

Proprietà generali per problemi uno-dimensionali

*Corso di MMMQ, a.a. 2020-2021
Dipartimento di Matematica, Università di Milano*

9/10/20

In questa dispensa consideriamo alcuni aspetti (molto generali) dello studio dello spettro discreto (e relative autofunzioni) per operatori di Schroedinger in una dimensione. Nelle Appendici ricordiamo come si studiano i più semplici potenziali in una dimensione (questa discussione dovrebbe essere familiare dal corso di base di Meccanica Quantistica).

1 Risultati generali per lo spettro discreto di operatori di Schroedinger in una dimensione

Iniziamo col ricordare alcuni risultati generali riguardo allo spettro discreto (stati legati) per problemi uno-dimensionali¹; di alcuni diamo nel seguito una breve dimostrazione.

Diamo qui - ed in tutta la dispensa - per scontato di avere a che fare con operatori di Schroedinger della forma

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) ,$$

con $V(x)$ il potenziale.

1. Se il potenziale $V(x)$ è limitato inferiormente da V_0 , e soddisfa

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = V_{\pm} ,$$

i livelli discreti dello spettro E_n (se esistono) soddisfano la condizione²

$$V_0 < E_n < \min(V_+, V_-) .$$

Ci riferiremo a questo risultato come *teorema del minimo*. Nel caso in cui $V_0 = \min(V_+, V_-)$, non si hanno autovalori discreti. In generale, tutti

¹Alcuni di questi si estendono anche a dimensione superiore, come discusso nel seguito

²Questa implica anche che esiste uno stato legato se esistono stati in cui il valor medio di H sia inferiore a $\min(V_+, V_-)$.

i valori di E che soddisfano $E \geq \min(V_+, V_-)$ appartengono allo spettro continuo. Nel caso $V_+ \neq V_-$, allora per tutti i valori dell'energia $\min(V_+, V_-) < E < \max(V_+, V_-)$ si ha un autovalore non degenere; per $E \geq \max(V_+, V_-)$ si ha un autovalore doppiamente degenere.

2. Tutti gli autovalori discreti sono *non degeneri*, cioè ad ogni autovalore (dello spettro discreto) corrisponde una sola autofunzione³. Questo risultato è anche noto come *teorema di non degenerazione*.
3. Se il potenziale è *pari*, cioè soddisfa

$$V(-x) = V(x) ,$$

allora tutte le autofunzioni corrispondenti allo spettro discreto sono o pari o dispari, ossia soddisfano

$$\begin{cases} \psi(-x) = \psi(x) & (\text{pari}) \\ \psi(-x) = -\psi(x) & (\text{dispari}) \end{cases} .$$

Questo risultato è anche noto come *teorema di parità*.⁴

4. Numerando gli autovalori dello spettro discreto come E_n ($n = 0, 1, 2, \dots$), con $E_n < E_{n+1}$, e le corrispondenti autofunzioni come ψ_n , la funzione ψ_n si annulla in n punti (ha n zeri). Questo risultato è anche noto come *teorema di oscillazione*.

Forniamo qui le (semplicissime) dimostrazioni di quanto su affermato.

1.1 Dimostrazione del teorema del minimo

E' evidente che se ψ è autofunzione dell'Hamiltoniana $H = p^2/2m + V(q)$ con autovalore λ , allora definendo

$$\tilde{V}(q) = V(q) + k ,$$

con k una costante reale, la stessa ψ è anche autofunzione di

$$\tilde{H} = p^2/2m + \tilde{V}(q)$$

con autovalore

$$\tilde{\lambda} = \lambda + k .$$

D'altra parte, se V ammette un minimo negativo finito V_0 possiamo scegliere k in modo che \tilde{V} sia sempre positivo. Se questa condizione è soddisfatta, il valor medio di \tilde{H} su ogni stato ϕ (e quindi anche su ogni autostato ψ) è certamente positivo.

³Sottolineamo che questo risultato *non* si applica allo spettro continuo. Ad esempio per la particella libera l'operatore p^2 ha lo stesso autovalore per le autofunzioni e^{ipx} ed e^{-ipx} .

⁴Sottolineamo che non si ha nessun risultato simile per $V(x)$ dispari, $V(-x) = -V(x)$.

Infatti,

$$\langle \tilde{H} \rangle_\phi = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle_\phi + \langle \tilde{V}(q) \rangle_\phi ,$$

ed ognuno di questi addendi è non negativo: definendo

$$W := \sqrt{\tilde{V}(q)}$$

(il che è possibile per $\tilde{V}(q) \geq 0$), e supponendo per semplicità di notazione che sia $\|\phi\|^2 = 1$, abbiamo

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle_\phi &= \langle \phi | p^2 | \phi \rangle = \langle p(\phi) | p(\phi) \rangle \geq 0 , \\ \langle \tilde{V}(q) \rangle_\phi &= \langle \phi | \tilde{V}(q) | \phi \rangle = \langle W(\phi) | W(\phi) \rangle \geq 0 ; \end{aligned}$$

naturalmente ambedue le disuguaglianze discendono dalle proprietà fondamentali del prodotto scalare. Quindi $\lambda \geq 0$, e $\lambda \geq V_0$.

1.2 Dimostrazione del teorema di non degenerazione

Siano ψ e ϕ due (diverse) soluzioni del problema agli autovalori

$$H \psi = \lambda \psi$$

per l'operatore H , relative allo *stesso* livello E appartenente allo spettro discreto. Allora, ricordando che

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

queste sono soluzioni di

$$\begin{aligned} \psi_{xx} &= \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi \\ \phi_{xx} &= \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \phi \end{aligned}$$

Moltiplicando la prima equazione per ϕ e la seconda per ψ , e sottraendole l'una all'altra, otteniamo

$$\psi_{xx} \phi - \psi \phi_{xx} = 0 ;$$

questa si scrive anche come

$$\frac{d}{dx} (\psi_x \phi - \psi \phi_x) = 0 ,$$

e quindi abbiamo

$$\psi_x \phi - \psi \phi_x = c .$$

Per $x \rightarrow \pm\infty$, le funzioni ψ e ϕ devono (ambidue) tendere a zero⁵, altrimenti non sarebbero normalizzabili. Quindi deve essere $c = 0$, ed abbiamo

$$\psi_x \phi = \psi \phi_x .$$

Siamo dunque giunti ad un'equazione separabile, che riscriviamo come

$$\frac{\psi_x}{\psi} = \frac{\phi_x}{\phi}$$

e che ha come soluzione

$$\phi(x) = K \psi(x)$$

con K una costante (in effetti, di modulo uno dato che $|\psi| = 1 = |\phi|$; quindi $K = \exp[i\theta]$). Abbiamo così mostrato che non possono esistere due autofunzioni indipendenti per lo stesso autovalore (nello spettro discreto) di un operatore di Schroedinger in una dimensione.

1.3 Dimostrazione del teorema di parità

Sia P l'operatore di inversione spaziale $P : x \rightarrow -x$. E' evidente che la parte cinetica $p^2/2m$ dell'operatore di Schroedinger è invariante sotto P , mentre la parte potenziale lo è per ipotesi. Quindi H è invariante sotto P .

