

Questa parte delle lezioni segue il libro Cohen-Tannoudjim, Diu, Laloë, Quantum Mechanics.

Abbiamo visto che all' inizio del '900 diversi risultati sperimentali indicavano chiaramente che le leggi della fisica classica non erano adeguate per la descrizione della materia e della sua interazione con la radiazione, specialmente a bassa  $T$ . Il tentativo di Bohr di "rattoppare" con ipotesi ad hoc l' approccio classico proposto per l' atomo di idrogeno conserva certamente una valenza storica ma non è certo sufficiente per dissipare tutte le contraddizioni osservate. Inoltre, vari problemi, richiedevano "rattoppi" differenti. Dopo decenni di discussioni si andò sviluppando un nuovo approccio alla descrizione della materia che fu in grado di descrivere e spiegare i vecchi risultati e, cosa ancor più importante, predirne di nuovi. Questo nuovo approccio, che incorpora la fisica classica nel regime dove la fisica classica è corretta, si basa su sei postulati. Così come abbiamo accettato la legge  $\vec{F} = m\vec{a}$  come fondamento della fisica classica, accettiamo adesso questi postulati e vediamo come assumendoli veri possiamo risolvere le discrepanze tra risultati sperimentali e predizioni classiche discussa nella precedente lezione. La meccanica quantistica che introdurremo nel corso è ancora quella basata su concetti non-relativistici. L' equazione di Dirac, relativisticamente corretta, risolve i problemi insoluti della meccanica non-relativistica, ma ancora una volta, recupera nel limite  $v \ll c$  le equazioni della meccanica quantistica non relativistica che andiamo ad introdurre.

## 1 I tools matematici della Meccanica quantistica: Richiami spazi vettoriali

Per definire gli assiomi della meccanica quantistica occorre prima richiamare alcuni aspetti degli spazi vettoriali ed in particolare dello spazio così detto  $L^2$  lo spazio delle funzioni "quadrato integrabili" cioè tali che

$$\int dr^3 |\psi(r, t)|^2 = 1$$

o per essere ancor più precisi il sottospazio di  $L^2$  costituito da tutte le funzioni continue e derivabili che indicheremo con il simbolo  $\mathcal{F}$ .

I concetti che dobbiamo ripassare sono:

### 1.1 $\mathcal{F}$

$\mathcal{F}$  soddisfa tutti i criteri di uno spazio vettoriale.

#### 1.1.1 combinazioni lineari

Combinazione lineare di elementi dello spazio è ancora un elemento dello spazio. Se  $\psi_1$  e  $\psi_2 \in \mathcal{F}$ , allora  $\phi \equiv \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \in \mathcal{F}$  con  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  arbitrari numeri complessi.

### 1.1.2 prodotto scalare

Ad ogni coppia di funzioni  $\psi_1$  e  $\psi_2$  appartenenti a  $\mathcal{F}$  e' possibile associare un numero complesso definito da

$$(|\psi_1 \rangle \cdot |\psi_2 \rangle) \equiv \int \psi_1^* \psi_2 d\mathbf{r}$$

che chiameremo prodotto scalare tra  $\psi_1$  e  $\psi_2$  (e spesso useremo il simbolo  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$  per il prodotto scalare). Il prodotto scalare che gode di essere lineare in  $\psi_2$  ed antilineare in  $\psi_1$ .

Notate che l' integrale converge se  $\psi_1$  e  $\psi_2 \in \mathcal{F}$ .

Le proprieta' seguenti derivano dalla definizione data

- $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*$
- $\langle \psi_1 | \lambda_2 \psi_2 + \lambda_3 \psi_3 \rangle = \lambda_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \lambda_3 \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle$
- $\langle \lambda_2 \psi_2 + \lambda_3 \psi_3 | \psi_1 \rangle = \lambda_2^* \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle + \lambda_3^* \langle \psi_3 | \psi_1 \rangle$

Chiameremo ortogonali due funzioni il cui prodotto scalare e' zero. Infine notiamo che il prodotto scalare  $\langle \phi | \phi \rangle = 0$  se e solo se  $\phi = 0$ .

