Appunti per le lezioni del corso di Meccanica Quantistica: le regole di quantizzazione

g.longhi

a.a. 2002-2003

Indice

Capitolo 1

Regola di quantizzazione di Dirac

Sia S un sistema fisico descritto dell'insieme di variabili canoniche

$$q_1, q_2, ...q_n; p_1, p_2, ...p_n; \tag{1.1}$$

e definiamo le parentesi di Poisson tra due osservabili classiche

$$A = A(q, p); \quad B = B(q, p), \tag{1.2}$$

con

$$\{A,\ B\} = \sum_{i=1}^{n} (\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}), \tag{1.3}$$

dove un'eventuale dipendenza dal tempo non è indicata.

Le parentesi elementari sono

$$\begin{cases} \{q_i,\ q_j\} = \{p_i,\ p_j\} = 0, \\ \{q_i,\ p_j\} = \delta_{ij}. \end{cases} \tag{1.4}$$

Dalla definizione di $\{,\}$ seguono le seguenti proprietà algebriche

$$\{A,\ B\} = -\{B,\ A\}, \tag{1.5}$$

$$\{A_1 + A_2,\ B\} = \{A_1,\ B\} + \{A_2,\ B\} \tag{1.6}$$

$$\{A_1A_2,\ B\} = A_1\{A_2,\ B\} + \{A_1,\ B\}A_2, \tag{1.7}$$

(e quindi anche

$$\{A,\ B_1B_2\} = \{A,\ B_1\}B_2 + B_1\{A,\ B_2\}).$$

Notare che l'ordine dei fattori nella (1.7) è arbitrario: $A_1\{A_2,\ B\} = \{A_2,\ B\}A_1$.

Si ha ancora

$$\{A,\ C\} = 0, \quad \text{se C è una costante}, \tag{1.8}$$

e si ha infine l'identità di Jacobi

$$\{A,\ \{B,\ C\}\} + \{C,\ \{A,\ B\}\} + \{B,\ \{C,\ A\}\} = 0. \tag{1.9}$$

Vale inoltre

$$\begin{cases} \{q_i,\ F(A(q,p))\} = \frac{\partial F}{\partial A}\{q_i,\ A\}, \\ \{p_i,\ F(A(q,p))\} = \frac{\partial F}{\partial A}\{p_i,\ A\}, \end{cases} \tag{1.10}$$

come si verifica subito.

E' noto che le equazioni del moto, governate da un'Hamiltoniana

$$H = H(q,p), \tag{1.11}$$

si possono esprimere in termini delle parentesi di Poisson:

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \{q_i,\ H\}, \\ \dot{p}_i = \{p_i,\ H\}. \end{cases} \tag{1.12}$$

* * * * * * * * * *

In base ai postulati della meccanica quantistica, a due generiche osservabili classiche A e B corrispondono due operatori lineari autoaggiunti $\hat{A}$ e $\hat{B}$.

Poiché $\{A,\ B\}$ è anch'essa un'osservabile classica, ad essa corrisponderà un operatore lineare autoaggiunto $\{A,\ B\}\hat{}$. Ci domandiamo come si può determinare quet'operatore in termini degli operatori $\hat{A}$ e $\hat{B}$.

L'ipotesi che permette di determinarlo è che esso obbedisca alle stesse regole algebriche cui obbedisce la parentesi di Poisson, cioè le (1.5)-(1.9), dove l'equazione (1.7) va interpretata con l'ordine degli operatori a secondo membro come è scritta, tenuto conto che gli operatori in generale non commutano e che quindi bisogna fare attenzione all'ordine in cui vengono scritti.

Con questa ipotesi abbiamo che la seguente parentesi quantistica

$$\{A_1A_2,\ B_1B_2\}\hat{}$$

si può svipuppare con l'uso della (1.7) in due modi, sviluppando prima rispetto al primo argomento e poi rispetto al secondo, e cioè

$$\left\{\begin{array}{l} \{A_1A_2,\ B_1B_2\}\hat{} = \\ = \hat{A}_1\{A_2,\ B_1B_2\}\hat{} + \{A_1,\ B_1B_2\}\hat{}\hat{A}_2 = \\ = \hat{A}_1\hat{B}_1\{A_2,\ B_2\}\hat{} + \hat{A}_1\{A_2,\ B_1\}\hat{}\hat{B}_2 + \\ +\hat{B}_1\{A_1,\ B_2\}\hat{}\hat{A}_2 + \{A_1,\ B_1\}\hat{}\hat{B}_2\hat{A}_2, \end{array}\right. \tag{1.13}$$

dove abbiamo consevato l'ordine dei fattori indicato nella (1.7), oppure sviluppando prima rispetto al secondo argomento e poi rispetto al primo

$$\left\{\begin{array}{l} \{A_1A_2,\ B_1B_2\}\hat{} = \\ = \hat{B}_1\hat{A}_1\{A_2,\ B_2\}\hat{} + \hat{B}_1\{A_1,\ B_2\}\hat{}\hat{A}_2 + \\ +\hat{A}_1\{A_2,\ B_1\}\hat{}\hat{B}_2 + \{A_1,\ B_1\}\hat{}\hat{A}_2\hat{B}_2. \end{array}\right. \tag{1.14}$$

