Riassunto: le indicazioni dagli esperimenti fondamentali

SQ

Fisica Classica

- Punto materiale.
- Principi della dinamica. $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$
- Campi elettrici e magnetici. Equazioni di Maxwell
- Onde elettromagnetiche.
- c = costante (relatività ristretta)

Esperimento chiave: la doppia fenditura (Young)

Per il singolo punto materiale:
determinismo, reversibilità temporale

Misura:
ripetibile, incertezza sperimentale dovuta agli strumenti.
Misure di grandezze fisiche differenti sono (o possono essere rese) *indipendenti*.

Energia possibile per un punto materiale:
spettro continuo.

SQ

Esperimenti ?

previsioni classiche

Diffusione di elettroni *

Effetto fotoelettrico
Effetto Compton

Interferenza di singoli elettroni e fotoni *

Spettri atomici

- Punto materiale.
- Principi della dinamica. **F** = m**a**
- Campi elettrici e magnetici. Equazioni di Maxwell
- Onde elettromagnetiche.
- c = costante (relatività ristretta)

Per il singolo punto materiale:
determinismo, reversibilità temporale

Misura:
ripetibile, incertezza sperimentale dovuta agli strumenti.
Misure di grandezze fisiche differenti sono (o possono essere rese) *indipendenti*.

Energia possibile per un punto materiale:
spettro continuo.

SQ

* Esperimento chiave: la doppia fenditura

Crisi dei concetti classici.

De Broglie: λ è una proprietà generale

Planck, Einstein: quanti di radiazione

Heisenberg: alcune grandezze non possono essere determinate con precisione simultaneamente

Bohr: stati *stazionari* con energia *quantizzata*

- Punto materiale.
- Principi della dinamica. **F** = m**a**
- Campi elettrici e magnetici. Equazioni di Maxwell
- Onde elettromagnetiche.
- c = costante (relatività ristretta)

Per il singolo punto materiale:
determinismo, reversibilità temporale

Misura:
ripetibile, incertezza sperimentale dovuta agli strumenti.
Misure di grandezze fisiche differenti sono (o possono essere rese) *indipendenti*.

Energia possibile per un punto materiale:
spettro continuo.

SQ

Fondamenti formali

- Definizione e postulato della funzione d'onda (*fdo*).
- Giustificazione della equazione di Schrödinger per la fdo.
- Equazione di Schrödinger dipendente e indipendente dal tempo
- Interpretazione probabilistica: limitazioni nella scelta della fdo.
- Interpretazione probabilistica: il problema della misura.
- Valori di aspettazione.
- Operatori e osservabili.
- Stati stazionari.

(• Un sistema (ir)realistico: la buca di potenziale infinita)

Il problema fisico

In generale, per conoscere un qualunque sistema è necessario:

1– identificare le grandezze che lo descrivono

2– determinare le leggi che regolano le relazioni fra le suddette grandezze (ivi compresa l'evoluzione temporale)

L'impostazione "classica":

1– posizione, momento (quantità di moto), momento angolare (momento della quantità di moto), energia cinetica e potenziale

2– $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, etc.

In generale, per conoscere un qualunque sistema è necessario:

1– identificare le grandezze che lo descrivono

2– determinare le leggi che regolano le relazioni fra le suddette grandezze (ivi compresa l'evoluzione temporale)

L'approccio della Meccanica Quantistica

Secondo le indicazioni degli esperimenti e le interpretazioni date, si *postula*:

Postulato 1
Esiste una funzione $\Psi(x,t)$, detta *funzione d'onda*, che contiene tutta l'informazione sul sistema in esame.

Il primo passo è quindi

Determinare le equazioni cui la funzione d'onda deve sottostare

La funzione d'onda e l'equazione di Schrödinger

Funzione d'onda

Cerchiamo una grandezza che possa essere usata per descrivere un sistema fisico.
Supponiamo che tutte le informazioni,
invece che nelle grandezze classiche {posizione, velocità},
siano contenute in una funzione $\Psi(x,t)$ (*funzione d'onda*).
Essa deve render conto dei dati sperimentali, e quindi deve poter:

- rappresentare enti dotati di lunghezza d'onda e frequenza;
- soddisfare una equazione d'onda;
- rappresentare una (densità di) probabilità;
- rappresentare "particelle".

Fatto questo assunto, si cerca(no) l'equazione (le equazioni) che descrive (descrivono) l'evoluzione spaziale e temporale della $\Psi(x,t)$.