## 1.2 Operatori Lineari (e commutatori)

Un operatore lineare e' una quantita' matematica che associa ad ogni funzione in  $\mathcal{F}$  un'altra funzione attraverso una corrispondenza lineare.

- $A|\psi \rangle = |\psi' \rangle$
- $A[\lambda_2 |\psi_2 \rangle + \lambda_3 |\phi_3 \rangle] = \lambda_2 A|\psi_2 \rangle + \lambda_3 A|\phi_3 \rangle$

Esempi tipici di operatori lineari sono l' operatore  $X$  moltiplicazione per  $x$  e l' operatore  $D_x$  di derivazione (parziale) rispetto a  $x$ .

Il prodotto tra due operatori  $A$  e  $B$  e' definito come

$$(AB)|\psi \rangle = A[B|\psi \rangle]$$

In generale  $AB$  e' diverso da  $BA$ . Si definisce l' operatore commutatore  $[A, B]$  come  $AB - BA$ . Nel caso degli operatori  $X$  e  $D_x$ ,  $[X, D_x] = -1$ .

### 1.2.1 Base (discreta)

Definiamo base un set di funzioni  $u_i$  di  $\mathcal{F}$ , distinte da un indice  $i$ , che gode di essere ortonormale

$$(u_i, u_j) = \int dr^3 u_i^* u_j = \delta_{ij}$$

e tale che ogni funzione dello spazio  $\mathcal{F}$  possa essere espansa in una e solo una maniera in termini delle funzioni  $u_i$ .

$$\psi = \sum_i c_i u_i$$

Il prodotto scalare e la normalizzazione possono essere facilmente espressi in termini di  $c_i$ . Date due funzioni  $\phi$  e  $\psi$ , che possiamo espandere nella base  $u_i$  come  $\phi = \sum_i a_i u_i$  e  $\psi = \sum_i b_i u_i$ , il loro prodotto scalare assume il valore

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_i a_i^* b_i$$

### 1.2.2 Relazione di chiusura

Se una base e' completa, una arbitraria funzione puo' essere scritta come somma su tutti gli elementi della base

$$|\phi\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \phi \rangle$$

che mostra che l'operatore  $\sum_i |u_i\rangle \langle u_i|$  coincide con l'operatore unita'. Questa relazione vale anche puntualmente nello spazio  $\mathbf{r}$ , poiche'

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \sum_i \langle u_i | \psi \rangle |u_i\rangle = \sum_i \left[ \int u_i(\mathbf{r}')^* \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right] u_i(\mathbf{r}) \\ &= \int \psi(\mathbf{r}') \sum_i [u_i(\mathbf{r}')^* u_i(\mathbf{r})] d\mathbf{r}' = \int \psi(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \end{aligned}$$

per cui

$$\sum_i u_i(\mathbf{r}')^* u_i(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

## 2 Esempi di basi "anomale" ma utili

Guardiamo due possibili basi che consentono di espandere le funzioni d'onda per chiarire meglio i concetti appena esposti. Usiamo due basi, che sebbene non siano base di funzioni quadrato integrabili, nondimeno sono di grande utilita' in fisica.

Ricordiamoci la definizione di trasformate di Fourier. Per comodita' lavoriamo in una dimensione, ma la generalizzazione allo spazio tridimensionale e' semplice.

## 2.1 Onde piane. (base $|\mathbf{p} \rangle$ )

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}(p) e^{ipx/\hbar}$$

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar}$$

definendo

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

possiamo riscrivere le due espressioni precedenti come

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}(p) v_p(x)$$

$$\bar{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x) v_p(x)^*$$

[Dimensionalmente,  $\psi(x)$  ha le dimensioni di  $\frac{1}{\sqrt{x}}$  e  $\bar{\psi}(p)$  ha le dimensioni di  $\frac{1}{\sqrt{p}}$  mentre  $v_p(x)$  ha dimensioni  $\frac{1}{\sqrt{\hbar}}$ ]

Come si vede, la funzione d'onda  $\psi(x)$  puo' essere letta come una combinazione lineare di onde piane  $v_p(x)$ , in cui  $\bar{\psi}(p)$  indica l'importanza dell'onda piana prescelta.  $\bar{\psi}(p)$  non e' altro che il prodotto scalare tra  $v_p(x)$  e  $\psi(x)$ . Inoltre  $p$  gioca il ruolo di quantita' di moto dell'onda (in un'onda  $p = U/v$ , dove  $U$  e' l'energia e  $v$  la velocita' di propagazione dell'onda).

