Meccanica Quantistica

- Lo STATO del sistema $\longleftrightarrow$ distribuzione statistica dei risultati di misura

$\updownarrow$

funzione d'onda $\psi(\bar{x},t)$

Evoluzione temporale governata da eq. di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\bar{x},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{x})\right)\psi(\bar{x},t)$$

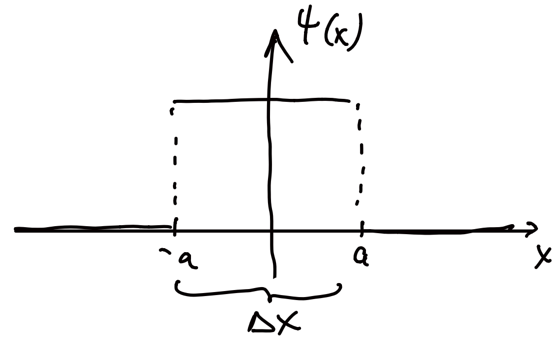
sua conoscenza permette di predire probab. di misurare particella in posizione x al tempo t

$|\psi(\bar{x},t)|^2$

Esempio di Pacchetto d'onda

Prendiamo funzione d'onda

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2a}} & \text{se} \quad -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

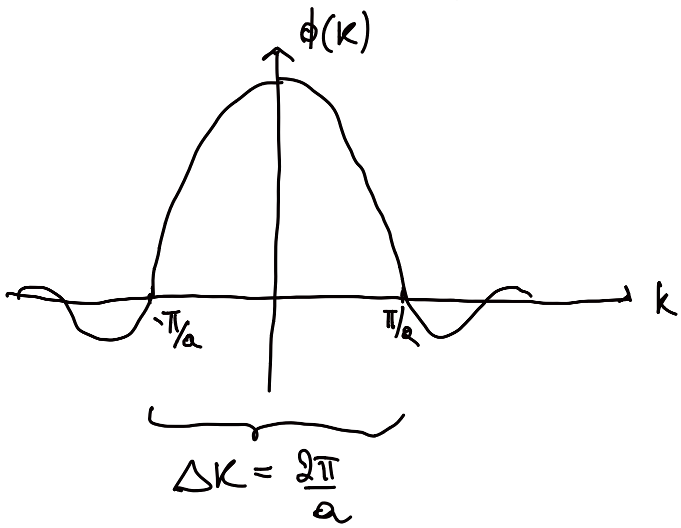


$\psi(x)$ è $\neq 0$ in intervallo $\Delta x = 2a$ (la particella si può trovare solo in $x \in [-a,a]$.

Quali sono le onde piane che contribuiscono a pt. d'onda?

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^{a} \frac{1}{\sqrt{2a}} (\cos kx - i \cancel{\text{sen}}\, kx) dx =$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \frac{1}{k} \text{sen}\, kx \Big|_{-a}^{a} = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\text{sen}\, ka}{ka}$$



$$\Delta x \cdot \Delta K \simeq 4\pi \gtrsim 1$$

- Dualità onda-corpuscolo suggerisce di introdurre una funzione d'onda a valori COMPLESSI $\psi(\bar{x})$ che dia informazioni sulla distribuzione di prob. nello spazio.

(Restringiamoci a 1 grado di lib.)

- Vorremmo identificare $\psi(x)$ con lo STATO del sistema. Quali informazioni si possono ottenere da ψ sullo stato del sist.?

• La probab. che la particella si trovi nell'intervallo Δ è data da
$$P(x\in\Delta) = \int_\Delta dx\, \underbrace{K|\psi(x)|^2}_{\text{densità di probabilità}}$$

La cost. K dev'essere t.c. la prob. tot. è 1, cioè
$$\underbrace{K\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\psi(x)|^2}_{\text{affinché questo integrale converga}} = 1 \Rightarrow K^{-1} = \|\psi\|^2 \equiv \int_{\mathbb{R}} dx\, |\psi(x)|^2$$

$$\underline{\psi \in L^2(\mathbb{R})}$$

La funz. d'onda ψ è detta NORMALIZZATA se $\|\psi\|^2 = 1$.

• $\dfrac{|\psi(x)|^2}{\|\psi\|^2}$ ci dà la dens. di prob. per la variabile x

• Notiamo che $\psi(x)$ e $e^{i\alpha(x)}\psi(x)$ sono due funz. d'onda diverse che danno la stessa dens. di prob. per la distrib. di x

↳ descrivono lo stesso stato o stati diversi?

(cioè data un'altra variabile dinamica, queste due funz. d'onda predicono le stesse distribuzioni statistiche o no?)

