Meccanica Quantistica II

Prof. Mauro Villa

Dettaglio del corso - II

- Stati liberi e stati legati

  - Eq. di Schroedinger con potenziale

  - Casi unidimensionali:

    -- Stati stazionari;

    -- buca di potenziale infinita

    -- buca di potenziale finito

    -- Oscillatore armonico

    -- barriera di potenziale (step singolo e doppio)

    --effetto tunnel

    Esempi: microscopia ad effetto tunnel, decadimenti beta, fusione nucleare

- L'atomo di idrogeno

  - Problemi in 3 dimensioni

  -- Livelli energetici, numeri quantici

- Spin e fisica atomica
  - Spin ed elettroni in un campo B
  - Spin e statistica
  - Interazione spin orbita e doppietti spettrali

Materiale didattico e testi

- Quanto già presentato dal Prof. Massa
- Halliday-Resnik, *Meccanica Quantistica*, CEA
- Max Born, *Fisica Atomica*, Boringhieri

- Lucidi ed altro materiale in ISHTAR:
- http://ishtar.df.unibo.it/Uni/bo/ingegneria/all/
  /villa/stuff/2005/LS/FisicaModerna.html

Prima parte: Stati legati

- Equazione di Schrödinger con potenziale
- Soluzioni all'eq. di Schrödinger: stati stazionari
- Normalizzazione e continuità delle funzioni d'onda
- Esempio I: buca di potenziale infinita

- Grandezze fisiche: operatori ed incertezze; osservabili
- Esempio II: buca di potenziale finita
- Esempio III: Forza elastica / Oscillatore armonico
- Sovrapposizione ed evoluzione di stati
- Principio di corrispondenza: M. Quantistica ←→M. Classica

Equazione di Schrödinger (particella libera)

Eq per la particella libera (1D): $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}=i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

Caratteristiche principali:

eq differenziale *lineare* su quantità energetiche

Vale il ***Principio di sovrapposizione***:

$$\psi_1;\psi_2 \quad \text{soluzioni} \quad \Rightarrow \quad \psi=a\psi_1+b\psi_2 \text{ soluzione}$$

La soluzione $\psi(x,t)=Ae^{i(kx-\omega t)}$ rappresenta un'onda piana.

Sostituendo nella equazione di Schrödinger, si ottiene

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\hbar\omega \quad \text{e quindi, utilizzando} \quad \left.\begin{array}{l} E=\hbar\omega \\ p=\hbar k \end{array}\right\} \Rightarrow (K\equiv)\frac{p^2}{2m}=E$$

che rispecchia la proprietà della particella libera
(non soggetta a forze, e quindi senza energia potenziale).

Eq. di Schrödinger con potenziale

- In meccanica classica l'equazione energetica di riferimento e'

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + U(x) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

- Una naturale estensione dell'equazione di Schrödinger in presenza di potenziali è quindi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

- Il principio di corrispondenza MC ↔ MQ è così soddisfatto

In MC, il ***moto di un corpo*** è determinato sulla base delle equazioni cardinali della meccanica: eq. sulle forze e sui momenti delle forze. In MQ, lo ***stato di un sistema*** (Ψ) è determinato sulla base dell'equazione di Schrödinger: trovare la Ψ(x,y) conoscendo la U(x)

Soluzioni all'eq. di Schrödinger: stati stazionari (I)

L'eq. di Schrödinger è una eq *lineare* alle derivate parziali in $\Psi(x,t)$ che si risolve in diversi passi.

Conseguenze della linearità:

$$\psi_1 ; \psi_2 \quad \text{soluzioni} \quad \Rightarrow \quad \psi = a\psi_1 + b\psi_2 \text{ soluzione}$$

Come trovo una prima soluzione?

Ipotesi. Separazione delle variabili: $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x)\varphi(t) = i\hbar\,\psi(x)\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t}$$

$\psi(x)$ parte spaziale

$\varphi(t)$ parte temporale

Infine divido tutto per $\psi(x)\varphi(t)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + U(x) = i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = C = \text{costante}$$

C non dipende da x o da t

Stati stazionari: II - parte temporale *φ(t)*

Iniziamo ad analizzare la parte temporale.
Si tratta di una eq differenziale lineare al primo ordine:

$$i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = C \rightarrow \frac{d\varphi(t)}{dt} = -i\frac{C}{\hbar}\varphi(t)$$

Notare il cambio
$\partial \rightarrow d$

La cui soluzione è facile: $\phi(t) = Ae^{-i(C/\hbar)t}$

Si tratta della parte temporale dell'equazione delle onde.
Questa soluzione ha una pulsazione data da: $\omega = C/\hbar$
E quindi una energia E data da : $E = \hbar\omega = C$

La costante C ha le dimensioni dell'energia (verificare!) e rappresenta l'energia associata ad una determinata funzione d'onda. Nel processo di separazione delle variabili abbiamo imposto che l'energia del sistema sia ben definita!

Stati stazionari: III – definizione ed energia

Proprietà principale degli stati ad energia E definita:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) = \psi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$$

Notare l'assenza di A

La densità di probabilità non dipende dal tempo:

$$P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = [\psi^*(x)e^{+iEt/\hbar}][\psi(x)e^{-iEt/\hbar}] = \psi^*(x)\psi(x) = P(x)$$

Poiché la probabilità *P(x,t)* non varia con *t*, lo stato *osservabile* del sistema non varia nel tempo. Tali stati quantistici sono detti

stati stazionari.

