Osservabili (variabili dinamiche)

In meccanica classica, se conosco lo stato del sistema $(\bar{p}, \bar{q})$, allora posso predire con certezza il risultato di una misura di un'osservabile $f(\bar{p}, \bar{q})$.

In meccanica quantistica, noto lo stato del sistema, posso predire solo la probabilità di misurare un certo valore per l'osservabile.

Data una VARIABILE DINAMICA (OSSERVABILE) essa deve essere descritta (in MQ) da un oggetto matematico che includa sia i possibili risultati di una misura di tale osservabile (autovalori), sia gli stati corrispondenti ai singoli risultati (autostati) (cioè gli stati in cui ho prob. 1 di rimisurare il risultato corrispondente)

Stati $\longleftrightarrow$ vettori in $\mathcal{H}$

Osservabili $\longleftrightarrow$ OPERATORI in $\mathcal{H}$
(autoaggiunti)

Operatori X e P in $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$

$$\langle x \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} x\, |\psi(x)|^2\, dx = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) \cdot \Big(\underbrace{x\, \psi(x)}_{(\hat{X}\psi)(x)} \Big)\, dx$$

$$= (\psi, \hat{X}\psi) \qquad \hat{X} : \psi(x) \mapsto x\psi(x)$$

$$\langle P \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} p\, |\tilde{\psi}(p)|^2\, dp \qquad \tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx\, e^{-ipx/\hbar}\, \psi(x)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dp\; p \int_{\mathbb{R}} \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ipx'/\hbar}\, \psi(x')^* \int_{\mathbb{R}} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{-ipx/\hbar}\, \psi(x) =$$

$$p e^{-ipx/\hbar}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dp \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} dx'\; \psi(x')^* e^{ipx'/\hbar}\, \psi(x)\, i\hbar \frac{d}{dx} e^{-ipx/\hbar}$$

integrazione per parti

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} dx' \int_{\mathbb{R}} dp\; \psi(x')^* e^{ipx'/\hbar} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x) \right) e^{-ipx/\hbar}$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} dx'\; \psi(x')^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x) \right) \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \frac{dp}{2\pi\hbar}\, e^{ip(x'-x)/\hbar}}_{\delta(x-x')}$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dx\; \psi(x)^* \Big(\underbrace{-i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x)}_{\hat{P}\psi(x)} \Big)$$

$$\Downarrow$$

$$\langle p \rangle_\psi = (\psi, \hat{p}\psi) \qquad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

Data un'osservabile A (op. autoagg. in $L^2(\mathbb{R})$), il suo valor medio è

$$\langle A \rangle_\psi = (\psi, \hat{A}\psi)$$

$\hat{x}$ e $\hat{p}$ sono operatori autoaggiunti

Osservabile classica è una funz. di $\bar{p}$ e $\bar{q}$ ($\bar{p} \leftrightarrow p$, $\bar{q} \leftrightarrow x$)

$\leadsto f(x,p)$

Domanda: in meccanica quant. $f \to f(\hat{x},\hat{p})$?

Sì, ma con attenzione.

↳ Es.
se l'osserv. è $f(x,p) = xp$, l'operatore associato è $\hat{x}\hat{p}$ o $\hat{p}\hat{x}$?

(ambiguità nell'associare un operatore a una variabile dinamica classica)

Il problema è che $\hat{x}$ e $\hat{p}$ NON commutano:

$$[\hat{x},\hat{p}]\cdot\psi = \hat{x}\hat{p}\psi - \hat{p}\hat{x}\psi =$$

$$= \hat{x}\left(-i\hbar\frac{d\psi}{dx}\right) - \hat{p}\left(x\psi(x)\right)$$

$$= -i\hbar\, x\psi'(x) + i\hbar\frac{d}{dx}\left(x\psi(x)\right) =$$

$$= -i\hbar\, x\psi' + i\hbar\psi + i\hbar\, x\psi' = i\hbar\cdot\psi$$

$$\Rightarrow \quad [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\,\mathbb{1} \qquad (1 \text{ dim})$$

In 3d $\psi(\bar{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ $\tilde{\psi}(\bar{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \, e^{-i\bar{p}\cdot\bar{x}/\hbar} \psi(\bar{x})$

Abbiamo tre op. per le tre coord. $\bar{x}(x, y, z) \leftrightarrow \hat{X} = (\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3)$

$$\hat{\vec{X}} \psi(x) = \bar{x}\, \psi(\bar{x}) \qquad [\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\, \delta_{ij} \mathbb{1} \quad (*)$$

$$\hat{\vec{P}} \psi(x) = -i\hbar \bar{\nabla} \psi \qquad [\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 0 = [\hat{P}_i, \hat{P}_j]$$

$(*)$: Analogia con le Parentesi di Poisson $(x_i \leftrightarrow q_i)$

$$\{x_i, p_j\} = \delta_{ij} \qquad \{x_i, x_j\} = 0 = \{p_i, p_j\}$$

Passare da mecc. classica a MQ : $\bar{x}, \bar{p}$ sostituiti da operatori, P.P. sostituite da $\frac{1}{i\hbar}[\,,\,]$.