Confrontando la (1.13) e la (1.14) si ha

$$\left\{\begin{array}{l} \hat{A}_1\hat{B}_1\{A_2,\ B_2\}\hat{} + \{A_1,\ B_1\}\hat{}\hat{B}_2\hat{A}_2 = \\ = \hat{B}_1\hat{A}_1\{A_2,\ B_2\}\hat{} + \{A_1,\ B_1\}\hat{}\hat{A}_2\hat{B}_2, \end{array}\right. \tag{1.15}$$

o anche

$$\left\{\begin{array}{l} (\hat{A}_1\hat{B}_1 - \hat{B}_1\hat{A}_1)\{A_2,\ B_2\}\hat{} = \\ = \{A_1,\ B_1\}\hat{}(\hat{A}_2\hat{B}_2 - \hat{B}_2\hat{A}_2). \end{array}\right. \tag{1.16}$$

Questa relazione dovrà valere per qualunque scelta delle coppie di osservabili (A_1, B_1), (A_2, B_2) e sarà sicuramente soddisfatta se si pone

$$\hat{A}_1\hat{B}_1 - \hat{B}_1\hat{A}_1 \propto \{A_1,\ B_1\}\hat{} \tag{1.17}$$

e analogamente per (A_2, B_2).

Quindi in generale si avrà

$$[\hat{A},\ \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = k\widehat{\{A,\ B\}}. \tag{1.18}$$

Ora, sempre in base ai postulati della meccanica quantistica, $\hat{A}$ e $\hat{B}$ sono operatori autoaggiunti, ne segue che

$$[\hat{A},\ \hat{B}]^* = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A},\ \hat{B}]. \tag{1.19}$$

Poiché l'operazione di aggiunto coniuga le costanti, avremo

$$[\hat{A},\ \hat{B}]^* = \overline{k}(\widehat{\{A,\ B\}})^* = \overline{k}\widehat{\{A,\ B\}}, \tag{1.20}$$

dovendo essere anche $\widehat{\{A,\ B\}}$ un operatore autoaggiunto.

Ne segue che

$$\overline{k} = -k, \tag{1.21}$$

e quindi possiamo porre

$$k = i\hbar, \quad (\hbar \text{ costante reale}), \tag{1.22}$$

e scriveremo

$$[\hat{A},\ \hat{B}] = i\hbar\widehat{\{A,\ B\}}. \tag{1.23}$$

Il fatto che $\hbar$ sia proprio la costante di Planck risulterà dall'applicazione della regola di quantizzazione (1.23) a casi specifici.

La regola (1.23) è la regola di quantizzazione di Dirac.

Se facciamo l'ipotesi molto naturale che alle osservabili classiche zero e uno corrisponda l'operatore nullo e l'operatore unità, allora, per le variabili canoniche q_i e p_i, avremo i seguenti commutatori

$$\begin{cases} [\hat{q}_i,\ \hat{p}_j] = O, \\ [\hat{q}_i,\ \hat{p}_j] = O, \\ [\hat{q}_i,\ \hat{p}_j] = i\hbar. \end{cases} \tag{1.24}$$

Capitolo 2

Spettro e autostati degli operatori

Per un teorema di analisi funzionale un operatore lineare autoaggiunto $\hat{A}$ ammette un insieme completo di autovettori. L'insieme degli autovalori di $\hat{A}$ forma lo spettro di $\hat{A}$. Lo spettro può essere discreto, continuo o misto. Discreto se gli autovalori formano un insieme discreto finito o numerabile. Continuo se formano un insieme continuo e misto se si presentano ambedue i casi. Quindi, in generale, se sviluppiamo un generico vettore dello spazio di Hilbert $\mathcal{H}$ associato al sistema fisicao S che stiamo esaminando, avremo l'espressione

$$v = \sum_n c_n u_n + \int d\lambda \; c(\lambda) u(\lambda), \tag{2.1}$$

dove v è un generico vettore di $\mathcal{H}$ e la somma e l'integrale sono estesi ad un insieme opportuno, determinato dallo spettro di $\hat{A}$ (per l'integrale si tratta comunque di parte o tutto l'asse reale, essendo $\hat{A}$ autoaggiunto).

La base di vettori $(u_n, u(\lambda))$ sarà ortogonale, poichè autovettori corrispondenti ad autovalori distinti di un operatore autoaggiunto sono ortogonali.

Per avere una base ortonormale potremo porre

$$\begin{cases} (u_n, u_m) = \delta_{n,m}, \\ (u_n, u(\lambda)) = 0, \\ (u(\lambda), u(\lambda')) = \delta(\lambda - \lambda'). \end{cases} \tag{2.2}$$

E' evidente che gli autovettori dello spettro continuo non sono normalizzabili $((u(\lambda), u(\lambda)) = \delta(0)$, che non ha senso) e quindi non sono propriamente vettori di $\mathcal{H}$.

Al loro posto andrebbero considerati gli <u>autodifferenziali</u> (vedi, per esempio, Caldirola, Cirelli e Prosperi, pag 282, o anche Messiah,I, pag 185 e 249)

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta\lambda}} \int_{\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} u(\lambda') d\lambda', \tag{2.3}$$

che hanno norma finita.

Però, anche se $u(\lambda)$ non è un vettore di $\mathcal{H}$, a tutti gli effetti lo sviluppo (2.1) si può usare con le normalizzazioni (2.2); il vettore v dell'equazione (2.1) ha la norma

$$\| v \|^2 = \sum_n | v |^2 + \int d\lambda \, | v |^2 \tag{2.4}$$

e quindi è sufficiente che questa espressione sia finita per garantire che v sia un vettore dello spazio $\mathcal{H}$.

Capitolo 3

Operatori compatibili

Per semplicità di notazione ci limitiamo ad operatori con spettro discreto.