Per tali stati l'energia E è nota con precisione. Per il principio di indeterminazione di Heisenberg, in tali stati il tempo è una quantità non determinabile: $\Delta E \Delta t > \hbar / 2$

Stati stazionari: IV – parte spaziale *ψ(x)*

Riprendiamo l'eq di Schrödinger e sostituiamo la φ(t):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+U(x)\psi(x)\varphi(t)=\psi(x)i\hbar\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t}=E\psi(x)\varphi(t)$$

Dopo alcuni passaggi si perviene *all'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo*:

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

Caratteristiche: eq differenziale lineare alle derivate seconde (no derivate parziali in 1D) senza termini complessi. La ψ(x) può essere reale (ma ricordate che se *ψ(x)* è una soluzione allora anche *aψ(x)* con *a* costante complessa lo è!)

Normalizzazione delle funzioni d'onda

Che significato **fisico** diamo all'ampiezza della funzione d'onda?

- Probabilità di trovare la particella in un intervallo di ampiezza *dx*:

$$P(x,t)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$$

- Certezza di trovare la particella da qualche parte:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = \int \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$$

L'eq definisce la costante moltiplicativa della funzione d'onda. Solitamente si tratta di un numero definito a meno di una fase ininfluente. Se $\psi(x)$ è soluzione norm. $\rightarrow$ anche $\psi(x)\, e^{i\theta}$ lo è

Eccezione: onde piane. O non si fa la normalizzazione $\rightarrow \psi(x) = e^{ikx}$

o si normalizza in un "volume" (lunghezza) arbitrario (V)

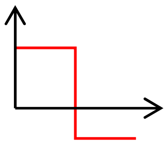
$P(V)=1 \rightarrow$ $\psi(x) = e^{ikx} / \sqrt{V}$

Continuità della funzione d'onda (I)

- Riscriviamo l'equazione di Schrödinger nella forma:

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

- Se $U(x)$ è una funzione continua e $\psi(x)$ *è* almeno una funzione C_0, → $\psi''(x)$ è continua, $\psi(x)$ è una funzione almeno C_2
- In generale, se $U(x)$ è una funzione C_n, allora $\psi(x)$ è una funzione C_{n+2}



- Se $U(x)$ presenta un salto finito, allora la $\psi''(x)$ sarà discontinua, ma la $\psi'(x)$ sarà continua e così anche la $\psi(x)$

Continuità della funzione d'onda (II)

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

- Se $U(x)$ presenta un salto infinito, allora la $\psi''(x)$ sarà discontinua, così anche la $\psi'(x)$, ma la $\psi(x)$ sarà ancora continua.

$$U(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ u & x > 0 \end{cases}$$

Regola generale: la $\psi(x)$ è sempre continua

La nostra prima soluzione: $\psi(x)=0$ per $x<0$

$$\text{per} \quad x > 0: \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(u - E)\psi(x) \quad \rightarrow \quad \psi(x) = A\,\mathrm{sen}(kx) + B\cos(kx)$$

La continuità in $x=0$ ci impone: $\psi(0) = 0 = A\sin 0 + B\cos 0 = B \rightarrow B = 0$

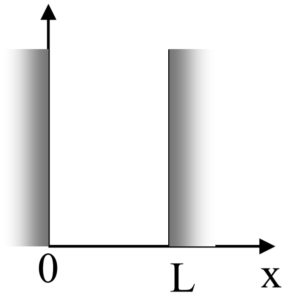
$$\text{per} \quad x > 0: \quad \psi(x) = A\,\mathrm{sen}(kx) \ \text{ con } \ k = \sqrt{2m(E-u)}/\hbar$$

Esempio I: buca di potenziale infinita (I)

Determiniamo la funzione d'onda per un potenziale dato da:

$$U(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \quad (I) \\ 0 & 0 < x < L \quad (II) \\ +\infty & x > L \quad (III) \end{cases}$$

(buca di potenziale)



Soluzione:

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

La nostra prima soluzione: $\psi_I(x)=0$ per $x<0$
e $\psi_{III}(x)=0$ per $x>L$
La particella non può mai trovarsi a x negative, né a $x>L$

$$\text{per} \quad 0 < x < L: \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

$$\rightarrow \quad \psi_{II}(x) = A\,\mathrm{sen}(kx) + B\cos(kx) \qquad \text{con} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Esempio I: buca di potenziale infinita (II)

Nella regione II: $\psi_{II}(x) = A\mathrm{sen}(kx) + \cancel{B\cos(kx)}$

A, B, E(k), incogniti. Richiedo la continuità per *x=0*:

$$\text{per} \quad x = 0, \quad \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow \; 0 = B \qquad\qquad \psi_{II}(x) = A\mathrm{sen}(kx)$$

Richiedo la continuità per *x=L*:

$$\text{per} \quad x = L, \quad \psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \rightarrow \; A\sin kx = 0$$

$$\rightarrow A = 0 \quad \text{oppure} \quad kL = \pi n \quad \text{con } n \text{ intero}$$

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad \rightarrow \quad E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$$

Solo certi valori di energia sono permessi;
L'energia è quantizzata

Normalizzazione: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \rightarrow \int_0^L \psi_{II}^*(x)\psi_{II}(x)dx = 1 \rightarrow A^* AL/2 = 1$

Posso scegliere A reale: $\psi_{II}(x) = \mathrm{sen}(kx)\sqrt{2/L}$

Esempio I: buca di potenziale infinita (III)

- Soluzione completa all'eq. Indipendente da *t*:

$$U(x) = \begin{cases} +\infty & x<0 \quad (I) \\ 0 & 0<x<L \quad (II) \\ +\infty & x>L \quad (III) \end{cases} \quad \rightarrow \quad \psi(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \quad (I) \\ \mathrm{sen}(kx)\sqrt{2/L} & 0<x<L \quad (II) \\ 0 & x>L \quad (III) \end{cases}$$

