Osservabili (variabili dinamiche)

In meccanica classica, se conosco lo stato del sistema $(\bar{p}, \bar{q})$ 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, si può 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 include 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 AUTOAGGIUNTI hanno autovalori REALI (come dovrebbe per un risultato di una misura fisica) e una BASE di AUTOVETTORI.

$\Rightarrow$ Data un'osservabile A, ogni vettore $\psi \in \mathcal{H}$ può essere espanso in una base di autovettori di $\hat{A}$:

- Siano a_n gli autovalori di $\hat{A}$

- Dato un autovalore a_n, ad esso corrisponde un AUTOSPAZIO V_n di autovetti.(*) di $\hat{A}$ relativi ad autoval. a_n di dimensione $d_n \equiv \dim V_n$. d_n è detta DEGENERAZIONE dell'autovalore a_n. (*) $\hat{A}\psi = a_n \psi \quad \forall \psi \in V_n$

- Siano $\psi_n^i \quad i=1,\dots,d_n$ una base dell'autospazio V_n.

$$\Rightarrow \quad \psi = \sum_n \sum_{i=1}^{d_n} \beta_n^i \psi_n^i \, .$$

Prendiamo il caso semplice (e più intuitivo) in cui $d_n = 1 \quad \forall n$. Allora

$$\psi = \sum_n \beta_n \psi_n \qquad \text{con} \qquad \hat{A}\psi_n = a_n \psi_n \, . \qquad (\bigstar)$$

Da quanto detto precedentemente:

- se compiamo una misura di A col sistema nello stato ψ_n, il risultato della misura sarà CON PROBABILITÀ 1 dato da a_n;

- se il sistema è nello stato ψ, una misura di A può dare come risultato

  a_n con probab. $= |\beta_n|^2$ $\left(\begin{array}{c} \text{se } \psi \text{ è norm.} \\ \text{cioè } \|\psi\|^2 = 1 \end{array} \right)$

- da quanto appena detto, uno si può calcolare il VALOR MEDIO $\langle A \rangle_\psi$ di misure ripetute di A col sistema nello stato $\psi \in \mathcal{H}$:

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_n a_n |\beta_n|^2$$

Se β_m sono i coeff. in $(\star)$ rispetto a una base $\{\psi_m\}$ ORTONORMALE (cioè $(\psi_n, \psi_m) = \delta_{nm}$), allora

$$(\psi_n, \psi) = \sum_m \beta_m (\psi_n, \psi_m) = \beta_n$$

$$\Rightarrow \langle A \rangle_\psi = \sum_n a_n |(\psi_n, \psi)|^2 = \sum_n a_n (\psi, \psi_n)(\psi_n, \psi) =$$

$$= \sum_n \beta_n a_n (\psi, \psi_n) = (\psi, \sum_n \beta_n a_n \psi_n) = (\psi, \sum_n \beta_n \hat{A} \psi_n) =$$

$$= (\psi, \hat{A} \sum_n \beta_n \psi_n) = (\psi, \hat{A}\psi)$$

Se ψ non è norm. $\Rightarrow \langle A \rangle_\psi = \dfrac{(\psi, \hat{A}\psi)}{\|\psi\|^2}$

Se l'osservabile A è a spettro continuo, allora non esiste una base di autovett. in $\mathcal{H}$, ma possiamo prendere uno spazio $\mathcal{F}$ che contiene $\mathcal{H}$ ($\mathcal{H} \subset \mathcal{F}$) t.c. l'eq. $Av = av$ sia risolubile in $\mathcal{F}$.

Se A è a.a., possiamo trovare una base generalizzata di autovett. in $\mathcal{F}$. Cioè dato $\psi \in \mathcal{H}$

$$\psi = \int_{\mathrm{Spec}A} da\, \beta(a) \psi(a) \qquad \text{con} \quad A\psi(a) = a\psi(a)$$

Quando $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$, $\mathcal{F}$ è lo spazio delle DISTRIBUZIONI TEMPERATE.

OPERATORI A SPETTRO CONTINUO IN $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$: $\hat{X}$ e $\hat{P}$.