Se ora operiamo con P sulla relazione che soddisfano gli stati legati per H , cioè

$$H [\psi(x)] = E \psi(x) ,$$

questa viene trasformata in

$$H [\widehat{\psi}(x)] = E \widehat{\psi}(x) ,$$

dove abbiamo definito

$$\widehat{\psi}(x) := \psi(-x) .$$

D'altra parte il numero E non è stato cambiato, e ψ , $\widehat{\psi}$ sono autofunzioni corrispondenti allo stesso autovalore dello spettro discreto. Come abbiamo visto in precedenza, deve essere

$$\widehat{\psi}(x) = K \psi(x) .$$

Operando ancora con l'operatore P sulla equazione per $\widehat{\psi}$, otteniamo

$$H [\widehat{\widehat{\psi}}(x)] = E \widehat{\widehat{\psi}}(x) ;$$

ma da una parte

$$\widehat{\widehat{\psi}}(x) = \widehat{\psi}(-x) = \psi(x) ,$$

⁵Più precisamente lo faranno in modo esponenziale, dato che $E < \min(V_+, V_-)$ dove $V_{\pm} = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x)$.

e dall'altra

$$\widehat{\psi}(-x) = K \psi(-x) = K \widehat{\psi}(x) ;$$

quindi

$$\psi(x) = \widehat{\widehat{\psi}}(x) = K \widehat{\psi}(x) = K^2 \psi(x) ,$$

e necessariamente $K^2 = 1$, che ci lascia con le due opzioni

$$K = \pm 1 .$$

In altre parole, abbiamo mostrato che – come affermato – le uniche possibilità sono

$$\psi(-x) = \pm \psi(x) .$$

1.4 Dimostrazione del teorema di oscillazione

Per dimostrare questo teorema sarà necessario confrontare due diverse autofunzioni; in questo contesto è utile usare il teorema del Wronskiano⁶. Siano ψ_1 e ψ_2 due funzioni (reali); allora definiamo il loro Wronskiano come

$$W(\psi_1, \psi_2) := \psi_1(x) \psi_2'(x) - \psi_1'(x) \psi_2(x) = \det \begin{pmatrix} \psi_1 & \psi_1' \\ \psi_2 & \psi_2' \end{pmatrix} .$$

Se ψ_1, ψ_2 sono soluzione di due *diverse* equazioni del secondo ordine della forma

$$\begin{aligned} \psi_1'' &= F_1(x) \psi_1(x) , \\ \psi_2'' &= F_2(x) \psi_2(x) , \end{aligned}$$

segue facilmente⁷ che

$$[W(\psi_1, \psi_2)]_a^b = - \int_a^b [F_1(x) - F_2(x)] \psi_1(x) \psi_2(x) dx .$$

Se ora F_1 ed F_2 sono della forma

$$F_k(x) = V(x) - \mu_k$$

con lo stesso $V(x)$ e diverse costanti μ_k , il che è proprio il caso se si tratta di soluzioni dell'equazione di Schroedinger corrispondenti a differenti autovalori $\lambda_k = (2m/\hbar^2)\mu_k$ (diciamo, sempre per concretezza, con $\lambda_1 < \lambda_2$), abbiamo evidentemente

$$[W(\psi_1, \psi_2)]_a^b = (\mu_1 - \mu_2) \int_a^b \psi_1(x) \psi_2(x) dx .$$

⁶Presumibilmente noto dai corsi di Analisi, ma che ricordiamo qui ad ogni buon conto.

⁷Moltiplicando la prima equazione per ψ_2 , la seconda per ψ_1 , e considerando la differenza tra le due

Ora scegliamo a e b come zeri consecutivi⁸ della funzione ψ_1 (questi possono essere $\pm\infty$); allora $\psi_1(a) = \psi_1(b) = 0$, e quindi

$$[W(\psi_1, \psi_2)]_a^b = [\psi_1'(x)\psi_2(x)]_a^b = \psi_1'(b)\psi_2(b) - \psi_1'(a)\psi_2(a) .$$

Notiamo anche che $\psi_1'(a)$ e $\psi_1'(b)$ devono avere segno opposto, diciamo sempre per fissare le idee con $\psi_1'(a) > 0$, mentre $\psi_1(x)$ ha segno costante nell'intervallo $[a, b]$; con la scelta $\psi_1'(a) > 0$, abbiamo $\psi_1(x) > 0$.

Allora

$$[W(\psi_1, \psi_2)]_a^b = \psi_1'(b)\psi_2(b) - \psi_1'(a)\psi_2(a) = (\mu_2 - \mu_1) \int_a^b \psi_1(x)\psi_2(x) dx ;$$

ma se ψ_2 avesse lo stesso segno agli estremi di $[a, b]$, i due membri dell'equazione avrebbero segno opposto. Quindi ψ_2 deve avere almeno uno zero tra ogni due zeri di ψ_1 (mentre va necessariamente a zero, come anche ψ_1 , per $x \rightarrow \pm\infty$). Possiamo quindi ordinare le autofunzioni secondo il numero di zeri al finito (nodi), e questo ordinamento coincide con quello in termini dell'autovalore corrispondente.

Osservazione. Abbiamo in questo modo mostrato che ognuna delle autofunzioni ψ_n ($n = 0, 1, \dots$) ha *almeno* n nodi, e che indicando con N_n il numero di nodi di ψ_n si ha $N_n > N_m$ per $n > m$. Questo di per sè non basta a concludere che $N_n = n$. Esiste però un teorema generale⁹ che assicura che – per una vasta classe di operatori, non solo in una dimensione, tra cui gli operatori di Schroedinger – si ha $N_n \leq n$. Usando anche questo risultato otteniamo che effettivamente $N_n = n$. \odot

2 Teorema del confronto

E' spesso molto utile poter confrontare un potenziale con un altro potenziale di cui si conosce lo spettro (o parte dello spettro) per ottenere informazioni sullo spettro del primo.

La base per questo tipo di considerazioni è fornita dal seguente “teorema del confronto”, che nuovamente si applica a problemi uno-dimensionali, definiti da Hamiltoniane della forma

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

Assumiamo di considerare due diversi potenziali, $V_+(x)$ e $V_-(x)$, tali che

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} V_{\pm}(x) = 0 ,$$

⁸Sottolineamo che è sempre possibile (in assenza di campo magnetico) scegliere ψ reale, come segue dal fatto che tutti i termini nell'equazione di Schroedinger sono reali.

⁹Per la sua dimostrazione si veda ad esempio il primo volume di Courant-Hilbert.

ed inoltre tali che

$$V_+(x) \geq V_-(x) \quad \forall x \in \mathbf{R} .$$

Allora si può mostrare che se H_+ ha uno stato legato, allora anche H_- ha (almeno) uno stato legato. Qui naturalmente abbiamo scritto

$$H_{\pm} = \frac{p^2}{2m} + V_{\pm}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\pm}(x) .$$

Evidentemente lo spettro continuo (per ambedue le Hamiltoniane) corrisponde a $[0, \infty)$. Quindi se H_+ ammette uno stato legato $\psi_0^{(+)}$, questo deve avere energia $E_0^{(+)} < 0$.