Guardiamo anche il prodotto scalare tra due elementi della base

$$(v'_p(x) \cdot v_p(x)) = \langle v'_p | v_p \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx e^{i(p-p')x/\hbar} = \frac{1}{\hbar} \delta[(p-p')/\hbar] = \delta[(p-p')]$$

dove abbiamo fatto uso della relazione

$$\frac{1}{2\pi} \int dk e^{iku} = \delta(u)$$

e della relazione  $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$ . Approfittiamo anche per notare che

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}(p) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{ipx/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}(p) p e^{ipx/\hbar}$$

## 2.2 Funzioni delta di Dirac. (base $|\mathbf{r}\rangle$ )

Un'altra interessante base anomala e' costituita dalle funzioni che indicheremo con il simbolo  $\xi_{x_0}(x)$  definite come

$$\xi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$$

Naturalmente possiamo scrivere

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \psi(x_0) \delta(x - x_0)$$

dove

$$\psi(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x) \delta(x - x_0)$$

che mostra che  $\psi(x)$  puo' essere espansa in modo univoco nella base  $\xi_{x_0}(x)$  nella quale  $\psi(x_0)$  e' il risultato del prodotto scalare tra  $\psi(x)$  e  $\xi_{x_0}(x)$ .

Le funzioni  $\xi_{x_0}(x)$  costituiscono una base ortonormale

$$\langle \xi_{x_0}(x) | \xi_{x'_0}(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_0) \delta(x - x'_0) = \delta(x'_0 - x_0)$$

Nella base delle funzioni delta,  $|\psi(x_0)|^2$  e' la probabilita' che la particella sia in  $x_0$ .

## 3 Operatori R e P

Se definiamo l' operatore  $X$  come l' operatore che moltiplica la funzione d' onda per  $x$

$$\psi'(x, y, z) = X\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z)$$

nella rappresentazione  $\mathbf{r}$

$$\langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle = x \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$$

Se dobbiamo calcolare l' elemento di matrice

$$\langle \psi_1 | X | \psi_2 \rangle$$

possiamo scrivere utilizzando la relazione di chiusura

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | X | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_1 | 1 \cdot X | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \int dx_0 | x_0 \rangle \langle x_0 | \cdot X | \psi_2 \rangle \\ &= \int dx_0 \langle \psi_1 | x_0 \rangle \langle x_0 | \cdot X | \psi_2 \rangle = \int dx_0 \psi_1(x_0)^* x_0 \psi_2(x_0) \end{aligned}$$

Le stesse considerazioni valgono per l'operatore  $P$  nella base  $|\mathbf{p}\rangle$  in cui definiamo l'operatore  $P$  come l'operatore che agendo su  $\bar{\psi}(p)$  moltiplica per  $p$ . Avendo scritto

$$|\psi(x)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}(p) |v_p(x)\rangle$$

allora

$$P|\psi(x)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp p \bar{\psi}(p) |v_p(x)\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} |\psi(x)\rangle$$

che mostra che nella base  $|\mathbf{r}\rangle$  l'operatore  $P$  si esprime come

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

### 3.1 Notazione di Dirac

Un funzionale è una operazione che associa ad ogni funzione d'onda un numero. Il prodotto scalare è un esempio di funzionale. Per esempio il prodotto scalare della funzione d'onda  $|\psi\rangle$  con le funzioni dello spazio è un funzionale a cui possiamo dare il simbolo  $\langle\psi|$  e chiamarlo bra. Analogamente chiamiamo ket la generica funzione d'onda  $|\phi\rangle$ . Il prodotto scalare tra due funzioni  $|\psi\rangle$  e  $|\phi\rangle$  lo indichiamo come

$$(|\psi\rangle \cdot |\phi\rangle) = \langle\psi|\phi\rangle$$

La corrispondenza tra bra e ket è antilineare. Il bra di  $\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$  è  $\lambda_1^* \langle\psi_1| + \lambda_2^* \langle\psi_2|$ .

