Corso di Laurea in Chimica Industriale

Chimica Fisica II

Lezione 12

Esercizi
(settima parte)

A.A. 2022-2023

Marco Ruzzi

Dipartimento di Scienze Chimiche
Università degli Studi di Padova
Via Marzolo 1 35129 Padova
E-mail: marco.ruzzi@unipd.it

Esercizio 77

Si considerino gli operatori $\hat{D} = d/dx$ e $\hat{D}^2 = d^2/dx^2$. Verificare se le funzioni:

$\psi = e^{ikx}$; $\psi = cos(kx)$; $\psi = k$; $\psi = k\mathrm{x}$; $\psi = \mathrm{e}^{-\mathrm{ax}}$;

sono autofunzioni degli operatori dati ed eventualmente calcolarne gli autovalori.

$\hat{D}e^{ikx} = ik\, e^{ikx}$ — e^{ikx} è autofunzione di $\hat{D}$ con autovalore ik

$\hat{D}cos(kx) = -k\,sen(kx)$ — $cos(kx)$ non è autofunzione

$\hat{D}k = 0$ — k è autofunzione di $\hat{D}$ con autovalore 0

$\hat{D}kx = k$ — kx non è autofunzione di $\hat{D}$

$\hat{D}\mathrm{e}^{-\mathrm{ax}^2} = -2ax\,\mathrm{e}^{-ax^2}$ — e^{-ax^2} è autofunzione di $\hat{D}$ con autovalore $-2ax$

$$\hat{D}^2 e^{ikx} = \hat{D}(ik\, e^{ikx}) = -k^2 e^{ikx}$$

e^{ikx} è autofunzione di $\hat{D}^2$ con autovalore $-k^2$

$$\hat{D}^2 cos(kx) = \hat{D}(-k\,sen(kx)) = -k^2 cos(kx)$$

$cos(kx)$ è autofunzione di $\hat{D}^2$ con autovalore $-k^2$

Esercizi [187]

$\hat{D}^2 k = \hat{D}(0) = 0$ $\quad$ k è autofunzione di $\hat{D}^2$ con autovalore 0

$\hat{D}^2 kx = \hat{D}k = 0$ $\quad$ kx è autofunzione di $\hat{D}^2$ con autovalore 0

$$\hat{D}^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{ax}^2} = \hat{D}(-2ax\,\mathrm{e}^{-ax^2})$$
$$= (-2a + 4a^2x^2)\,\mathrm{e}^{-ax^2}$$

e^{-ax^2} è autofunzione con autovalore $-2a+4a^2x^2$

Esercizio 78

Si consideri l'operatore di inversione $\hat{I}$ (operazione di parità 1-dimensionale) che agisce su una funzione d'onda ψ invertendo il segno della coordinata spaziale x:

$$\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$$

Dire se le funzioni:

$\psi_1 = x^3 - kx$; $\psi_2 = cos(kx)$; $\psi_3 = x^2 + 3\mathrm{x} - 1$;

sono autofunzioni dell'operatore ed eventualmente calcolarne gli autovalori.

Valgono:

$$\hat{I}\psi_1 = \hat{I}\left(x^3 - kx\right) = (-x)^3 - k(-x) = -\left(x^3 - kx\right) = -\psi_1$$

ψ_1 è autofunzione dell'operatore $\hat{I}$ con autovalore -1 ;

$$\hat{I}\psi_2 = \hat{I}\left(cos(kx)\right) = cos(-kx) = cos(kx) = +\psi_2$$

ψ_2 è autofunzione dell'operatore $\hat{I}$ con autovalore $+1$;

$$\hat{I}\psi_3 = \hat{I}\left(x^2 + 3x - 1\right) = (-x)^2 - 3x - 1 = x^2 - 3x - 1$$

ψ_3 non è autofunzione dell'operatore $\hat{I}$.

Esercizio 79

Un elettrone confinato in una buca 1-dimensionale di larghezza L è descritto dall'autofunzione:

$$\psi_1(x) = sen(n\pi x/L) \qquad\qquad n = 1,\ 2, 3, \ldots$$

definita nel dominio $0 \leq x \leq L$. Fuori dal dominio la funzione d'onda è nulla. Si dimostri che le funzioni d'onda caratterizzate dai numeri quantici $m=1$ e $n=2$ sono tra loro ortogonali.

Le funzioni d'onda ψ_1 e ψ_2 sono ortogonali se vale:

$$\int \psi_1^* \psi_2 \, dx = 0$$

sull'intero dominio dove sono definite.

Quindi le funzioni d'onda:

$$\psi_1(x) = sen(\pi x/L)$$

$$\psi_2(x) = sen(2\pi x/L)$$

sono ortogonali se, nella regione $0 \leq \mathrm{x} \leq L$, vale:

$$\int_0^L sen(\pi x/L)\ sen(2\pi x/L)\, dx = 0$$

Eseguendo la sostituzione:

$\pi x/L = u \qquad x = u\,L/\pi \qquad dx = du\,L/\pi$

si può scrivere:

$$\int_0^L sen\left(\pi x/L\right)\, sen\left(2\pi x/L\right) dx = \left(L/\pi\right)\int_0^\pi sen\left(u\right)\, sen\left(2u\right) du$$

$$= \left(L/\pi\right)\int_0^\pi sen\left(u\right)\, 2sen\left(u\right)\cos\left(u\right) du$$

$$= \left(2L/\pi\right)\int_0^\pi sen^2\left(u\right)\, cos\left(u\right) du$$

$$= \left(2L/\pi\right)\int_0^\pi \left(1 - cos^2\left(u\right)\right) cos\left(u\right) du$$

$$= \left(2L/\pi\right)\left(\int_0^\pi cos\left(u\right) du - \int_0^\pi cos^3\left(u\right) du\right)$$

$$= \left(2L/\pi\right)\left(sen\left(u\right)\Big|_0^\pi - \int_0^\pi cos^3\left(u\right) du\right)$$

$$= \left(2L/\pi\right)\int_0^\pi cos^3\left(u\right) du = 0$$

L'ultimo integrale è nullo in quanto la funzione integranda è una funzione pari e l'integrale è esteso nel semiperiodo $[0, \pi]$.

L'asserto sull'ortogonalità è dunque dimostrato.

Esercizio 80

Un elettrone confinato in una buca 1-dimensionale di larghezza L è descritto dall'autofunzione:

$$\psi_1(x) = cos(n\pi x/L) \qquad n = 1,\ 3,\ 5,\ldots$$

definita nel dominio $-L/2 \leq x \leq +L/2$. Fuori dal dominio la funzione d'onda è nulla. Si dimostri che le funzioni d'onda caratterizzate dai numeri quantici $n=1$ e $n=3$ sono tra loro ortogonali.