Se H_- non avesse nessuno stato legato, il valor medio di H_- in qualsiasi stato sarebbe positivo. Ma

$$\langle \psi_0^{(+)} | H_- | \psi_0^{(+)} \rangle \leq \langle \psi_0^{(+)} | H_+ | \psi_0^{(+)} \rangle < 0 .$$

Quindi H_- deve avere almeno uno stato legato $\psi_0^{(-)}$, con energia

$$E_0^{(-)} \leq E_0^{(+)} .$$

Consideriamo ora la situazione in cui inoltre V_{\pm} sono ambedue potenziali *pari*,

$$V_{\pm}(-x) = V_{\pm}(x) ;$$

allora se H_+ ammette un secondo stato legato $\psi_1^{(+)}$, con energia $E_1^{(+)}$, questo è dispari. Essendo dispari, è anche automaticamente ortogonale al primo stato legato $\psi_0^{(-)}$ di H_- (che è pari).

Quindi, nel sottospazio degli stati ortogonali a $\psi_0^{(-)}$, esiste uno stato – appunto, $\psi_1^{(+)}$ – su cui il valor medio di H_- è negativo (come si dimostra procedendo allo stesso modo che sopra); quindi H_- deve avere almeno un autovalore negativo su questo sottospazio. In altre parole esiste uno stato legato $\psi_1^{(-)}$, con energia $E_1^{(-)} \leq E_1^{(+)}$.

Questo argomento si può estendere a potenziali che non hanno una parità definita. Supponiamo infatti che H_+ abbia due stati legati, e consideriamo

$$\psi = a \psi_0^{(+)} + b \psi_1^{(+)} \quad (|a|^2 + |b|^2 = 1) .$$

Allora

$$\langle \psi | H_- | \psi \rangle \leq \langle \psi | H_+ | \psi \rangle = |a|^2 E_0^{(+)} + |b|^2 E_1^{(+)} \leq E_1^{(+)} < 0 .$$

Se H_- non avesse un secondo stato legato, dovrebbe avere valor medio positivo in tutti gli stati ortogonali a $\psi_0^{(-)}$. Ma se φ_0 è la proiezione di $\psi_0^{(-)}$ nello spazio \mathcal{V} generato da $\psi_0^{(+)}$ e $\psi_1^{(+)}$, esiste almeno un vettore di \mathcal{V} ortogonale a φ_0 . Quindi GH_- deve avere almeno uno stato legato oltre a $\psi_0^{(-)}$. Inoltre

$$E_1^{(-)} \leq \langle \psi | H_- | \psi \rangle \leq E_1^{(+)} ,$$

ossia abbiamo in tutta generalità che

$$E_1^{(-)} \leq E_1^{(+)} .$$

Esercizio 1. Dimostrare che lo stesso risultato vale nel caso in cui H_+ ammette $m + 1$ stati legati; vale a dire, anche H_- ammette almeno $m + 1$ stati legati, e le loro energie soddisfano

$$E_k^{(-)} \leq E_k^{(+)} \quad k = 0, \dots, m .$$

(Suggerimento: procedere per induzione.)

Esercizio 2. Stimare il numero di stati legati per il potenziale

$$V(x) = -\frac{A}{\lambda^2 + x^2} .$$

(Suggerimento: usare il teorema del confronto ed un potenziale a buca.)

Esercizio 3. Determinare il numero minimo di stati legati (dipendente dal parametro reale β) che possono avere il potenziale

$$V_1(x) = -3 \frac{\hbar^2}{m \beta^2} e^{-x^2/\beta^2}$$

ed il potenziale

$$V_2(x) = -4 \frac{\hbar^2}{m \beta^2} e^{-x^2/\beta^2} .$$

Soluzione: 1 e 2 rispettivamente.

Esercizio 4. Determinare $\lambda = \lambda(n)$ in modo che il potenziale ($\lambda > 0$)

$$V_3(x) = -\frac{\lambda}{x^2 + A^2}$$

abbia almeno n stati legati. Risposta: $\lambda(n) \geq (n-1)^2 \pi^2 \hbar^2 / (8m)$.

Esercizio 5. Determinare il numero di stati legati del potenziale (con $\lambda > 0$, $A > 0$)

$$V_4(x) = -\frac{\lambda}{|x| + A} .$$

Soluzione: esistono infiniti stati legati. Suggerimento: risulta utile considerare la funzione $F(\xi) = \xi^2 |V(\xi)|$.

3 Discussione: estensione dei teoremi al di fuori del caso uno-dimensionale

I teoremi che abbiamo visto (e dimostrato) finora si applicano al caso uno-dimensionale. E' naturale chiedersi se sia possibile estenderli a dimensione arbitraria, o almeno al caso di dimensione fisica – cioè due o tre.

Tornando a considerare i teoremi e le loro dimostrazioni da questo punto di vista, è chiaro che questi sono di tipi distinti. Le dimostrazioni del teorema del minimo e del teorema del confronto si basano su proprietà del valor medio di H su stati (legati) arbitrari, ed è naturale attendersi che possano essere estesi a dimensione maggiore, ed anzi arbitraria. Invece il teorema di non degenerazione ed il teorema di oscillazione utilizzano degli aspetti spiccatamente uni-dimensionali, e ci aspettiamo che *non* si estendano al di là di questo ambito. Il teorema di parità infine meriterà un discorso a parte.

Iniziamo col discutere il teorema di oscillazione. Se abbiamo una funzione reale $\psi : R^n \rightarrow R$, l'insieme dei suoi zeri sarà in generale $(n - 1)$ -dimensionale. Quindi possiamo parlare di numero degli zeri (o dei nodi) *solo* nel caso $n = 1$. Più precisamente, se ψ è differenziabile allora l'insieme dei suoi zeri è una varietà, che indicheremo con Z , di codimensione uno e quindi di dimensione $n - 1$. Nel caso $n - 1$ abbiamo quindi un insieme (possibilmente vuoto) di punti disgiunti, e l'unico indice topologico per un insieme di punti disgiunti è appunto il loro numero. Per $n > 1$ invece la caratterizzazione topologica di Z diviene più complessa, ed è evidente che non vi può essere una estensione "semplice" (qualunque cosa questo significhi) del teorema di oscillazione a dimensione maggiore.