#### 3.1.1 Operatore Aggiunto

Abbiamo visto che ad ogni funzione d'onda  $|\psi\rangle$  (ket) possiamo associare un corrispondente  $\langle\psi|$  (bra) attraverso la definizione di prodotto scalare.  $|\psi\rangle$  e  $\langle\psi|$  sono chiamati Hermitiani coniugati.

Dato un operatore  $A$  tale che

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle = A|\psi\rangle$$

possiamo chiederci come definire l'equivalente di  $\langle\psi'|$  (il suo Hermitiano coniugato). Definiamo  $A^\dagger$  l'operatore che agisce sul bra  $\langle\psi|$  per dare  $\langle\psi'|$ ,

$$\langle\psi'| = \langle A\psi| = \langle\psi|A^\dagger$$

Le regole del prodotto scalare ci consentono di visualizzare il rapporto tra  $A$  e  $A^\dagger$  (notate che  $A^\dagger$  agisce a sinistra). In particolare

$$\langle\psi'|\phi\rangle = \langle\phi|\psi'\rangle^* \quad \langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|A|\psi\rangle^*$$

$A^\dagger$  è anche chiamato Hermitiano coniugato di  $A$ . Gli operatori aggiunti godono delle seguenti proprietà

- $(A^\dagger)^\dagger = A$
- $(\lambda A^\dagger) = \lambda^* A^\dagger$
- $(A + B)^\dagger = (A^\dagger + B^\dagger)$
- $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ . Infatti, se  $|\phi\rangle = A|\xi\rangle$  con  $|\xi\rangle = B|\psi\rangle$  (così che  $|\phi\rangle = AB|\psi\rangle$ ) allora  $\langle\phi| = \langle\xi|A^\dagger = \langle\psi|B^\dagger A^\dagger$ .

### 3.2 Operatori Hermitiani - $A = A^\dagger$

Un operatore è chiamato hermitiano se  $A = A^\dagger$ . Ne consegue che

$$\begin{aligned}\langle\psi|A|\phi\rangle &= \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle^* = \langle\phi|A|\psi\rangle^* \\ &= \langle A\psi|\phi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle = \langle\psi|A|\phi\rangle\end{aligned}$$

Da ricordare che il prodotto di due operatori hermitiani è hermitiano se  $[A, B] = 0$ . Infatti  $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA$ .  $BA = AB$  solo se il commutatore è nullo.

### 3.3 Autovalori e autofunzioni

Una funzione d'onda è detta autofunzione di un operatore lineare  $A$  se

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

L'autovalore  $\lambda$  è chiamato non-degenere quando è unico. Se esistono due o più autofunzioni linearmente indipendenti con lo stesso  $\lambda$ , l'autovalore è detto degenere (di grado  $g$ ).

Autovalori ed autovettori di un operatore  $A$  su una base discreta si trovano risolvendo l'equazione

$$\text{Det}[A - \lambda I] = 0$$

### 3.4 Esempio di diagonalizzazione di una matrice $2 \times 2$

Supponiamo di avere una Hamiltoniana in uno spazio bidimensionale. Questo vuol dire che possiamo rappresentare l'operatore  $H$  con una matrice hermitiana  $2 \times 2$ .

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{22} \end{pmatrix}$$

Dobbiamo risolvere l'equazione agli autovalori

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

dove l' autofunzione  $|\psi\rangle$  e' espressa come un vettore a due componenti nella base di partenza  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$ .

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} H_{11} - E & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{22} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

che ammette soluzioni per i valori di  $E$  per cui

$$\det|H - EI| = 0 \quad (H_{11} - E)(H_{22} - E) - |H_{12}|^2 = 0$$

$$E^2 - (H_{11} + H_{22})E + H_{11}H_{22} - |H_{12}|^2 = 0$$

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \left( (H_{11} + H_{22}) \pm \sqrt{(H_{11} + H_{22})^2 - 4(H_{11}H_{22} - |H_{12}|^2)} \right)$$

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \left( (H_{11} + H_{22}) \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2} \right)$$

Da notare che :

- La traccia si conserva:  $E_1 + E_2 = H_{11} + H_{22}$
- Il determinante e' dato da  $E_1 E_2$
- Se  $E_1 = E_2$ ,  $(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2 = 0$ , che essendo somma di quadrati e' solo possibile se  $H_{11} = H_{22}$  e  $H_{12} = 0$ , cioe' se  $H$  e' proporzionale alla matrice unita'.