• Essendo $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$, possiamo esprimerla per mezzo della trasformata di Fourier:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \, \underbrace{e^{ikx}} \, \hat{\psi}(k)$$

onda piana monocromatica che trasporta impulso $p = \hbar k$

cambiamo variab. d'integr.

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \, e^{ipx/\hbar} \, \underbrace{\hat{\psi}\left(\frac{p}{\hbar}\right)}_{=\tilde{\psi}(p)}$$

chiameremo questa la "trasf. di Fourier"

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \, e^{ipx/\hbar} \, \tilde{\psi}(p)$$

Sovrapposizione di onde a impulso definito con pesi $\tilde{\psi}(p)$

$$1 = \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} |\tilde{\psi}(p)|^2 dp$$

funz. d'onda normalizzata

$\tilde{\psi} \in L^2(\mathbb{R})$

Possiamo interpretare $|\tilde{\psi}(p)|^2$ come densità di probabilità della distribuzione dei momenti

• Poiché la trasf. di Fourier è biunivoca, è equivalente conoscere $\psi(x)$ o $\tilde{\psi}(p)$ (cioè se conosco $\tilde{\psi}(p)$ mi posso ricostruire $\psi(x)$ e viceversa)

Si dice che $\tilde{\psi}(p)$ è la funz. d'onda in rappresentazione p, mentre $\psi(x)$ " " " " x.

- Possiamo ritornare alla nostra domanda :

$\psi(x)$ e $e^{i\alpha(x)}\psi(x)$ descrivono lo stesso stato?

$\rightarrow$ $\psi(x)$ e $e^{i\alpha(x)}\psi(x)$ hanno trasf. di Fourier DIVERSE! e quindi danno diverse distribuzioni del momento p $\Rightarrow$ $\Rightarrow$ sono stati diversi.

- Rimangono due tipi di ambiguità (cioè diverse ψ che danno lo stesso stato):

1) modificando la funzione d'onda in un insieme di misura nulla, gli integrali del tipo $\int_\Delta |\psi(x)|^2 dx$ non cambiano e la trasf. di Fourier viene anche modificata in un insieme di misura nulla.

$\Rightarrow$ funzioni d'onda che differiscono in un insieme di misura nulla, descrivono lo stesso stato (perchè danno le stesse distribuzioni)

2) modificando la funz. d'onda per un fattore <u>costante</u> $\neq 0$, la distr. di prob. non cambia

$$P_\Delta = \frac{1}{\|\psi\|^2}\int_\Delta |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{\|\beta\psi\|^2}\int_\Delta |\beta\psi(x)|^2 dx$$

$\hookrightarrow$ relazione di equivalenza:

$\psi_1 \sim \psi_2$ se $\exists \beta$ t.c. $\psi_2(x) = \beta \cdot \psi_1(x)$

$\rightsquigarrow$ classi di equivalenza

$\hat{\psi} = \{\beta\psi(x) \mid \beta \in \mathbb{C}, \beta \neq 0\} \longleftrightarrow$ STATO del sistema

Per lavorare con gli stati (classi di equiv.) di solito si sceglie un RAPPRESENTANTE della classe.

Tipicamente si lavora col rappresentante a norma unitaria, cioè con la funz. d'onda normalizzata ($\|\psi\|^2 = 1$)

↓

con prob rappresentata $P_\Delta = \int_\Delta |\psi(x)|^2 dx$

- Abbiamo detto che $\psi \in L^2$. Inoltre vogliamo che ψ si comporti come l'AMPIEZZA di un'onda, cioè che valga il PRINCIPIO DI SOVRAPPOSIZIONE (esperim. fenditure di Young)

$\Rightarrow$ combinazioni lin. di funz. d'onda sono ancora funz. d'onda

$\Rightarrow$ ψ deve appartenere a uno SP. VETTORIALE

ma L^2 è uno sp. vett. !

$$\Big[\quad \underbrace{\hat\psi_1 + \hat\psi_2}_{\text{somma di stati}} \longrightarrow \psi_1 + \psi_2$$

rapp. di $\hat\psi_1$ — rappresentante di $\hat\psi_2$

(Anche se ψ_1 e ψ_2 sono funz. d'onda normalizzate, generic. $\psi_1 + \psi_2$ non è normalizzata. In ogni caso nella sua classe di equiv. c'è una f. d'onda normalizzata]

$L^2(\mathbb{R})$ è uno SPAZIO DI HILBERT : sp. vett. (a dim. infinita) con un prodotto scalare hermitiano

$$(\psi, \phi) = \int dx\, \psi^*(x)\, \phi(x) = (\phi, \psi)^*$$

$\psi, \phi \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$

Il prodotto scalare permette di def. una norma

$$\|\psi\|^2 = (\psi, \psi) = \int dx\, |\psi(x)|^2$$

Lo stato di un sist. quantistico è $\underbrace{\text{un vettore}}$ in uno spazio di HILBERT