Dove $k = k_n = \dfrac{n\pi}{L} \quad \rightarrow \quad E = E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$ con n intero >0

Reintroduciamo il tempo:

$$\Psi_n(x,t) = \mathrm{sen}(k_n x)e^{-iE_n t/\hbar}\sqrt{2/L}$$

Soluzione con energia E_n definita

Usiamo il *principio di sovrapposizione* per trovare la soluzione più generale:

$$\Psi(x,t) = \sum_1^{+\infty} c_n \Psi_n(x,t) = \sum_1^{+\infty} c_n\, \mathrm{sen}(k_n x)e^{-iE_n t/\hbar}\sqrt{2/L} \qquad \text{con} \quad \sum_1^{+\infty} |c_n|^2 = 1$$

I coefficienti c_n sono determinati dalle condizioni iniziali.

Buca di potenziale infinita: riassunto

- Abbiamo visto:

1) Come passare dall'eq di Schrödinger completa a quella indipendente dal tempo (separazione delle variabili);
2) Come risolvere la parte temporale (energia definita);
3) Come risolvere la parte spaziale (per regioni omogenee)
4) Come usare la continuità della funzione d'onda per determinare alcune caratteristiche della $\psi(x)$
5) Come *ottenere* la quantizzazione dell'energia imponendo la continuità:

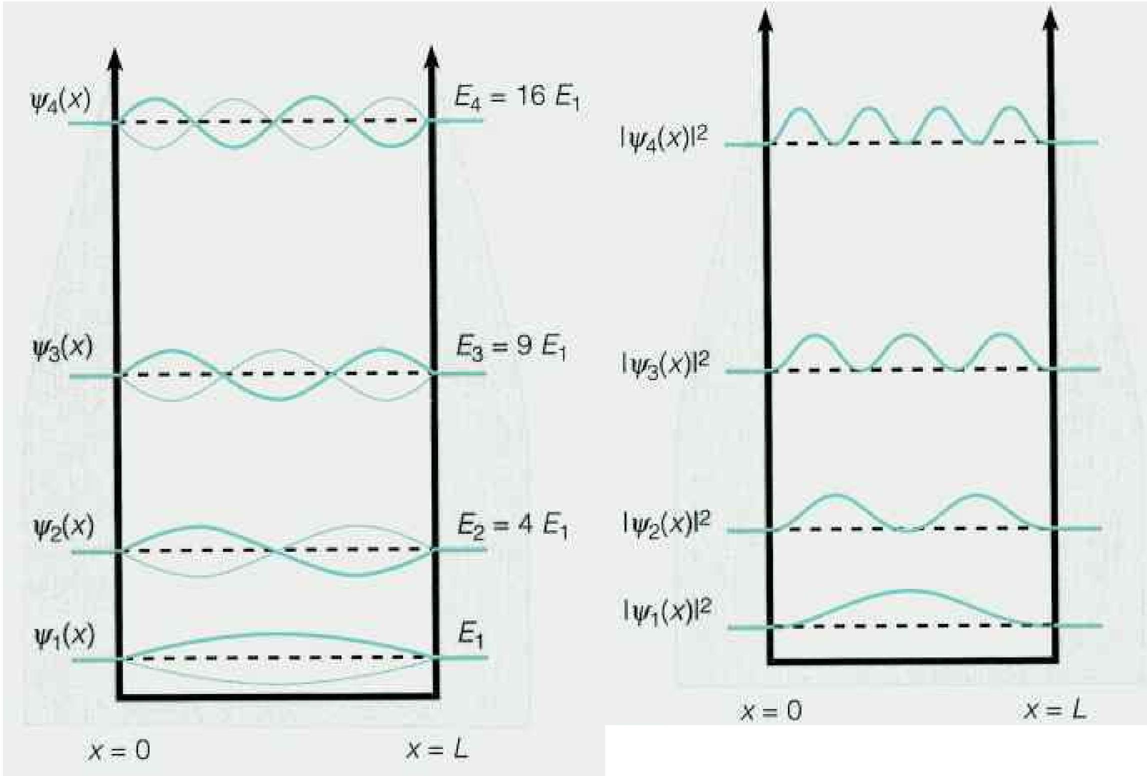
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \qquad \text{con } n \text{ intero;}$$

6) Come ricomporre la funzione d'onda completa $\Psi_n(x,t)$
7) Come ottenere la soluzione più generale

$$\Psi(x,t) = \sum_{1}^{+\infty} c_n \,\mathrm{sen}(k_n x) e^{-iE_n t/\hbar} \sqrt{2/L} \qquad \text{con} \quad \sum_{1}^{+\infty} |c_n|^2 = 1$$

Buca di potenziale infinita

Primi stati stazionari:



