dove \mathscr{U}_i è il sottospazio di \mathscr{U} formato dagli stati in cui ogni particella si trova nello stato $|\psi_i\rangle$. Φ è un isomorfismo di spazi vettoriali poiché i vettori della forma $|n_1\rangle |n_2\rangle \ldots$ generano $\bigotimes_i \mathscr{U}_i$.

Se le particelle del sistema non interagiscono tra loro, la loro energia totale è la somma delle loro energie individuali. Perciò se $|\psi\rangle$ è un autostato dell'Hamiltoniana di un singolo bosone, con energia $E, |n\psi\rangle$ è un autostato dell'Hamiltoniana dell'intero sistema avente autovalore nE.

Siccome nel sottospazio \mathscr{U}_{ψ} vale

$$\hat{H}|n\psi\rangle = n E |n\psi\rangle = E \,\hat{a}_{\psi}^{\dagger} \,\hat{a}_{\psi} |n\psi\rangle \tag{3.22}$$

per ogni $n\in\mathbb{N},$ l'Hamiltoniana nel sottospazio \mathscr{U}_{ψ} è

$$\hat{H} = E \,\hat{a}_{ab}^{\dagger} \,\hat{a}_{ab}. \tag{3.23}$$

Se $|\psi_i\rangle \in \mathscr{S}$ sono tutti autostati dell'Hamiltoniana di una particella, con energia E_i , allora lo stato $|n_1 n_2 \dots\rangle$ ha energia $n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots$; ragionando come sopra segue che l'Hamiltoniana di \mathscr{U} è

$$\hat{H} = \sum_{i} E_i \, \hat{a}_i^{\dagger} \, \hat{a}_i. \tag{3.24}$$

3.3 Sistemi fermionici

Analizziamo ora il caso precedente supponendo che le particelle in questione siano fermioni, quindi particelle con spin semi-intero.

Analogamente a quanto fatto sopra, denoteremo con $\wedge^r \mathcal{S}$ il sottospazio antisimmetrico di $\otimes^r \mathcal{S}$ e lo spazio totale degli stati di tutte le particelle sarà

$$\mathscr{U} = \mathscr{V}_0 \oplus \mathscr{S} \oplus \wedge^2 \mathscr{S} \oplus \wedge^3 \mathscr{S} \oplus \dots \tag{3.25}$$

In questo caso il sottospazio \mathcal{U}_{ψ} , formato dagli stati in cui le particelle occupano lo stato $|\psi\rangle$, è bidimensionale per il principio di esclusione di Pauli: due fermioni identici non possono occupare lo stesso stato. Perciò non sono ammissibili stati del tipo¹ $|r\psi\rangle$ e gli unici stati occupabili sono lo stato di vuoto $|0\rangle$ e $|\psi\rangle$ per una singola particella.

É possibile anche in questo caso definire gli operatori di creazione e distruzione con l'accortezza che \hat{a}_{ψ}^{\dagger} non crei un fermione nello stato $|\psi\rangle$ se questo è già occupato; per evitare ciò basta porre

$$\hat{a}_{\psi}|\psi\,\phi_1\,\phi_2\ldots\rangle = |\phi_1\,\phi_2\ldots\rangle, \quad \hat{a}_{\psi}|\phi_1\,\phi_2\ldots\rangle = 0, \quad (3.26)$$

$$\hat{a}_{\psi}^{\dagger} | \psi \, \phi_1 \, \phi_2 \dots \rangle = 0, \quad \hat{a}_{\psi}^{\dagger} | \phi_1 \, \phi_2 \dots \rangle = | \psi \, \phi_1 \, \phi_2 \dots \rangle, \tag{3.27}$$

dove $|\phi_i\rangle$ sono ortogonali a $|\psi\rangle$.

Questi operatori non soddisfano la relazione di commutazione (2.7), tuttavia godono di una simile proprietà di *anticommutazione*

$$\{\hat{a}_{\psi}, \, \hat{a}_{\psi}^{\dagger}\} = 1,$$
 (3.28)

¹Vedi (3.14).

e inoltre vale

$$\hat{a}_{\psi}^2 = (\hat{a}_{\psi}^{\dagger})^2 = 0. \tag{3.29}$$

Basta dimostrarlo per uno stato che contenga un fermione nello stato $|\psi\rangle$, in caso contrario il procedimento è simmetrico:

$$\{\hat{a}_{\psi}, \, \hat{a}_{\psi}^{\dagger}\} | \psi \, \phi_1 \, \phi_2 \dots \rangle = \hat{a}_{\psi} \hat{a}_{\psi}^{\dagger} | \psi \, \phi_1 \, \phi_2 \dots \rangle + \hat{a}_{\psi}^{\dagger} \hat{a}_{\psi} | \psi \, \phi_1 \, \phi_2 \dots \rangle$$
$$= 0 + \hat{a}_{\psi}^{\dagger} | \phi_1 \, \phi_2 \dots \rangle = | \psi \, \phi_1 \, \phi_2 \dots \rangle$$
(3.30)

$$\hat{a}_{\psi}^{2} | \psi \, \phi_{1} \, \phi_{2} \dots \rangle = \hat{a}_{\psi} | \phi_{1} \, \phi_{2} \dots \rangle = 0$$

$$(\hat{a}_{\psi}^{\dagger})^{2} | \psi \, \phi_{1} \, \phi_{2} \dots \rangle = \hat{a}_{\psi}^{\dagger}(0) = 0. \tag{3.31}$$

Sia ora $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$,... un insieme ortonormale completo di stati contenenti una particella. A ciascuno di questi corrispondono gli operatori \hat{a}_{ψ} e \hat{a}_{ψ}^{\dagger} soddisfacenti le due proprietà esposte sopra. Mostriamo adesso che gli \hat{a}_{ψ} anticommutano fra loro. Siano