Consideriamo $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ e chiamiamo $\hat{X}$ l'operatore che deve rappresentare la variabile dinamica "posizione della particella" x. Esso deve essere tale che

$$\langle X \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} x \, |\psi(x)|^2 dx \qquad (\psi \text{ normalizzata})$$

Qto può essere espresso come

$$= \int_{\mathbb{R}} x \, \psi^*(x) \psi(x) \, dx = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) \big(x \psi(x) \big) \, dx$$

che è $= (\psi, \hat{X}\psi)$ se $\hat{X}$ è def. da:

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

Una base di autofunzioni generalizzate è data dalle delte di Dirac $\delta(x - x_0)$; infatti

$$\hat{X} \, \delta(x - x_0) = x \, \delta(x - x_0) = x_0 \, \delta(x - x_0)$$

Ogni funzione $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ può essere espansa in qta base

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} dx_0 \, \psi(x_0) \, \delta(x - x_0)$$

Cosa possiamo dire sull'operatore $\hat{P}$ che rappresenta la quantità di moto della particella?

- De Broglie ci dice che l'onda associata a una particella con quantità di moto definita è un'onda monocromatica $e^{ipx/\hbar}e^{-i\omega t}$.
  Quest'affermazione significa che $e^{ipx/\hbar}$ è un'autofunzione dell'operatore $\hat{P}$ con autovalore p:

$$\hat{P}\, e^{ipx/\hbar} = p\, e^{ipx/\hbar}$$

Da qui si evince che $\hat{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ come operatore che agisce su $\mathcal{H}$ (e $\mathcal{F}$).

Ogni funzione $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ può essere espressa in questa base gen.:

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

↑ Trasf. di Fourier di $\psi(x)$

Calcoliamo il valor medio di $\hat{P}$ nello stato ψ:

$$\langle P \rangle_\psi = (\psi, \hat{P}\psi) = \int dx\, \psi^*(x)\, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\psi(x) =$$

$$= \int dx \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \tilde{\psi}(p')^* e^{-ip'x/\hbar}\, \frac{\hbar}{i}\, \tilde{\psi}(p) \frac{d}{dx} e^{ipx/\hbar} =$$

$$= \int dx \int dp' \int dp\, \frac{1}{2\pi\hbar}\, \tilde{\psi}(p')^* \tilde{\psi}(p)\, p\, e^{-i(p'-p)x/\hbar} =$$

$$= \int dp \int dp'\, p\, \tilde{\psi}(p')^* \tilde{\psi}(p) \underbrace{\int \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{i(p-p')x/\hbar}}_{\delta(p-p')} = \int dp\; p\, |\tilde{\psi}(p)|^2$$

$\Rightarrow |\tilde{\psi}(p)|^2$ è la DENSITÀ DI PROBABILITÀ della variabile p.

⇝ In particolare osserviamo che le funzioni $\psi(x)$ e $\psi'(x) \equiv e^{i\alpha(x)}\psi(x)$ <u>non</u> rappresentano lo stesso stato: benché diano la stessa distribuz. per x $(|\psi(x)|^2 = |\psi'(x)|^2)$, non danno la stessa distribuz. per P in quanto hanno TRASFORMATA DI FOURIER DIVERSA.

Osservabili con analogo classico

Un'osservabile classica è una funzione di p e q; se q è la posizione x e p la quant. di moto, un'osservabile è $f(x,p)$.

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

Risposta: sì, ma con attenzione perché ora $\hat{X}$ e $\hat{P}$ sono degli operatori che non necessariamente commutano: come vedremo fra breve infatti $\hat{X}\hat{P} \neq \hat{P}\hat{X}$.

→ Es. se $f(x,p) = xp$, quale operatore prendiamo associato a qto osservabile, $\hat{x}\hat{p}$? $\hat{p}\hat{x}$? $\alpha\hat{X}\hat{P} + (1-\alpha)\hat{P}\hat{X}$?