Le equazioni furono determinate da Schrödinger, 1925.

Considerazioni sull'equazione delle onde

Fisica classica:

l'onda armonica progressiva $\Psi_+(x,t) = \bar{A}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$

soddisfa l'equazione delle onde

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

Notazione:
Ψ indica la funzione *dipendente da x e t*, mentre ψ indica la sola dipendenza da x (quando è possibile separarle)

però soddisfa anche l'equazione del primo ordine:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\frac{1}{v}\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Perché questa equazione non è accettabile?

Perché non è soddisfatta dall'onda regressiva $\Psi_-(x,t) = \bar{A}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx+\omega t)}$

L'equazione *non è simmetrica per propagazione in versi opposti*, ovvero non è identica per k e $-k$.
Perché lo sia, deve contenere la derivata seconda rispetto a x.

Inoltre, la grandezza fisica è la *parte reale*, Re[Ψ]:
perché l'equazione non "mescoli" anche la parte immaginaria, è necessaria la derivata seconda rispetto a t.

Una giustificazione dell'eq. di Schrödinger

L'equazione si deve applicare a fenomeni simili ai fenomeni ondulatori; consideriamo come funzione d'onda di prova:

$$\Psi(x,t) = \bar{A}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$$

Nota: si tratta di un *caso particolare*: **non è una dimostrazione.**

Similmente all'equazione delle onde, richiedendo che l'equazione sia simmetrica per *k* e – *k*, è ragionevole scrivere un termine con la derivata seconda rispetto a *x*.

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -k^2\bar{A}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} = -k^2\Psi(x,t) = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi(x,t)$$

De Broglie, non relativistico
$p = \hbar k$
$E = \hbar\omega$

La derivata prima rispetto al tempo fornisce

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\mathrm{i}\omega\bar{A}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} = -\mathrm{i}\omega\Psi(x,t) = -\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}\Psi(x,t)$$

si procede
ammettendo che la grandezza di interesse possa essere complessa
(ovvero ammettendo che non sia solo la parte reale Re[Ψ] che determina la fisica)
e quindi sfruttando le due equazioni precedenti

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi(x,t) \qquad \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}\Psi(x,t)$$

Per procedere: analogia con la fisica classica

Energia di una particella = en. cinetica + en. potenziale $\quad E = K + V$

Attenzione ai simboli: in questo contesto *V* è l'*energia potenziale*, non il *potenziale*.

con $\quad p = mv \longrightarrow K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

$$\longrightarrow \qquad p^2 = 2m(E-V)$$

Sostituendo, la prima equazione fornisce $\quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\Psi(x,t)$

da cui, usando la seconda: $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$

Ricordiamo che questa equazione è ottenuta per la fdo di prova: $\Psi(x,t) = \bar{A}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$
*non è **ricavata** per una fdo qualunque*.

Equazione di Schrödinger

Si ***assume*** che ogni funzione d'onda debba soddisfare l'equazione:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

dove in generale $V = V(x,t)$ è l'energia potenziale specifica del problema in questione.

La maggior parte dei problemi di Meccanica Quantistica che verranno trattati consistono nella soluzione dell'equazione di Schrödinger per un determinato sistema, rappresentato e descritto dal particolare $V(x,t)$.

L'equazione di Schrödinger *dipendente dal tempo* è l'equazione da risolvere per studiare i problemi di moto e di evoluzione temporale.

Equazione di Schrödinger - commenti

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

L'equazione di S. è lineare:
se Ψ_1 e Ψ_2 sono soluzioni, anche $a\Psi_1 + b\Psi_2$ lo è
(N.B.: a, b sono numeri complessi).

Questo è necessario, poiché il comportamento ondulatorio rivelato sperimentalmente richiede che valga il principio di sovrapposizione:

Ogni sovrapposizione lineare di una funzione d'onda è a sua volta una funzione d'onda ammissibile.

Equazione di Schrödinger indipendente da *t*

Supponiamo quindi che la fdo soddisfi l'equazione di Schrödinger.

Equazione di Schrödinger *dipendente dal tempo*: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$

Supponiamo che *V non dipenda dal tempo*: *V=V(x)*

Ipotesi di *separazione delle variabili*: $\Psi(x,t)=f(t)\psi(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}f\frac{d^2\psi}{dx^2}+V\psi f=\mathrm{i}\hbar\psi\frac{df}{dt}$$

dividendo per $f\psi$:

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V}_{\text{funzione solo di } x}=\underbrace{\mathrm{i}\hbar\frac{1}{f}\frac{df}{dt}}_{\text{funzione solo di } t}$$

Funzioni di variabili differenti uguali fra loro $\Rightarrow$ Devono essere uguali a una costante. Chiamiamola *E*.