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_i\rangle + |\psi_j\rangle), \quad |\theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_i\rangle + i|\psi_j\rangle)$$
 (3.32)

da cui

$$\hat{a}_{\phi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_i + \hat{a}_j), \quad \hat{a}_{\theta} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_i - i\,\hat{a}_j).$$
 (3.33)

Si osservi che anche questi ultimi due godono delle (3.28) e (3.29). Inoltre sostituendo la (3.33) nella (3.29) si ottiene

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_i\} = \{\hat{a}_i^{\dagger}, \hat{a}_i^{\dagger}\} = 0,$$
 (3.34)

mentre dalla (3.33) e (3.28) abbiamo

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^{\dagger}\} = 0 \quad se \quad i \neq j,$$
 (3.35)

perciò

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^{\dagger}\} = \delta_{ij}. \tag{3.36}$$

Osservazione 3.3.1. Il fatto che \hat{a}_i e \hat{a}_j anticommutino è normale trattando di fermioni. Infatti $\hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_j^{\dagger}|\Psi\rangle$ e $\hat{a}_j^{\dagger}\hat{a}_i^{\dagger}|\Psi\rangle$ differiscono per uno scambio di due particelle e quindi per un fattore -1.

La formula (3.24) per l'energia del sistema di particelle non interagenti è esaustiva e applicabile anche nel caso di fermioni. Anche l'isomorfismo introdotto nel teorema 2.5.3 vale, con l'eccezione che ogni singolo spazio \mathcal{U}_i non è quello di un oscillatore armonico ma uno spazio bidimensionale generato da $|0\rangle$ e $|\psi_i\rangle$.

Dalle relazioni (3.34) e (3.35) segue che vi è una totale simmetria tra gli

operatori di creazione e distruzione per i fermioni (almeno nel caso finito-dimensionale) e ciò non vale nel caso di bosoni. Per un bosone infatti gli operatori di distruzione possiedono un vettore simultaneo, ossia un vettore che è autostato di tutti gli \hat{a}_i , nullo. Questo autostato è lo stato di vuoto $|0\rangle$. D'altro canto, per un fermione, gli operatori di creazione possiedono un vettore simultaneo nullo corrispondente a $|\Omega\rangle = \hat{a}_1^{\dagger} \dots \hat{a}_N^{\dagger} |0\rangle$ (dove N è la dimensione dello spazio \mathscr{S}). $|\Omega\rangle$ è l'unico stato in cui tutti gli stati mono-particella sono occupati.

Ciò implica che qualunque stato può essere ottenuto applicando \hat{a} ad $|\Omega\rangle$ oppure \hat{a}^{\dagger} ad $|0\rangle$. I "buchi" formati da \hat{a} in $|\Omega\rangle$ in certi casi - come nei semiconduttori - si comportano come particelle con carica opposta a quella di quelle di partenza.

Capitolo 4

Accenno alla teoria quantistica dei campi

In questo capitolo vedremo com'è possibile riscrivere le equazioni di un campo in termini quantistici, tale operazione è detta *quantizzazione* del campo in oggetto.

Nello specifico tratteremo il caso del campo elettromagnetico, successivamente ci si occuperà invece di un campo scalare generico.

In quest'ultima parte verranno presupposte alcune nozioni di meccanica quantistica relative alla rappresentazione di Schrödinger e del formalismo relativistico quadrivettoriale.

4.1 L'Hamiltoniana del campo elettromagnetico

In questa sezione utilizzeremo il potenziale vettoriale per mostrare come l'Hamiltoniana del campo elettromagnetico possa essere espressa come quella di una collezione di oscillatori armonici.

Gli operatori \hat{a}^{\dagger} , \hat{a} , che abbiamo già incontrato, in questo caso particolare si riveleranno essere gli operatori di creazione e distruzione dei fotoni: i quanti di energia associati alla radiazione elettromagnetica.

Secondo la teoria classica dell'elettromagnetismo il campo elettrico $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ e magnetico $\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$, nel vuoto e in assenza di materiali magnetici, soddisfano

le equazioni di Maxwell¹

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \rho \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \left(4\pi \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right), \end{cases}$$
(4.1)

dove ρ e **j** sono rispettivamente la densità di carica e di corrente del materiale che genera i campi e c è la velocità della luce.

Introduciamo ora due campi ausiliari per esprimere i campi fisici \mathbf{E} e \mathbf{B} : il potenziale vettoriale $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$, e il potenziale scalare $\varphi(\mathbf{r},t)$. Dalla legge di Gauss per il magnetismo

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \tag{4.2}$$

segue che possiamo scrivere

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \tag{4.3}$$

in quanto la divergenza del rotore di un campo è identicamente nulla. Quindi la legge di Faraday

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \tag{4.4}$$

diventa

$$\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0, \tag{4.5}$$

e siccome il rotore del gradiente di un campo è identicamente nullo, possiamo scrivere

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}.\tag{4.6}$$

Definizione 4.1.1. I campi **A** e φ definiti implicitamente in (4.3) e (4.6) sono chiamati **potenziali elettromagnetici**.