Vogliamo dimostrare che due operatori lineari autoaggiunti possono aver una base di autovettori in comune se e solo se commutano (cioè se sono simultaneamente diagonalizzabili).

Iniziamo col dimostrare che la condizione è necessaria, cioè gli operatori A e B ammettano una base in comune; indichiamo con $u_{\alpha\beta\gamma}$ questa base,

$$\begin{cases} \hat{A}u_{\alpha\beta\gamma} = \alpha u_{\alpha\beta\gamma}, \\ \hat{B}u_{\alpha\beta\gamma} = \beta u_{\alpha\beta\gamma}, \end{cases} \tag{3.1}$$

dove γ indica un'eventuale degenerazione. Più precisamente con γ numeriamo i vettori della base con α e β fissati, se ve n'è più di uno.

Dalla (3.1) segue subito

$$\begin{cases} \hat{A}\hat{B}u_{\alpha\beta\gamma} = \hat{A}(\hat{B})u_{\alpha\beta\gamma} = \\ = \hat{A}(\beta u_{\alpha\beta\gamma}) = \beta(\hat{A}u_{\alpha\beta\gamma}) = \beta\alpha u_{\alpha\beta\gamma}, \end{cases} \tag{3.2}$$

ma si ha anche

$$\begin{cases} \hat{B}\hat{A}u_{\alpha\beta\gamma} = \hat{B}(\hat{A}u_{\alpha\beta\gamma}) = \\ = \hat{B}(\alpha u_{\alpha\beta\gamma}) = \alpha(\hat{B}u_{\alpha\beta\gamma}) = \alpha\beta u_{\alpha\beta\gamma}, \end{cases} \tag{3.3}$$

e, sottraendo membro a membro

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})u_{\alpha\beta\gamma} = 0. \tag{3.4}$$

Poiché per ipotesi la base è completa, avremo

$$[\hat{A},\ \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{A}\hat{B} = 0, \tag{3.5}$$

come si voleva dimostrare.

La condizione è <u>sufficiente</u>, siano infatti $\hat{A}$ e $\hat{B}$ commutanti tra di loro e dimostriamo che esiste una base di autostati a comune.

Se u_α è una base per $\hat{A}$

$$\hat{A}u_\alpha = \alpha u_\alpha, \tag{3.6}$$

segue

$$\hat{B}(\hat{A}u_\alpha) = \hat{A}(\hat{B}u_\alpha) = \alpha(\hat{B}u_\alpha), \tag{3.7}$$

cioè sia u_α che $\hat{B}u_\alpha$ sono autovettori di $\hat{A}$, corrispondenti allo <u>stesso</u> autovalore α. Ovvero, appartengono allo stesso spazio caratteristico o anche che il sottospazio caratteristico di $\hat{A}$, corrispondente all'autovalore α è invariante sotto l'azione di $\hat{B}$ (cioè $u_\alpha \to \hat{B}u_\alpha$ non fa uscire il vettore dal sottospazio caratteristico).

Ora $\hat{B}$ è autoaggiunto e lo resterà se viene ristretto a questo sottospazio (infatti la condizione $(f, Bg) = (Bf, g)$ dovrà valere anche se f e g appartengono ambedue al sottospazio). In questo sottospazio $\hat{B}$ ammetterà una base completa, che indicheremo con $u_{\alpha\beta\gamma}$:

$$\hat{B}u_{\alpha\beta\gamma} = \beta u_{\alpha\beta\gamma}, \tag{3.8}$$

dove l'indice α ci ricorda che siamo nel sottospazio ad α fissato e γ tien conto di un'eventuale ulteriore degenerazione.

Ora u_α si potrà sviluppare su questa base, i cui vettori sono tutti autovettori di $\hat{A}$ con autovalore α. Possiamo perciò prendere come base simultanea di $\hat{A}$ e $\hat{B}$ la base $u_{\alpha\beta\gamma}$. Poich'e α è generico, possiamo scrivere

$$\begin{cases} \hat{A}u_{\alpha\beta\gamma} = \alpha u_{\alpha\beta\gamma}, \\ \hat{B}u_{\alpha\beta\gamma} = \beta u_{\alpha\beta\gamma}. \end{cases} \tag{3.9}$$

Capitolo 4

Rappresentazione q

Abbiamo visto che gli operatori $\hat{q}_i$ e $\hat{p}_i$, che corrispondono alle osservabili classiche q_i e p_i, soddisfano le (1.24)

$$\begin{cases} [\hat{q}_i,\ \hat{q}_j] = [\hat{p}_i,\ \hat{p}_j] = 0, \\ [\hat{q}_i,\ \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j}. \end{cases} \tag{4.1}$$

Limitiamoci ad un solo grado di libertà. Vogliamo studiare la relazione di commutazione

$$[\hat{q},\ \hat{p}] = i\hbar, \tag{4.2}$$

e realizzare concretamente gli operatori lineari e autoaggiunti $\hat{q}$ e $\hat{p}$.

Dobbiamo tener conto del fatto che l'operatore $\hat{q}$ rappresenta una posizione. I risultati della misura dovranno essere perciò tutti i possibili valori reali. Ciò determina lo spettro dell'operatore $\hat{q}$.

Iniziamo allora col postulare l'esistenza di una base di autovettori di $\hat{q}$ corrispondenti allo spettro continuo. Sia questa base completa ed ortogonale e inoltre non degenere

$$\hat{q} \mid q') = q' \mid q'), \tag{4.3}$$

dove q' è per ipotesi un numero reale, essendo l'autovalore di un operatore autoaggiunto, e poniamo

$$(q' \mid q'') = \delta(q' - q''). \tag{4.4}$$

Questa condizione di ortonormalità è la generalizzazione al caso continuo della condizione di ortogonalità del caso discreto.