Le funzioni d'onda ψ_1 e ψ_3 sono ortogonali se vale:

$$\int \psi_1^* \psi_3 \, dx = 0$$

sull'intero dominio dove sono definite.

Quindi le funzioni d'onda:

$$\psi_1(x) = cos(\pi x/L)$$

$$\psi_3(x) = cos(3\pi x/L)$$

sono ortogonali se, nella regione $-L/2 \leq \mathrm{x} \leq +L/2$, vale:

$$\int_{-L/2}^{+L/2} cos(\pi x/L)\, cos(3\pi x/L)\, dx = 0$$

Vale:

$$\int_{-L/2}^{L/2} cos\left(\pi x/L\right)\, cos\left(3\pi x/L\right)\, dx =$$

$$= -\left(L/4\pi\right)\, sen\left(-2\pi x/L\right) + \left(L/8\pi\right)\, sen\left(4\pi x/L\right)\Big|_{-L/2}^{L/2} = 0$$

Le due funzioni d'onda sono dunque ortogonali.

Esercizio 81

Un elettrone confinato a muoversi in un anello (spazio a simmetria assiale 1-dimensionale) è descritto dall'autofunzione:

$$\psi_{m_l}(\phi) = e^{im_l\phi} \qquad\qquad m_l = 1,\ 2, 3, \ldots$$

con ϕ coordinata spaziale ($0 \leq \phi \leq 2\pi$) che definisce la posizione della particella. Si dimostri che le funzioni d'onda caratterizzate dai numeri quantici $m_l = +1$ e $m_l = +2$ sono tra loro ortogonali.

Le funzioni d'onda ψ_1 e ψ_2 :

$$\psi_1(\phi) = e^{i\phi}$$

$$\psi_2(\phi) = e^{2i\phi}$$

sono ortogonale se, sull'intero dominio dove sono definite, vale:

$$\int \psi_1^* \psi_2 \, d\tau = 0$$

ossia se vale:

$$\int_0^{2\pi} e^{-i\phi} \, e^{2i\phi} d\phi = 0$$

Vale evidentemente:

$$\int_0^{2\pi} e^{-i\phi}\, e^{2i\phi} d\phi = \int_0^{2\pi} e^{i\phi} d\phi = \frac{1}{i} e^{i\phi}\Big|_0^{2\pi}$$

$$= \frac{1}{i}\left(e^{i2\pi} - e^{i0}\right)$$

$$= \frac{1}{i}\left[\left(cos\left(2\pi\right) + i\, sen\left(2\pi\right)\right) - \left(cos\left(0\right) + i\, sen\left(0\right)\right)\right]$$

$$= \frac{1}{i}\left[1 - 1\right] = 0$$

L'asserto sull'ortogonalità è dunque dimostrato.

Esercizio 82

Si calcoli il commutatore delle seguenti coppie di operatori:

(a) $\hat{\Omega}_1 = \frac{d}{dx},\ \hat{\Omega}_2 = \frac{1}{x}$; (b) $\hat{\Omega}_1 = \frac{d}{dx},\ \hat{\Omega}_2 = x^2$.

Per valutare il commutatore degli operatori si deve considerare l'effetto del commutatore su una generica funzione d'onda ψ.

(a) Vale:

$$\left[\frac{d}{dx},\frac{1}{x}\right]\psi = \frac{d}{dx}\left(\frac{\psi}{x}\right) - \frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx}$$

$$= \frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx} + \psi\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x}\right) - \frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx}$$

$$= \frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx} - \psi\frac{1}{x^2} - \frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx} \quad = -\frac{1}{x^2}\psi$$

Alla fine dunque:

$$\left[\frac{d}{dx},\frac{1}{x}\right]\psi = -\frac{1}{x^2}\psi$$

l'operatore è identificato dal termine: $-1/x^2$.

(b) Vale:

$$\left[\frac{d}{dx}, x^2\right]\psi = \frac{d}{dx}\left(x^2\psi\right) - x^2\frac{d\psi}{dx}$$
$$= x^2\frac{d\psi}{dx} + \psi\frac{d\,x^2}{dx} - x^2\frac{d\psi}{dx}$$
$$= \frac{d\,x^2}{dx}\psi = 2x\,\psi$$

Alla fine dunque:

$$\left[\frac{d}{dx}, x^2\right]\psi = 2x\,\psi$$

e l'operatore è identificato dal termine: $2x$.

Esercizio 83

Ricordando le ben note proprietà dei commutatori:

$$\left[\hat{A},\hat{A}^2\right]=\hat{A}\left(\hat{A}\hat{A}\right)-\left(\hat{A}\hat{A}\right)\hat{A}=0$$

$$\left[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}\right]=\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\hat{C}-\hat{C}\left(\hat{A}+\hat{B}\right)=\hat{A}\hat{C}+\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}-\hat{C}\hat{B}=\left[\hat{A},\hat{C}\right]+\left[\hat{B},\hat{C}\right]$$

$$\left[\hat{A},c\right]=\left[\hat{A},\hat{I}c\right]=\hat{A}\hat{I}c-\hat{I}c\hat{A}=c\left(\hat{A}\hat{I}-\hat{I}\hat{A}\right)=0$$

con $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$ operatori arbitrari, $\hat{I}$ operatore identità e c costante,
si calcolino i seguenti commutatori:

$$\left[\hat{H},\hat{x}\right]$$

$$\left[\hat{H},\hat{p}_x\right]$$

considerando l'Hamiltoniano caratterizzato dalle seguenti energie potenziali:

(a) $\hat{V}(x)=V_0$

(b) $\hat{V}(x)=\dfrac{1}{2}kx^2$

(a) $\left[\hat{H},\hat{x}\right]=\left[\dfrac{\hat{p}_x^2}{2m}+\hat{V}_0,\hat{x}\right]=\left[\dfrac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{x}\right]+\left[\hat{V}_0,\hat{x}\right]=\left[\dfrac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{x}\right]+0=\left[\dfrac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{x}\right]$

Vale:

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{x}\right]\psi=\left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\hat{x}-\hat{x}\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right)\psi$$

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

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

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

$$=-\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{d}{dx}\right)\psi$$

e dunque:

$$\left[\hat{H},\hat{x}\right]==-\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{d}{dx}\right)$$

(b) $\left[\hat{H},\hat{x}\right]=\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{1}{2}k\hat{x}^2,\hat{x}\right]=\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{x}\right]+\left[\frac{1}{2}k\hat{x}^2,\hat{x}\right]=\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{x}\right]+0=\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{x}\right]$

Vale (come nel caso precedente):

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{x}\right]\psi=\left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\hat{x}-\hat{x}\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right)\psi$$