Ottengo due equazioni differenziali ordinarie

$$\mathrm{i}\hbar\frac{1}{f}\frac{df}{dt}=E$$

$$\frac{df}{dt}=-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}f$$

$$f(t)=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}t}$$

L'evoluzione temporale
non dipende da *V*,
se *V* non dipende da *t*.
—> non dipende dal problema particolare

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V=E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V\psi=E\psi$$

Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo.
$\psi(x)$ dipende da *V(x)*.

L'equazione di Schrödinger *indipendente dal tempo* è una equazione agli autovalori.

Risolvere l'equazione di Schrödinger equivale a risolvere un problema agli autovalori, ovvero trovare i valori permessi di *E* e le corrispondenti $\psi(x)$.
Questa parte del problema dipende da *V*.
La fdo complessiva (che include la dinamica) è data poi da:

$$\Psi(x,t)=\psi(x)f(t)=\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}t}$$

Interpretazione statistica

Born diede per primo una chiara *interpretazione statistica* della funzione d'onda, suggerendo che

$$|\Psi(x,t)|^2 dx$$

rappresenti la probabilità di trovare al tempo t fra il punto x e il punto $x+dx$ la particella rappresentata da $\Psi(x,t)$.

Pertanto $|\Psi(x,t)|^2$ è una *densità di probabilità*.

Nota: $\Psi(x,t)$ non è una buona grandezza probabilistica: è complessa!
Invece, $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)= |\Psi(x,t)|^2$ è reale

Nota 2: $\Psi(x,t)$ soddisfa a un'equazione delle onde: è detta anche un'*onda di probabilità*.

Normalizzazione della funzione d'onda

Se $|\Psi(x,t)|^2$ è una densità di probabilità,
deve valere la proprietà di normalizzazione della probabilità:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$

Ricordiamoci che la fdo rappresenta una particella: quest'ultima, anche se non completamente localizzata, deve trovarsi da qualche parte.

L'interpretazione probabilistica (richiesta dagli esperimenti) impone quindi un ***vincolo*** sulle possibili fdo:
sono funzioni d'onda fisiche *solo le fdo normalizzabili*.
Poiché l'equazione di Schrödinger è lineare, se Ψ è soluzione anche $A\Psi$ è soluzione. *Normalizzare* la fdo significa scegliere A tale che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$

A può essere complessa.

Normalizzazione della fdo: conseguenze

Normalizzare la fdo: $$\int_{-\infty}^{+\infty} |A\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$

Perché la fdo sia normalizzabile, per $x \rightarrow \pm\infty$, $\Psi \rightarrow 0$ più rapidamente di $1/\sqrt{|x|}$

Alcune soluzioni (inclusa la soluzione banale $\Psi = 0$) devono essere scartate.

Richiamo: $\int_{c}^{+\infty} \frac{1}{x} dx, \;\; c > 0$ diverge

$\int_{c}^{+\infty} \frac{1}{x^{1+\delta}} dx, \;\; c > 0$ converge

Osservazione. Mediante separazione di variabili abbiamo ottenuto:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) f(t) = \psi(x) \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar} t}$$

$\longrightarrow$ la normalizzazione di $\Psi(x,t)$ comporta la normalizzazione di $\psi(x)$.

Conservazione della probabilità

Sia data $\Psi(x,t)$, funzione d'onda, che soddisfi l'equazione di Schrödinger.
Essa sia stata normalizzata, p.es., al tempo $t = 0$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 dx = 1$$

L'evoluzione temporale è dettata da: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

A tempi $t > 0$, la fdo è ancora normalizzata?
Se non lo è, la teoria diviene inconsistente!
Bisogna verificare che:

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 0$$

Conservazione della probabilità - dimostrazione

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\right]dx$$

Derivata del prodotto di funzioni: $\frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi^*\Psi\right] = \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}$

Equazione di Schrödinger: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ $\Rightarrow$ $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\Psi$

richiamo: –i = 1/i

complessa coniugata: $\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\Psi^*$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi^*\Psi\right] = \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(-\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi + \Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)$$

$$= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)$$

esercizio: verificare

Conservazione della probabilità - dimostrazione (2)

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi^*\Psi\right] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)$$

allora:

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\right]dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)dx = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)\Bigg|_{-\infty}^{+\infty} = 0$$

dove l'ultimo passaggio deriva dal fatto che le fdo devono essere normalizzabili, e quindi devono andare a zero velocemente per *x*–> ±∞.
Quindi, se Ψ è normalizzata a *t = 0*, resta normalizzata.