Consideriamo in questa base un generico elemento di matrice della (4.2)

$$(q'' \mid \hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} \mid q') = i\hbar\delta(q'' - q'); \tag{4.5}$$

usando la (4.3) e la sua coniugata

$$(q' \mid \hat{q} = q'(q' \mid, \tag{4.6}$$

si ha

$$\begin{cases} (q'' \mid q''\hat{p} - \hat{p}q' \mid q') = \\ = (q'' - q')(q'' \mid \hat{p} \mid q') = \\ = i\hbar\delta(q'' - q'), \end{cases} \tag{4.7}$$

cioè gli elementi di matrice dell'operatore $\hat{p}$ nella base di q soddisfano l'equazione

$$(q'' - q')(q'' \mid \hat{p} \mid q') = i\hbar\delta(q'' - q'). \tag{4.8}$$

Per risolvere quest'equazione ricordiamo alcune proprietà della delta di Dirac

$$\begin{cases} x\delta(x) = 0, \\ x\delta'(x) + \delta(x) = 0 \end{cases}$$

dove la seconda si può anche scrivere

$$(x'' - x')\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x'' - x') + \delta(x'' - x') = 0.$$

Con l'uso di queste formule si vede che

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial q''}\delta(q'' - q')$$

fornisce una soluzione particolare dell'equazione (4.8). A questa va aggiunta la soluzione generale dell'equazione omogenea

$$(q'' - q')g(q'', q') = 0, \tag{4.9}$$

che è

$$f(q'')\delta(q''-q'), \tag{4.10}$$

con f funzione arbitraria.

Quindi si ha la soluzione

$$(q'' \mid \hat{p} \mid q') = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q''}\delta(q''-q') + f(q'')\delta(q''-q'). \tag{4.11}$$

La funzione f deve essere reale: se si coniuga la (4.11) e si tien conto del fatto che $\hat{p}$ è autoaggiunto si ha $\overline{(q'' \mid \hat{p} \mid q')} = (q' \mid \hat{p} \mid q'')$, cioè la stessa espressione con $q' \leftrightarrow q''$.

D'altra parte la δ è pari e la sua derivata δ' è dispari, quindi coniugando e scambiando le q si ha $f = \overline{f}$, tenendo anche conto della proprietà

$$f(q'')\delta(q''-q') = f(q')\delta(q''-q'). \tag{4.12}$$

Il termine $f(q'')\delta(q''-q')$ si può eliminare con la seguente osservazione. La base (4.3) è definita a meno di un fattore di fase arbitrario. Se cioè si effettua la sostituzione

$$\mid q') \longrightarrow e^{i\gamma(q')} \mid q') \equiv \mid \tilde{q}'), \tag{4.13}$$

con $\gamma(q')$ funzione reale si ha ancora una base possibile (n.b. l'equazione che definisce $\hat{p}$ (4.8) resta invariata sotto la sostituzione (4.13), poiché i fattori di fase si compensano a causa della δ. Anche la condizione di ortonormalità (4.4)) resta invariata per lo stesso motivo. .

Si può allora fare uso di questa arbitrarietà e scegliere γ in modo da eliminare il termine $f\delta$ nella (4.11). Si verifica facilmente che basta porre

$$f(q) = -\hbar\gamma'(q), \tag{4.14}$$

per ottenere il risultato voluto. Infatti si ha

$$\begin{aligned}
(\tilde{q}'' \mid \hat{p} \mid \tilde{q}') = & \qquad (4.15)\\
= e^{i(\gamma(q')-q'')}(q'' \mid \hat{p} \mid q') = & \qquad (4.16)\\
-i\hbar e^{i(\gamma(q')-\gamma(q''))}\frac{\partial}{\partial q''}\delta(q''-q') & \qquad (4.17)\\
+f(q'')\delta(q''-q'). & \qquad (4.18)\\
& \qquad (4.19)
\end{aligned}$$

Integrando per parti si ha

$$(\tilde{q}'' \mid \hat{p} \mid \tilde{q}') = \tag{4.20}$$
$$= -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial q''}[e^{i(\gamma(q')-q'')}\delta(q''-q')] + \tag{4.21}$$
$$+i\hbar[\tfrac{\partial}{\partial q''}e^{i(\gamma(q')-\gamma(q''))}]\delta(q''-q') + +f(q'')\delta(q''-q') = \tag{4.22}$$
$$= -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial q''}\delta(q''-q') + [\hbar\gamma' + f(q'')]\delta(q''-q'). \tag{4.23}$$
$$\tag{4.24}$$

La scelta (4.14) fornisce perciò il risultato voluto.
Infine si ha

$$(q'' \mid \hat{p} \mid q') = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q''}\delta(q''-q'). \tag{4.25}$$

Nel caso di più dimensioni il procedimento seguito fin qui non è sufficiente ed è necessaria un'ulteriore osservazione.