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

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

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

$$=-\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{d}{dx}\right)\psi$$

e dunque:

$$\left[\hat{H},\hat{x}\right]==-\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{d}{dx}\right)$$

(a) $$\left[\hat{H},\hat{p}_x\right]=\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\hat{V}_0,\hat{p}_x\right]=\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{p}_x\right]+\left[\hat{V}_0,\hat{p}_x\right]=0+0$$

(b) $$\left[\hat{H},\hat{p}_x\right]=\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{1}{2}k\hat{x}^2,\hat{p}_x\right]=\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{p}_x\right]+\left[\frac{1}{2}k\hat{x}^2,\hat{p}_x\right]=0+\left[\frac{1}{2}k\hat{x}^2,\hat{p}_x\right]$$

Vale:

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{2}k\hat{x}^2,\hat{p}_x\right]\psi &= \frac{1}{2}k\left(\hat{x}^2\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x}^2\right)\psi \\ &= \frac{1}{2}k\frac{\hbar}{i}\left(x^2\frac{d\psi}{dx}-\frac{d}{dx}\left(x^2\psi\right)\right) \\ &= \frac{1}{2}k\frac{\hbar}{i}\left(x^2\frac{d\psi}{dx}-x^2\frac{d\psi}{dx}-\psi\,2x\right) \\ &= \frac{1}{2}k\frac{\hbar}{i}\left(-2x\right)\psi\end{aligned}$$

e dunque:

$$\left[\hat{H},\hat{p}_x\right]=-\frac{\hbar k}{i}x$$

Esercizio 84

Un elettrone confinato in una buca 1-dimensionale di larghezza L è descritto dall'autofunzione:

$$\psi(x) = (2/L)^{1/2}\, sen(2\pi x/L)$$

definita nel dominio $0 \le x \le L$. Si calcoli il valore di attesa della posizione dell'elettrone all'interno della buca.

La funzione d'onda è normalizzata in quanto vale:

$$\left|\psi(x)\right|^2 = \int \psi^* \psi \; dx = (2/L)\int_0^L sen^2(2\pi x/L)\,dx$$

$$= (2/L)(L/2\pi)\int_0^{2\pi} sen^2(u)\,du$$

$$= (1/\pi)\left(\frac{1}{2}u - \frac{1}{4}sen(2u)\Big|_0^{2\pi}\right)$$

$$= (1/\pi)\left(\frac{1}{2}2\pi - \frac{1}{4}sen(2\,2\pi)\right) = 1$$

e l'operatore di posizione è $\hat{x} = x$.

In tal caso, essendo la funzione d'onda già normalizzata, per calcolare il valore di attesa della posizione si può scrivere:

$$\langle x\rangle = \int_0^L \psi^* \hat{x}\, \psi \, dx = (2/L)\int_0^L x\, sen^2(2\pi x/L)\, dx$$

E' importante ribadire che la formula sopra per il calcolo del valore di attesa vale solo se la funzione d'onda è normalizzata.

Risolvendo l'integrale prima operando la sostituzione:

$$2\pi x/L = u \quad \Rightarrow \quad x = u\, L/2\pi \qquad\qquad dx = du\, L/2\pi$$

$$\langle x\rangle = \int_0^L \psi^* \hat{x}\, \psi \, dx = (2/L)\int_0^L x\, sen^2(2\pi x/L)\, dx$$

$$= (2/L)(L/2\pi)^2 \int_0^{2\pi} u\, sen^2(u)\, du$$

e poi per parti si ottiene alla fine:

$$\langle x\rangle = \frac{2}{L}\left\{\frac{L^2}{4} - \frac{L}{4(2\pi/L)} sen(4\pi L/L) - \frac{1}{8(2\pi/L)^2}\left[cos(4\pi L/L) - 1\right]\right\} = \frac{L}{2}$$

Esercizio 85

Un elettrone confinato in una buca 1-dimensionale di larghezza L è descritto dall'autofunzione:

$$\psi(x) = (2/L)^{1/2}\ sen(2\pi x/L)$$

definita nel dominio $0 \le x \le L$. Si calcoli il valore di attesa del momento lungo la direzione x (quantità di moto p_x) dell'elettrone dentro la buca.

La funzione d'onda è normalizzata in quanto vale (vedi esercizio 82):

$$|\psi(x)|^2 = \int \psi^* \psi\ dx = (2/L)\int_0^L sen^2(2\pi x/L)\,dx = 1$$

e l'operatore momento lungo la direzione x è $\hat{p}_x = (\hbar/i)\,d/dx$.
In tal caso, essendo la funzione d'onda già normalizzata, per calcolare il valore di attesa del momento p_x si può scrivere:

$$\langle p_x \rangle = \int_0^L \psi^* \hat{p}_x \psi\ dx = (2/L)\int_0^L sen(2\pi x/L)\,\hat{p}_x\, sen(2\pi x/L)\,dx$$

E' importante ribadire che la formula sopra per il calcolo del valore di attesa vale solo se la funzione d'onda è normalizzata.

Vale:

$$\langle p_x \rangle = \int_0^L \psi^* \hat{p}_x \psi \, dx = (2/L) \int_0^L sen(2\pi x/L)\, \hat{p}_x \, sen(2\pi x/L)\, dx$$

$$= (2\hbar/iL) \int_0^L sen(2\pi x/L)(d/dx) sen(2\pi x/L)\, dx$$

$$= \left(4\pi\hbar/iL^2\right) \int_0^L sen(2\pi x/L) cos(2\pi x/L)\, dx$$

$$= \left(4\pi\hbar/iL^2\right) \int_0^L (1/2) sen(4\pi x/L)\, dx$$

$$= \left(2\pi\hbar/iL^2\right)(L/4\pi) \int_0^{4\pi} sen\ u\ du$$

$$= \left(2\pi\hbar/iL^2\right)(L/4\pi)(-cos\,u)\Big|_0^{4\pi}$$

$$= \left(2\pi\hbar/iL^2\right)(L/4\pi)(-cos 4\pi + cos 0)\Big| = 0$$

Il risultato è interpretabile tenendo conto che c'è una ugual probabilità di trovare la particella con momento positivo (moto nel verso delle x positive) e negativo (moto verso le x negative).

Esercizio 86

Un elettrone confinato a muoversi in un anello (spazio a simmetria assiale 1-dimensionale) è descritto dall'autofunzione normalizzata:

$$\psi_{m_l}(\phi) = e^{im_l\phi} \qquad\qquad m_l = 1,\ 2, 3, \ldots$$

con ϕ coordinata spaziale $(0 \le \phi \le 2\pi)$ che definisce la posizione della particella. Si calcoli il valore di attesa della posizione ϕ dell'elettrone all'interno dell'anello nel caso in cui valga $m_l = +1$ e nel caso generale con m_l intero positivo.

