rappresentazione di Schrödinger il ket di stato al tempo t è dato da $\mathcal{U}|a'\rangle$, mentre i ket di base $|a'\rangle$ e $|b'\rangle$ non variano nel tempo; così abbiamo

$$\underbrace{\langle b'|}_{\text{bra di base}} \cdot \underbrace{(\mathcal{U}|a'\rangle)}_{\text{ket di stato}} \tag{2.2.45}$$

per questa ampiezza di transizione. Al contrario nella rappresentazione di Heisenberg il ket di stato è stazionario cioè rimane $|a'\rangle$ ad ogni istante ma i ket di base evolvono in modo opposto. Allora la ampiezza di transizione diventa

$$\underbrace{(\langle b'|\mathcal{U})}_{\text{bra di base}} \cdot \underbrace{|a'\rangle}_{\text{ket di stato}} . \tag{2.2.46}$$

Ovviamente (2.2.45) e (2.2.46) sono uguali. Entrambe possono essere scritte come

$$\langle b'|\mathcal{U}(t,0)|a'\rangle. \tag{2.2.47}$$

In qualche senso possiamo parlare di una transizione per "andare" da uno stato $|a'\rangle$ ad uno stato $|b'\rangle$.

A conclusione di questo paragrafo una sintesi della differenza fra la rappresentazione di Schrödinger e quella di Heisenberg è data in Tabella 2.1.

2.3 OSCILLATORE ARMONICO UNIDIMENSIONALE

L'oscillatore armonico unidimensionale è uno dei più importanti problemi in meccanica quantistica. Da un punto di vista pedagogico può essere utilizzato per illustrare i concetti e i metodi fondamentali della meccanica quantistica. Da un punto di vista pratico ha applicazioni in molti campi della fisica moderna - spettroscopia molecolare, fisica dello stato solido, struttura nucleare, teoria quantistica dei campi, ottica quantistica, meccanica statistica quantistica, ecc.. Da un punto di vista storico fu la ipotesi di M.Plank, di associare unità discrete di energia ad oscillatori di radiazione, che portò alla nascita dei concetti quantistici. Una comprensione approfondita degli oscillatori quanto-meccanici è indispensabile per ogni studioso serio di fisica moderna.

Autoket dell'energia e autovalori dell'energia

Iniziamo la nostra discussione con l'elegante metodo operatoriale di Dirac, che è basato sul lavoro precedente di M.Born e N.Wiener, per ottenere gli autoket dell'energia e gli autovalori dell'energia dell'oscillatore armonico unidimensionale. La hamiltoniana fondamentale è

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \tag{2.3.1}$$

dove ω è la pulsazione (frequenza angolare) dell'oscillatore classico legata alla costante k della molla nella legge di Hooke da $\omega = \sqrt{k/m}$. Gli operatori x e p sono ovviamente hermitiani. È conveniente definire due operatori non hermitiani

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right), \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{ip}{m\omega}\right), \tag{2.3.2}$$

noti come **operatore di distruzione** e **operatore di creazione** rispettivamente, per ragioni che saranno chiare fra breve. Facendo uso delle relazioni di commutazione canoniche, otteniamo facilmente

$$[a, a^\dagger] = \left(\frac{1}{2\hbar}\right)(-i[x,p] + i[p,x]) = 1. \tag{2.3.3}$$

Definiamo anche l'operatore numero

$$N = a^\dagger a, \tag{2.3.4}$$

che è ovviamente hermitiano. Non ci sono difficoltà a dimostrare che

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)\left(x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2}\right) + \left(\frac{i}{2\hbar}\right)[x,p] \\ &= \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}, \end{aligned} \tag{2.3.5}$$

cosí abbiamo una importante relazione fra l'operatore numero e l'operatore hamiltoniano