L'equazione che determina l'elemento di matrice di $\hat{p}_i$ è ancora data dalla (4.11)

$$(q'' \mid \hat{p}_i \mid q') = [-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i''} + f_i(q'')]\delta(q'') - q'), \tag{4.26}$$

dove ora

$$\begin{cases} \mid q') \equiv \mid q_1', q_2', ...q_n'), \\ \delta(q''-q') = \Pi_{i=1}^n \delta(q_i''-q_i'). \end{cases} \tag{4.27}$$

Dalla prima delle (4.1) segue che gli operatori $\hat{q}_i$ sono commutanti e quindi esiste la base $\mid q')$ di autovettori simultanei degli operatori $\hat{q}_i$. Si ha poi

$$[\hat{p}_i,\ \hat{p}_j] = 0, \tag{4.28}$$

da cui

$$(q'' \mid \hat{p}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{p}_i \mid q') = 0 \tag{4.29}$$

e, inserendo la completezza

$$\mathbf{1} = \int \mid \overline{q})d\overline{q}(\overline{q} \mid, \tag{4.30}$$

si ha

$$\int d\overline{q}(q'' \mid \hat{p}_i \mid \overline{q})(\overline{q} \mid \hat{p}_j \mid q') - (i \leftrightarrow j) = 0 \tag{4.31}$$

e sostituendo in questa la (4.26), dopo alcuni passaggi, si ottiene

$$(\frac{\partial f_j(q'')}{\partial q''_i} - \frac{\partial f_j i(q'')}{\partial q''_j})\delta(q'' - q') = 0. \tag{4.32}$$

Da questa segue

$$\frac{\partial f_j(q'')}{\partial q''_i} - \frac{\partial f_i(q'')}{\partial q''_j} = 0, \tag{4.33}$$

che ha per soluzione

$$f_i(q) = \frac{\partial}{\partial q_i} F(q), \tag{4.34}$$

dove F è una funzione arbitraria.

Ora la fase arbitraria della base

$$\mid \tilde{q}) = e^{i\gamma(q)} \mid q) \tag{4.35}$$

è una funzione reale di $q_1, q_2, ..., q_n$; basterà allora porre

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial q_i} \gamma(q) = f_i(q), \tag{4.36}$$

ovvero

$$F(q) = -\hbar\gamma(q), \tag{4.37}$$

per avere il risultato (4.25) anche nel caso di più gradi di libertà.

Capitolo 5

Gli operatori in rappresentazione q e in rappresentazione p

Se si applica la (4.25) al caso di un vettore generico $\mid f)$, si ha

$$\begin{aligned}(q'' \mid \hat{p} \mid f) = \int_{-\infty}^{infty} dq'(q'' \mid \hat{p} \mid q')(q' \mid f) = \\ = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} [\frac{\partial}{\partial q''}\delta(q'' - q')](q' \mid f) = \\ = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q''}(q'' \mid f),\end{aligned} \tag{5.1}$$

e, posto

$$(q \mid f) = f(q), \tag{5.2}$$

si vede che si può definire un operatore sullo spazio delle $f(q)$ con

$$\tilde{p}f(q) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} f(q). \tag{5.3}$$

Notare che le funzioni $f(q)$ realizzano lo spazio $\mathcal{H}$ come uno spazio $L_2(-\infty, +\infty)$: dati due vettori di $\mathcal{H} \mid f)$ e $\mid g)$ si ha

$$(f \mid g) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq (f \mid q)(q \mid g) = \; = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}(q) g(q) dq \equiv (f \mid g), \qquad (5.4)$$

che è il prodotto scalare in $L_2(-\infty, +\infty)$.

In modo analogo si ha dalla (4.3), sempre in rappresentazione q,

$$(q'' \mid \hat{q} \mid q') = q' \delta(q'' - q'), \qquad (5.5)$$

$$\begin{aligned} (q'' \mid \hat{q} \mid f) &= \int_R dq' (q'' \mid \hat{q} \mid q')(q' \mid f) = \\ &= \int_R dq' q' \delta(q'' - q') f(q') = q'' f(q''), \qquad (5.6) \\ & \qquad (5.7) \end{aligned}$$

quindi, posto

$$\tilde{q}(q'' \mid f) \equiv (q'' \mid q \mid f), \qquad (5.8)$$

si ha

$$\tilde{q} f(q) = q f(q), \qquad (5.9)$$

cioè $\tilde{q}$ è un operatore di moltiplicazione in $L_2(R)$.

Naturalmente avremmo potuto definire fin dall'inizio una rappresentazione p con

$$\tilde{p} \mid p) = p \mid p), \qquad (5.10)$$

al posto della (4.3). Avremmo ottenuto gli stessi risultati con p al posto di q e viceversa in tutte le formule, ma con un segno diverso nella (4.8), (4.11) e (4.25), a causa del fatto che il prime membro della (4.2) è antisimmetrico nello scambio $p \leftrightarrow q$. Avremmo quindi ottenuto

$$(p'' \mid \hat{q} \mid p') = i\hbar \frac{\partial}{\partial p''} \delta(p'' - p') \qquad (5.11)$$

al posto della (4.25) e

$$\tilde{q} f(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} f(p') \tag{5.12}$$

al posto della (5.3).