Nel caso in cui valga $m_l = +1$, la funzione d'onda normalizzata si scrive:

$$\psi_{+1}(\phi) = \frac{1}{(2\pi)^{-1/2}} e^{i\phi}$$

e in tal caso, essendo la funzione d'onda già normalizzata, per calcolare il valore di attesa della posizione ϕ si può scrivere:

$$\langle\phi\rangle = \int_0^{2\pi} \psi^*_{+1}\ \phi\ \psi_{+1}\ d\phi = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-i\phi}\ \phi\ e^{i\phi} d\phi = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\ \phi\ d\phi = \frac{1}{2\pi}\left.\frac{\phi^2}{2}\right|_0^{2\pi} = \pi$$

Analogamente, nel caso generale, vale:

$$\langle \phi \rangle = \int_0^{2\pi} \psi_{m_l}^* \, \phi \, \psi_{m_l} d\phi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i\, m_l\, \phi} \, \phi \;\, e^{i\, m_l\, \phi} d\phi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \phi \, d\phi = \frac{1}{2\pi} \frac{\phi^2}{2} \bigg|_0^{2\pi} = \pi$$

Esercizio 87

Una particella è descritta dalla seguente funzione d'onda normalizzata:

$$\psi(x) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-ax^2}$$

con a parametro reale e x variabile di posizione ($-\infty < x < +\infty$).

(a) Calcolare per la particella i valori di attesa:

$$\langle x \rangle \quad \langle x^2 \rangle \quad \langle p_x \rangle \quad \langle p_x^2 \rangle$$

(b) Si utilizzino i valori di attesa trovati per calcolare le indeterminazioni sulla posizione x e sul momento lineare p_x :

$$\Delta x = \left[\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2\right]^{1/2}$$

$$\Delta p_x = \left[\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2\right]^{1/2}$$

Nel calcolo si utilizzino i seguenti integrali notevoli:

$$\int_0^{+\infty} e^{-kx^2}\, dx = \frac{1}{2}\left(\pi/k\right)^{1/2} \qquad \int_0^{+\infty} x^2 e^{-kx^2}\, dx = \frac{1}{4}\left(\pi/k^3\right)^{1/2}$$

Essendo la funzione d'onda già normalizzata, per calcolare il valore di attesa della posizione x, si può scrivere:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \, x \, \psi \;\; dx = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} x \, e^{-2ax^2} \;\; dx = 0$$

in quanto la funzione integranda è una funzione dispari e il dominio di integrazione è l'intero dominio dei numeri reali.

Per il calcolo del valore di attesa di x^2 vale:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \, x^2 \, \psi \;\; dx = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \, e^{-2ax^2} \;\; dx$$

$$= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} 2\int_{0}^{+\infty} x^2 e^{-2ax^2} \;\; dx$$

$$= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} 2\,\frac{1}{4}\left(\pi\big/(2a)^3\right)^{1/2} = 1/4a$$

Per il calcolo dell'ultimo integrale si è utilizzato l'integrale notevole fornito nel testo con $k = 2a$.

Per il calcolo del valore di attesa di p_x vale:

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \; p_x \; \psi \quad dx = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{-2ax^2} \; dx$$

$$= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} \frac{h}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-4ax\right) e^{-2ax^2} \; dx = 0$$

in quanto la funzione integranda è una funzione dispari e il dominio di integrazione è l'intero dominio dei numeri reali.

Per il calcolo del valore di attesa di p_x^2 vale:

$$\langle p_x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \; p_x^2 \; \psi \quad dx = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{h^2}{i^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-2ax^2} \; dx$$

$$= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} \frac{h^2}{i^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(-4ax\, e^{-2ax^2}\right) \; dx$$

$$= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} \frac{h^2}{i^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(4a^2 x^2 e^{-2ax^2} - 2a\, e^{-2ax^2}\right) \; dx$$

$$= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} \frac{h^2}{i^2} \left(2a^2 \left(\pi/(2a)^3 \right)^{1/2} - 2a\left(\pi/(2a)\right)^{1/2} \right) = \hbar^2 a$$

Per il calcolo dell'ultimo integrale si sono utilizzati gli integrali notevoli forniti nel testo.

Valgono dunque: $\langle\ x\ \rangle = 0$, $\langle\ x^2\ \rangle = 1/4a$, $\langle\ p_x\ \rangle = 0$, $\langle\ p_x^2\ \rangle = \hbar^2 a$.

L'indeterminazione sulla posizione vale:

$$\Delta x = \left[\left\langle x^2 \right\rangle - \left\langle x \right\rangle^2 \right]^{1/2} = \left(1/4a - 0^2 \right)^{1/2} = (1/4a)^{1/2}$$

L'indeterminazione sul momento vale:

$$\Delta p_x = \left[\left\langle p_x^2 \right\rangle - \left\langle p_x \right\rangle^2 \right]^{1/2} = \left(\hbar^2 a \right)^{1/2} = \hbar (a)^{1/2}$$

Il prodotto delle indeterminazioni vale:

$$\Delta x\, \Delta p_x = (4a)^{-1/2}\, \hbar (a)^{1/2} = \hbar/2$$

Il risultato è in accordo con il principio di indeterminazione di Heisemberg che prevede che valga sempre: $\Delta x\, \Delta p_x \geq \hbar/2$.

Esercizio 88

Si dimostri che l'operatore energia cinetica è un operatore Hermitiano. Si assuma che per $x \to \pm\infty$ la funzione d'onda sia nulla.

Un operatore $\hat{\Omega}$ è Hermitiano se vale:

$$\int \psi_i^* \hat{\Omega} \psi_j \, d\tau = \left[\int \psi_j^* \hat{\Omega} \psi_i \, d\tau \right]^*$$

Si deve dunque dimostrare che vale:

$$\int \psi_i^* \hat{T} \psi_j \, d\tau = \left[\int \psi_j^* \hat{T} \psi_i \, d\tau \right]^*$$

Si può scrivere:

$$\int \psi_i^* \hat{T} \psi_j \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_j \, dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \frac{d^2 \psi_j}{dx^2} dx$$

Integrando per parti una prima volta l'ultimo integrale si ottiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_i^*\frac{d^2\psi_j}{dx^2}dx=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_i^*\frac{d\psi_j}{dx}\bigg|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\psi_i^*}{dx}\frac{d\psi_j}{dx}dx\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(0-\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\psi_i^*}{dx}\frac{d\psi_j}{dx}dx\right)$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\psi_i^*}{dx}\frac{d\psi_j}{dx}dx$$