QED

Il flusso

La grandezza:

$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left(-\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi + \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) = -\frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)$$

è detta *flusso*, e poiché si è dimostrato

(Vedi dimostrazione della conservazione della probabilità per l'eq. di Schrödinger)

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi + \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)$$

Si ha la legge di conservazione per la densità di probabilità:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(x,t)|^2 + \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) = 0$$

In 3D: $$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(\overrightarrow{r},t)|^2 + \overrightarrow{\nabla}\cdot\overrightarrow{j}(\overrightarrow{r},t) = 0$$

cfr. equazione di continuità per la corrente

Probabilità: richiami

$\rho(x)$ *densità di probabilità* per la variabile continua $x \in (-\infty, +\infty)$. Allora:

$\rho(x)dx$ — Probabilità di trovare il valore di x fra x e $x+dx$.

$P_{ab} = \int_a^b \rho(x)dx$ — Probabilità di trovare x nell'intervallo $[a,b]$.

$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)dx = 1$ — Normalizzazione della probabilità

$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x)dx$ — Valor medio di x ("valore aspettato")
NON è necessariamente il valore più probabile

$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)dx$ — Valor medio di $f(x)$

$\sigma^2 \equiv \left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\rho(x)dx - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x)dx\right)^2$ — varianza o scarto quadratico medio

$\sigma = \sqrt{\sigma^2} = \sqrt{\left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2}$ — Deviazione standard

La varianza

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x)dx$$

Valor medio di x.

$$\langle \Delta x \rangle = \langle x - \langle x \rangle \rangle = \langle x \rangle - \langle \langle x \rangle \rangle = \langle x \rangle - \langle x \rangle = 0$$

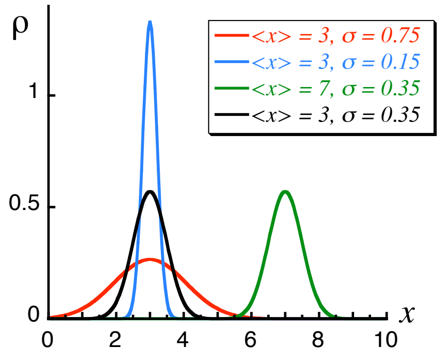
La deviazione media di x dal valor medio è zero. Non è una misura della larghezza della distribuzione per x.

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho(x)dx - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x)dx \right)^2$$

varianza o scarto quadratico medio

Distribuzioni gaussiane con diversi valori medi e deviazioni standard

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \mathrm{e}^{-\frac{(x-\langle x \rangle)^2}{2\sigma_x^2}}$$



$$\sigma = \sqrt{\sigma^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

deviazione standard: misura della larghezza della distribuzione per x.

Postulati della MQ

La funzione d'onda

Esiste una funzione d'onda (fdo) Ψ che descrive l'evoluzione spaziale e temporale di una particella (o di un sistema, vedi più oltre) quantistica.
Una fdo del tipo $\Psi(x,t)$ descrive un sistema o particella con un solo grado di libertà (indicato dalla variabile x)

L'evoluzione è data dall'equazione di Schroedinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Implicazione: l'evoluzione della fdo è deterministica.

Interpretazione probabilistica

La grandezza:
$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$
rappresenta la densità di probabilità di una particella (o sistema) quantistico.

Di conseguenza

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t)^*\Psi(x,t)dx = 1$$

Implicazione: le fdo ammissibili devono essere *normalizzabili*.

Continuità

La fdo $\Psi(x,t)$
e la derivata spaziale $\partial\Psi(x,t)/\partial x$
sono funzioni continue in un mezzo isotropo.

Implicazione: le fdo ammissibili devono essere finite nello spazio delle posizioni.

Osservabili e operatori

Le grandezze misurabili sono rappresentate da *operatori*.
Gli operatori agiscono sulla fdo $\Psi(x,t)$.
L'operazione di *misurare* un osservabile Q si traduce matematicamente nell'*applicare l'operatore corrispondente* alla fdo e cercarne l'autovalore:

$$\widehat{Q}\Psi(x,t) = q\Psi(x,t)$$

I diversi valori di q ammissibili rappresentano i possibili risultati di una misura.