Definendo le variabili

$$\tan \theta = \frac{2|H_{12}|}{H_{11} - H_{22}}$$

e la fase di  $H_{12}$

$$H_{12} = |H_{12}|e^{i\phi}$$

si puo' mostrare che gli autovettori corrispondenti sono

$$|\psi_+\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} |\psi_1\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} |\psi_2\rangle$$

$$|\psi_-\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} |\psi_1\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} |\psi_2\rangle$$

### 3.4.1 Proprieta' autovalori operatori hermitiani

Gli operatori hermitiano hanno

- Autovalori reali :

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \lambda \langle \psi | \psi \rangle \quad \langle \psi | A | \psi \rangle^* = \lambda^*$$

ma se  $A$  e' hermitiano  $\langle \psi | A | \psi \rangle^* = \langle \psi | A^\dagger | \psi \rangle = \lambda$ . Dunque  $\lambda = \lambda^*$

- Autovettori associati ad autovalori distinti sono ortogonali. Assumendo che

$$A | \psi \rangle = \lambda | \psi \rangle \quad A | \phi \rangle = \mu | \phi \rangle$$

Infatti (ricordando che gli autovalori sono reali)

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \lambda \langle \phi | \psi \rangle = \mu^* \langle \phi | \psi \rangle = \mu \langle \phi | \psi \rangle$$

da cui

$$(\lambda - \mu) \langle \phi | \psi \rangle = 0$$

## 4 Osservabili che commutano

### 4.1 Autovettori comuni

- Se due operatori  $A$  e  $B$  commutano, se  $|\psi\rangle$  e' un autovettore di  $A$ ,  $B|\psi\rangle$  e' anche esso un autovettore di  $A$  con lo stesso autovalore. Assumendo che  $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$

$$BA|\psi\rangle = aB|\psi\rangle \quad \rightarrow \quad AB|\psi\rangle = aB|\psi\rangle$$

Se  $a$  e' non degenera,  $B|\psi\rangle = b|\psi\rangle$ , quindi  $|\psi\rangle$  e' un autovettore anche di  $B$ . Se  $a$  e' degenera  $B|\psi\rangle$  appartiene al sottospazio degenera di  $A$ .

- E' possibile costruire una base ortonormale con autovettori comuni ad  $A$  e  $B$ . Se  $A$  e' non degenera, questa assunzione e' banale, avendo visto che in questo caso le autofunzioni di  $A$  sono anche autofunzioni di  $B$ . Nel caso in cui ci sia un sottospazio di  $A$   $g$  volte degenera, la base di  $A$  non e' univoca. Possiamo dunque scegliere come base quella in cui  $B$  e' diagonale.

### 4.2 CSCO: Set completo di osservabili che commutano

Se un operatore  $A$  ha tutti autovalori non degeneri, gli autovalori automaticamente definiscono le autofunzioni. In questo caso l' operatore  $A$  costituisce da solo un set completo. Se  $A$  e' degenera, all' interno del sottospazio degenera la scelta della base non e' univoca. Se

però un altro operatore  $B$  che commuta con  $A$  rimuove completamente la degenerazione (in tutti i sottospazi degeneri), allora  $A$  e  $B$  costituiscono un set completo. E così via.

In modo preciso, definiamo un insieme di osservabili  $A, B, C$  etc un CSCO se tutti gli osservabili commutano tra loro a coppie e se specificando gli autovalori di tutti gli osservabili viene determinato in modo univoco l' autovettore comune.

## 5 I (sei) Postulati della Meccanica Quantistica

### 5.1 Primo Postulato: lo stato del sistema

Lo stato di un sistema fisico composto da  $N$  particelle al tempo  $t_0$  è definito da una funzione d' onda,  $\psi(t_0, \mathbf{r}^N)$  continua e derivabile. Tale funzione deve godere della proprietà di essere quadrato-integrabile, cioè

$$\int |\psi(t_0, \mathbf{r}^N)|^2 d\mathbf{r}^N = 1$$

Vedremo poi che  $\psi(t_0, \mathbf{r}^N)$  può essere considerato un vettore nello spazio delle funzioni quadrato-integrabili. Spesso utilizzeremo la notazione  $|\psi\rangle$  per la funzione d' onda e la notazione  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$  per il prodotto scalare.