Possiamo riscrivere le equazioni di Maxwell in funzione di questi due potenziali. La legge di Gauss

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \rho \tag{4.7}$$

diventa

$$-\nabla^2 \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{A} = 4\pi \rho, \tag{4.8}$$

mentre sostituendo la (4.3) e (4.6) nella legge di Ampère

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t},\tag{4.9}$$

¹Espresse nel sistema di unità di misura di Gauss.

otteniamo

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(-\nabla \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right), \tag{4.10}$$

dove al primo membro si è usata l'identità del doppio prodotto vettoriale:

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}), \quad \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3.$$
 (4.11)

La (4.8) e (4.10) descrivono la propagazione dei due potenziali e sono anche dette *equazioni elettrodinamiche*. Possono essere riscritte in modo disaccoppiato mediante la gauge di Coulomb, che impone la condizione

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \tag{4.12}$$

Ciò permette di riscrivere la (4.8) come

$$\nabla^2 \varphi = -4\pi \rho \tag{4.13}$$

la cui soluzione è

$$\varphi(\mathbf{r},t) = \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$
 (4.14)

Si noti che la (4.14) coincide con l'espressione di un potenziale scalare dovuto a una distribuzione di carica ρ in elettrostatica, da questo il nome della gauge adottata. Tuttavia in questo modo non ci si è ristretti a una distribuzione di carica statica e perciò il potenziale nel punto \mathbf{r} al tempo t dipende da $\rho(\mathbf{r}',t)$ nello stesso istante. Non ci sono dunque effetti di ritardo dovuti al tempo $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/c$ necessario a una variazione in ρ nel punto \mathbf{r}' per cambiare il valore del campo nel punto \mathbf{r} . L'assenza di effetti di questo tipo in questa gauge sottolinea il fatto che gli effetti fisici dipendono direttamente da $\mathbf{E} \in \mathbf{B}$ e non dai campi ausiliari introdotti, i quali possono sempre essere alterati da un'altra trasformazione di gauge.

Esaminiamo ora l'Hamiltoniana di un campo elettromagnetico isolato, ossia in assenza di cariche e correnti esterne ($\rho = 0$, $\mathbf{j} = \mathbf{0}$). In tal caso l'energia della radiazione è

$$H_{E\&M} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2).$$
 (4.15)

Inoltre dalla (4.14) ricaviamo che in assenza di cariche si ha $\varphi=0$, per (4.6) vale $\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}$; sostituendo

$$H_{E\&M} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r \left[\left(-\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 + (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right]. \tag{4.16}$$

L'equazione (4.10) per il potenziale vettore nella gauge di Coulomb in assenza di cariche e correnti diventa

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{A} = 0, \tag{4.17}$$

una cui soluzione particolare è data dall'onda piana

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \, e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)},\tag{4.18}$$

con $\omega = kc$. Si osservi inoltre che per la scelta della gauge vale la condizione

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0 \, e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = 0, \tag{4.19}$$

da cui $\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0 = 0$ ossia \mathbf{A} è ortogonale alla direzione di propagazione.

Una soluzione generale della (4.17) può essere ottenuta sovrapponendo le diverse soluzioni d'onda piane. Questa sovrapposizione è resa con un integrale su tutti i possibili valori di \mathbf{k} , tuttavia per la nostra trattazione è equivalente e più comodo imporre una discretizzazione dei valori assumibili da \mathbf{k} e lavorare così con una somma.

Assumiamo ad esempio di restringerci a un cubo di lato L in cui \mathbf{A} è soggetto a condizioni di periodicità. Imponiamo quindi

$$e^{ik_x x} = e^{ik_x(x+L)} \Leftrightarrow k_x L = 2\pi n_x, \quad n_x \in \mathbb{Z}$$

$$e^{ik_y y} = e^{ik_y(y+L)} \Leftrightarrow k_y L = 2\pi n_y, \quad n_y \in \mathbb{Z}$$

$$e^{ik_z z} = e^{ik_z(z+L)} \Leftrightarrow k_z L = 2\pi n_z, \quad n_z \in \mathbb{Z}$$

$$(4.20)$$

Osservazione 4.1.2. Si noti che $n_{x,y,z}$ variano da $-\infty$ a $+\infty$ e che se consideriamo

$$\lim_{L \to \infty} \Delta k_{x,y,z} = \lim_{L \to \infty} \frac{2\pi}{L} = 0. \tag{4.21}$$

Perciò se $L \to \infty$ e il volume V che stiamo considerando tende a infinito, i $\Delta k_{x,y,z}$ sono infinitesimi e i valori dei $k_{x,y,z}$ sono continui come ci si aspetta.

La soluzione generale della (4.17) è quindi

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \left(c_{\mathbf{k},\lambda} \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k},\lambda) \frac{e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}}{\sqrt{V}} + \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}} \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k},\lambda) \frac{e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}}{\sqrt{V}} \right) \tag{4.22}$$

Il versore $\varepsilon(\mathbf{k}, \lambda)$ indica la direzione di \mathbf{A} per ogni valore di \mathbf{k} ed è ortogonale a quest'ultimo, infatti dalla condizione di gauge (4.12) segue

$$\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, \lambda) = 0. \tag{4.23}$$

Scegliamo $\varepsilon(\mathbf{k}, 1)$ e $\varepsilon(\mathbf{k}, 2)$ due vettori unitari tali che $\{\varepsilon(\mathbf{k}, 1), \varepsilon(\mathbf{k}, 2), \mathbf{k}/|\mathbf{k}|\}$ sia una terna destrorsa di vettori ortonormali.

I fattori $c_{\mathbf{k},\lambda}$ sono coefficienti introdotti per garantire l'arbitrarietà delle ampiezze delle onde piane; si osservi che la presenza del complesso coniugato $\overline{c_{\mathbf{k},\lambda}}$ garantisce che \mathbf{A} sia un campo reale.

Abbiamo così introdotto tutti gli strumenti per analizzare l'Hamiltoniana (4.16). Il primo termine diventa

$$\frac{1}{8\pi} \int d^{3}r \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \cdot \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

$$= \frac{1}{8\pi} \int d^{3}r \sum_{\mathbf{k},\lambda} \left(\frac{-i\omega}{c} c_{\mathbf{k},\lambda} \varepsilon(\mathbf{k},\lambda) \frac{e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}}{\sqrt{V}} + \frac{i\omega}{c} \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}} \varepsilon(\mathbf{k},\lambda) \frac{e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}}{\sqrt{V}} \right)$$

$$\cdot \sum_{\mathbf{k}',\lambda'} \left(\frac{-i\omega'}{c} c_{\mathbf{k}',\lambda'} \varepsilon(\mathbf{k}',\lambda') \frac{e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega't)}}{\sqrt{V}} + \frac{i\omega'}{c} \overline{c_{\mathbf{k}',\lambda'}} \varepsilon(\mathbf{k}',\lambda') \frac{e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega't)}}{\sqrt{V}} \right).$$
(4.24)

Dimostriamo ora una relazione di ortonormalità utile per semplificare quest'ultima equazione.