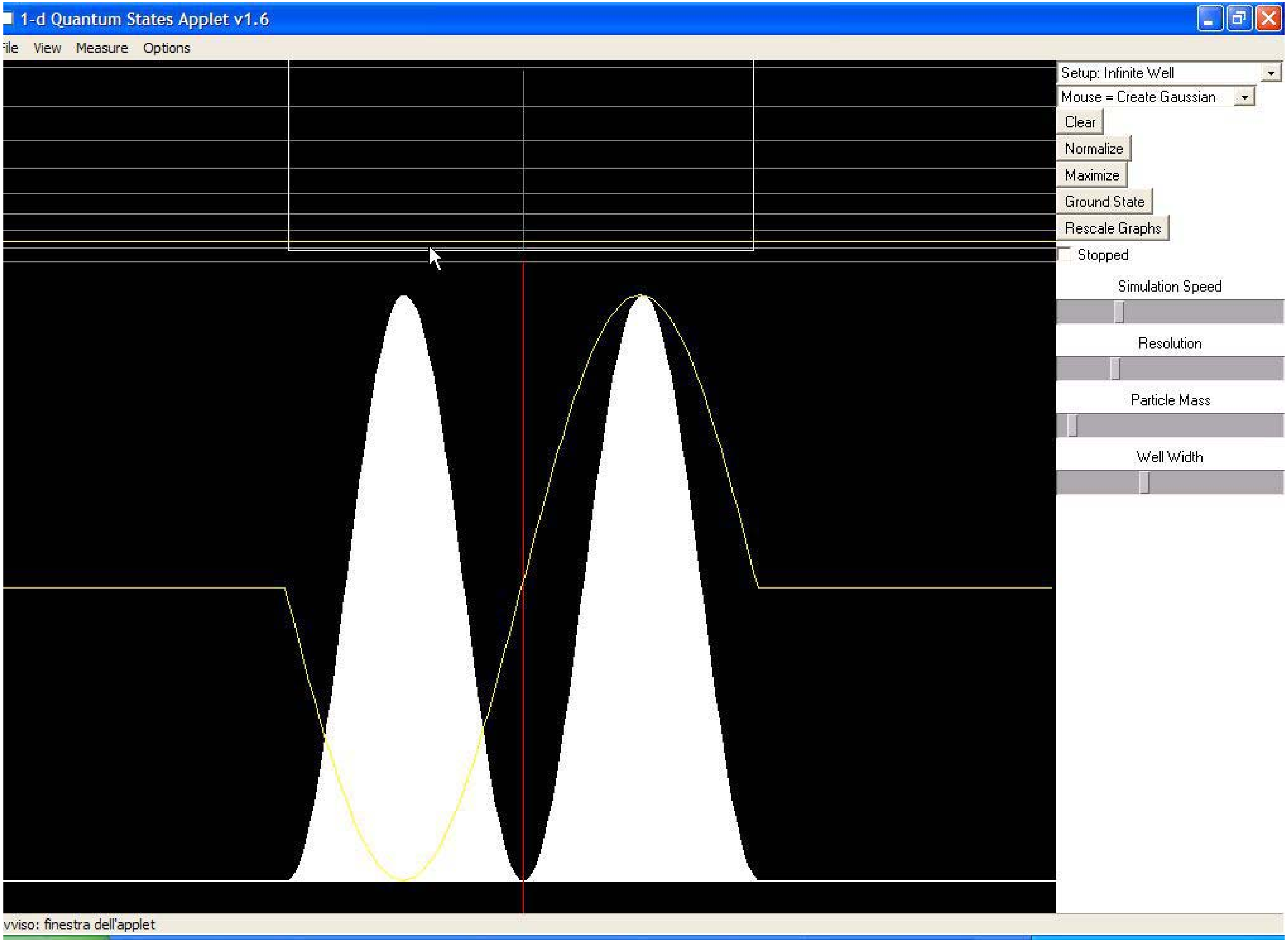
Livello di minima energia (n=1, ground state):

$$\Psi_1(x,t) = \mathrm{sen}(\pi x / L) e^{-iE_1 t/\hbar} \sqrt{2/L} \qquad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Secondo livello energetico (n=2):

$$\Psi_2(x,t) = \mathrm{sen}(2\pi x / L) e^{-i4E_1 t/\hbar} \sqrt{2/L} \qquad E_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 = n^2 E_1 = 4E_1$$

Applet Java



1-d Quantum States Applet v1.6
File View Measure Options
Setup: Infinite Well
Mouse = Create Gaussian
Clear
Normalize
Maximize
Ground State
Rescale Graphs
Stopped
Simulation Speed
Resolution
Particle Mass
Well Width
vviso: finestra dell'applet

Grandezze fisiche: operatori ed incertezze

- Abbiamo una soluzione completa all'equazione di Schrödinger. Ormai sappiamo tutto del nostro sistema quantistico….
- Ma come si determina la posizione, l'impulso, la velocità e l'energia di una particella conoscendo la funzione d'onda?

Generalizzando il concetto di probabilità:

$P(x)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$ è la probabilità di trovare la particella nell'intervallo x, $x+dx$. La probabilità di *misurare* un valore x in un intorno di x, $x+dx$ è quindi: $P(x)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$

Calcolo il valore medio della quantità x attraverso l'espressione della *media pesata*:

$$\langle x \rangle = \int x P(x)dx = \int \psi^*(x)\, x\, \psi(x)dx$$

Incertezze

Stati stazionari:

Posizione: $\langle x \rangle = \int x P(x) dx = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx$

Potenze della posizione: $\langle x^n \rangle = \int x^n P(x) dx = \int \psi^*(x) x^n \psi(x) dx$

$(U(x) = U_0 + U_1 x + U_2 x^2 + U_3 x^3 .....)$

Incertezza sulla posizione: $\Delta x = \sqrt{\left\langle \left(x - \langle x \rangle \right)^2 \right\rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

Stati non stazionari:

Posizione: $\langle x \rangle (t) = \int x P(x,t) dx = \int \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx$

Incertezza sulla posizione: $\Delta x(t) = \sqrt{\left\langle \left(x - \langle x \rangle \right)^2 \right\rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

Per gli stati non stazionari le grandezze fisiche osservabili (e le loro incertezze) sono funzione del tempo t

Generalizzando….