Questo primo postulato già rompe completamente con la fisica classica. La fisica classica si basava sul fatto che la (teoricamente) infinita precisione di posizioni e velocità ( $\mathbf{r}^N$  e  $\mathbf{v}^N$ ) univocamente definisse lo stato del sistema. Adesso, abbiamo una funzione di ( $\mathbf{r}^N$ ). Il sistema non è più localizzato in un punto dello "spazio della fasi". In aggiunta, l' integrale  $\int |\psi(t_0, \mathbf{r}^N)|^2 d\mathbf{r}^N = 1$ , tipico di una normalizzazione di una densità di probabilità introduce il significato probabilistico di funzione d' onda.

Disegno di  $|\psi(t_0, x)|^2$  vs  $x$

Disegno Bidimensionale di uno spazio  $L^2$

### 5.2 Secondo Postulato: Le quantità fisiche

Ad ogni quantità fisica misurabile  $\mathcal{A}$  è associato un operatore Hermitiano  $A$  (che chiameremo "osservabile") che agisce nello spazio delle funzioni quadrato-integrabili.

Disegno della matrice associata ad  $A$

### 5.3 Terzo Postulato: la misura

L' unico possibile risultato di una operazione di misura della quantità  $\mathcal{A}$  è uno degli autovalori (reali) dell' osservabile  $A$ . Disegno della matrice diagonalizzata associata ad  $A$

## 5.4 Quarto Postulato (per spettro di $A$ discreto e non degenere)

La probabilita'  $\mathcal{P}$  di osservare l' autovalore  $a_n$ , effettuando una misura della grandezza fisica  $\mathcal{A}$ , e'

$$\mathcal{P}(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

dove  $|u_n\rangle$  e' l' autovettore normalizzato associato all' autovalore  $a_n$ .

Anche il secondo e terzo e quarto postulato presentano una cesura notevole con la fisica classica. Il risultato di una misura e' un numero ben preciso (reale) che coincide con uno degli autovalori di un osservabile. La probabilita' di misurare un autovalore specifico dipende dallo stato del sistema (dalla funzione d' onda dunque)

## 5.5 Quinto Postulato (per spettro di $A$ discreto e non degenere)

Se una misura di  $\mathcal{A}$  ha dato come risultato  $a_n$ , lo stato del sistema immediatamente dopo la misura e'  $u_n$ . **Disegno della nuova funzione d' onda**

La misura di un osservabile  $\mathcal{B}$

## 5.6 Sesto Postulato

L'evoluzione temporale dello stato del sistema  $|\psi\rangle$  e' governata dalla equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

dove  $H(t)$  e' l' osservabile associato con la energia totale del sistema (operatore Hamiltoniano)

# 6 Un po' di considerazioni di Fisica

Stiamo assumendo che lo strumento di misura sia esterno al sistema (e non quantistico), e che perturbi il sistema SOLO per l' effetto quantistico della misura.

Una singola misura restituisce un autovalore. Ma l' aspetto probabilistico della misura ci obbliga a ripetere la misura un gran numero di volte e di considerare la distribuzione dei risultati per ottenere  $\mathcal{P}(a_n)$ . In particolare sono importanti media e varianza di questa distribuzione.