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}). \tag{2.3.6}$$

Poiché H è una funzione lineare di N, N si può diagonalizzare assieme a H. Denotiamo un autoket dell'energia e di N col suo autovalore n

$$N|n\rangle = n|n\rangle. \tag{2.3.7}$$

Mostreremo più avanti che n deve essere un intero non negativo. Per (2.3.6) si deve anche avere

$$H|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle, \tag{2.3.8}$$

che significa che gli autovalori dell'energia sono dati da

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega. \tag{2.3.9}$$

Per cogliere il significato fisico di $a, a^\dagger$ e N facciamo notare che

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger[a,a] + [a^\dagger, a]a = -a, \tag{2.3.10}$$

dove abbiamo usato (2.3.3). Similmente possiamo dedurre

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger. \tag{2.3.11}$$

Come conseguenza abbiamo

$$\begin{aligned} N a^\dagger|n\rangle &= ([N, a^\dagger] + a^\dagger N)|n\rangle \\ &= (n+1) a^\dagger |n\rangle \end{aligned} \tag{2.3.12a}$$

e

$$\begin{aligned} N a|n\rangle &= ([N, a] + aN)|n\rangle \\ &= (n-1) a|n\rangle. \end{aligned} \tag{2.3.12b}$$

Queste relazioni implicano che $a^\dagger|n\rangle (a|n\rangle)$ è un autoket di N con l'autovalore aumentato (diminuito) di uno. Poiché l'aumento (diminuzione) di uno per n equivale alla creazione (distruzione) di una quantità di energia unitaria $\hbar\omega$ è appropriato il termine *operatore di creazione (operatore di distruzione)* per $a^\dagger (a)$.

L'equazione (2.3.12b) implica che $a|n\rangle$ e $|n-1\rangle$ sono gli stessi a meno di una costante moltiplicativa. Scriviamo

$$a|n\rangle = c|n-1\rangle, \tag{2.3.13}$$

dove c è una costante numerica da determinarsi tramite la richiesta che $|n\rangle$ e $|n-1\rangle$ siano entrambe normalizzati. Dapprima notiamo che

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = |c|^2. \tag{2.3.14}$$

Possiamo valutare la parte a sinistra in (2.3.14) tenendo presente che $a^\dagger a$ è proprio l'operatore numero, cosí

$$n = |c|^2. \tag{2.3.15}$$

Prendendo c reale e positivo per convenzione, otteniamo finalmente

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \tag{2.3.16}$$

Similmente è facile vedere che

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \tag{2.3.17}$$

Supponiamo di continuare ad applicare l'operatore di distruzione da entrambe le parti di (2.3.16) (a destra e a sinistra)

$$\begin{aligned} a^2|n\rangle &= \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle, \\ a^3|n\rangle &= \sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle, \\ &\vdots \end{aligned} \tag{2.3.18}$$

Possiamo ottenere autoket dell'operatore numero con n sempre più piccolo finché la sequenza termina, il che deve succedere dato che siamo partiti con un n intero positivo. Si può arguire che, se partiamo con n non intero, la sequenza non termina e abbiamo autoket con valore negativo di n. Ma abbiamo anche da imporre la richiesta di positività della norma di $a|n\rangle$:

$$n = \langle n|N|n\rangle = (\langle n|a^\dagger\rangle) \cdot (\langle a|n\rangle) \geq 0 \tag{2.3.19}$$

che implica che n non può mai essere negativo! Cosí concludiamo che la sequenza deve terminare con $n = 0$ e che i valori permessi di n sono gli interi non negativi.

Poiché il più piccolo valore possibile di n è zero, l'energia dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico è

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{2.3.20}$$

Possiamo ora applicare in successione l'operatore di creazione $a^\dagger$ allo stato fondamentale $|0\rangle$. Usando (2.3.17) otteniamo

$$\begin{aligned}
|1\rangle &= a^\dagger|0\rangle \\
|2\rangle &= \left(\frac{a^\dagger}{\sqrt{2}}\right)|1\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{2}}\right]|0\rangle \\
|3\rangle &= \left(\frac{a^\dagger}{\sqrt{3}}\right)|2\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^3}{\sqrt{3!}}\right]|0\rangle \\
&\vdots \\
|n\rangle &= \left[\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\right]|0\rangle.
\end{aligned} \tag{2.3.21}$$

In questo modo siamo riusciti a costruire autoket simultanei di N e H con autovalori dell'energia

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad (n = 0, 1, 2, 3, \ldots). \tag{2.3.22}$$

Da (2.3.16), (2.3.17) e richiedendo la ortonormalità per $\{|n\rangle\}$ otteniamo gli elementi di matrice