Possiamo facilmente generalizzare per funzioni generiche della posizione: $f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + f_3 x^3 .....$

$$\langle f(x) \rangle (t) = \int f(x) P(x,t) dx = \int \Psi^*(x,t) f(x) \Psi(x,t) dx$$

Generalizziamo ulteriormente utilizzando il concetto di *operatore funzionale* $\bar{O}$: $\quad \bar{O}\Psi(x,t) = f(x,t)$

L’operatore funzionale è una operazione sulla funzione Ψ(x,t)

$$\langle O \rangle (t) = \int \Psi^*(x,t) \bar{O} \Psi(x,t) dx = \int \left\{ \Psi^*(x,t) \left[\bar{O} \Psi(x,t) \right] \right\} dx$$

In MQ, tutte le *quantità fisiche misurabili* (posizione, energia) sono *operatori funzionali*. I valori medi di tali operatori sono detti “**osservabili**” (quantità osservabile, misurabile), per distinguerli dalla funzione d’onda che non è osservabile né misurabile.

Principali osservabili fisiche

- Posizione. Operatore $\bar{O} = x$

  Osservabile: $\langle x \rangle = \int x P(x) dx = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx$

- Impulso. Operatore $\bar{O} = p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

  Osservabile: $\langle p \rangle = -\int \Psi^*(x,t) i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} dx = -\int \psi^*(x) i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} dx$

- Energia. Operatore $\bar{O} = E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

$$\langle E \rangle = \int \Psi^*(x,t) i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} dx \qquad \left(= \sum |c_n|^2 E_n \right)$$

Nota bene: l'equazione di Schrödinger è tra operatori:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad \rightarrow \quad \left(\frac{p^2}{2m} + U(x) \right) \Psi(x,t) = \bar{E} \Psi(x,t)$$

Esercizio sulla buca di potenziale infinita

- Calcolare le osservabili *posizione* e *impulso* e le loro incertezze per la funzione d'onda di minima energia

$$\Psi_1(x,t) = \mathrm{sen}(\pi x / L) e^{-iE_1 t/\hbar} \sqrt{2/L} \qquad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Posizione: $$\langle x \rangle = \int \psi_1^*(x) x \psi_1(x) dx = \int_0^L x\, \mathrm{sen}^2(k_1 x) dx (2/L) = L/2$$

$$\langle x^2 \rangle = \int \psi_1^*(x) x^2 \psi_1(x) dx = \int_0^L x^2\, \mathrm{sen}^2(k_1 x) dx (2/L) = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right)$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \simeq 0{,}181 L$$

Impulso: $$\langle p \rangle = -\int \psi_1^*(x) i\hbar \frac{d\psi_1(x)}{dx} dx = -i\hbar \int_0^L k_1\, \mathrm{sen}(k_1 x) \cos(k_1 x) dx (2/L) = 0$$

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int \psi_1^*(x) \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} dx = 2mE_1 \qquad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \simeq \frac{\pi \hbar}{L}$$

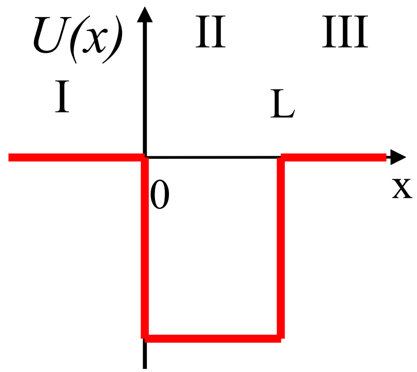
Principio di indeterminazione: $\Delta x \cdot \Delta p = 0.568\hbar$

Rifare l'esercizio per $\Psi_2(x,t)$

Esempio II: buca di potenziale finita

Determiniamo la funzione d'onda dello *stato fondamentale* per un potenziale dato da:

$$U(x)=\begin{cases} 0 & x<0 \quad (I) \\ -U_0 & 0<x<L \quad (II) \\ 0 & x>L \quad (III) \end{cases}$$



Soluzione:

Il sistema sarà caratterizzato da stati liberi e da stati legati.
Gli stati liberi (E>0) saranno simili ad onde piane (quando $U_o \rightarrow 0$),
Gli stati legati (E<0) saranno simili a quelli per la buca di potenziale Infinita (quando $Uo \rightarrow -\infty$)

Limitiamoci agli stati legati: E<0

Soluzione non normalizzabile: D=0

Nella regione I (*x<0*) si ha:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \quad \rightarrow \quad \psi(x)=Ce^{\alpha x}+\cancel{De^{-\alpha x}} \text{ con } \alpha=\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Buca di potenziale finita (II)

- Ricerchiamo una soluzione nella forma

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{+\alpha x} & x < 0 \quad (I) \\ A\,\mathrm{sen}(kx) + B\cos(kx) & 0 < x < L \quad (II) \\ Ge^{-\alpha x} & x > L \quad (III) \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{array}{l} \alpha = \sqrt{-\dfrac{2mE}{\hbar^2}} \\ k = \sqrt{\dfrac{2m(U_0 + E)}{\hbar^2}} \end{array}$$

Imponiamo la continuità di ψ e di ψ' in 0 e in L

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \rightarrow C = B \qquad \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \quad \rightarrow C\alpha = kA$$

Fisso A e B

$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \quad \rightarrow A\sin(kL) + B\cos(kL) = Ge^{-\alpha L}$$