Lemma 4.1.3. Se valgono delle condizioni di periodicità come quelle in (4.20) allora

$$\int d^3r \left(\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}\right)^{\dagger} \left(\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}\right) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'},\tag{4.25}$$

dove l'integrale è eseguito su tutto lo spazio.

Dimostrazione. Se $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ l'asserto è banale in quanto l'integrale diventa $\int \frac{d^3r}{V} = \frac{V}{V} = 1$. Nel caso $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ la (4.25) diventa

$$\int d^3r \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}}{V} \tag{4.26}$$

osserviamo che vale

$$(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r} = \frac{2\pi}{L} (n_x - n_x') r_x + \frac{2\pi}{L} (n_y - n_y') r_y + \frac{2\pi}{L} (n_z - n_z') r_z, \quad \mathbf{r} = (r_x, r_y, r_z)^T.$$
(4.27)

Per il teorema di Fubini possiamo considerare l'integrale di partenza come il prodotto di tre integrali nelle diverse componenti. Siccome $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ esiste una componente, supponiamo x, per cui $k_x \neq k_x'$ e quindi

$$\int_{-L}^{+L} e^{\frac{2\pi}{L}i(n_x - n_x')r_x} dr_x = \left| \frac{e^{\frac{2\pi}{L}i(n_x - n_x')r_x}}{\frac{2\pi}{L}i(n_x - n_x')} \right|_{-L}^{+L} = \frac{e^{2\pi i(n_x - n_x')} - e^{-2\pi i(n_x - n_x')}}{\frac{2\pi}{L}i(n_x - n_x')}$$

$$= \frac{\cos(2\pi(n_x - n_x')) - \cos(-2\pi(n_x - n_x'))}{\frac{2\pi}{L}i(n_x - n_x')} = 0.$$
(4.28)

Abbiamo quindi la tesi.

Uno dei quattro termini derivanti dal prodotto tra le sommatorie in (4.24) si può riscrivere quindi così

$$\frac{1}{8\pi} \int d^3r \sum_{\mathbf{k},\lambda} \left(\frac{-i\omega}{c} c_{\mathbf{k},\lambda} \, \varepsilon(\mathbf{k},\lambda) \frac{e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}}{\sqrt{V}} \right) \cdot \sum_{\mathbf{k}',\lambda'} \left(\frac{i\omega'}{c} \overline{c_{\mathbf{k}',\lambda'}} \, \varepsilon(\mathbf{k}',\lambda') \frac{e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega' t)}}{\sqrt{V}} \right) \\
= \frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \sum_{\mathbf{k}',\lambda'} \left(\frac{-i\omega}{c} c_{\mathbf{k},\lambda}(t) \, \varepsilon(\mathbf{k},\lambda) \right) \cdot \left(\frac{i\omega'}{c} \overline{c_{\mathbf{k}',\lambda'}}(t) \, \varepsilon(\mathbf{k}',\lambda') \right) \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \\
= \frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \sum_{\lambda'} \frac{\omega^2}{c^2} c_{\mathbf{k},\lambda} \, \overline{c_{\mathbf{k},\lambda'}} \, \varepsilon(\mathbf{k},\lambda) \cdot \varepsilon(\mathbf{k},\lambda') \\
= \frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \sum_{\lambda'} \frac{\omega^2}{c^2} c_{\mathbf{k},\lambda} \, \overline{c_{\mathbf{k},\lambda'}} \, \delta_{\lambda,\lambda'} = \frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \frac{\omega^2}{c^2} c_{\mathbf{k},\lambda} \, \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}}, \tag{4.29}$$

dove nella prima uguaglianza abbiamo usato il lemma precedente.

Il secondo è invece

$$\frac{1}{8\pi} \int d^3r \sum_{\mathbf{k},\lambda} \left(\frac{i\omega}{c} \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}} \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k},\lambda) \frac{e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}}{\sqrt{V}} \right) \cdot \sum_{\mathbf{k}',\lambda'} \left(\frac{-i\omega'}{c} c_{\mathbf{k}',\lambda'} \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}',\lambda') \frac{e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega' t)}}{\sqrt{V}} \right) \\
= \frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \sum_{\mathbf{k}',\lambda'} \left(\frac{i\omega}{c} \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}}(t) \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k},\lambda) \right) \cdot \left(\frac{-i\omega'}{c} c_{\mathbf{k}',\lambda'}(t) \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}',\lambda') \right) \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \\
= \frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \sum_{\lambda'} \frac{\omega^2}{c^2} \, c_{\mathbf{k},\lambda'} \, \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}} \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k},\lambda) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k},\lambda') \\
= \frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \sum_{\lambda'} \frac{\omega^2}{c^2} \, c_{\mathbf{k},\lambda'} \, \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}} \, \delta_{\lambda,\lambda'} = \frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \frac{\omega^2}{c^2} \, c_{\mathbf{k},\lambda} \, \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}} \,, \tag{4.30}$$

Si osservi che i restanti due termini sono dipendenti dal tempo:

$$\frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \sum_{\mathbf{k}',\lambda'} \left(\frac{-\omega\omega'}{c^2} c_{\mathbf{k},\lambda}(t) c_{\mathbf{k}',\lambda'}(t) \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k},\lambda) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}',\lambda') \right) \frac{e^{i[(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}-(\omega+\omega')t]}}{V} \tag{4.31}$$

$$\frac{1}{8\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \sum_{\mathbf{k}',\lambda'} \left(\frac{-\omega\omega'}{c^2} \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}}(t) \overline{c_{\mathbf{k}',\lambda'}}(t) \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k},\lambda) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}',\lambda') \right) \frac{e^{-i[(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}-(\omega+\omega')t]}}{V} \tag{4.32}$$