Il valore medio dell' osservabile  $A$  e' dato da

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_\psi &= \sum_i a_i |c_i|^2 = \sum_i a_i |\langle \psi | u_i \rangle|^2 = \sum_i a_i \langle \psi | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_i a_i | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \\ &= \langle \psi | \sum_i A | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \langle \psi | A \sum_i | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \end{aligned}$$

dove abbiamo usato la relazione  $\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = 1$  (completezza dello spazio). Infatti

$$\begin{aligned}\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle &= \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \sum_j c_j |u_j\rangle = \sum_i \sum_j c_j |u_i\rangle\langle u_i|u_j\rangle = \\ &= \sum_i \sum_j c_j \delta_{ij} = \sum_j c_j |u_j\rangle = |\psi\rangle\end{aligned}$$

Analogamente la varianza, una misura della ampiezza della distribuzione e' data da  $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2}$

## 6.1 Compatibilita' degli osservabili

Se due osservabili commutano ( $[A, B] = 0$ ), allora esiste una base comune che indichiamo con  $|a_n, b_p\rangle$ . Su questo stato, la misura di  $A$  dara' in questo caso  $a_n$  e la misura di  $B$  dara'  $b_p$ . L'ordine della misura (prima  $A$  e poi  $B$  o viceversa) e' irrilevante. In questo caso gli osservabili son detti compatibili.

Se invece due osservabili NON commutano ( $[A, B] \neq 0$ ) allora non e' possibile trovare una base comune. Inoltre il risultato delle misure dipende dall'ordine con cui i due osservabili sono misurati. I due osservabili in questo caso sono detti non compatibili.

## 6.2 Determinismo nella evoluzione di $|\psi\rangle$

La equazione di Schrödinger e' del primo ordine nel tempo. Quindi, dato lo stato iniziale, lo stato a tempi successivi e' determinato.

## 6.3 Conservazione della norma

Calcoliamo prima l' hermitiano coniugato della equazione di Schrödinger

$$\begin{aligned}\left[ i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right]^\dagger &= [H(t)|\psi(t)\rangle]^\dagger \\ -i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t)| &= \langle \psi(t)| H\end{aligned}$$

Calcoliamo

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \psi(t)|\psi(t)\rangle &= \left[ \frac{d}{dt} \langle \psi(t)| \right] |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t)| \left[ \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right] = \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t)| H(t) |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t)| \frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle = 0\end{aligned}$$

## 6.4 Evoluzione dei valori medi

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle &= \left[ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] A(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A(t) \left[ \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right] + \langle \psi(t) | \frac{\partial A(t)}{\partial t} | \psi(t) \rangle = \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t) A(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A(t) \frac{1}{i\hbar} H(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial A(t)}{\partial t} | \psi(t) \rangle = \end{aligned}$$

da cui

$$\frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H(t)] \rangle + \langle \frac{\partial A(t)}{\partial t} \rangle$$

Il risultato precedente ci chiarisce che se  $A$  non dipende dal tempo esplicitamente

$$\frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H(t)] \rangle$$

e dunque tutte le volte che l'osservabile  $A$  commuta con  $H$ ,  $\frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle = 0$ . Quindi  $\langle A(t) \rangle$  è costante. Le leggi di conservazione in fisica classica, trovano l'analogo quantistico in questo risultato.

## 6.5 Cross-over quantistico-classico (richiede $P = -i\hbar\nabla$ )

Prendiamo il caso di una particella in un potenziale, con Hamiltoniana

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(R)$$

L'evoluzione nel tempo di  $R$  e  $P$  è data da (visto che  $R$  commuta con  $V(R)$  e  $P$  con  $P^2$ )

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle R \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [R, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [R, \frac{P^2}{2m}] \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle P \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [P, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [P, V(R)] \rangle \end{aligned}$$

Il commutatore

$$[R, \frac{P^2}{2m}] = \frac{i\hbar}{m} P$$

Infatti, per ogni componente sommando e sottraendo  $P_x X P_x$

$$\begin{aligned} [X, P_x^2] &= X P_x^2 - P_x^2 X = X P_x^2 - P_x^2 X + P_x X P_x - P_x X P_x = X P_x^2 - P_x X P_x + P_x X P_x - P_x^2 X \\ &= [X, P_x] P_x + P_x [X, P_x] = 2i\hbar P_x \end{aligned}$$

Invece

$$[P, V(R)] = -i\hbar \nabla V(R)$$

per cui

$$\frac{d}{dt} \langle R \rangle = \frac{1}{m} \langle P \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle = - \langle \nabla V(R) \rangle$$

che vanno confrontate con le analoghe espressioni classiche. Se  $\langle \nabla V(R) \rangle$  fosse identico a  $\nabla V(\langle R \rangle)$ , la fisica quantistica per i valori medi coinciderebbe con la fisica classica. In realta' questo succede (e' cioe' una buona approssimazione) tutte le volte che la funzione d' onda e' localizzata (limite classico).