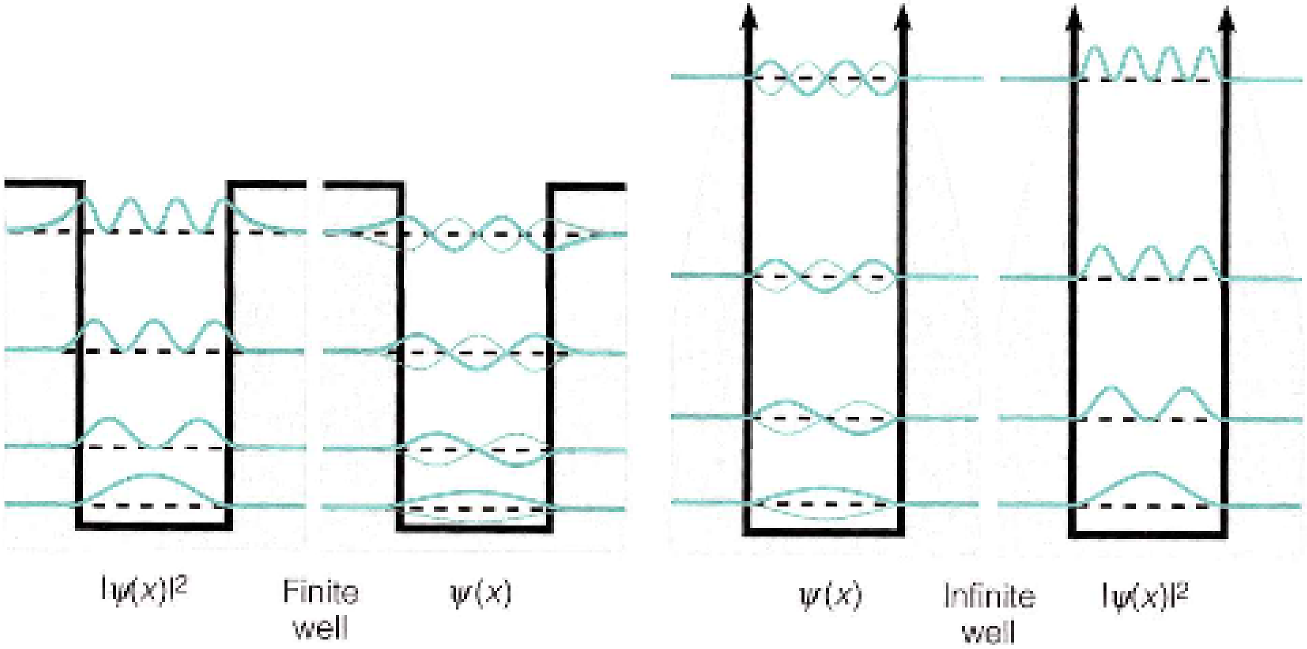
Fisso G

$$\psi'_{II}(L) = \psi'_{III}(L) \quad \rightarrow Ak\cos(kL) - kB\sin(kL) = -\alpha Ge^{-\alpha L}$$

Sostituendo e riarrangiando i termini: $2\cot(kL) = \dfrac{k}{\alpha} - \dfrac{\alpha}{k}$

E' una relazione di quantizzazione!

Buca di potenziale finita (III)



Notare le differenze tra la buca di potenziale finita (sinistra), l'analogo classico e la buca a potenziale infinito (destra).

In questo caso, la particella NON è confinata nella buca, ma può Essere trovata anche nelle regioni I e III, non permesse classicamente

Lunghezza di penetrazione δ: $\psi(x) = e^{-\alpha x}$

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}}$$

Esempio III: Forza elastica / Oscillatore armonico

Caso classico:

Legge di Hooke: $F_x = -kx \qquad F_x = ma = m\ddot{x}$

Potenziale: $U(x) = \frac{1}{2} k x^2$

Equazione del moto: $x(t) = A\cos(\omega t + \varphi_0)$ con $\omega = \sqrt{k/m}$

Moto oscillatorio tra x=-A e x=+A

Caso quantistico:

Potenziale: $U(x) = \frac{1}{2} k x^2$

Eq. di Schrödinger: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

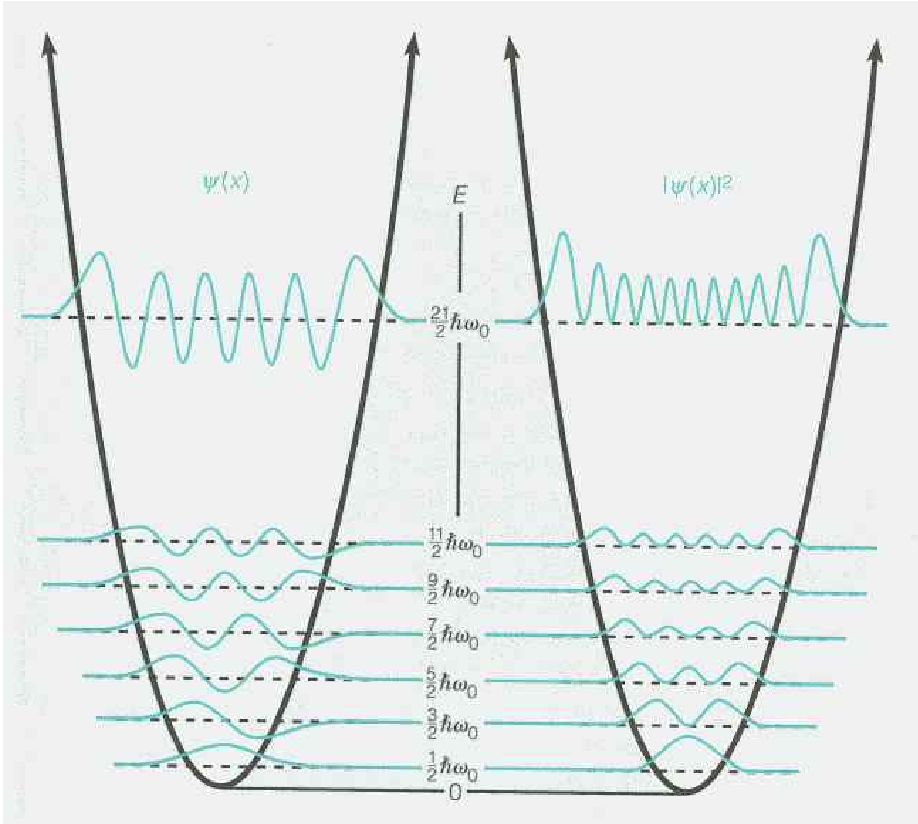
Quantizzazione: esistono soluzioni solo quando

$$E = \hbar\omega_0 (n + \tfrac{1}{2}) \quad \text{con} \quad \omega_0 = \sqrt{k/m}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Lunghezza caratteristica: l=1/b→ $b = \left(mk\hbar^2\right)^{1/4}$