Tuttavia, siccome l'Hamiltoniana totale per un sistema chiuso dev'essere indipendente dal tempo, si ha che essi si elidono con il contributo del campo elettrico dipendente dal tempo, ottenuto da

$$\frac{1}{8\pi} \int d^3 r (\nabla \times \mathbf{A})^2. \tag{4.33}$$

Inoltre si verifica che il contributo indipendente dal tempo della (4.33) è pari alla somma di quelli in (4.29) e (4.30). Abbiamo quindi

$$H = \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \frac{\omega^2}{c^2} c_{\mathbf{k},\lambda} \, \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}} \tag{4.34}$$

dato che i termini dipendenti dal tempo si elidono, cosa prevedibile visto che l'Hamiltoniana di un sistema chiuso è indipendente dal tempo.

Possiamo rendere la (4.34) più familiare operando il seguente cambio di variabile

$$q_{\mathbf{k},\lambda} = \frac{1}{2c\sqrt{\pi}}(c_{\mathbf{k},\lambda} + \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}}) \qquad p_{\mathbf{k},\lambda} = \frac{-i\omega}{2c\sqrt{\pi}}(c_{\mathbf{k},\lambda} - \overline{c_{\mathbf{k},\lambda}})$$
(4.35)

da cui

$$c_{\mathbf{k},\lambda} = c\sqrt{\pi} \frac{\omega \, q_{\mathbf{k},\lambda} + i \, p_{\mathbf{k},\lambda}}{\omega} \qquad c_{\mathbf{k},\lambda} = c\sqrt{\pi} \, \frac{\omega \, q_{\mathbf{k},\lambda} - i \, p_{\mathbf{k},\lambda}}{\omega}. \tag{4.36}$$

L'Hamiltoniana del campo elettromagnetico può essere quindi essere scritta come

$$H = \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \left(c\sqrt{\pi} \frac{\omega \, q_{\mathbf{k},\lambda} + i \, p_{\mathbf{k},\lambda}}{\omega} \right) \left(c\sqrt{\pi} \, \frac{\omega \, q_{\mathbf{k},\lambda} - i \, p_{\mathbf{k},\lambda}}{\omega} \right) \tag{4.37}$$

$$= \sum_{\mathbf{k},\lambda} \left(\frac{p_{\mathbf{k},\lambda}^2}{2} + \frac{1}{2} \omega^2 q_{\mathbf{k},\lambda}^2 \right). \tag{4.38}$$

ossia la somma delle Hamiltoniane di una collezione di oscillatori armonici indipendenti.

Nel prossimo paragrafo sfrutteremo questo risultato. Applicandovi quanto studiato nel secondo capitolo, si potrà così quantizzare il campo elettromagnetico riscrivendolo in termini operatoriali propri della teoria quantistica.

4.2 Quantizzazione del campo elettromagnetico

Siccome $q_{\mathbf{k},\lambda}$ e $p_{\mathbf{k},\lambda}$ definite in (4.35) sono variabili indipendenti che descrivono il campo, possiamo quantizzare quest'ultimo promuovendoli ad operatori soddisfacenti le relazioni di commutazione

$$[\hat{q}_{\mathbf{k},\lambda}, \hat{p}_{\mathbf{k},\lambda}] = i\hbar \, \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \, \delta_{\lambda,\lambda'}; \tag{4.39}$$

ovviamente in tal modo segue dalla (4.36) che anche ai $c_{\mathbf{k},\lambda}$ e ai $\overline{c_{\mathbf{k},\lambda}}$ corrispondano degli operatori, rispettivamente $\hat{c}_{k,\lambda}$ e $\hat{c}_{k,\lambda}^{\dagger}$.

Chiaramente gli operatori maggiormente adatti a trattare di oscillatori armonici sono come in (2.5),

$$\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^{\dagger} = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q}_{\mathbf{k},\lambda} - \frac{i}{\omega} \hat{p}_{\mathbf{k},\lambda} \right), \qquad \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(\hat{q}_{\mathbf{k},\lambda} + \frac{i}{\omega} \hat{p}_{\mathbf{k},\lambda} \right). \tag{4.40}$$

Possiamo quindi riscrivere gli operatori iniziali come

$$\hat{q}_{\mathbf{k},\lambda} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} + \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^{\dagger} \right), \qquad \hat{p}_{\mathbf{k},\lambda} = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} - \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^{\dagger} \right); \qquad (4.41)$$

confrontare quest'ultima con la (4.35) suggerisce le due sostituzioni:

$$c\sqrt{\frac{2\pi 1h}{\omega}}\,\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} \leadsto \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda} \qquad c\sqrt{\frac{2\pi 1h}{\omega}}\,\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^{\dagger} \leadsto \hat{c}_{\mathbf{k},\lambda}^{\dagger}$$
 (4.42)

e perciò il potenziale vettore $classico~\mathbf{A}$ viene sostituito dall'operatore Hermitiano $\hat{\mathbf{A}}$

$$\hat{\mathbf{A}} = \sum_{\mathbf{k},\lambda} c \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k},\lambda) \frac{e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}}{\sqrt{V}} + \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^{\dagger} \, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k},\lambda) \frac{e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}}{\sqrt{V}} \right). \quad (4.43)$$

Si osservi che avendo promosso $c_{\mathbf{k},\lambda}$ e $\overline{c_{\mathbf{k},\lambda}}$ a operatori questi in generale non commutano e per ricavare l'operatore Hamiltoniano \hat{H} bisogna procedere valutando (4.43) in (4.38) e non sostituendo direttamente (4.42) in (4.38)². Si ha

$$\hat{H} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r \left\{ \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \hat{\mathbf{A}}}{\partial t} \right)^2 + \left(\nabla \times \hat{\mathbf{A}} \right)^2 \right\}$$
 (4.44)

e da questo si ottiene

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\lambda} \hbar \omega \left(\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} \, \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^{\dagger} + \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^{\dagger} \, \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} \right) \tag{4.45}$$

$$= \sum_{\mathbf{k},\lambda} \hbar \omega \left(\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^{\dagger} \, \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} + \frac{1}{2} \right), \tag{4.46}$$

dove nella seconda uguaglianza è stata usata la relazione di commutazione $[\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda},\,\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k},\lambda}]=\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\,\delta_{\lambda,\lambda'}$ derivante dalla (2.7).