Il teorema di non degenerazione è semplicemente falso in dimensione maggiore di uno; per convincersene, è sufficiente considerare un oscillatore armonico isotropo in dimensione due, cioè (con una ovvia notazione)

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2) = H_{(x)} + H_{(y)} .$$

Tattandosi di una Hamiltoniana separabile (in due Hamiltoniane parziali identiche, espresse rispetto a coordinate diverse), è chiaro che il prodotto

$$\Phi_{n,m}(x, y) = \psi_n(x) \psi_m(y)$$

di autofunzioni delle due Hamiltoniane parziali (con autovalori λ_n, λ_m rispettivamente) è una autofunzione della Hamiltoniana totale, con autovalore

$$\Lambda_{m,n} = \lambda_m + \lambda_n .$$

Ognuna delle Hamiltoniane $H_{(x)}$ ed $H_{(y)}$ rappresenta un oscillatore armonico ed ha quindi autovalori $\lambda_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Dunque tutte le autofunzioni $\Phi_{n,m}$ di H con $n + m = N$ assegnato hanno lo stesso autovalore, e dunque abbiamo un semplice esempio di Hamiltoniana due-dimensionale i cui livelli energeici, ad

eccezione del fondamentale, sono tutti degeneri.¹⁰

Veniamo ora ai teoremi la cui dimostrazione si basa sul considerare valori medi della Hamiltoniana su stati. Nel caso del teorema del minimo, evidentemente non dobbiamo più considerare i limiti V_{\pm} (che non hanno senso), ma dobbiamo considerare invece il minimo V_m dei limiti di $V(\mathbf{x})$ per $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ lungo le diverse direzioni dello spazio. Con questa differenza, la dimostrazione del fatto che i livelli energetici E_n degli stati legati, se esistono, soddisfano $V_0 < E_n < V_m$ può essere fatta esattamente come nel caso uni-dimensionale – cosa che lo studente è invitato a verificare.

Le cose sono molto simili anche nel caso del teorema del confronto, dato che la sua dimostrazione si basa sempre sulla positività di un prodotto scalare che si riduce ad essere la norma quadrata di un elemento dello spazio di Hilbert.

Qui e nel caso precedente l'unica differenza è nella espressione concreta (in coordinate) del prodotto scalare, che in dimensione n diviene

$$(\phi, \psi) = \int \dots \int \phi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) dx^1 \dots dx^n .$$

Come anticipato, le cose sono diverse per il teorema di parità; questo è in effetti una diretta conseguenza della nozione di *osservabili compatibili*, e del fatto di essere in dimensione uno, dove grazie al teorema di non-degenerazione tutti gli autospazi sono di dimensione uno.

D'altra parte, se A è una osservabile che ammette un insieme finito di autovalori $\{\mu_1, \dots, \mu_r\}$, e che commuta con H , segue che A ed H ammettono una base comune di autofunzioni, e quindi che – se scegliamo questa base – ognuna delle autofunzioni della base comune è caratterizzata dall'energia (autovalore di H) e da un valore di A , cioè da uno dei μ . Non possiamo però spingerci fino a dire che ogni livello di H è caratterizzato da un valore di A , in quanto questi livelli potrebbero essere degeneri, e le diverse autofunzioni corrispondenti allo stesso livello di E potrebbero avere valori di μ associati diversi.

Un esempio di questa situazione ci è ancora fornito dal nostro oscillatore armonico due-dimensionale isotropo. Infatti, consideriamo l'operatore P_x di parità rispetto alla x , che evidentemente commuta con H . D'altra parte i livelli $\Lambda_{m,n} = \lambda_n^{(x)} + \lambda_m^{(y)} \neq 0$ sono degeneri, ed è chiaro che tra le autofunzioni

$$\Phi_{n,m}(x, y) = \psi_n(x) \psi_m(y)$$

ce ne sono alcune che sono autofunzioni di P_x con autovalore $\mu = +1$ (quelle con n pari) ed altre che sono autofunzioni di P_x con autovalore $\mu = -1$ (quelle con n dispari). Quindi sebbene *per questa scelta* delle autofunzioni esse siano caratterizzate da un preciso valore di $A = P_x$, se considerassimo un generico cambiamento di base in ogni autospazio di H avremmo autofunzioni di H che *non* sono autofunzioni di P_x .

¹⁰Una costruzione simile può essere fatta per qualsiasi potenziale $V(x, y) = W(x) + W(y)$: anche se in quel caso non sappiamo (in generale) determinare i livelli energetici, sappiamo che ad eccezione del fondamentale gli altri avranno tutti almeno una degenerazione di ordine due, dato che comunque $\Lambda_{m,n} = \Lambda_{n,m}$.

La nostra conclusione riguardo alla estensione del teorema di parità è solo apparentemente negativa: infatti la possibilità di classificare (scegliendo opportunamente la base) le autofunzioni di H secondo il valore di una – o più – osservabili che commutano con H apre tutto un filone di risultati, ed in generale spiega il ruolo che hanno le considerazioni di simmetria in Meccanica Quantistica. Del resto, questo genere di approccio dovrebbe essere ben noto dallo studio dei problemi con potenziale centrale in generale, e dell'atomo di Idrogeno in particolare.

4 Teorema di degenerazione

4.1 Risultato generale

Un risultato di tipo diverso, nel senso che richiede ipotesi più articolate sull'operatore da considerare¹¹, è il cosiddetto “teorema di degenerazione”.

Questo afferma che se una osservabile A commuta con due osservabili B e C che *non* commutano tra di loro, cioè

$$[A, B] = 0 = [A, C]; \quad [B, C] \neq 0,$$

allora A è degenere. Con questo si intende che A ha degli autovalori (propri) degeneri.

La dimostrazione di questo fatto è immediata: Se A non fosse degenere, *ogni* suo autovettore sarebbe anche autovettore sia di B che di C (mentre se è degenere, possiamo solo affermare che per ogni livello dello spettro esiste un autovettore comune ad A e B ed uno comune ad A e C), e quindi B e C ammetterebbero una base comune di autovettori, e quindi sarebbero necessariamente commutanti.¹²

4.2 Esempio: l'operatore di Parità

Consideriamo l'operatore P (di parità, o di “inversione spaziale”) definito sopra, che agisce sulle funzioni (di una sola variabile x , per ora) attraverso

$$(P\psi)(x) = \widehat{\psi}(x) = \psi(-x).$$

E' evidente che $P^2 = I$; inoltre P è autoaggiunto, $P^+ = P$. Infatti,

$$\begin{aligned} \langle \psi | P | \phi \rangle &= \int \psi^*(x) \phi(-x) dx = \left(\int \psi(x) \phi^*(-x) dx \right)^* \\ &= \left(\int \psi(-x) \phi^*(x) dx \right)^* = \left(\int \phi^*(x) \psi(-x) dx \right)^* \\ &= \left(\int \phi^*(x) P[\psi(x)] dx \right)^* = \langle \phi | P | \psi \rangle^*. \end{aligned}$$

¹¹Ed anche che non riguarda il solo caso unidimensionale – anche se abbiamo appena visto come alcuni dei nostri teoremi uni-dimensionali in realtà si estendano a più dimensioni

¹²Lo studente che avesse perplessità riguardo a questa dimostrazione può controllare la definizione di *osservabile*.

Questo mostra anche che P è unitario: infatti $P = P^+ = P^{-1}$.

E' anche semplice mostrare (in realtà lo abbiamo già fatto sopra, nella dimostrazione del teorema di parità) che gli unici autovalori di P sono $\lambda = \pm 1$. Infatti, se

$$P\psi = \lambda\psi ,$$

ricordando che $P^2 = I$, e quindi che

$$P^2\psi = \lambda^2\psi = \psi ,$$

segue che $\lambda^2 = 1$, cioè

$$\lambda = \pm 1 .$$

Le autofunzioni che corrispondono a $\lambda = 1$ sono (tutte le) funzioni pari, quelle che corrispondono a $\lambda = -1$ sono (tutte le) funzioni dispari – e l'autovalore identifica la parità della corrispondente autofunzione.