Si noti che il primo termine dentro la parentesi tonda è assunto nullo in quanto come espresso nel testo del problema valgono:

$$\psi_i(x)\Big|_{x\to\pm\infty}\to 0^{\pm}$$

$$\frac{d\psi_i(x)}{dx}\bigg|_{x\to\pm\infty}\to 0^{\pm}$$

Integrando per parti una seconda volta l'ultimo integrale si ottiene:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\psi_i^*}{dx}\frac{d\psi_j}{dx}dx=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d\psi_i^*}{dx}\psi_j\bigg|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d^2\psi_i^*}{dx^2}\psi_j\,dx\right)$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left(0-\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d^2\psi_i^*}{dx^2}\psi_j\,dx\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d^2\psi_i^*}{dx^2}\psi_j\,dx$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_j\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi_i^*\,dx$$

Anche in questo caso il primo termine dentro la parentesi tonda è assunto nullo in quanto come espresso nel testo del problema valgono:

$$\psi_i(x)\Big|_{x\to\pm\infty}\to 0^{\pm}$$

$$\frac{d\psi_i(x)}{dx}\bigg|_{x\to\pm\infty}\to 0^{\pm}$$

Alla fine fin qui si è dimostrato che vale:

$$\int \psi_i^* \hat{T} \psi_j \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_j \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_i^* \, dx$$

L'ultimo integrale a destra può essere tuttavia riscritto nella forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_i^* \, dx = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_i \, dx \right]^* = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j^* \hat{T} \psi_i \, dx \right]^*$$

Alla fine dunque vale:

$$\int \psi_i^* \hat{T} \psi_j \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_j \, dx$$

$$= \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_i \, dx \right]^* = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j^* \hat{T} \psi_i \, dx \right]^*$$

L'operatore energia cinetica è un operatore Hermitiano

Esercizio 89

Si dimostri che la somma di due operatori Hermitiani è ancora un operatore Hermitiano.

Si consideri la somma di due operatori Hermitiani arbitrari $\hat{A}$ e $\hat{B}$:

$$\int \psi_i^* \left(\hat{A} + \hat{B}\right)\psi_j \, d\tau = \int \psi_i^* \hat{A} \; \psi_j \, d\tau + \int \psi_i^* \hat{B} \; \psi_j \, d\tau$$

Essendo $\hat{A}$ Hermitiano, vale:

$$\int \psi_i^* \hat{A} \psi_j \, d\tau = \left[\int \psi_j^* \hat{A} \psi_i \, d\tau\right]^*$$

Analogamente per $\hat{B}$:

$$\int \psi_i^* \hat{B} \psi_j \, d\tau = \left[\int \psi_j^* \hat{B} \psi_i \, d\tau\right]^*$$

Vale dunque:

$$\begin{aligned}\int \psi_i^* \left(\hat{A} + \hat{B}\right)\psi_j \, d\tau &= \int \psi_i^* \hat{A} \; \psi_j \, d\tau + \int \psi_i^* \hat{B} \; \psi_j \, d\tau \\ &= \left[\int \psi_j^* \hat{A} \psi_i \, d\tau\right]^* + \left[\int \psi_j^* \hat{B} \psi_i \, d\tau\right]^* \\ &= \left[\int \psi_j^* \left(\hat{A} + \hat{B}\right)\psi_i \, d\tau\right]^*\end{aligned}$$

che dimostra l'asserto. ■

Esercizio 90

Si dimostri che il prodotto di due operatori Hermitiani è ancora un operatore Hermitiano.

Suggerimento:
si consideri l'integrale $I = \int \psi_i^* \hat{\Omega}\hat{\Omega}\psi_j \, d\tau$, si consideri la funzione $\hat{\Omega}\psi_j$ e si applichi la condizione di Hermiticita.

Essendo $\hat{\Omega}\psi_j = \psi_k$ anche una funzione, l'integrale I può essere riscritto nella forma:

$$\int \psi_i^* \hat{\Omega}\hat{\Omega}\psi_j \, d\tau = \int \psi_i^* \hat{\Omega}\psi_k \, d\tau$$

$\hat{\Omega}$ è operatore Hermitiano e dunque vale:

$$\int \psi_i^* \hat{\Omega}\psi_k \, d\tau = \left[\int \psi_k^* \hat{\Omega}\psi_i \, d\tau\right]^*$$

Il passo successivo è porre ($\hat{\Omega}\psi_i$ è funzione):

$$\hat{\Omega}\psi_i = \psi_l$$

In tal caso si può scrivere:

$$\int \psi_i^* \hat{\Omega} \psi_k \, d\tau = \left[\int \psi_k^* \hat{\Omega} \psi_i \, d\tau \right]^* = \left[\int \psi_k^* \psi_l \, d\tau \right]^* = \int \psi_k \psi_l^* \, d\tau$$

$$= \left[\int \psi_k^* \psi_l \, d\tau \right]^*$$

$$= \int \psi_k \psi_l^* \, d\tau$$

$$= \int \psi_l^* \psi_k \, d\tau$$

$$= \int \psi_l^* \hat{\Omega} \psi_j \, d\tau$$

dove nell'ultima riga si è posto: $\hat{\Omega}\psi_j = \psi_k$.

Ricordando che $\hat{\Omega}$ è Hermitiano vale:

$$\int \psi_l^* \hat{\Omega} \psi_j \, d\tau = \left[\int \psi_j^* \hat{\Omega} \psi_l \, d\tau \right]^*$$

e dunque si può scrivere:

$$\int \psi_i^* \hat{\Omega} \psi_k \, d\tau = \int \psi_i^* \hat{\Omega} \psi_j \, d\tau = \left[\int \psi_j^* \hat{\Omega} \psi_l \, d\tau \right]^*$$

E' stato dimostrato fin qui che vale:

$$\int \psi_i^* \hat{\Omega} \psi_k \, d\tau = \left[\int \psi_j^* \hat{\Omega} \psi_l \, d\tau \right]^*$$

e sostituendo in questa relazione trovata le espressioni per ψ_l e ψ_k viste in precedenza:

$$\hat{\Omega}\psi_j = \psi_k$$

$$\hat{\Omega}\psi_i = \psi_l$$

si ottiene la relazione:

$$\int \psi_i^* \hat{\Omega} \hat{\Omega} \psi_j \, d\tau = \left[\int \psi_j^* \hat{\Omega} \hat{\Omega} \psi_i \, d\tau \right]^*$$

che dimostra che $\hat{\Omega}\hat{\Omega}$ è Hermitiano.

Esercizio 91

Si collochino i nodi radiali della funzione d'onda corrispondente all'orbitale 3*s* dell'atomo di idrogeno.