Come avevamo già osservato alla fine della sezione 3.1, il campo elettromagnetico può essere visto come una collezione di oscillatori armonici, ognuno dei quali è associato a diversi \mathbf{k} e $\lambda(=1,2)$ e ha frequenza $\omega=k\,c$. Ogni oscillatore corrisponde allo stato di un fotone con due stati di polarizzazione per ogni direzione di propagazione; l'energia di ogni stato del fotone è il quanto del corrispondente oscillatore $\hbar\omega$.

²Effettivamente si può verificare che i due risultati sono diversi!

Perciò l'aggiunta o rimozione di un fotone corrisponde a un incremento/decremento energetico di $\hbar\omega$, tuttavia quest'uguaglianza vale soltanto per le variazioni di energia: l'energia totale dell'insieme degli oscillatori non è uguale alla somma di quelle dei fotoni per via dell'energia di punto zero (allo stato fondamentale) degli oscillatori, cioè $\frac{1}{2}\hbar\omega$.

Osserviamo infatti che con un numero infinito di oscillatori si avrebbe un'energia di punto zero infinita, che tuttavia è costante e priva di significato fisico.

Questo inconveniente può essere risolto mediante la scelta di un **ordinamento normale**, ossia ponendo tutti gli operatori di creazione alla sinistra di quelli di distruzione. Nel caso della (4.45) otteniamo $\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \hbar \omega (\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k},\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda})$ invece di $\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \hbar \omega (\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k},\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} + \frac{1}{2})$ cosicché $\hat{H}|0\rangle = 0$.

4.3 Quantizzazione di un campo scalare

Abbiamo visto come, il meccanica quantistica, le quantità classiche siano tradotti in operatori. In quest'ultima parte, nella quantizzazione di un campo scalare, vedremo come anche i valori scalare relativi a una particella quantistica - i valori della funzione d'onda - diventino loro stessi operatori $\hat{\phi}(\mathbf{r})$. Per questo motivo la formulazione della teoria quantistica per insiemi di particelle è chiamata **seconda quantizzazione.**

4.3.1 Seconda quantizzazione

Per un sistema di bosoni che si muovono nello spazio, come visto nella sezione 3.1, lo spazio degli stati è dato da (2.52) e possiede operatori di distruzione e creazione \hat{a} e \hat{a}^{\dagger} per ogni funzione d'onda $\psi \in \mathscr{S}$. Denotiamo un generico stato di n particelle con

$$|\psi_1 \dots \psi_n\rangle := S(|\psi_1|\rangle \dots |\psi_n\rangle), \tag{4.47}$$

dove S è l'operatore di simmetrizzazione.

É possibile definire l'azione dell'operatore di distruzione \hat{a}_{ψ} in modo più generale rispetto a (2.54) come

$$\hat{a}_{\psi}|\psi_{1}\dots\psi_{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\{\langle\psi|\psi_{1}\rangle|\psi_{2}\dots\psi_{n}\rangle + \langle\psi|\psi_{2}\rangle|\psi_{1}\psi_{3}\dots\psi_{n}\rangle + \dots\}. (4.48)$$

Questo ha senso non solo per tutte le funzioni d'onda $\psi \in \mathscr{S}$, ma anche per ogni $\langle \psi |$; in particolare per $\langle \delta_{\mathbf{r}} |$, il bra per cui vale

$$\langle \delta_{\mathbf{r}} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}). \tag{4.49}$$

Questo porta a un operatore di distruzione per ogni punto dello spazio

$$\hat{a}_{\delta_{\mathbf{r}}}|\psi_{1}\dots\psi_{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\{\langle\delta_{\mathbf{r}}|\psi_{1}\rangle|\psi_{2}\dots\psi_{n}\rangle + \langle\delta_{\mathbf{r}}|\psi_{2}\rangle|\psi_{1}\psi_{3}\dots\psi_{n}\rangle + \dots\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n}} \{ \psi_1(\mathbf{r}) | \psi_2 \dots \psi_n \rangle + \psi_2(\mathbf{r}) | \psi_1 \psi_3 \dots \psi_n \rangle + \dots \}. \quad (4.50)$$

Denotiamo $\hat{a}_{\delta_{\mathbf{r}}}$ con $\hat{\phi}(\mathbf{r})$, quest'ultimo è un operatore in funzione della posizione ossia un **campo quantistico**. Introduciamo l'operazione di creazione per lo stato descritto dalla funzione d'onda f come³

$$\hat{\phi}^{\dagger}[f] = \int f(\mathbf{r})\phi^{\dagger}(\mathbf{r}) d^{3}\mathbf{r}; \qquad (4.51)$$

allora il campo quantistico $\hat{\phi}^{\dagger}(\mathbf{r})$ può essere pensato come l'operatore di creazione di un ipotetico stato di una particella localizzata precisamente in \mathbf{r} .