In meccanica classica

$$\delta x = \epsilon \{x, \underset{\text{generatore di trasf.}}{G}\}$$

Se ora uso $G = P$, ottengo

$$\delta x = \epsilon \{x, p\} = \epsilon \Rightarrow x' = x + \epsilon$$

$\Rightarrow p$ è il generatore delle TRASLAZIONI

$\hat{P}$ in meccanica quantistica è ancora il generatore di traslazioni infinitesime :

$\psi(x+\epsilon)$ è la trasformata di ψ sotto traslazioni

$$\psi(x+\epsilon) \simeq \psi(x) + \underbrace{\epsilon\psi'(x)}_{\delta\psi \,=\, \frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{P}\psi}$$

Facendo la stessa cosa con $\hat{M}_i$ (momento angolare)

otteniamo che la variaz. di ψ sotto rotaz. attorno asse x_i è $\delta\psi = \frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{M}_i\psi$

Esempio di osservabili senza ambiguità:

1) Momento angolare

$$M_i = \sum_{kj} \epsilon_{ijk} \underbrace{x_j P_k}_{\text{in questi prodotti}} \longleftrightarrow \hat{M}_i = \sum_{kj} \epsilon_{ijk} \underbrace{\hat{X}_j \hat{P}_k}_{\text{commutano}}$$

$$j \neq k \Rightarrow [\hat{X}_i, \hat{P}_k] = 0$$

2) Sistemi meccanici con V dip. da $\bar{x}$, es. particella

$$H = \frac{\bar{P}^2}{2m} + V(\bar{x}) \longleftrightarrow \hat{H} = \frac{\hat{\bar{P}}^2}{2m} + V(\hat{\bar{X}})$$

$$\hat{\bar{P}}^2 = \hat{P}_1^2 + \hat{P}_2^2 + \hat{P}_3^2$$

$\downarrow$

Eq. di Schrödinger diventa

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\bar{x}, t) = \hat{H} \psi(\bar{x}, t)$$

ci dice che $\hat{H}$ è il generatore di traslazioni temporali

$$\hat{\bar{P}} = -i\hbar \bar{\nabla} \Rightarrow \hat{\bar{P}}^2 = -\hbar^2 \nabla^2$$

$$\hat{H} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\bar{x}) \right) \psi$$

$\hat{H}$, $\hat{\bar{P}}$, $\hat{\bar{M}}$ generano le stesse trasf. che generavano in meccanica classica

EQUAZIONE di SCHRÖDINGER

Consideriamo una particella di massa m che si muove in $\mathbb{R}^3$.
Il suo stato è descritto da una funzione d'onda $\underset{\text{NORMALIZZATA}}{}$ $\psi(\bar{x},t)$ che soddisfa l'eq. di Schrödinger (in presenza di un campo di forze)

NORMALIZZATA

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

Calcoliamo la variazione nel tempo della probabilità di trovare la particella in una regione Σ

$$P_\Sigma(t) = \int_\Sigma d^3x\, |\psi(\bar{x},t)|^2$$

$$\frac{d}{dt}P_\Sigma(t) = \frac{d}{dt}\int_\Sigma d^3x\, \psi^*(\bar{x},t)\,\psi(\bar{x},t) = \int_\Sigma d^3x\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\cdot\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) =$$

usiamo eq. di Schrödinger $\rightarrow$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi$$

V è a valori REALI

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi^*$$

$$= \int_\Sigma d^3x\left[-\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + \cancel{V\psi^*}\right)\psi + \frac{1}{i\hbar}\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \cancel{V\psi}\right)\right]$$

$$\underbrace{\nabla\cdot[\psi^*\nabla\psi]} - \cancel{\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi}$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_\Sigma d^3x\left\{\underbrace{\nabla^2\psi^*\cdot\psi}_{\nabla\cdot[(\nabla\psi^*)\cdot\psi] - \cancel{\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi}} - \psi^*\nabla^2\psi\right\}$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_\Sigma d^3x\, \nabla\cdot\left[(\nabla\psi^*)\psi - \psi^*\nabla\psi\right]$$

$$\hat{\bar{P}} = \frac{\hbar}{i}\bar{\nabla}$$

Definisco: $\bar{J}(\bar{x},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right] = \frac{1}{2m}\left[\psi^*(\hat{\bar{P}}\psi) + \psi(\hat{\bar{P}}\psi)^*\right]$

$$\frac{d}{dt} P_\Sigma(t) \stackrel{!}{=} - \int_\Sigma d^3x \; \overline{\nabla} \cdot \overline{J}(\overline{x},t) = - \int_{\partial\Sigma} d\Sigma \; \overline{n} \cdot \overline{J}$$

↘ EQ. di CONTINUITA'

flusso del vettore $\overline{J}$ attraverso la superficie $\partial\Sigma$

$\overline{J}$ viene interpretato come CORRENTE di PROBABILITA' (*)

L'eq. di continuità dice che la probabilità che esce attraverso la superficie $\partial\Sigma$ è uguale alla diminuzione della probab. di trovare la particella in Σ. ("Probab. si conserva")

(*) Interpretiamo $\overline{J}$

$$\int d^3x \; \overline{J}(\overline{x},t) = \frac{1}{2m} \int \left(\psi^* (\hat{\overline{P}} \psi) + \psi (\hat{\overline{P}} \psi)^* \right) =$$

$$\stackrel{!}{=} \frac{1}{2m} \left[(\psi, \hat{\overline{P}} \psi) + (\hat{\overline{P}} \psi, \psi) \right] =$$

$\hat{\overline{P}}$ è autoaggiunto

$$\stackrel{!}{=} \frac{1}{m} (\psi, \hat{\overline{P}} \psi) = \left\langle \frac{\overline{P}}{m} \right\rangle = \langle \overline{v} \rangle$$

valor medio della velocità della particella.