## 7 Il principio di indeterminazione di Heisenberg

Consideriamo due operatori hermitiani  $A$  e  $B$ , il cui commutatore e'  $iC$

$$[A, B] = iC$$

Consideriamo il ket

$$|\psi \rangle = (A + i\lambda B)|\phi \rangle$$

con  $\lambda$  reale e  $|\phi \rangle$  un ket arbitrario. La norma di  $|\psi \rangle$  e'

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \phi | (A - i\lambda B)(A + i\lambda B) | \phi \rangle = \langle \phi | A^2 + \lambda^2 B^2 + i\lambda(AB - BA) | \phi \rangle$$

Poiche' la norma deve essere sempre positiva,

$$\langle A^2 \rangle + \lambda^2 \langle B^2 \rangle - \lambda \langle C \rangle \geq 0$$

Questa espressione e' un polinomio di grado 2 in  $\lambda$ , sempre positivo. Dunque non ci devono essere radici sull' asse reale. Il che vuol dire che il determinante deve essere negativo o nullo. Dunque

$$\langle C \rangle^2 - 4 \langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \leq 0 \quad \langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \geq \frac{\langle C \rangle^2}{4}$$

Ora definiamo 2 altri osservabili, come

$$A' = A - \langle A \rangle \quad B' = B - \langle B \rangle$$

Il commutatore  $[A', B']$  e'

$$[A', B'] = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) - (B - \langle B \rangle)(A - \langle A \rangle) = AB - \langle B \rangle A - \langle A \rangle B + \langle A \rangle \langle B \rangle - \{BA - \langle A \rangle B - \langle B \rangle A + \langle A \rangle \langle B \rangle\} = AB - BA = [A, B]$$

quindi anche per questi due osservabili

$$\langle A'^2 \rangle \langle B'^2 \rangle \geq + \frac{\langle C \rangle^2}{4} \quad \langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq \frac{\langle C \rangle^2}{4}$$

Nel caso di  $X$  e  $P_x$ , se ci ricordiamo che  $[X, D_x] = -1$ ,  $[X, P_x] = i\hbar$  e dunque  $\langle \Delta X^2 \rangle \langle \Delta P_x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$  o

$$\Delta X \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

che ci mostra che la precisione nella posizione e nella quantità di moto sono inversamente proporzionali.

## 8 Esercizio

Complemento H<sub>II</sub> N. 11 e 12 pag 206

Si consideri un sistema fisico in uno spazio tridimensionale individuato dalla base ortonormale  $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ . In questa base,  $H$  e  $B$  sono definiti da

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad B = b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

con  $\omega_0$  e  $b$  reali.

- Sono  $H$  e  $B$  hermitiani ?
- Quali sono gli autovalori e gli autovettori
- Commutano ?
- Esiste e quale è una base comune
- Quale di questi set di operatori è un CSCO ?  $\{H\}$ ,  $\{B\}$ ,  $\{H, B\}$ ,  $\{H^2, B\}$

Risposte:

- Sono  $H$  e  $B$  hermitiani ? Sì, la trasposta coniugata è uguale alla matrice originale.
- Quali sono gli autovalori e gli autovettori ? Gli autovettori di  $H$  sono la base stessa, e gli autovalori sono 1 e -1, quest'ultimo degenero. Per quel che riguarda  $B$ ,  $|u_1\rangle$  è un autovettore con autovalore 1. La sottomatrice  $(0,1)(1,0)$  ha autovalori  $\pm 1$  ed autovettori combinazioni lineari  $\pm$  di  $|u_2\rangle$  e  $|u_3\rangle$ .
- Commutano ? Occorre moltiplicare le matrici

- Esiste e quale e' una base comune. La base comune e'

$$|u_1 >, \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2 > + |u_3 >), \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2 > - |u_3 >)$$

- Quale di questi set di operatori e' un CSCO ?  $\{H\}$  no,  $\{B\}$  no,  $\{H, B\}$  si,  $\{H^2, B\}$  no