Dato che ogni funzione $f(x)$ può essere espressa come somma di una funzione pari $f_+(x)$ ed una funzione dispari $f_-(x)$, attraverso la definizione

$$f_{\pm}(x) = \frac{1}{2} [f(x) \pm f(-x)] ,$$

ogni funzione può essere espressa come combinazione lineare di autofunzioni di P , cioè queste costituiscono un insieme completo (e P è un'osservabile).

Osserviamo anche che P anticommute con p ed x . Infatti, sia ϕ una generica funzione. Allora

$$\begin{aligned} P[p\phi(x)] &= P[i\hbar\phi'(x)] = i\hbar\phi'(-x) , \\ p[P\phi(x)] &= p[\phi(-x)] = i\hbar\frac{d}{dx}\phi(-x) = -i\hbar\phi'(-x) ; \\ P[x\phi(x)] &= (-x)\phi(-x) = -x\phi(-x) , \\ xP[\phi(x)] &= x\phi(-x) . \end{aligned}$$

Queste relazioni si esprimono anche come

$$P x P^{-1} = -x , \quad P p P^{-1} = -p .$$

Quindi P è l'operatore che cambia di segno (inverte) sia la coordinata spaziale x che il momento p .

Esercizio 6. Mostrare che tutte queste proprietà valgono anche per funzioni $\psi(\mathbf{x})$ definite su uno spazio \mathbf{R}^n ad n dimensioni, con P l'inversione $(P\psi)(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x})$.

Esercizio 7. Considerare in \mathbf{R}^3 il caso in cui si introducono gli operatori P_x, P_y, P_z che agiscono come

$$(P_x\psi)(x, y, z) = \psi(-x, y, z)$$

etc.; determinare gli autovalori e le autofunzioni di P_k , dire se le osservabili P_k sono compatibili, e quali sono le autofunzioni che formano un insieme completo.

Consideriamo ora

$$H_0 = \frac{p^2}{2m}$$

In questo caso è immediato verificare che

$$[H_0, P] = 0, \quad [H_0, p] = 0.$$

D'altra parte, come abbiamo visto in precedenza,

$$[P, p] \neq 0.$$

In effetti, come sappiamo, gli autovalori $\lambda^2 \in (0, \infty)$ di H_0 sono tutti doppiamente degeneri, e le autofunzioni corrispondenti sono

$$\psi_\lambda^{(\pm)} = \exp[\pm i\lambda x];$$

queste soddisfano

$$p[\psi_\lambda^{(\pm)}] = \pm \hbar \lambda \psi_\lambda^{(\pm)}.$$

D'altra parte, non sono certo autofunzioni di P :

$$P\psi_\lambda^{(\pm)} = \psi_\lambda^{(\mp)}.$$

Naturalmente, dal punto di vista della presente discussione, sarebbe anche opportuno considerare invece come base delle autofunzioni

$$\varphi_\lambda^{(+)} = \frac{\psi_\lambda^{(+)} + \psi_\lambda^{(-)}}{2} = \cos(\lambda x); \quad \varphi_\lambda^{(-)} = \frac{\psi_\lambda^{(+)} - \psi_\lambda^{(-)}}{2i} = \sin(\lambda x).$$

Infatti queste soddisfano

$$P\varphi_\lambda^{(\pm)} = \pm \varphi_\lambda^{(\pm)},$$

sono cioè autofunzioni di P . D'altra parte, queste non sono autofunzioni di p :

$$p[\varphi_\lambda^{(\pm)}] = \pm i\hbar \lambda \varphi_\lambda^{(\mp)}.$$

A Buca di potenziale infinita

La “buca di potenziale infinita” è probabilmente il più semplice sistema quantistico possibile (forse anche più della particella libera). Si tratta del caso in cui

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x \in [a, b] \\ \infty & \text{altrimenti} \end{cases}$$

cioè la particella è rigorosamente confinata ad un intervallo finito $[a, b]$, che possiamo sempre identificare – modulo una traslazione dell’origine – con l’intervallo $[-L, L]$.

L’equazione di Schroedinger è dunque

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} = E \psi \quad (x \in [-L, L])$$

e va complementata con le condizioni al contorno

$$\psi(-L) = 0 = \psi(L) .$$

E’ evidente che abbiamo due serie infinite di soluzioni,

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)} &= \frac{1}{\sqrt{L}} \cos \left[\left(k + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{L} x \right] , \\ \psi_k^{(-)} &= \frac{1}{\sqrt{L}} \cos \left[k \frac{\pi}{L} x \right] . \end{aligned}$$

Queste sono ortogonali tra di loro rispetto al prodotto scalare standard in $L^2[-L, L]$,

$$(f, g) = \int_{-L}^{+L} f^*(x) g(x) dx .$$

Inoltre le $\psi_k^{(+)}$ sono funzioni pari, le $\psi_k^{(-)}$ sono funzioni dispari.

Gli autovalori $E_k^{(\pm)}$ corrispondenti alle due serie di soluzioni sono

$$E_k^{(+)} = (k + 1/2)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} ; \quad E_k^{(-)} = k^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} .$$

Dunque la sequenza degli autovalori, partendo dal basso, è

$$E_0^{(+)}, E_1^{(-)}, E_1^{(+)}, E_2^{(-)}, \dots$$

In particolare, osserviamo che lo stato fondamentale (cioè lo stato di energia minima) non ha energia zero (come sarebbe secondo la meccanica classica), ma ha invece energia

$$\epsilon_0 = E_0^{(+)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m L^2} ;$$

gli altri stati hanno energie

$$E_k^{(+)} = 4(k + 1/2)^2 \epsilon_0 , \quad E_k^{(-)} = 4k^2 \epsilon_0 .$$

B Buca di potenziale finita

Consideriamo ora il potenziale a buca (simmetrica) per valori finiti della ampiezza ξ e della profondità A , ossia

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < -\xi \\ -A & \text{per } -\xi \leq x \leq \xi \\ 0 & \text{per } x > \xi. \end{cases}$$

Notiamo che ora gli autovalori sono sicuramente maggiori di $-A$; quelli positivi corrisponderanno allo spettro continuo. Scriviamo quindi

$$\lambda = E = -|E|.$$

Consideriamo ora solamente stati legati per questo potenziale $V(x)$; per quanto detto alla sezione uno, questi avranno energia E con

$$-V_0 < E < 0.$$

Con questa condizione la funzione d'onda nelle regioni con $|x| > \lambda$ dovrà soddisfare l'equazione per una particella libera,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} = -|E| \psi,$$

ovvero

$$\psi_{xx} = \mu^2 \psi$$

con μ un parametro reale dato da

$$\mu = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}},$$

e quindi sarà della forma

$$\psi_{\pm}(x) = a_{\pm} e^{-\mu|x|}.$$

Invece nella regione con $|x| \leq \lambda$ abbiamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} - V_0 \psi = -|E| \psi,$$

ovvero

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} = -(|E| - V_0) \psi.$$

Riscriviamo ancora questa come

$$\psi_{xx} = -\omega^2 \psi,$$

dove $\omega \in \mathbf{R}$, e più precisamente

$$\omega = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}},$$

ed abbiamo usato l'informazione che $V_0 > |E|$.