Per gli atomi idrogenoidi le funzioni d'onda sono il prodotto di una parte radiale e di una parte angolare: $\psi_{n,l,m_l} = R_{n,l}(r)\ Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$

Le funzioni d'onda radiali $R_{n,l}(r)$ sono le funzioni di Laguerre (note!)
Le funzioni d'onda angolari $Y_{l,m_l}(\theta,\phi)$ sono le armoniche sferiche (note!)

Nel caso di un elettrone nell'orbitale 3*s* la funzione d'onda radiale si scrive:

$$R_{3,0}(r) = \frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6-6\rho+\rho^2\right)\ e^{-\rho/2} \quad \text{con: } \rho = 2Zr/na_0 \quad a_0 = 52.9 \text{ pm}$$

I nodi radiali si calcolano imponendo la condizione:

$6-6\rho+\rho^2 = 0$ da cui: $\rho_{1,2} = 3 \pm \sqrt{3}$.

Valendo: $\rho_{1,2} = 2Z\,r_{1,2}/na_0 = \left(3\pm\sqrt{3}\right)$

si ottiene: $r_{1,2} = \frac{1}{2Z}\left(3\pm\sqrt{3}\right)na_0 = \frac{1}{2}\left(3\pm\sqrt{3}\right)3\cdot 52.9 \text{ pm} = 101,\ 376 \text{ pm}$ ■

Esercizio 92

La funzione d'onda dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno si scrive:

$$\psi(r) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

definita nello spazio tridimensionale R^3 .

(a) Si verifichi che la funzione d'onda è normalizzata.

(b) Si calcoli il valore di attesa dell'energia potenziale di un elettrone nello stato fondamentale di un atomo di idrogeno.

Suggerimento: per il calcolo si utilizzi il seguente integrale notevole;

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

La costante di normalizzazione risulta:

$$\mathrm{N} = \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty} \int_0^{+\pi} \int_0^{2\pi} \left(\Psi(r,\theta,\phi) \right)^* \left(\Psi(r,\theta,\phi) \right) r^2 sen\,\theta \, d\theta \, d\phi \, dr \right)^{1/2}}$$

Vale:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\pi} \int_0^{2\pi} \left(e^{-2r/a_0} \right) r^2 sen\,\theta\, d\theta\, d\phi\, dr \right)^{1/2}}$$

$$= \pm \frac{1}{\left(\frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^{+\infty} \left(e^{-2r/a_0} \right) r^2 dr \int_0^{+\pi} sen\,\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \right)^{1/2}}$$

$$\boxed{\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}}$$

$$= \pm \frac{1}{\left(\frac{1}{\pi a_0^3} \frac{2!}{(2/a_0)^3} \cdot \left(-cos\,\theta \Big|_0^{\pi} \right) \cdot (2\pi) \right)^{1/2}}$$

$$= \pm \frac{1}{\left(\frac{1}{\pi a_0^3} \frac{2!}{(2/a_0)^3} \cdot (2) \cdot (2\pi) \right)^{1/2}} = \pm 1$$

La funzione d’onda data è normalizzata.

Il valore d'attesa dell'energia potenziale risulta:

$$\langle V \rangle = \frac{\int_0^{+\infty}\int_0^{+\pi}\int_0^{2\pi}\left(\psi\left(r,\theta,\phi\right)\right)^* V\left(r\right)\left(\psi\left(r,\theta,\phi\right)\right) r^2 sen\,\theta\, d\theta\, d\phi\, dr}{\int_0^{+\infty}\int_0^{+\pi}\int_0^{2\pi}\left(\psi\left(r,\theta,\phi\right)\right)^* \left(\psi\left(r,\theta,\phi\right)\right) r^2 sen\,\theta\, d\theta\, d\phi\, dr}$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^{+\infty}\int_0^{+\pi}\int_0^{2\pi}\left(e^{-2r/a_0}\right)\left(\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\right) r^2 sen\,\theta\, d\theta\, d\phi\, dr$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_0^{+\infty}\left(e^{-2r/a_0}\right) r\, dr \int_0^{+\pi} sen\,\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$\boxed{\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}}$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1!}{(2/a_0)^2}\cdot\left(-\cos\theta\Big|_0^{\pi}\right)\cdot 2\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3}\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1!}{(2/a_0)^2}\cdot 2\cdot 2\pi$$

$$= \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0}$$

Esercizio 93

Una particella si trova in uno stato descritto dalla seguente funzione d'onda:

$$\psi(x) = cos\chi\, e^{ikx} + sen\chi\, e^{-ikx}$$

con χ parametro reale. Determinare la probabilità di trovare la particella con momento lineare (a) $p = +\hbar k$ e (b) $p = -\hbar k$. Determinare inoltre la funzione d'onda della stessa particella se da misure sperimentali si ottiene una probabilità del 90% che il valore sia $p = +\hbar k$.

Il momento lineare, nel caso unodimensionale, è descritto in meccanica quantistica dall'operatore:

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Vale:

$$\begin{aligned} p\psi(x) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(cos\chi\, e^{ikx} + sen\chi\, e^{-ikx}) \\ &= -i\hbar(ik\, cos\chi\, e^{ikx} - ik\, sen\chi\, e^{-ikx}) \\ &= \hbar k(cos\chi\, e^{ikx} - sen\chi\, e^{-ikx}) \end{aligned}$$

La funzione d'onda $\psi(x)$ non è autofunzione dell'operatore *p*.

La funzione d'onda $\psi(x)$ data non è dunque autofunzione dell'operatore p .

Tuttavia per la funzione d'onda data:

$$\psi\left(x\right)=cos\chi\, e^{ikx}+sen\chi\, e^{-ikx}$$

valgono:

$$p(e^{ikx})=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(e^{ikx})=+\hbar k(e^{ikx})$$

$$p(e^{-ikx})=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(e^{-ikx})=-\hbar k(e^{-ikx})$$

ossia la funzione d'onda ψ(x) è esprimibile come combinazione lineare (con coefficienti $cos\chi$ e $sen\chi$) di ψ_{+x}(x) e ψ_{-x}(x) autofunzioni di p:

$$\psi\left(x\right)=cos\chi\,\psi_{+x}\left(x\right)+sen\chi\,\psi_{-x}\left(x\right)$$

con: $\Psi_{+x}\left(x\right)=e^{ikx}$ autofunzione di p con autovalore $p=+\hbar k$
(stato di particella viaggiante verso dx)

$\Psi_{-x}\left(x\right)=e^{-ikx}$ autofunzione di p con autovalore $p=-\hbar k$
(stato di particella viaggiante verso sx)

La particella prima della misura si trova in uno stato descritto dalla sovrapposizione dei due stati *particella viaggiante verso dx* e *particella viaggiante verso sx*. La funzione d'onda che descrive questo stato è la combinazione lineare:

$$\psi(x) = cos\chi\, e^{ikx} + sen\chi\, e^{-ikx} = cos\chi\, \psi_{+x}(x) + sen\chi\, \psi_{-x}(x)$$

L'esito della misura dell'osservabile p della particella è quello di far collassare (*entanglement*) la funzione d'onda $\psi(x)$ verso uno dei due stati componenti. Il risultato della misura dell'osservabile p sarà dunque a seconda dei casi $p = +\hbar k$ o $p = -\hbar k$.