Le soluzioni per l'oscillatore armonico

n	E	$\psi_n(x)$
0	$\frac{1}{2}\hbar\omega_0$	$\sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}b^2x^2}$
1	$\frac{3}{2}\hbar\omega_0$	$\sqrt{\frac{b}{2\sqrt{\pi}}}(2bx)e^{-\frac{1}{2}b^2x^2}$
2	$\frac{5}{2}\hbar\omega_0$	$\sqrt{\frac{b}{8\sqrt{\pi}}}(4b^2x^2-2)e^{-\frac{1}{2}b^2x^2}$
3	$\frac{7}{2}\hbar\omega_0$	$\sqrt{\frac{b}{48\sqrt{\pi}}}(8b^3x^3-12bx)e^{-\frac{1}{2}b^2x^2}$
n	$(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0$	$\sqrt{\frac{b}{2^n n!\sqrt{\pi}}}H_n(bx)e^{-\frac{1}{2}b^2x^2}$



$H_n(bx)$: polinomi di Hermite

$$\int \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = \delta_{nm} \begin{cases} 1 & \text{per } n = m \\ 0 & \text{per } n \neq m \end{cases}$$

Vale per ogni insieme di soluzion
stazionarie

Lo stato fondamentale

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}b^2x^2}$$

Posizione media: $<x>=0$ (notare: $\langle x \rangle_n = 0 \quad \forall n$)

Incertezza su x: $\Delta x = \sqrt{\left\langle \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \right\rangle} = \frac{1}{b}$

Impulso medio: $<p>=0$ (notare: $\langle p \rangle_n = 0 \quad \forall n$)

Incertezza sull'impulso: $\Delta p = \sqrt{\left\langle \left(p - \langle p \rangle\right)^2 \right\rangle} = \frac{\hbar b}{2}$

Relazione di indeterminazione di Heisenberg: $\Delta x\, \Delta p = \hbar / 2$

Energia: $E = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ con $\omega_0 = \sqrt{k/m}$

Regola generale (su tutti gli stati QM): l'energia minima NON è mai 0
il corpo appare sempre in moto ($\Delta p \neq 0$), anche se non si sposta ($<p>=0$)
Per questo comportamento non esiste un analogo classico.

Sovrapposizione di stati

Supponiamo di avere un oscillatore armonico in una sovrapposizione di stati stazionari (*n=0, n=1*):

$$\Psi(x,t) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Psi_0(x,t) + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Psi_1(x,t) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}b^2x^2-\frac{1}{2}i\omega_0 t} + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{b}{2\sqrt{\pi}}}(2bx)e^{-\frac{1}{2}b^2x^2-\frac{3}{2}i\omega_0 t}$$

Determiniamo l'osservabile posizione:

$$x\rangle(t) = \int \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx = \int\left(\tfrac{1}{\sqrt{2}}\Psi^*{}_0(x,t) + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Psi^*{}_1(x,t)\right)x\left(\tfrac{1}{\sqrt{2}}\Psi_0(x,t) + \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Psi_1(x,t)\right)d.$$

$$= \frac{1}{2}\int \Psi_0^*(x,t)x\Psi_0(x,t)dx + \frac{1}{2}\int \Psi_1^*(x,t)x\Psi_1(x,t)dx + \frac{1}{2}\int \Psi_0^*(x,t)x\Psi_1(x,t)dx +$$

$$+\frac{1}{2}\int \Psi_1^*(x,t)x\Psi_0(x,t)dx = 0 + 0 + \mathrm{Re}\left[\int \Psi_0^*(x,t)x\Psi_1(x,t)dx\right] =$$

t

$$= \mathrm{Re}\left[\sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}}}\sqrt{\frac{b}{2\sqrt{\pi}}}e^{+\frac{1}{2}i\omega_0 t-\frac{3}{2}i\omega_0 t}\int e^{-\frac{1}{2}b^2x^2}x(2bx)e^{-\frac{1}{2}b^2x^2}dx\right] = \frac{1}{\pi b}\cos(\omega_0 t)$$