Le soluzioni sono naturalmente fornite da

$$\psi_0(x) = c \cos(\omega x) + s \sin(\omega x) .$$

La funzione ψ deve essere continua insieme alla sua derivata (infatti ora ψ_{xx} non ha termini di tipo δ); quindi le condizioni di raccordo in $x = \pm a$ sono semplicemente

$$\begin{cases} \psi_-(-\lambda) = \psi_0(-\lambda) \\ \psi_+(\lambda) = \psi_0(\lambda) \\ \psi'_-(-\lambda) = \psi'_0(-\lambda) \\ \psi'_+(\lambda) = \psi'_0(\lambda) \end{cases}$$

Osserviamo che

$$\psi'_-(x) = a_- \mu e^{\mu x}, \quad \psi'_0(x) = s \omega \cos(\omega x) - c \omega \sin(\omega x), \quad \psi'_+(x) = -a_+ \mu e^{-\mu x};$$

dundue le condizioni di raccordo si scrivono come

$$M \mathbf{p} = 0 ,$$

dove

$$M = \begin{pmatrix} e^{-\lambda\mu} & 0 & -\cos(\lambda\omega) & \sin(\lambda\omega) \\ 0 & e^{-\lambda\mu} & -\cos(\lambda\omega) & -\sin(\lambda\omega) \\ e^{-\lambda\mu}\mu & 0 & -\omega \sin(\lambda\omega) & -\omega \cos(\lambda\omega) \\ 0 & -e^{-\lambda\mu}\mu & \omega \sin(\lambda\omega) & -\omega \cos(\lambda\omega) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = \begin{pmatrix} a_- \\ a_+ \\ c \\ s \end{pmatrix} .$$

Come al solito la condizione per avere una soluzione è che sia $\text{Det}(M) = 0$; da un calcolo esplicito otteniamo

$$\text{Det}(M) = e^{-2\lambda\mu} [(\omega^2 - \mu^2) \sin(2\lambda\omega) - 2\mu\omega \cos(2\lambda\omega)] .$$

Però sappiamo dalla discussione generale che (avendo un potenziale pari) le autofunzioni dello spettro discreto saranno pari o dispari, ovvero i coefficienti soddisferanno una di queste coppie di condizioni:

$$\begin{cases} a_+ = a_- = a, \quad s = 0 & \text{(caso pari)} \\ a_+ = -a_- = a, \quad c = 0 & \text{(caso dispari)} \end{cases}$$

il che ci permette di semplificare notevolmente i calcoli.

B.0.1 Autofunzioni pari

Nel caso pari le condizioni di raccordo si riducono a

$$M_+ \mathbf{p}_+$$

dove

$$M_+ = \begin{pmatrix} e^{-\lambda\mu} & -\cos(\lambda\omega) \\ e^{-\lambda\mu}\mu & -\omega \sin(\lambda\omega) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p}_+ = \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} .$$

Ora

$$\text{Det}(M) = e^{-\lambda\mu}(\mu \cos(\lambda\omega) - \omega \sin(\lambda\omega)) ,$$

e quindi la condizione per avere soluzioni è che sia

$$\mu = \omega \tan(\lambda\omega) .$$

Ricordando le relazioni tra μ , ω ed E , ossia

$$\mu = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} , \quad \omega = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} ;$$

e scrivendo

$$\eta := |E|/V_0 , \quad K := \frac{\lambda \sqrt{2mV_0}}{\hbar} ,$$

questa relazione si scrive come

$$\sqrt{\frac{\eta}{1-\eta}} = \tan \left[K \sqrt{1-\eta} \right] . \quad (*)$$

E' evidente che il numero di soluzioni cresce al crescere di K .

B.0.2 Autofunzioni dispari

Nel caso dispari le condizioni di raccordo si riducono a

$$M_- \mathbf{p}_+$$

dove

$$M_- = \begin{pmatrix} e^{-\lambda\mu} & -\sin(\lambda\omega) \\ e^{-\lambda\mu}\mu & \omega \cos(\lambda\omega) \end{pmatrix} , \quad \mathbf{p}_- = \begin{pmatrix} a \\ s \end{pmatrix} .$$

Ora

$$\text{Det}(M) = e^{-\lambda\mu}(\omega \cos(\lambda\omega) + \mu \sin(\lambda\omega)) ,$$

e quindi la condizione per avere soluzioni è che sia

$$\mu = -\omega \cot(\lambda\omega) .$$

Con le stesse notazioni usate più sopra, abbiamo

$$\frac{\eta}{1-\eta} = -\cot \left[K \sqrt{1-\eta} \right] . \quad (**)$$

E' evidente che anche qui il numero di soluzioni cresce al crescere di K .

B.1 Numero di stati legati per la buca di potenziale

Considerando le relazioni (*) e (**) che determinano l'energia per gli stati legati (corrispondenti a stati pari e dispari), ed il comportamento delle funzioni trigonometriche, è possibile determinare il numero di stati legati: questo corrisponde al più piccolo intero maggiore di

$$N_{V_0, \lambda} = \frac{\sqrt{2mV_0\lambda^2/\hbar^2}}{\pi/2} = \sqrt{2mV_0} \frac{2\lambda}{\pi\hbar} .$$

C Potenziale a delta

Consideriamo l'operatore di Schroedinger con potenziale

$$V(x) = -A \delta(x) ,$$

dove A è una costante reale (positiva). Ci interessa determinare gli stati legati, ossia le soluzioni di

$$H\psi = E\psi$$

con $E < 0$.

Al di fuori del punto $x = 0$, il problema si riduce a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} = -|E| \psi ,$$

ovvero

$$\psi_{xx} = \mu^2 \psi , \quad \mu^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} > 0 .$$

Indichiamo con un indice $(-, +)$ le funzioni negli intervalli $(-\infty, 0)$ e $(0, \infty)$ rispettivamente. Abbiamo immediatamente

$$\psi_{(\pm)}(x) = a_{(\pm)} e^{\mu x} + b_{(\pm)} e^{-\mu x} .$$

E' anche immediato vedere che la condizione di normalizzabilità di ψ – cioè in sostanza la richiesta di avere $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ – richiede

$$b_{(-)} = 0 = a_{(+)} .$$

Quindi

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_{(-)}(x) = a_{(-)} e^{\mu x} & \text{per } x < 0 \\ \psi_{(+)}(x) = b_{(+)} e^{-\mu x} & \text{per } 0 < x. \end{cases}$$

D'ora in poi scriveremo $a_{(-)} = a$, $b_{(+)} = b$; quindi

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_{(-)}(x) = a e^{\mu x} & \text{per } x < 0 \\ \psi_{(+)}(x) = b e^{-\mu x} & \text{per } 0 < x. \end{cases}$$