$\hat\psi = \{ \alpha\psi \mid \alpha \in \mathbb{C} \setminus \{0\} \}$

Sp. degli stati $\longleftrightarrow \mathcal{H}$

(Lo stato del sist. può essere rappresentato equiv. da $\psi \in L^2_{\{x\}}(\mathbb{R})$ o da $\tilde{\psi} \in L^2_{\{p\}}(\mathbb{R})$)

Pacchetto d'onda Gaussiano

(1 grado di lib.; particella libera)

A $t=0$

$$\psi(x,0) = \frac{a^{1/2}}{\hbar^{1/2}(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}(p-p_0)^2} e^{ipx/\hbar}\, dp$$

$$\hookrightarrow \tilde{\psi}(p) = \frac{a^{1/2}}{(2\pi)^{1/4}} e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}(p-p_0)^2}$$

Gaussiana centrata in p_0 ⇒ distr. di prob. dei momenti è Gaussiana

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, e^{-\xi^2} = \pi^{1/2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, e^{-\alpha^2(\xi+\beta)^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi'\, e^{-\alpha^2\xi'^2} = \frac{1}{\alpha}\int d\zeta\, e^{-\zeta^2} = \frac{\pi^{1/2}}{\alpha}$$

$\alpha\xi' = \zeta$

Calcoliamo la funz. d'onda in rappresentazione x:

$$\psi(x,0) = \frac{a^{1/2}}{\hbar^{1/2}(2\pi)^{3/4}} e^{ip_0x/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}(p-p_0)^2} e^{i(p-p_0)x/\hbar}\, dp \underset{p'=p-p_0}{=}$$

$$= \frac{a^{1/2}}{\hbar^{1/2}(2\pi)^{3/4}} e^{ip_0x/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}p'^2 + ip'x/\hbar}\, dp'$$

$$= \frac{a^{1/2}}{\hbar^{1/2}(2\pi)^{3/4}} e^{ip_0x/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}\Big(\underbrace{p'^2 - \frac{4\hbar i p' x}{a^2} - \frac{4\hbar^2x^2}{a^4}}_{\left(p' - \frac{2\hbar i x}{a^2}\right)^2 \;\; p''} + \frac{4\hbar^2x^2}{a^4}\Big)}\, dp'$$

$$\psi(x,0) = \frac{a^{1/2}}{\hbar^{1/2}(2\pi)^{3/4}}\, e^{ip_0x/\hbar} \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\underset{\alpha=\frac{a}{2\hbar}}{\frac{a^2}{4\hbar^2}}p''^2}\, dp''\right)}_{\frac{2\hbar\pi^{1/2}}{a}} \cdot e^{-x^2/a^2}$$

$$= \left(\frac{2\hbar^2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ip_0x/\hbar}\, e^{-x^2/a^2}$$

$e^{ip_0x/\hbar}$ è importante nel determinare lo stato (diversi valori di p_0 danno stati diversi)

$$\|\psi\|^2 = \left(\frac{\cancel{2}\hbar^2}{\cancel{\pi a^2}}\right)^{1/2} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{|e^{ip_0x/\hbar}|^2}_{=1}\, e^{-2x^2/a^2}\, dx}_{=\cancel{a}\sqrt{\frac{\cancel{\pi}}{\cancel{2}}}} = \hbar$$

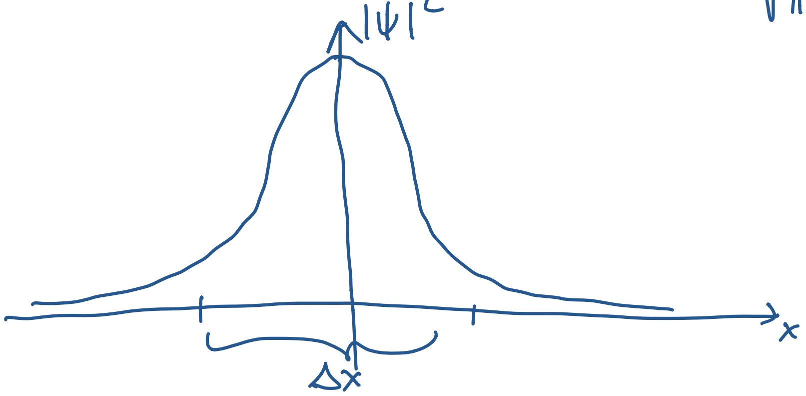
$\Rightarrow$ funz. d'onda normalizzata è $\frac{\psi}{\|\psi\|}$, che chiamiamo ancora ψ (con abuso di notazione)

$$\underset{\text{normal.}}{\psi} = \left(\frac{2\hbar^2}{\pi a^2}\right)^{1/4} \cdot \frac{1}{\hbar^{1/2}}\, e^{ip_0x/\hbar}\, e^{-x^2/a^2}$$

$$= \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ip_0x/\hbar}\, e^{-x^2/a^2}$$