La (5.2) e la (5.4) traducono in termini di operazioni su $L_2(R)$ le operazioni effettuate su $\mathcal{H}$: se $\mid f) \,\epsilon\, \mathcal{H}$ e $f(q) \,\epsilon\, L_2(R)$, si ha

$$\mid f) \rightarrow f(q) = (q \mid f) \tag{5.13}$$

in rappresentazione q, con

$$\parallel \mid f) \parallel^2 = \parallel f \parallel^2 = \int_R \mid f(q) \mid^2 dq. \tag{5.14}$$

L'operatore p

$$\mid f) \rightarrow \hat{p} \mid f) \tag{5.15}$$

si traduce con

$$f(q) \rightarrow \tilde{p} f(q) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} f(q). \tag{5.16}$$

In modo analogo potremo usare la rappresentazione p:

$$\begin{gathered} \mid f) \rightarrow \tilde{f}(p) = (p \mid f), \\ \parallel \mid f) \parallel^2 = \parallel \tilde{f} \parallel^2 = \int_R \mid \tilde{f}(p) \mid^2 dp, \end{gathered} \tag{5.17}$$

dove si è cambiato nome alla $f(p)$ per convenienza, e ancora

$$\mid f) \rightarrow \hat{q} \mid f), \tag{5.18}$$

che si traduce in

$$\tilde{f}(p) \rightarrow \tilde{q} \tilde{f}(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{f}(p). \tag{5.19}$$

La trasformazione dall'una all'altra rappresentazione è determinata dalla funzione $(q \mid p)$, infatti

$$f(q) = (q \mid f) = \int_R (q \mid p) dp (p \mid f) = \int_R (q \mid p) \tilde{f}(p) dp, \tag{5.20}$$

e viceversa

$$\tilde{f}(p) = (p \mid f) = \int_R (p \mid q) dq (q \mid f) = \int_R (p \mid q) \tilde{f}(q) dq. \tag{5.21}$$

Vogliamo calcolare $(q \mid p)$. Per far ciò consideriamo per esempio l'equazione agli autovalori dell'operatore $\hat{p}$ in rappresentazione q

$$(q \mid \hat{p} \mid p) = p(q \mid p), \tag{5.22}$$

cioè, per la (5.16)

$$\tilde{p}(q \mid p) = p(q \mid p), \tag{5.23}$$

dove p, autovalore di $\tilde{p}$, è un numero reale. Quest'ultima equazione, sempre per la (5.16), è

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial q}(q \mid p) = p(q \mid p), \tag{5.24}$$

che ha per soluzione

$$(q \mid p) = \mathrm{cost.}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\mathrm{pq}}{\hbar}}. \tag{5.25}$$

La costante d'integrazione è fissata (in modulo) dalla condizione di normalizzazione per la base $\mid q)$ (4.4). Dovendo essere

$$(q \mid q') = \delta(q - q'), \tag{5.26}$$

si ha

$$\delta(q - q') = \int_R (q \mid p) dp (p \mid q'), \tag{5.27}$$

cioè

$$\int_R \mid \mathrm{cost.} \mid^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\mathrm{pq}}{\hbar}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\mathrm{pq'}}{\hbar}} \mathrm{dp} = \delta(\mathrm{q} - \mathrm{q'}), \tag{5.28}$$

da cui

$$| \text{ cost. } |^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}, \tag{5.29}$$

dove si è usata la consueta rappresentazione della δ

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_R e^{ixk} dk. \tag{5.30}$$

Quindi, a meno di un fattore di fase, si ha

$$(q \mid p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{pq}{\hbar}}. \tag{5.31}$$

Capitolo 6

Particella libera

Consideriamo ora una particella classica di massa m libera, la cui posizione sia individuata da coordinate cartesiane in un riferimento dato. Ad un tempo t fissato, che non indicheremo esplicitamente, essa avrà le coordinate canoniche $\vec{x}$ e $\vec{p}$.

L'Hamiltoniana è data da

$$H = \frac{1}{2m}\vec{p}^2. \tag{6.1}$$

Questa è un'osservabile classica cui corrisponderà un operatore lineare autoaggiunto, definito sullo spazio di $\mathcal{H}$ degli stati del sistema.

Applicando le considerazioni fatte precedentemente, avremo che gli operatori di posizione e impulso, che sono ora operatori vettoriali, saranno operatori lineari autoaggiunti che soddisfano le regole di commutazione

$$[\hat{x}_i,\ \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i,\ \hat{p}_j] = 0, \tag{6.2}$$

$$[\hat{x}_i,\ \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j}, \quad (i, j = 1, 2, 3). \tag{6.3}$$

In rappresentazione x (dove ora si è usato il simbolo x al posto di q per indicare la posizione) avremo l'analoga delle (4.25)

$$(\vec{x}' \mid \hat{p}_i \mid \vec{x}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'_i}\delta(\vec{x}' - \vec{x}), \tag{6.4}$$

(dove $\delta(\vec{x}) \equiv \delta(x_1)\delta(x_2)\delta(x_3)$).

Uno stato generico $| \psi)$ in rappresentazione x sarà dato da

$$\psi(\vec{x}) = (\vec{x} \mid \psi), \tag{6.5}$$

dove

$$| \psi) = \int d^3x \mid \vec{x})(\vec{x} \mid \psi). \tag{6.6}$$

La funzione $\psi(\vec{x})$ è la <u>funzione d'onda</u> del sistema, dove il tempo t è fissato, ma non indicato.

In analogia alla (5.3) avremo

$$\tilde{\vec{p}}\psi(\vec{x}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{x}}\psi(\vec{x}). \tag{6.7}$$

All'osservabile H dell'equazione (6.1) faremo corrispondere l'operatore sullo spazio $\mathcal{H}$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}})^2. \tag{6.8}$$

In rappresentazione x avremo

$$\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2. \tag{6.9}$$

Vogliamo ora determinare gli autostati dell'operatore $\tilde{\vec{p}}$. Per la (6.7) questi saranno determinati dall'equazione agli autovalori

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{x}}\psi(\vec{x}) = \vec{p}\psi(\vec{x}), \tag{6.10}$$

dove $\vec{p}$ sono gli autovalori di $\tilde{\vec{p}}$.