Le condizioni di raccordo in $x = 0$ corrispondono alla continuità di ψ e ad avere una discontinuità di ψ di ampiezza pari ad A (il coefficiente di δ nel potenziale); Quindi queste sono

$$\begin{cases} \psi_{(-)}(0) = \psi_{(+)}(0) & , \\ \psi'_{(+)}(0) = \psi'_{(-)}(0) - \widehat{A} \psi_{(-)}(0) & , \end{cases}$$

avendo scritto

$$\widehat{A} := (2mA/\hbar^2) .$$

La prima condizione implica che

$$b = a ;$$

abbiamo quindi

$$\psi_{(\pm)}(x) = a e^{\mp \mu x} .$$

Osservando che

$$\psi'_{(\pm)}(x) = \mp a \mu e^{\mp \mu x} ,$$

la seconda condizione di raccordo diventa

$$-a \mu = a \mu - \hat{A} a ,$$

che fornisce immediatamente

$$\mu = \frac{\hat{A}}{2} = \frac{m A}{\hbar^2} .$$

Ricordando la definizione di μ in termini dell'energia $E = -|E|$ dello stato legato, abbiamo

$$|E| = \frac{m A^2}{2 \hbar^2} .$$

Notiamo che questo determina (univocamente) μ , quindi l'energia E . Il parametro a non è invece stato determinato, ma il suo valore (a meno di una fase θ , che può essere presa uguale a zero) segue immediatamente dalla condizione di normalizzazione

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

Infatti abbiamo

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx &= 2 \int_0^{\infty} |a e^{-\mu x}|^2 dx = 2 |a|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\mu x} dx \\ &= - \left[\frac{|a|^2}{\mu} \right]_0^{\infty} = \frac{|a|^2}{\mu} ; \end{aligned}$$

quindi deve essere

$$|a|^2 = \mu ; \quad a = \sqrt{\mu} e^{i\theta} .$$

Notiamo infine che, come previsto dai risultati generali elencati in precedenza (nella sezione 1), l'unico stato legato – che è anche lo stato fondamentale – non ha nodi, ed è inoltre pari (qui il potenziale è evidentemente pari).

In conclusione,

$$|E| = \frac{\hbar^2 \mu^2}{2m} ; \quad \psi(x) = \sqrt{\mu} e^{-\mu|x|} , \quad \mu = mA/\hbar^2 .$$

Esercizio*. Si consideri il potenziale

$$V(x) = -B \delta(x + \xi) - B \delta(x - \xi) ,$$

con $B = A/2$ e ξ costanti reali positive. Dopo aver determinato gli stati legati, si verifichi che per $\xi \rightarrow 0$ si ottengono i risultati del potenziale a delta semplice.

D Potenziale a delta e buca di potenziale

Sappiamo che la delta si può ottenere come limite di potenziali non singolari; in particolare qui ci interessa ottenere la delta come limite di funzioni “rettangolari”. Vogliamo ora considerare una successione di “buche di potenziale” via via più strette e profonde, e vedere se lo spettro discreto di queste corrisponde a quello del potenziale a delta.

In altre parole considereremo ora il potenziale a buca visto in precedenza,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < -\xi \\ -A & \text{per } -\xi \leq x \leq \xi \\ 0 & \text{per } x > \xi, \end{cases}$$

ma ci interessa in particolare il caso in cui

$$\xi = \frac{1}{n}, \quad V_0 = A \left(\frac{n}{2} \right).$$

Infatti in questo caso abbiamo (nel limite $n \rightarrow \infty$)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} V(x) dx = \int_{-\xi}^{+\xi} V(x) dx = -A = \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} -A \delta(x) dx.$$

Non dobbiamo fare altro che considerare i risultati generali nell’opportuno limite.

D.0.1 Autofunzioni pari

Nel caso pari abbiamo mostrato che si hanno soluzioni per

$$\mu = \omega \tan(\lambda \omega).$$

Ricordando le relazioni tra μ, ω ed E , e scrivendo $\eta = |E|/V_0$, $K = (\xi \sqrt{2mV_0})/\hbar$, questa relazione si scrive nella forma (*), che riproduciamo qui:

$$\sqrt{\frac{\eta}{1-\eta}} = \tan \left[K \sqrt{1-\eta} \right]. \quad (*)$$

Per

$$\lambda = \frac{1}{n}, \quad V_0 = A \frac{n}{2}.$$

risulta immediatamente

$$K := \frac{\sqrt{mAn}}{n\hbar} = \frac{\sqrt{Am}}{\hbar} \sqrt{1}\sqrt{n},$$

quindi il limite $n \rightarrow \infty$ corrisponde a $K \rightarrow 0$. In questo limite, la (*) diventa

$$\sqrt{\frac{\eta}{1-\eta}} = K \sqrt{1-\eta},$$

ossia

$$\sqrt{\eta} = K (1 - \eta) ;$$

è evidente che abbiamo sempre una (ed una sola) soluzione per questa equazione. Essa è data da

$$\eta = \frac{1 + 2K^2 - \sqrt{1 + 4K^2}}{2K^2} \approx K^2 ,$$

ovvero

$$\eta := \frac{|E|}{V_0} \simeq \frac{2m V_0 \lambda^2}{\hbar^2} ;$$

ne segue che

$$|E| \simeq \frac{2m}{\hbar^2} V_0^2 \lambda^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{A^2 n^2}{4} \frac{1}{n^2} = \frac{m A^2}{2 \hbar^2} .$$

Abbiamo quindi ritrovato il livello dell'unico stato legato per il potenziale delta. E' evidente che anche la autofunzione corrispondente converge a quella trovata nella discussione del potenziale delta.

D.0.2 Autofunzioni dispari

Nel caso dispari abbiamo visto come la condizione per avere soluzioni sia

$$\mu = -\omega \cot(\lambda\omega) .$$

Con le stesse notazioni usate più sopra, abbiamo (anche in questo caso ririduciamo l'equazione trovata in precedenza)

$$\frac{\eta}{1 - \eta} = -\cot \left[K \sqrt{1 - \eta} \right] . \quad (**)$$

Per $K \rightarrow 0$ questa diviene

$$\frac{\eta}{1 - \eta} = -\frac{1}{K \sqrt{1 - \eta}} ,$$

ossia

$$K = -\frac{\eta}{\sqrt{1 - \eta}}$$

che non ha soluzione per K positivo.

Abbiamo quindi ritrovato tutti i risultati ottenuti per il potenziale a delta; in altre parole questo puo' essere considerato come opportuno limite dei potenziali di buca finita.

E L'oscillatore armonico

L'oscillatore armonico quantistico è stato già studiato in corsi precedenti¹³; ricordiamo comunque brevemente alcuni risultati e formule notevoli in vista di un utilizzo futuro nel quadro della *teoria delle perturbazioni*.

In questo caso, l'Hamiltoniana è

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 ,$$

sottolineamo che qui ω è un parametro reale, corrispondente classicamente alla frequenza dell'oscillatore.