$\Downarrow$

dens. prob. è ora $|\psi(x,0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}}\, e^{-2x^2/a^2}$



VALOR MEDIO di X

$$\langle x \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} x \, P(x)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \, |\psi(x,0)|^2 \,dx =$$

f.d'o. normalizzata

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \underbrace{x\, e^{-2x^2/a^2}}_{\text{funz. dispari}} = 0$$

$$\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle_\psi - \underbrace{\langle x \rangle_\psi^2}_{=0}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \, |\psi(x,0)|^2 \,dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2x^2/a^2} \,dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\beta x^2} = -\frac{d}{d\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} = -\frac{d}{d\beta} \frac{\pi^{1/2}}{\beta^{1/2}} = -\pi^{1/2} \frac{d}{d\beta} \frac{1}{\sqrt{\beta}} =$$

$$= \frac{\pi^{1/2}}{2} \frac{1}{\beta^{3/2}}$$

$\beta = 2/a^2$

$$= \sqrt{\frac{\cancel{2}}{\cancel{\pi a^2}}} \, \frac{\cancel{\pi^{1/2}}}{2} \, \frac{a^{\cancel{3}\,2}}{2^{\cancel{3/2}}} = \frac{a^2}{4} \Rightarrow \Delta x = \frac{a}{2}$$

Possiamo fare gli stessi tipi di conti per la distrib. dei momenti:

$$\langle p \rangle_\psi = \int p \, e^{-(p-p_0)^2/\ldots} = p_0 \underbrace{\int e^{-(p-p_0)^2/\ldots}}_{=1} + \cancel{\int (p-p_0) e^{-(p-p_0)^2/\ldots}}$$

$$= p_0$$

$$\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle_\psi - \langle p \rangle_\psi^2 = \left(\frac{\hbar^2}{a^2} + p_0^2 \right) - (p_0)^2 = \frac{\hbar^2}{a^2}$$

$\Rightarrow \Delta p = \hbar/a$

$$\Rightarrow \quad \Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

In effetti, questo è il minimo valore che $\Delta x \cdot \Delta p$ può assumere $(\forall \psi)$

Principio di indeterminazione di Heisenberg

$$\Delta x_\psi \, \Delta p_\psi \geq \hbar/2 \quad \forall \psi \in \mathcal{H}$$

Se prepariamo lo stato con un Δx molto piccolo (per avere una particella localizzata in una regione piccola), allora Δp sarà grande (scarsa precisione nella predizione del risultato di una misura di p)

Evoluzione temporale :

$$\psi(x,t) = \frac{a^{1/2}}{(2\pi)^{3/4}\hbar^{1/2}} \int e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}(p-p_0)^2} \, e^{i(px - E_p t)/\hbar} \, dp$$

$E_p = \frac{p^2}{2m}$; t: dip. dal tempo ; frequenza dell'onda

Al tempo t il pacchetto d'onde rimane Gaussiano.

Svolgendo i conti :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\hbar^{1/2}} \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{i\varphi}}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/4}} \, e^{ip_0 x/\hbar} \, e^{-\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right)^2 / \left(a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}\right)}$$

- $\|\psi\|^2$ è costante nel tempo, cioè $\int |\psi(x,t)|^2 dx = \int |\psi(x,0)|^2 dx$.

  (prob. si conserva)

- La densità di prob. $|\psi(x,t)|^2$ è ancora Gaussiana, ma ora l'ampiezza dip. da t:

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}$$ aumenta al passare del tempo

- $\langle x \rangle_{\psi_t}$ cambia $\langle x \rangle_t = \frac{p_0 t}{m}$ ← particella libera classica: $x(t) = \frac{p_0 t}{m}$

$\langle x \rangle_t \leftrightarrow x_{cl}(t)$

- $|\tilde{\psi}(p)|^2$ rimane cost. nel tempo $\Rightarrow \langle p \rangle, \Delta p$ rimangono cost.

- $\langle x \rangle_t$ soddisfa le equazioni del moto classiche
$\langle p \rangle_t$ (cost.) anche soddisfa eq. moto classiche

(Questo è vero per ogni variabile dinamica).

- $\Delta x(t)$ aumenta nel tempo: l'incertezza su dove troveremmo particella compiendo misura di x aumenta
("pacchetto d'onda si sparpaglia")