La (6.10) è nient'altro che la (6.2) nel caso 3-dimensionale, quindi si ha

$$\psi(\vec{x}) = (\vec{x} \mid \vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}, \tag{6.11}$$

poiché l'equazione è separabile si ha il prodotto di 3 soluzioni del tipo (5.31).

Notare che queste autofunzioni sono anche le funzioni di trasformazione dalla base $| \vec{p})$ alla base $| \vec{x})$. Notare anche che non si ha degenerazione, poiché ad ogni terna di autovalori p_1, p_2, p_3 corrisponde un <u>solo stato</u> (6.11).

Per quanto riguarda l'Hamiltoniana (6.9), che è un operatore funzione dell'operatore $\tilde{p}$, ci si può aspettare che sia diagonale sulla base sulla quale $\tilde{p}$ è diagonale. Infatti, per il teorema spettrale degli operatori autoaggiunti, una funzione di un operatore ha autovalori che sono dati dalla questa stessa funzione valutata sui corrispondenti autovalori.

Si ha infatti

$$\begin{aligned}\tilde{H}\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}] = \\ &= \frac{1}{2m}\vec{p}^2[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}],\end{aligned} \tag{6.12}$$

cioè

$$\tilde{H}\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}\psi_{\vec{p}}(\vec{x}). \tag{6.13}$$

Quindi, gli autovalori di $\tilde{H}$ sono

$$\frac{\vec{p}^2}{2m}. \tag{6.14}$$

Questi autovalori sono ora <u>degeneri</u>, perché, fissato l'autovalore (6.14) dell'energia, è fissato solo il <u>modulo di</u> $\vec{p}$; si ha cioè un'infinità di autovettori $\psi_{\vec{p}}(\vec{x})$ per ogni autovalore dell'energia, corrispondenti a tutte le possibili direzioni di $\vec{p}$.

Se oltre a $\tilde{H}$ si diagonalizzano altri due operatori commutanti con $\tilde{H}$ e tra di loro, per esempio $\tilde{p}_x$ e $\tilde{p}_y$ e si tien conto del segno di $\tilde{p}_z$,si ha un sistema di tre operatori commutanti a due a due, che permette, fissando i loro autovalori, di individuare uno e un solo autostato. Analogamente potremmo fare la scelta delle tre componenti dell'impulso e considerare l'Hamiltoniana funzione dell'impulso.

Queste varie scelte di tre operatori commutanti due a due sono esempi di <u>osservazione massima</u> del sistema, cioè della diagonalizzazione simultanea di un insieme massimale di operatori (lineari e autoaggiunti) <u>compatibili</u>, massimale nel senso che non esistono altri operatori definiti sullo spazio di Hilbert del sistema che commutino con tutti questi operatori.

L'aggiunta di altri operatori a $\tilde{H}$ che permettono di avere un insieme di autovalori che individuano un solo autostato simultaneo si esprime dicendo che la degenerazione iniziale dell'energia è stata completamente rimossa.

Vi sono varia scelte di un sistema massimale di operatori per un dato sistema; un'altra scelta per il caso di un punto materiale che è interessante dal punto di vista fisico è $(H, \vec{L}^2, L_z)$ (dove si è omesso il simbolo di operatore in rappresentazione x), e dove $\vec{L}$ è il momento angolare rispetto ad un punto appropriato. Questa scelta sarà utile in problemi dove vi sia simmetria sferica, e verrà usato in seguito.

Naturalmente, per ogni scelta, bisogna verificare che gli operatori siano autoaggiunti e compatibili. Se si applica la regola di quantizzazione di Dirac ad un modello classico, quest'ultima condizione sarà soddisfatta se lo è a livello classico, cioè se le corrispondenti parentesi di Poisson delle corrispondenti grandezze classiche sono a due a due nulle. Però questa condizione è necessaria, ma non è sufficiente a garantire la commutatività quantistica, che va perciò verificata caso per caso.

Capitolo 7

Il valore di aspettazione

Data un'osservabile quantistica $\hat{A}$ si definisce il suo valore di aspettazione sullo stato $\mid \psi)$ con il numero reale

$$(\psi \mid \hat{A} \mid \psi) = (\hat{A}\psi \mid \psi) = \overline{(\psi \mid \hat{A} \mid \psi)}. \tag{7.1}$$

Il suo significato fisico si ottiene sviluppando lo stato $\mid \psi)$ sulla base degli autostati di $\hat{A}$. Poniamo

$$\hat{A} \mid \alpha) = \alpha \mid \alpha), \qquad (\alpha \mid \alpha') = \delta_{\alpha\alpha'}, \tag{7.2}$$

dove per semplicità abbiamo supposto che lo spettro di $\hat{A}$ sia discreto e non degenere.

Si ha allora

$$\mid \psi) = \sum_{\alpha} \psi_\alpha \mid \alpha), \quad (\psi_\alpha = (\alpha \mid \psi)), \tag{7.3}$$

e

$$\begin{aligned}(\psi \mid \hat{A} \mid \psi) &= \sum_{\alpha,\alpha'} \overline{\psi}_\alpha \psi_{\alpha'} (\alpha \mid \hat{A} \mid \alpha') = \\ &= \sum_{\alpha,\alpha'} \overline{\psi}_\alpha \psi_{\alpha'} \alpha' (\alpha \mid \alpha') = \sum_{\alpha} \mid \psi_\alpha \mid^2 \alpha.\end{aligned} \tag{7.4}$$

Tenuto conto dei postulati interpretativi, si vede che il valore di aspettazione di $\hat{A}$ è il valore medio delle possibili misure dell'osservabile A, quando il sistema si trova nello stato individuato dal vettore normalizzato $\mid \psi)$.