$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}, \qquad \langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} \tag{2.3.23}$$

che assieme a

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger), \qquad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-a + a^\dagger), \tag{2.3.24}$$

ci permettono di ricavare gli elementi di matrice degli operatori x e p

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}), \tag{2.3.25a}$$

$$\langle n'|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}). \tag{2.3.25b}$$

Si noti che né x né p sono diagonali nella rappresentazione N che stiamo esaminando. Questo non deve sorprendere, dato che x e p , come pure a e $a^\dagger$, non commutano con N. Il metodo operatoriale può essere utilizzato anche per ricavare le autofunzioni dell'energia nello spazio x (delle posizioni). Partiamo dallo stato fondamentale definito da

$$a|0\rangle = 0, \tag{2.3.26}$$

che nella rappresentazione x è

$$\langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x'|\left(\frac{x+ip}{m\omega}\right)|0\rangle = 0. \tag{2.3.27}$$

Ricordando (1.7.17) possiamo considerare quest'ultima come una equazione differenziale per $\langle x'|0\rangle$:

$$\left(x' + x_0^2 \frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle = 0, \tag{2.3.28}$$

dove abbiamo introdotto

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \tag{2.3.29}$$

che fissa la scala delle lunghezze dell'oscillatore. Vediamo che la soluzione normalizzata di (2.3.28) è

$$\langle x'|0\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\right)\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right]. \tag{2.3.30}$$

Possiamo altresì ottenere le autofunzioni dell'energia per gli stati eccitati valutando

$$\begin{aligned}
\langle x'|1\rangle &= \langle x'|a^\dagger|0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle,\\
\langle x'|2\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\langle x'|(a^\dagger)^2|0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2!}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)^2\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)^2\langle x'|0\rangle, \ldots
\end{aligned} \tag{2.3.31}$$

in generale otteniamo

$$\langle x'|n\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}\right)\left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}}\right)\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)^n \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right]. \tag{2.3.32}$$

È istruttivo considerare il valor medio di x^2 e p^2 nello stato fondamentale. Notiamo dapprima che

$$x^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)(a^2 + a^{\dagger 2} + a^\dagger a + a a^\dagger). \tag{2.3.33}$$

Prendiamo poi il valore d'aspettazione di x^2, solo l'ultimo termine in (2.3.33) dà un contributo finito

$$\langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{x_0^2}{2}. \tag{2.3.34}$$

Similmente

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}. \tag{2.3.35}$$

Ne segue che il valor medio dell'energia cinetica e dell'energia potenziale sono rispettivamente

$$\langle \frac{p^2}{2m} \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\langle H \rangle}{2}, \quad \text{e} \quad \langle \frac{m\omega^2 x^2}{2} \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\langle H \rangle}{2}, \tag{2.3.36}$$

come ci si aspetta dal teorema del viriale. Da (2.3.25a) e (2.3.25b) segue che

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0 \tag{2.3.37}$$

che vale anche per gli stati eccitati. Abbiamo perciò

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad \text{e} \quad \langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}, \tag{2.3.38}$$

e constatiamo che la relazione di indeterminazione è soddisfatta con il prodotto minimo delle indeterminazioni

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}. \tag{2.3.39}$$

Questo non deve sorprendere dato che lo stato fondamentale ha una forma gaussiana. Per gli stati eccitati, invece, il prodotto delle indeterminazioni è più grande:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = (n + \frac{1}{2})^2 \hbar^2, \tag{2.3.40}$$

come il lettore può verificare facilmente.

Evoluzione temporale dell'oscillatore

Fino ad ora non abbiamo discusso l'evoluzione temporale del ket di stato dell'oscillatore né delle osservabili come x e p . Tutto quello che abbiamo fatto si suppone valere ad un certo istante per esempio $t = 0$; gli operatori x, p, a e $a^\dagger$ vanno considerati o come operatori nella rappresentazione di Schrödinger (per tutti i t) o come operatori nella rappresentazione di Heisenberg per $t = 0$. Per il resto di questo paragrafo lavoriamo esclusivamente nella rappresentazione di Heisenberg che significa che $x, p, a, a^\dagger$ sono tutti dipendenti dal tempo, anche se non scriviamo esplicitamente $x^{(H)}(t)$ e così via.

Le equazioni del moto di Heisenberg per p e x seguono da (2.2.32) e (2.2.33)

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x \tag{2.3.41a}$$

e

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}. \tag{2.3.41b}$$