Un'analoga costruzione si può ripetere per gli autobra $\langle \varepsilon_{\mathbf{r}} |$; definiamo l'operatore di distruzione $\hat{a}(\mathbf{k})$ come

$$\hat{a}(\mathbf{k})|\psi_1\dots\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{i=1}^n \langle \varepsilon_{\mathbf{r}}|\psi_i\rangle|\psi_1\dots\psi_{i-1}\psi_{i+1}\dots\psi_n\rangle$$
 (4.52)

dove la funzione d'onda dell'autostato del momento è $(2\pi)^{-\frac{3}{2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Siccome $\langle \varepsilon_{\mathbf{r}}|\psi_i\rangle = (2\pi)^{-3/2}\int \psi_i(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d^3\mathbf{r}$,

$$\hat{a}(\mathbf{k})|\psi_{1}\dots\psi_{n}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{\sqrt{n}} \int d^{3}\mathbf{r} \, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{i=1}^{n} \psi_{i}(\mathbf{r})|\psi_{1}\dots\psi_{i-1}\psi_{i+1}\dots\psi_{n}\rangle$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^{3}\mathbf{r} \, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\phi}(\mathbf{r})|\psi_{1}\dots\psi_{n}\rangle; \tag{4.53}$$

perciò $\hat{a}(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int \phi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}$ è la trasformata di Fourier di $\hat{\phi}(\mathbf{r})$. Per il teorema di inversione di Fourier, possiamo scrivere

$$\hat{\phi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \hat{a}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k}$$
 (4.54)

Consideriamo ora questi operatori nella rappresentazione di Heisemberg. Gli operatori di campo sono espressi quindi in forma dipendente dal tempo e soddisfano l'equazione differenziale⁴:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\phi}(\mathbf{r},t) = [\hat{\phi}(\mathbf{r},t), \hat{H}].$$
 (4.55)

Supponiamo per semplicità che l'Hamiltoniana sia quella di una teoria non-relativistica che descrive il moto di particelle in un potenziale V. La restrizione al sottospazio che descrive lo stato di n particelle è

$$\hat{H}_n = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right). \tag{4.56}$$

³Non è possibile introdurre $\hat{\phi}^{\dagger}$ "esplicitamente" poiché questo di fatto non esiste. Esso ha senso soltanto moltiplicato a una funzione liscia e poi integrato (da ciò la definizione).

⁴Per semplicità abbiamo posto $\hbar = 1$.

Nel caso di una funzione d'onda per una singola particella scriviamo

$$\tilde{\psi} = \hat{H}\psi = -\frac{1}{2m}\nabla^2\psi + V\psi; \tag{4.57}$$

allora

$$[\hat{\phi}(\mathbf{r}), \, \hat{H}]|\psi_{1} \dots \psi_{n}\rangle = \sum_{i} \hat{\phi}(\mathbf{r})|\psi_{1} \dots \tilde{\psi}_{i} \dots \psi_{n}\rangle$$

$$- \sum_{i} \hat{H}\psi_{i}(\mathbf{r})|\psi_{1} \dots \psi_{i-1} \psi_{i+1} \dots \psi_{n}\rangle$$

$$= \sum_{i} \tilde{\psi}_{i}(\mathbf{r})|\psi_{1} \dots \psi_{i-1} \psi_{i+1} \dots \psi_{n}\rangle$$

$$= \left[-\frac{1}{2m}\nabla^{2} + V(\mathbf{r})\right]\hat{\phi}(\mathbf{r})|\psi_{1} \dots \psi_{n}\rangle. \tag{4.58}$$

Perciò

$$i\frac{\partial\hat{\phi}}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\nabla^2\hat{\phi} + V\hat{\phi} \tag{4.59}$$

e quindi $\phi(\mathbf{r},t)$ soddisfa l'equazione di Schrödinger.

Nel caso di una particella libera, in cui V=0, è possibile determinare esplicitamente la dipendenza dal tempo degli operatori $\hat{a}(\mathbf{k})$ nella rappresentazione di Heisemberg. Applicando l'equazione d'onda (4.59), considerata all'istante t, alla (4.54) abbiamo

$$\frac{i}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{\partial}{\partial t} \int \hat{a}(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k} = -\frac{1}{2m(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \nabla^2 \int \hat{a}(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k}$$
 (4.60)

$$\int i \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 \mathbf{k} = \int \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \hat{a}(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 \mathbf{k}$$
(4.61)

da cui

$$\hat{a}(\mathbf{k}, t) = \hat{a}(\mathbf{k})e^{-iEt}, \qquad E = \mathbf{k}^2/2m.$$
 (4.62)

Perciò per particelle non relativistiche si ha

$$\hat{\phi}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \hat{a}(\mathbf{k}) e^{-iEt + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k}, \qquad (4.63)$$

dove $E = E(\mathbf{k})$ è l'energia cinetica di una particella con momento \mathbf{k} .

Vediamo ora come i problemi della dinamica quantistica possono essere riformulati nei termini di $\hat{\phi}$. Secondo l'approccio di Schrödinger il problema è spesso quello di calcolare la funzione d'onda di una particella dopo un intervallo di tempo t e a partire da un dato stato iniziale, la risposta si può formulare come l'elemento di una matrice $\psi(\mathbf{r},t) = \langle \delta_{\mathbf{r}} | e^{-iHt} | \psi_0 \rangle$.

Quest'ultimo può essere espresso in funzione degli operatori del campo di Schrödinger $\phi^S(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}, 0)$, così

$$\psi(\mathbf{r},t) = \langle 0|\phi^S(\mathbf{r})e^{-iHt} \int \psi_0(\mathbf{r}')^{\dagger} d^3\mathbf{r}' |0\rangle, \qquad (4.64)$$

dove $|0\rangle$ è il medesimo stato di vuoto della rappresentazione di Heisemberg ed ha energia zero.