La particella prima della misura si trova in uno stato descritto dalla sovrapposizione dei due stati *particella viaggiante verso dx* e *particella viaggiante verso sx*. La funzione d'onda che descrive questo stato è la combinazione lineare:

$$\psi(x) = cos\chi\, e^{ikx} + sen\chi\, e^{-ikx} = cos\chi\, \psi_{+x}(x) + sen\chi\, \psi_{-x}(x)$$

L'esito della misura dell'osservabile p della particella è quello di far collassare (*entanglement*) la funzione d'onda $\psi(x)$ verso uno dei due stati componenti. Il risultato della misura dell'osservabile p sarà dunque a seconda dei casi $p = +\hbar k$ o $p = -\hbar k$.

La probabilità di ottenere uno o l'altro dei due autovalori dipende dal corrispettivo coefficiente della combinazione lineare della funzione d'onda.

Nel caso dell'esercizio il risultato della misura dell'osservabile p sarà:

$p = +\hbar k$ con probabilità $(cos\chi)^2$

$p = -\hbar k$ con probabilità $(sen\chi)^2$

Il risultato della misura dunque è da interpretarsi in termini probabilistici...

Esercizi [227]

Tenendo conto di quanto detto è facile dedurre che la funzione d'onda richiesta nella terza domanda del problema si scrive:

$$\psi(x) = (0.9)^{1/2}\, e^{ikx} + (0.1)^{1/2}\, e^{-ikx}$$

In tal caso infatti la probabilità di ottenere da una misura il valore $p = +\hbar k$ è pari proprio al coefficiente $(0.9)^{1/2}$ preso al quadrato.

Esercizio 94

Si calcoli il valore di attesa dell'energia cinetica di una particella in uno stato descritto dalla funzione d'onda dell'esercizio precedente (Esercizio 91):

$$\psi(x) = cos\chi\, e^{ikx} + sen\chi\, e^{-ikx} \quad (\ \chi \text{ parametro reale }\ )$$

La funzione d'onda $\psi(x)$ è autofunzione dell'operatore energia cinetica T:

$$\begin{aligned}
T\psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(cos\chi\, e^{ikx} + sen\chi\, e^{-ikx}\right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(cos\chi\, ik\, e^{ikx} + sen\chi\,(-ik)\, e^{-ikx}\right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(cos\chi\, i^2 k^2\, e^{ikx} + sen\chi\, i^2 k^2 e^{-ikx}\right) \\
&= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(cos\chi\ e^{ikx} + sen\chi\, e^{-ikx}\right) \\
&= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(x)
\end{aligned}$$

Essendo ψ(x) autofunzione di T il valore di attesa per l'energia cinetica coincide con l'autovalore di T :

$$\langle T \rangle = \frac{\int \psi^*(x) T \psi(x) dx}{\int \psi^*(x)\psi(x) dx}$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{\int \psi^*(x)\psi(x) dx}{\int \psi^*(x)\psi(x) dx}$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Sul concetto di misura in meccanica quantistica (1)

In meccanica quantistica il risultato di un gran numero di misure relative a un determinato osservabile Ω è correlabile con il valore di attesa di Ω calcolato sulla funzione d'onda che descrive il sistema.

Se la $\psi(\mathbf{r})$ di un sistema è esprimibile come combinazione lineare delle diverse autofunzioni $\psi_n(\mathbf{r})$ con autovalori ω_n di Ω, ossia se vale:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{N} c_n \psi_n(\mathbf{r}) \qquad \langle\Omega\rangle_n = \frac{\int \psi_n^*(\mathbf{r})\,\Omega\,\psi_n(\mathbf{r})\,dV}{\int \psi_n^*(\mathbf{r})\,\psi_n(\mathbf{r})\,dV} = \omega_n$$

allora il valore di attesa $\langle\Omega\rangle$ calcolato su $\psi(\mathbf{r})$ risulta:

$$\langle\Omega\rangle = \frac{\int \psi^*(\mathbf{r})\,\Omega\,\psi(\mathbf{r})\,dV}{\int \psi^*(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,dV} = \sum_{n=1}^{N} |c_n|^2\,\omega_n = |c_1|^2\,\omega_1 + \ldots |c_N|^2\,\omega_N$$

Il valore di attesa di Ω calcolato su ψ coincide con la somma dei possibili autovalori ω_n dell'operatore Ω pesata dal modulo quadro dei corrispettivi coefficienti c_n presenti nella combinazione lineare attraverso cui è espressa ψ.

Sul concetto di misura in meccanica quantistica (2)

In meccanica quantistica la misura di un osservabile Ω può essere pensata come un operatore di proiezione Π_Ω che agendo su una funzione d'onda $\psi(\boldsymbol{r})$ (non necessariamente autofunzione di Ω) manda al coefficiente c_n^{star} relativo all'autofunzione $\psi_n^{star}(\mathbf{r})$ con autovalore ω_n^{star} effettivamente ottenuto nel corso della singola misura.

In tal caso se $\psi(\boldsymbol{r})$ è la funzione d'onda che descrive lo stato di un sistema esprimibile come combinazione lineare di diversi autofunzioni $\psi_n(\boldsymbol{r})$ di Ω, ossia:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{N} c_n \psi_n(\mathbf{r}) \qquad \langle \Omega \rangle_n = \frac{\int \psi_n^*(\mathbf{r}) \Omega \psi_n(\mathbf{r}) dV}{\int \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) dV} = \omega_n$$

l'operazione di proiezione agisce sulla funzione d'onda $\psi(\mathbf{r})$ restituendo il coefficiente c_n^{star} della funzione d'onda $\psi_n^{star}(\mathbf{r})$ corrispondente al valore di attesa ω_n^{star} ottenuto nella misura:

$$H^N \xrightarrow{\Pi_\Omega[\ \omega_n^{star}\ ]} \mathbb{C}$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \Psi_n(\mathbf{r}) \xrightarrow{\Pi_\Omega[\ \omega_n^{star}\ ]} c_n^{star}$$

Operatore di proiezione per l'osservabile Ω:

$$H^N \xrightarrow{\Pi_\Omega[\,\omega_n^{star}\,]} \mathbb{C}$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \Psi_n(\mathbf{r}) \xrightarrow{\Pi_\Omega[\,\omega_n^{star}\,]} c_n^{star}$$