Il problema è che $\hat{X}$ e $\hat{P}$ <u>non</u> commutano; applichiamo il loro commutatore a un generico stato ψ:

$$[\hat{X},\hat{P}]\cdot\psi = \hat{X}\hat{P}\psi - \hat{P}\hat{X}\psi = \hat{X}\left(-i\hbar\frac{d\psi}{dx}\right) - \hat{P}\left(x\psi(x)\right) =$$

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

$$= -i\hbar\, x\psi' + i\hbar\psi + i\hbar\, x\psi' = i\hbar\psi \qquad \forall\psi$$

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

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

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

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

$$\hat{P}_i \psi(x) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \qquad [\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 0 = [\hat{P}_i, \hat{P}_j]$$

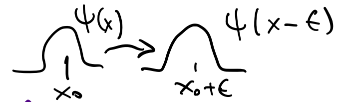
Notiamo un'analogia formale con le parentesi di Poisson in mecc. class.: $\{x_i, p_j\} = \delta_{ij} \qquad \{x_i, x_j\} = 0 = \{p_i, p_j\}$

Infatti un modo per "quantizzare" un sistema classico è promuovere le q_h e le p_h a operatori $\hat{Q}_h, \hat{P}_h$ che soddisfino le regole di commutazione canoniche $(*)$, cioè si fa la sostituzione $\{\ ,\ \} \to \frac{1}{i\hbar}[\ ,\ ]$!

Generatori di simmetrie.

In meccanica classica p è il gen. di traslazioni spaziali.

In meccanica quantistica $\hat{P}$ è ancora il generatore di TRASLAZIONI infinitesime. Sotto traslazioni finite, lo stato $\psi(x)$ viene mandato in $\psi(x-\epsilon)$. Se $\epsilon \ll 1$:



$$\psi_{\text{traslato}}(x) = \psi(x-\epsilon) \simeq \psi(x) - \epsilon\psi'(x) \implies \delta\psi = \frac{\epsilon}{i\hbar}\hat{P}\psi$$

Facendo la stessa cosa con $\hat{M}_i$ (momento angolare), otteniamo che la variazione di ψ sotto rotazioni infinitesime attorno asse $\hat{x}_i$, è data da $\quad \delta\psi = \frac{\epsilon}{i\hbar}\hat{M}_i\psi$

Esempio di osservabili senza ambiguità:

1) Momento angolare

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

in questi prodotti

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

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

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

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

Equazione che governa la dinamica in MQ.

- Ritorniamo per un momento alla meccanica classica:
  - Lo stato di un sistema è dato da $(\bar{p}, \bar{q})$.
  - L'evoluzione temporale di uno stato è data dalle funzioni $(\bar{p}(t), \bar{q}(t))$ [Cioè mappa $\mathbb{R}_t \to \{\text{STATI}\}$]
  - La dinamica deve dire, dato stato a t_0, qual è lo stato a $t > t_0$. Per far questo ci serve conoscere il GENERATORE DI TRASLAZIONI TEMPORALI, cioè l' HAMILTONIANA.

    Allora $\quad \delta\bar{x} = \{\bar{x}, H\}\,\delta t \to \dot{\bar{x}} = \{\bar{x}, H\}$

    cioè EQUAZIONI DI HAMILTON.

- Ora passiamo alla MECCANICA QUANTISTICA:
  - Lo stato di un sistema è dato da $\psi(\bar{x})$.
  - L'evoluzione temporale di uno stato è data dalla funzione $\psi(\bar{x}, t)$ [Cioè mappa $\mathbb{R}_t \to \{\text{STATI}\}$]
  - La dinamica deve dire, dato stato a t_0, qual è lo stato a $t > t_0$. Per far questo ci serve conoscere il GENERATORE DI TRASLAZIONI TEMPORALI. Se assumiamo che tale generatore sia ancora

l' HAMILTONIANA, abbiamo (nel nuovo formalismo della MQ)

$$\delta\psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi\,\delta t \longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\bar{x},t) = \hat{H}\psi(\bar{x},t)$$

cioè l' EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER!

Per una particella soggetta a un potenziale $V(x)$

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

quello applicato sulla funz. d'onda

→ forma trovata precedentemente per l'eq. di Schrödinger.