Perciò dal punto di vista operatoriale

$$\hat{\phi}(\mathbf{r},t) = e^{-iht}\phi^S(\mathbf{r})e^{iHt},\tag{4.65}$$

la funzione d'onda all'istante t è data da

$$\psi(\mathbf{r},t) = \int d^3 \mathbf{r}' \,\phi_0(\mathbf{r}') \,\langle 0|\hat{\phi}(\mathbf{r},t)\hat{\phi}(\mathbf{r}',t)^{\dagger}|0\rangle, \tag{4.66}$$

ciò mostra che il valor medio $\langle 0|\hat{\phi}(\mathbf{r},t)\hat{\phi}(\mathbf{r}',t)^{\dagger}|0\rangle$ è la **funzione di Green** per l'equazione di Schrödinger (4.57), ossia è il nucleo dell'operatore integrale che trasforma le condizioni iniziali $\psi_0(\mathbf{r})$ nella soluzione dell'equazione differenziale al tempo t.

4.3.2 L'equazione di Klein-Gordon

L'equazione di Schrödinger non-relativistica per una particella libera è ottenibile dalla relazione non-relativistica tra l'energia e il momento in (4.62) sostituendo

$$E \leadsto i \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{k} \leadsto -i \nabla,$$
 (4.67)

in un modo più compatto si può scrivere

$$k_{\mu} \leadsto i\partial_{\mu},$$
 (4.68)

dove $k^{\mu}=(E, \mathbf{k})$ è il quadrivettore controvariante energia-momento e

$$\partial_{\mu} = \partial/\partial_{\mu} \tag{4.69}$$

indica una derivata rispetto alle coordinate spazio-temporali.

Per rendere la teoria relativistica basta sostituire $E=\frac{\mathbf{k}^2}{2m}$ con l'identità relativistica

$$E = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2},\tag{4.70}$$

dove m è la massa della particella a riposo. Operndo la sostituzione (4.67) in quest'ultima si ottiene l'equazione differenziale di secondo ordine

$$\frac{\partial^2 \hat{\phi}}{\partial t^2} - \nabla^2 \hat{\phi} = -m^2 \hat{\phi},\tag{4.71}$$

che porta il nome di **equazione di Klein-Gordon**. L'operatore differenziale a sinistra è invariante per trasformazioni di Lorenz ed è spesso denotato con \square^2 :

$$\Box^2 = \frac{\partial^2}{\partial t^2} = \partial^\mu \, \partial_\mu, \tag{4.72}$$

dove $\partial^{\mu} = \eta^{\mu\nu} \partial_{\mu}$, con $\eta^{\mu\nu} = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$.

Poiché abbiamo ottenuto (4.71) elevando al quadrato la (4.70) e effettuando una sostituzione, sono ammesse anche delle soluzioni con energia negativa, perciò l'equazione di Klein-Gordon non si può considerare come l'equazione d'onda per una particella. La soluzione generale della (4.71) è

$$\hat{\phi}(\mathbf{r},t)) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \left\{ \hat{a}(k)e^{-iEt} + \hat{a}'(\mathbf{k})e^{iEt} \right\} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k}, \tag{4.73}$$

dove $\hat{a}(\mathbf{k})$ e $\hat{a}'(\mathbf{k})$ sono operatori arbitrari: i termini $\hat{a}'(\mathbf{k}) e^{iEt} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ nella rappresentazione di Schrödinger hanno energia negativa.

Osserviamo che la (4.73) differisce dall'equazione di un campo quantistico non relativistico (4.63), tuttavia una possibile interpretazione fisica per i termini con energia negativa si può azzardare confrontando l'equazione con quella dell'operatore hermitiano $\hat{\mathbf{A}}$ espresso in (4.43): $\hat{a}'(\mathbf{k})$ può essere interpretato come un operatore di creazione analogo a $\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}$. Denotiamo quindi⁵

$$\hat{a}'(\mathbf{k}) := \hat{b}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \tag{4.74}$$

un operatore di creazione. Quest'ultimo non è necessariamente hermitiano - cosa che accade nel caso elettromagnetico - perciò le particelle create da \hat{b}^{\dagger} non sono necessariamente le stesse distrutte da \hat{a} e sono dette **antiparticelle** le une delle altre.

Dalla (4.73), cambiando il segno della variabile nel secondo termine, otteniamo infine

$$\hat{\phi}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \hat{a}(\mathbf{k}) e^{-iEt+\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k} + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \hat{b}^{\dagger}(\mathbf{k}) e^{i(Et-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} d^3\mathbf{k}$$
$$= \hat{\phi}_{+}(\mathbf{r},t) + \hat{\phi}_{-}(\mathbf{r},t)^{\dagger}, \tag{4.75}$$

dove $\hat{\phi}_+$ è l'operatore di distruzione per la particella associato al campo (4.63) e $\hat{\phi}_-^{\dagger}$ l'operatore di creazione per la sua antiparticella.

Osserviamo che è possibile quindi riscrivere la soluzione generale (4.75) come una sovrapposizione di onde piane relative a particelle, create da $\hat{\phi}_+$, e antiparticelle, create da $\hat{\phi}_-^{\dagger}$.

La prima ipotesi sull'esistenza di antimateria fu avanzata nel 1928 dal fisico P. Dirac, egli teorizzava l'esistenza di "anti-elettroni": particelle con la stessa massa e spin degli elettroni, ma carica opposta. La prima conferma sperimentale di questa teoria arrivò nel 1932, le neo-scoperte particelle vennero chiamate positroni.

Questa scoperta aprì le porte allo studio dell'anti-materia, il quale è ad oggi uno degli ambiti di ricerca della fisica quantistica più indagati.

⁵Il segno meno nell'argomento è dovuto al fatto che le "particelle create" hanno energia (quindi momento) negativa.

Bibliografia

- [1] A. Sudbery, Quantum mechanics and the particles of nature, Cambridge University Press, 1986
- [2] J. Townsend, A modern approach to quantum mechanics, Mc-Graw-Hill, 1992
- [3] R. Shankar, Principles of quantum mechanics, Plenum Press, 1994