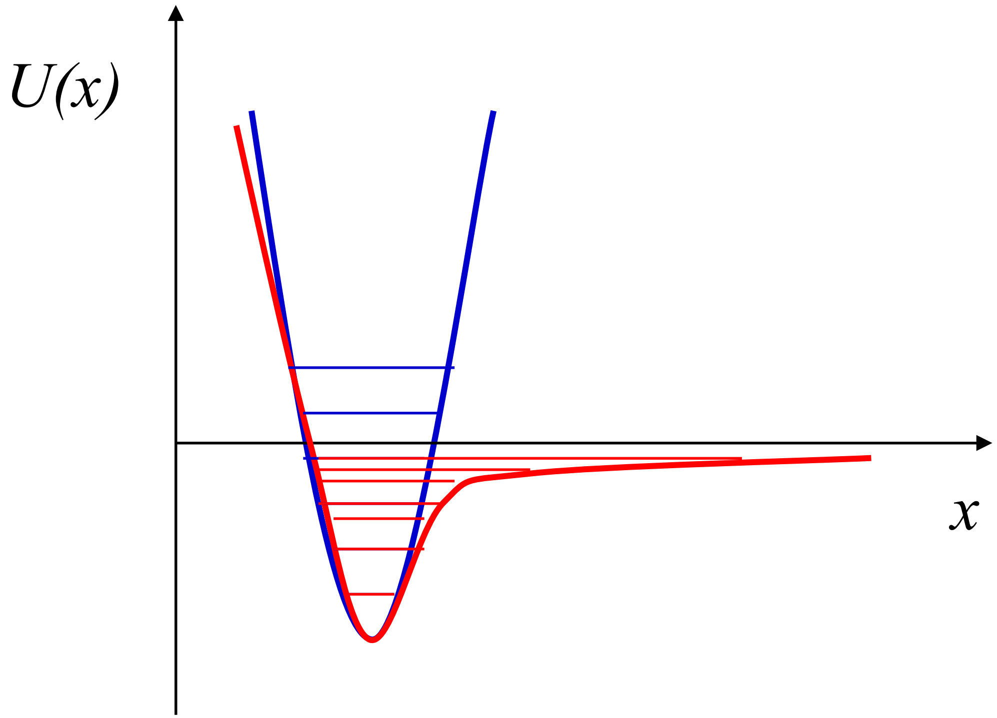
Applet→

La sovrapposizione degli stati produce il moto nel sistema!

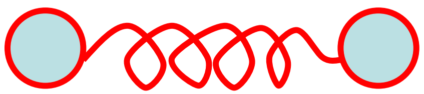
Esempi di oscillatori armonici: molecole, nuclei

MC: dato un potenziale arbitrario *U(x)* con un minimo, in prossimità del minimo il sistema ha delle oscillazioni (piccole oscillazioni)

MQ: per minimi sufficientemente profondi, il sistema si comporta come un oscillatore armonico: livelli energetici equispaziati



Esempi:
molecole biatomiche,
nuclei



Principio di Corrispondenza MQ ↔ MC

Meccanica Classica: $\vec{F} = m\vec{a}, \qquad F_x = m\ddot{x} \quad \rightarrow \quad x(t)$

Meccanica Quantistica: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad \rightarrow \quad \Psi(x,t)$

La *Ψ(x,t)* descrive *completamente* lo stato QM ma non è misurabile

Osservabile fisica: $\langle O \rangle (t) = \int \Psi^*(x,t)\bar{O}\Psi(x,t)dx$

Esempio: osservabile posizione $\langle x \rangle (t) = \int \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx$

Usando l'eq di Schrödinger si può verificare che:

$$m\frac{d^2\langle x \rangle (t)}{dt^2} = m\frac{d^2}{dt^2}\left(\int \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx\right) = \int \Psi^*(x,t)\left(-\frac{dU}{dx}\right)\Psi(x,t)dx = \left\langle -\frac{dU}{dx} \right\rangle = \langle F_x \rangle$$

Gli osservabili *accelerazione* e *forza* verificano: $\left\langle -\frac{dU}{dx} \right\rangle = \langle F_x \rangle = m\langle \ddot{x} \rangle$

La base della MC è una relazione tra *valori medi* sugli *stati quantistici*

Riassumendo

Esercizio I: condizione di normalizzazione

- Un sistema quantistico è soggetto ad un potenziale U(x) che produce solo stati legati. Siano $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ con n=0,1,2,…. le soluzioni normalizzate degli stati stazionari.

$$\int \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm} \begin{cases} 1 & \text{per } n = m \\ 0 & \text{per } n \neq m \end{cases}$$

Verificare che per uno stato arbitrario

$$\Psi(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \Psi_n(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Vale la condizione di normalizzazione $\sum_0^{+\infty} |c_n|^2 = 1$

Esercizio 2: Energia di un sistema

- Un sistema quantistico è soggetto ad un potenziale U(x) che produce solo stati legati. Siano $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ con n=0,1,2,…. le soluzioni normalizzate degli stati stazionari. Verificare che per uno stato arbitrario

$$\Psi(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \Psi_n(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

l'energia media vale:

$$\langle E \rangle = \int \Psi^*(x,t) i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} dx \qquad = \quad \sum |c_n|^2 E_n$$

Esercizio 3: Evoluzione di un sistema

- Al tempo t=0, un sistema quantistico è descritto da una funzione d'onda data φ(x) . Sapendo che $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ con n=0,1,2,…. sono le soluzioni normalizzate degli stati stazionari, determinare l'evoluzione futura (t>0) della funzione d'onda.

Soluzione: devo trovare i c_n per cui

$$\Psi(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \Psi_n(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Sapendo che: $\Psi(x,t=0) = \varphi(x)$

$$\int \Psi_n^*(x,t)\Psi(x,t)dx = \int \psi_n^*(x) e^{+iE_n t/\hbar} \left(\sum_0^{+\infty} c_m \psi_m(x) e^{-iE_m t/\hbar} \right) dx =$$

$$= \sum_0^{+\infty} c_m e^{+iE_n t/\hbar} e^{-iE_m t/\hbar} \int \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = \sum_0^{+\infty} c_m e^{+iE_n t/\hbar} e^{-iE_m t/\hbar} \delta_{nm} = c_n$$

Esercizio 3: Evoluzione di un sistema II

- Soluzione:

$$\int \Psi_n^*(x,0)\varphi(x)dx = \int \psi_n^*(x)\varphi(x)dx = c_n$$

$$\Psi(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \Psi_n(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

In questo modo sono sicuro che:

$$\Psi(x,t=0) = \varphi(x)$$