Per risolvere l'equazione di Schroedinger

$$\psi_{xx} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{m\omega^2 x^2}{2} - E \right) \psi$$

è utile introdurre una variabile adimensionale ξ definita come

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

ovvero riconoscere che esiste una lunghezza caratteristica del sistema, che tramite semplici considerazioni dimensionali¹⁴ risulta essere $\ell = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$, cosicchè ξ non è altro che il rapporto x/ℓ .

In termini di questa variabile abbiamo

$$\widehat{\psi}_{\xi\xi} = \left(\xi^2 - \frac{2E}{\hbar\omega} \right) \widehat{\psi}$$

e naturalmente bisogna ora pensare $\widehat{\psi} = \widehat{\psi}(\xi)$, con $\widehat{\psi}(\xi) = \psi(\xi\sqrt{m\omega/\hbar})$.

Per $\xi \rightarrow \infty$ possiamo trascurare il termine con E , dunque asintoticamente

$$\widehat{\psi}(\xi) \approx \exp[-\xi^2/2] ;$$

più precisamente avremo

$$\widehat{\psi}(\xi) \exp[-\xi^2/2] \chi(\xi) ,$$

e sostituendo nell'equazione di Schroedinger vediamo che χ deve soddisfare l'equazione

$$\chi'' - 2\xi\chi' + 2n\chi ,$$

dove abbiamo definito

$$n = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} .$$

¹³In particolare, Fisica Generale 3 e Fisica Matematica 3

¹⁴Lo studente è invitato a costruire una quantità con le dimensioni della lunghezza a partire dalle costanti fisiche del sistema, ossia \hbar , m ed ω .

Questa equazione ammette soluzioni con χ finita per ξ finita e che crescono per $\xi \rightarrow \pm\infty$ non più velocemente di una potenza (in modo tale che $\widehat{\psi}(\xi) \rightarrow 0$) se e solo se n è un intero non negativo. A meno di una costante (che può essere fissata richiedendo $\|\psi\| = 1$) abbiamo

$$\chi(\xi) = H_n(\xi) ,$$

con H_n il *polinomio di Hermite* di grado n ; questi sono definiti da

$$H_n(y) := (-1)^n \exp[y^2] \left(\frac{d^n}{dy^n} \exp[-y^2] \right) .$$

Tornando alla variabile originale x (e determinando il coefficiente per avere la corretta normalizzazione) risulta

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right] H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) .$$

In particolare, dato che $H_0(y) = 1$, lo stato fondamentale è

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right] .$$

Le autofunzioni degli stati $n = 1, 2, \dots$ possono essere determinate ricorsivamente (utilizzando le proprietà dei polinomi di Hermite) tramite la formula

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2n}} \left(\frac{1}{\beta} x - \beta \frac{d}{dx} \right) \psi_{n-1}(x) ,$$

dove abbiamo scritto

$$\beta := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} .$$

Questa si scrive anche in termini degli operatori di abbassamento ed innalzamento η ed η^\dagger , definiti da

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (p - im\omega x) , \quad \eta^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (p + im\omega x) .$$

Osserviamo infatti che

$$\eta\eta^\dagger = \frac{1}{\hbar\omega} H + \frac{1}{2} , \quad \eta^\dagger\eta = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2} ;$$

ne segue anche che

$$[\eta, \eta^\dagger] = 1 ,$$

ed inoltre

$$[H, \eta] = -\hbar\omega\eta , \quad [H, \eta^\dagger] = +\hbar\omega\eta^\dagger .$$

Sia ora $\psi_n = |n\rangle$ una autofunzione di H corrispondente all'autovalore (all'energia) $E = E_n$. Allora

$$H\eta|n\rangle = \eta H|n\rangle - \hbar\omega\eta|n\rangle = (E - \hbar\omega)\eta|n\rangle ;$$

quindi $\eta|n\rangle$ è un autostato di H con energia $E' = E - \hbar\omega$, cioè corrispondente al livello $n - 1$. In altre parole, abbiamo mostrato che

$$\eta|n\rangle = |n-1\rangle ;$$

naturalmente la catena deve terminare nello stato fondamentale, ed in effetti si ha (come si può controllare dall'espressione esplicita di $\psi_0(x) = |0\rangle$)

$$\eta|0\rangle = 0 .$$

Allo stesso modo, abbiamo

$$H\eta^\dagger|n\rangle = \eta^\dagger H|n\rangle + \hbar\omega\eta^\dagger|n\rangle = (E + \hbar\omega)\eta^\dagger|n\rangle ;$$

quindi $\eta^\dagger|n\rangle$ è un autostato di H con energia $E' = E + \hbar\omega$, cioè corrispondente al livello $n + 1$. In altre parole, abbiamo mostrato che

$$\eta^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle .$$

Ricordiamo infine che l'energia dello stato fondamentale (e quindi l'intero spettro) si ottiene immediatamente operando con η pur senza conoscere le funzioni $\psi_n(x)$. Infatti $\eta|0\rangle = 0$ implica che

$$0 = \langle 0|\eta^\dagger\eta|0\rangle = \langle 0|\left(\frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}\right)|0\rangle = \left(\frac{1}{\hbar\omega}E_0 - \frac{1}{2}\right)\langle 0|0\rangle = \left(\frac{1}{\hbar\omega}E_0 - \frac{1}{2}\right) ,$$

e quindi necessariamente

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega .$$

Segue immediatamente da questo, e dalla discussione precedente, che

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

Infine, dalla definizione di η ed η^\dagger segue immediatamente che

$$x = -i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\eta^\dagger - \eta) ; \quad p = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\eta^\dagger + \eta) .$$

E' anche comodo ricordare che

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\eta^\dagger)^n|0\rangle , \quad \langle 0|\eta^n(\eta^\dagger)^n|0\rangle = (n!) , \quad \langle 0|0\rangle = 1 .$$

Bibliografia

La discussione che fornisco qui dei teoremi in dimensione uno, e del teorema di degenerazione, segue da vicino quella di Picasso (nel testo “per matematici”). I sistemi considerati nelle Appendici (e che nel corso di Fisica Matematica 3, da cui questa dispensa trae origine, erano considerati in dispense diverse) sono studiati in qualsiasi testo di Meccanica Quantistica, tra cui ad esempio quelli di Landau, di Dirac, di Messiah e di Picasso.

La connessione tra simmetria e Meccanica Quantistica accennata al termine della sezione 3 è anche un argomento classico; una discussione completa e classica è fornita dal libro di Weyl, si vedano anche il testo di Hamermesh e come al solito quelli di Landau, di Dirac, di Messiah e di Picasso (nella versione “per fisici”).

- L.E. Picasso, *Lezioni sui Fondamenti della Meccanica Quantistica*; ETS 2017
- L.E. Picasso, *Lezioni di Meccanica Quantistica*; ETS 2015
- L.D. Landau and I.M. Lifshits, *Meccanica Quantistica*, Editori Riuniti
- P.A.M. Dirac, *I principi della Meccanica Quantistica*, Boringhieri
- A. Messiah *Quantum Mechanics*, Dover
- M. Hamermesh, *Group theory and its application to physical problems*, Dover
- H. Weyl, *The theory of groups and Quantum Mechanics*, Dover