Valori aspettati

Il valore aspettato di una variabile dinamica Q è fornito dalla operazione del corrispondente operatore sulla fdo, mediato su tutto lo spazio:

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t)^* \widehat{Q} \Psi(x,t) dx$$

Valori d'aspettazione. Operatori. Misura.

Valori d'aspettazione: posizione

Sia $\Psi(x,t)$ la fdo di un sistema. Stante il significato probabilistico, il valore aspettato per la posizione di una particella nello stato $\Psi(x,t)$ è:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x,t)|^2 dx$$

e rappresenta la media di numerose misure *effettuate su numerosi sistemi tutti preparati allo stesso modo* (stesso stato Ψ). Vedi oltre!

Cosa succede al variare del tempo?
<*x*> cambia, poiché cambia $\Psi(x,t)$.

Classicamente, cercheremmo la velocità: $v=dx/dt$.

Cerchiamo $d\langle x\rangle/dt$.

Valori d'aspettazione: velocità

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x,t)|^2 dx$$

In questo passaggio non va introdotto un termine $\partial x/\partial t$, perché la variazione di x nel tempo è data solo dalla variazione di Ψ !

Vedi dimostrazione della conservazione della probabilità per l'eq. di Schrödinger

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial |\Psi(x,t)|^2}{\partial t} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi + \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) dx$$

$$= \cancel{x\frac{i\hbar}{2m}\left(-\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi + \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}} - \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi + \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) dx$$

$$= \cancel{-\frac{i\hbar}{2m}\left(-\Psi^*\Psi\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty}} - \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}dx - \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}dx$$

Nei vari passaggi si sfrutta:
1- Ψ va a zero all'infinito più rapidamente di $1/x$.
2- l'integrazione per parti:
$\int_a^b f\frac{dg}{dx}dx = fg\big|_a^b - \int_a^b \frac{df}{dx}g dx$

In definitiva, identificando <*v*> con $d\langle x\rangle/dt$ (a questo livello è un postulato, anche se verosimile), si ha:

$$\langle v \rangle = \frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}dx$$

Che fornisce la maniera di calcolare v data Ψ.

Operatore momento

La velocità: $\langle v \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$

Il momento:

$$\langle p \rangle = m\langle v \rangle = -\mathrm{i}\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi dx$$

Questa relazione è scritta in termini di un **operatore** che **agisce** sulla fdo.

Si dice che l'operatore $\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}$ **rappresenta** il momento nello stato **Ψ**.

Operatori

Il momento: $\widehat{p} : \quad \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}$ $\qquad \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi dx$

La posizione: $\widehat{x} : \quad x$ $\qquad \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x \Psi dx$

In generale, qualunque grandezza Q può essere espressa come combinazione di questi due operatori.

$$\widehat{Q} : \quad Q(x,p) \qquad \langle Q(x,p) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* Q\left(x, \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi dx$$

Ad esempio, l'energia cinetica:

$$\widehat{K} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} : \quad \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \qquad \langle K(x,p) \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx$$

Energia e hamiltoniana

Energia cinetica:

$$\widehat{K} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} : \quad \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \qquad \langle K(x,p)\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}dx$$

L'energia totale è detta anche Hamiltoniana.

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + V(x) : \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

$$\langle H\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi dx$$

Equazioni agli autovalori

Dato un operatore $\widehat{Q}$, risolvere l'equazione $\widehat{Q}\Psi = q\Psi$

significa trovare la particolare classe di funzioni Ψ per le quali l'applicazione dell'operatore $\widehat{Q}$ fornisce la stessa funzione, moltiplicata per un opportuno numero *q*. Siano esse $\Psi_{Q,n}$

Le funzioni per cui ciò è possibile
si chiamano *autofunzioni* o *autostati* di $\widehat{Q}$

I valori di *q* si chiamano *autovalori* di $\widehat{Q}$
e possono essere discreti (*quantizzazione*) o continui,
in numero finito o infinito.

Nella maggior parte dei casi, la conoscenza di un sistema comporta il calcolo delle autofunzioni e degli autovalori di determinati operatori.

Equazioni agli autovalori

Esercizio: sia dato l'operatore differenziale (derivata):

$$\widehat{Q} = \frac{d}{dx}$$

Dimostrare che le autofunzioni sono esponenziali del tipo:

$$e^{qx}$$

dove q è l'autovalore

Operatori lineari.