La probabilità di ottenere in una misura il valore ω_n^{star} è data da:

$$Prob\left[\omega_n^{star}\right] = \left(c_n^{star}\right)^* \left(c_n^{star}\right) = \left|c_n^{star}\right|^2$$

Nel caso dell'esercizio precedente (Esercizio 91), valgono:

$$\Psi(x) = cos\chi\, e^{ikx} + sen\chi\, e^{-ikx}$$

$$\Psi(x) = cos\chi\, e^{ikx} + sen\chi\, e^{-ikx} \xrightarrow{\Pi_\Omega[+\hbar k]} cos\chi$$

$$Prob[\hbar k] = |cos\chi|^2$$

$$\Psi(x) = cos\chi\, e^{ikx} + sen\chi\, e^{-ikx} \xrightarrow{\Pi_\Omega[-\hbar k]} sen\chi$$

$$Prob[-\hbar k] = |sen\chi|^2$$

Note aggiunte [1]

I. The Copenhagen interpretation of the wavefunction (cenni di teoria)

Consider now a wavefunction ψ that is not an eigenfunction of an operator $\hat{\Omega}$ of interest and that can be written as a linear combination of its eigenfunctions ψ_k.

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \ldots + c_N\psi_N = \sum_{k=1}^{N} c_k\psi_k$$

with:

ψ_k eigenfunctions of $\hat{\Omega}$

ω_k eigenvalues of $\hat{\Omega}$

In this case the functions ψ_k are said to form a *complete set* in the sense that any arbitrary function ψ can be expressed as a linear combination of them.

According to quantum mechanics:

1. If the wavefunction of the particle is not an eigenfunction for the operator $\hat{\Omega}$ the state does not have a definite value for the corresponding observable.
2. When this observable is measured, in a single observation one of the eigenvalues ω_k corresponding to the ψ_k that contribute to the superposition will be found.
3. The probability of measuring a particular eigenvalue ω_k in a series of observations is proportional to the square modulus ($|c_k|^2$) of the corresponding coefficient in the linear combination.

Note aggiunte [2]

Consider now a wavefunction ψ that is not an eigenfunction of an operator $\hat{\Omega}$ of interest and that can be written as a linear combination of its eigenfunctions ψ_k.

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \ldots + c_N\psi_N = \sum_{k=1}^{N} c_k \psi_k$$

with:

ψ_k eigenfunctions of $\hat{\Omega}$

ω_k eigenvalues of $\hat{\Omega}$

4. The average value of a large number of observations is given by the expectation value, $\langle \Omega \rangle$, of the operator corresponding to the observable of interest.

5. The expectation value of an operator $\hat{\Omega}$ is defined as:

$$\langle \Omega \rangle = \int \psi^* \hat{\Omega} \psi \, d\tau$$

and can be thought as the weighted average of a large number of observations of the corresponding observable of $\hat{\Omega}$. This formula is valid only for normalized wavefunctions.

Note aggiunte [3]

II. Expectation value of an operator $\hat{\Omega}$ applied to an eigenfunction ψ

If ψ is an eigenfunction of the operator $\hat{\Omega}$ with eigenvalue ω,
i.e. if the following *eingevalues equation* holds:

$$\boxed{\hat{\Omega}\,\psi(\mathrm{x}) = \omega\,\psi(\mathrm{x})}$$

the expectation value of $\hat{\Omega}$ is ω .

The following expression holds:

$$\boxed{\langle\Omega\rangle = \int \psi^* \overbrace{\hat{\Omega}\psi}^{\omega\psi}\, d\tau = \int \psi^* \omega\, \psi\, d\tau = \omega \int \psi^* \psi\, d\tau = \omega}$$

because ω is a constant and may be taken outside the integral and the resulting integral is equal to 1 for a normalized wavefunction.

The interpretation of the previous expression is that, because every observation of the property Ω results in the value ω (because the wavefunction is an eigenfunction of $\hat{\Omega}$), the mean value of all the observations is also ω.

Note aggiunte [4]

III. Expectation value of an operator $\hat{\Omega}$ applied to a generic wave function ψ *that* may be written as linear combination of a set of eigenfunctions ψ_k of $\hat{\Omega}$.

Consider now a wavefunction that is not an eigenfunction of the operator $\hat{\Omega}$ of interest and that can be written as a linear combination of its eigenfunctions.

$$\boxed{\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \ldots + c_N\psi_N = \sum_{k=1}^{N} c_k\psi_k}$$

For simplicity, suppose the wavefunction is the sum of two eigenfunctions:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

The following expressions hold:

$$\langle\Omega\rangle = \int \left(c_1\psi_1 + c_2\psi_2\right)^* \hat{\Omega}\left(c_1\psi_1 + c_2\psi_2\right) d\tau$$

$$\langle\Omega\rangle = \int \left(c_1\psi_1 + c_2\psi_2\right)^* \left(c_1\,\hat{\Omega}\psi_1 + c_2\,\hat{\Omega}\psi_2\right) d\tau$$

$$\langle\Omega\rangle = \int \left(c_1\psi_1 + c_2\psi_2\right)^* \left(c_1\,\omega_1\psi_1 + c_2\,\omega_2\psi_2\right) d\tau$$

Note aggiunte [5]

$$\langle\Omega\rangle = \int (c_1\psi_1 + c_2\psi_2)^* \; (c_1\,\omega_1\psi_1 + c_2\,\omega_2\psi_2)\, d\tau$$

$$= c_1^{\,*} c_1\,\omega_1 \overbrace{\int \psi_1^* \,\psi_1 \, d\tau}^{1} + c_2^{\,*} c_2\,\omega_2 \overbrace{\int \psi_2^* \,\psi_2 \, d\tau}^{1} + c_2^{\,*} c_1\,\omega_1 \overbrace{\int \psi_2^* \,\psi_1 \, d\tau}^{0} + c_1^{\,*} c_2\,\omega_2 \overbrace{\int \psi_1^* \,\psi_2 \, d\tau}^{0}$$

because:
the first two integrals on the right are both equal to 1 because the wavefunctions are individually normalized;
ψ_1 and ψ_2 correspond to different eigenvalues of an hermitian operator, they are orthogonal, so the third and fourth integrals on the right are zero.

We can conclude that:

$$\boxed{\langle\Omega\rangle = |c_1|^2\,\omega_1 + |c_2|^2\,\omega_2}$$

This expression shows that the expectation value is the sum of the two eigenvalues of $\hat{\Omega}$ weighted by the square modulus of the corresponding coefficient in the linear combination ($|c_k|^2$) .

Hence, the expectation value is the weighted mean of a series of observations.