## 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 nel equazione di Schrödinger, si ottiene

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

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*** ($\Psi$) è determinato sulla base dell'equazione di Schrödinger: trovare la $\Psi(x,y)$ 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 *ψ(x)* è soluzione norm. → anche *ψ(x) e^{iθ}* 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* → $\psi(x) = e^{ikx}/\sqrt{V}$

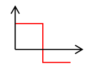


## Continuità della funzione d'onda (I)

- 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, *ψ''(x)* è continua, *ψ(x)* è una funzione $C_2$
- In generale, se *U(x)* è una funzione $C_n$, allora *ψ(x)* è una funzione $C_{n+2}$



- Se *U(x)* presenta un salto finito, allora la *ψ''(x)* sarà discontinua, ma la *ψ'(x)* sarà continua e così anche la *ψ(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 $x<0$

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

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

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

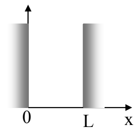


# Esempio I: buca di potenziale infinita (I)

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

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

(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 $x>L$

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

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



# 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 $x=0$:

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

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 $t$:

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

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

Reintroduciamo il tempo:

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

Soluzione con energia $E_n$ definita

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

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

I coefficienti $c_n$ sono determinati dalle condizioni iniziali.

## Buca di potenziale infinita: riassunto

- Abbiamo visto:

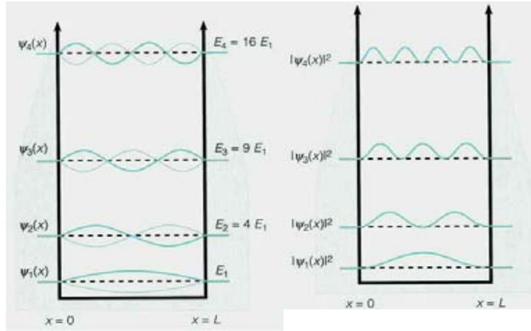
1) Come passare dall'eq di Schrödinger completa a quella indipendente dal tempo (separazione delle variabili);
2) Come risolvere la parte temporale (energia definita);
3) Come risolvere la parte spaziale (per regioni omogenee)
4) Come usare la continuità della funzione d'onda per determinare alcune caratteristiche della *ψ(x)*
5) Come *ottenere* la quantizzazione dell'energia imponendo la continuità: $E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$ con *n* intero;
6) Come ricomporre la funzione d'onda completa $\Psi_n(x,t)$
7) Come ottenere la soluzione più generale

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



## 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



## 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*:

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

## Incertezze

**Stati stazionari:**

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

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

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

*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: $f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + f_3 x^3 \ldots\ldots$

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

Generalizziamo ulteriormente utilizzando il concetto di *operatore funzionale* $\bar{O}$:

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

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

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 $\bar{O} = p = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}$

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

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

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

**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

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

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

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

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

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

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

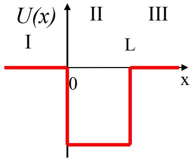
Principio di indeterminazione: $\Delta x \cdot \Delta p = 0.568\hbar$

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 $U_0 \rightarrow 0$),
Gli stati legati (E<0) saranno simili a quelli per la buca di potenziale
Infinita (quando $U_0 \rightarrow -\infty$)

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

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

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

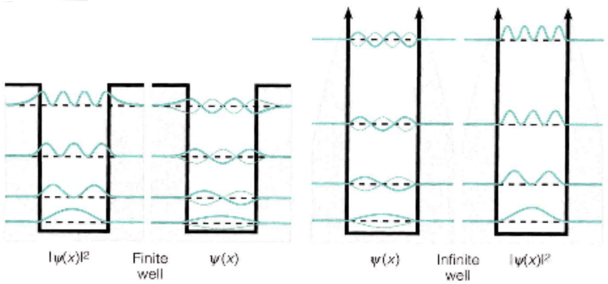
$$\psi'_{II}(L) = \psi'_{III}(L) \quad \rightarrow Ak\cos(kL) - kB\sin(kL) = -\alpha Ge^{-\alpha L}$$

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

*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: $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$

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

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

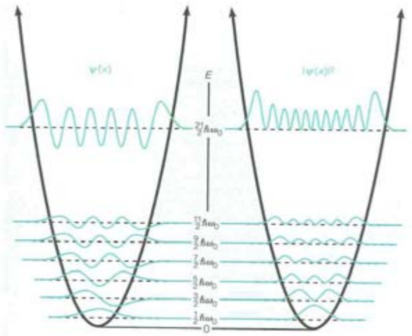
Quantizzazione: esistono soluzioni solo quando

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

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 soluzioni 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:

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

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

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

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→

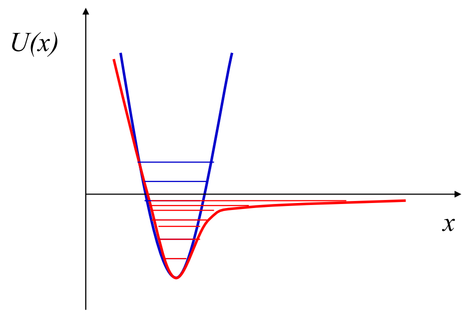
La sovrapposizione degli stati produce il moto nel sistema!



## 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:

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

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