Siano a e b due numeri (eventualmente complessi).
Un operatore $\widehat{Q}$ si dice lineare se:

$$\widehat{Q}\left[a\Psi_1(x) + b\Psi_2(x)\right] = a\widehat{Q}\Psi_1(x) + b\widehat{Q}\Psi_2(x)$$

Esempi di operatori lineari:
derivazioni di ogni ordine

Esempio di operatore non lineare:
il logaritmo

Gli operatori legati agli osservabili sono *lineari*.

Operatori hermitiani.

Operatori per cui valga: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \widehat{Q} \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \widehat{Q}^* \psi^* dx$ sono detti hermitiani.

Si dimostra che, per operatori hermitiani:

1] $$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \widehat{Q} \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1 \widehat{Q}^* \psi_2^* dx$$

2] gli autovalori sono *reali*.

3] autofunzioni corrispondenti a autovalori differenti sono *ortogonali*, e possono essere prese *ortonormali,* ovvero: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{n,m}$

4] l'insieme delle autofunzioni $\psi_{Q,n}$ di un operatore hermitiano $\widehat{Q}$ è *completo*, ovvero ogni fdo Ψ può essere espressa come combinazione lineare delle $\psi_{q,n}$:

$$\Psi(x) = \sum_n c_n \psi_{Q,n}(x)$$

Operatori hermitiani (2).

Gli operatori legati agli osservabili sono *hermitiani*.

Esercizio: dimostrare.
Suggerimento: il valore aspettato deve essere reale.

Ulteriori proprietà.

Essendo: $\Psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$ dove le ψ_n sono autofunzioni

allora: $$c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x) dx$$

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$

Esercizio: dimostrare.

Commutazione.

L'applicazione successiva di due operatori lineari *dipende dall'ordine di applicazione*.

Esempio: si considerino

– l'operatore posizione, *x*

– l'operatore momento, $\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}$

È evidente che: $x\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) \neq \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}[x\Psi(x)]$

Due operatori (lineari) non necessariamente commutano.

Detti $\widehat{Q}, \widehat{W}$ due operatori,

la grandezza $\left[\widehat{Q}, \widehat{W}\right] = \widehat{Q}\widehat{W} - \widehat{W}\widehat{Q}$

è detta *commutatore* di $\widehat{Q}$ e $\widehat{W}$

e rappresenta l'operazione:

$$\left[\widehat{Q}, \widehat{W}\right]\Psi = \widehat{Q}\left(\widehat{W}\Psi\right) - \widehat{W}\left(\widehat{Q}\Psi\right)$$

Esercizio: dimostrare che

$$[\,\widehat{p}\,, \widehat{x}\,] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}$$

La misura.

Sia Ψ(x,t*)* la fdo di un sistema. Stante il significato probabilistico, il valore aspettato per un osservabile *Q* nello stato Ψ(x,t*)* è:

$$\langle Q\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\widehat{Q}\Psi dx$$

Due misure immediatamente successive sul medesimo sistema <u>devono</u> dare il medesimo valore, perché il concetto di misura abbia senso.

Quindi, la relazione sopra non significa che *facendo numerose misure sulla stessa particella* il risultato è: $\langle Q\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\widehat{Q}\Psi dx$

Piuttosto, esso rappresenta la media di numerose misure *effettuate su numerosi sistemi tutti preparati allo stesso modo* (stesso stato Ψ).

"Effettuando una misura, la fdo *collassa* in un certo stato."

La misura.

Effettuare una misura di Q = applicare l'operatore corrispondente *e ottenere come risultato uno dei possibili valori di q, ovvero un autovalore*:

$$\widehat{Q}\Psi = q\Psi$$

Questo è possibile solo se la fdo è un autostato di $\widehat{Q}$, per cui:

$$\widehat{Q}\Psi_{Q,n} = q\Psi_{Q,n}$$

dove le $\Psi_{Q,n}$ sono le autofunzioni di $\widehat{Q}$

Di conseguenza, una misura di un osservabile *proietta* la fdo in uno degli autostati dell'operatore a esso associato.

una misura successiva fornirà nuovamente la misura q.

Effettuando una misura, la fdo *collassa* in un certo stato.

Esercizio: cercare su Google "paradosso di Zenone quantistico" o "effetto Zenone quantistico" o "quantum Zeno effect" o "quantum Zeno paradox"