In rappresentazione x, posto

$$(x \mid \hat{A} \mid \psi) = \tilde{A}(x \mid \psi) = \tilde{A}\psi(x), \tag{7.5}$$

si ha

$$(\psi \mid \hat{A} \mid \psi) = \int dx (\psi \mid x)(x \mid \hat{A} \mid \psi) = \int dx \overline{\psi}(x)\tilde{A}\psi(x) \equiv (\psi, \tilde{A}\psi). \tag{7.6}$$

Capitolo 8

Il principio di indeterminazione

Consideriamo una particella con coordinata x (consideriamo per semplicità un caso 1-dimensionale) e impulso p. Se si trova nello stato quantistico $\mid \psi)$, i valori di aspettazione di $\hat{x}$ e di $\hat{p}$ saranno dai da

$$\overline{x} = (\psi \mid \hat{x} \mid \psi), \tag{8.1}$$

$$\overline{p} = (\psi \mid \hat{p} \mid \psi). \tag{8.2}$$

Definiamo gli scarti quadratici medi:

$$(\triangle x)^2 = (\psi \mid (\hat{x} - \overline{x})^2 \mid \psi), \tag{8.3}$$

$$(\triangle p)^2 = (\psi \mid (\hat{p} - \overline{p})^2 \mid \psi), \tag{8.4}$$

che possiamo considerare una misura della <u>indeterminazione</u> di x e p.

Notare che si ha

$$(\triangle x)^2 = (\psi \mid (\hat{x})^2 - 2\overline{x}\hat{x} + (\overline{x})^2 \mid \psi) = (\overline{x})^2 - (\overline{x})^2, \tag{8.5}$$

dove $\mid \psi)$ è normalizzato. Analogamente per l'impulso.

Calcoliamo ora il <u>prodotto</u><u>d'indeterminazione</u>

$$\triangle x \triangle p, \tag{8.6}$$

o, per semplicità, il suo quadrato:

$$(\triangle x)^2(\triangle p)^2 = (\psi \mid (\hat{x}-\overline{x})^2 \mid \psi)(\psi \mid (\hat{p}-\overline{p})^2 \mid \psi), \tag{8.7}$$

e poniamo

$$\hat{\alpha} = \hat{x}-\overline{x}, \tag{8.8}$$
$$\hat{\beta} = \hat{p}-\overline{p}, \tag{8.9}$$

dove $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ sono ancora operatori lineari e autoaggiunti poiché $\overline{x}$ e $\overline{p}$ sono numeri reali. Quindi possiamo anche scrivere

$$\begin{aligned}(\triangle x)^2(\triangle p)^2 &= (\psi \mid \hat{\alpha}^2 \mid \psi)(\psi \mid \hat{\beta}^2\psi) = \\ &= (\hat{\alpha}\psi \mid \hat{\alpha}\psi)(\hat{\beta}\psi \mid \hat{\beta}\psi) = \\ &= \parallel \mid \hat{\alpha}\psi) \parallel^2 \parallel \mid \hat{\beta}\psi) \parallel^2 .\end{aligned} \tag{8.10}$$

Per la disuguaglianza di Schwarz si ha

$$\parallel \mid \hat{\alpha}\psi) \parallel^2 \parallel \mid \hat{\beta}\psi) \parallel^2 \geq \mid (\hat{\alpha}\psi \mid \hat{\beta}\psi) \mid^2, \tag{8.11}$$

cioè

$$(\triangle x)^2(\triangle p)^2 \geq \mid (\hat{\alpha}\psi \mid \hat{\beta}\psi) \mid^2 = \mid (\psi \mid \hat{\alpha}\hat{\beta} \mid \psi) \mid^2 . \tag{8.12}$$

Usiamo ora l'identità

$$\hat{\alpha}\hat{\beta} = \frac{1}{2}(\hat{\alpha}\hat{\beta}+\hat{\beta}\hat{\alpha}) + \frac{1}{2}(\hat{\alpha}\hat{\beta}-\hat{\beta}\hat{\alpha}) \equiv \frac{1}{2}\{\hat{\alpha},\hat{\beta}\} + \frac{1}{2}[\hat{\alpha},\hat{\beta}]; \tag{8.13}$$

si può scrivere

$$\begin{aligned}(\triangle x)^2(\triangle p)^2 &\geq \mid \frac{1}{2}(\psi \mid \frac{1}{2}\{\hat{\alpha},\hat{\beta}\} \mid \psi) + 1/2(\psi \mid [\hat{\alpha},\hat{\beta}] \mid \psi) \mid^2 = \\ &= \frac{1}{4} \mid (\psi \mid \{\hat{\alpha},\hat{\beta}\} \mid \psi) \mid^2 + \frac{1}{4} \mid (\psi \mid [\hat{\alpha},\hat{\beta}] \mid \psi) \mid^2,\end{aligned} \tag{8.14}$$

più il termine misto che però è nullo. Infatti l'operatore $\{\hat{\alpha}, \hat{\beta}\}$ è autoaggiunto, quindi il suo valore di aspettazione è reale, mentre il secondo operatore è antiautoaggiunto, con valore di aspettazione immaginario puro. Ne segue che nella (8.1) si ha il modulo quadrato di un numero a più un numero ib, con a e b reali, che quindi vale $a^2 + b^2$.

Se si calcola il commutatore si trova

$$[\hat{\alpha},\ \hat{\beta}] = [\hat{x},\ \hat{p}] = i\hbar, \tag{8.15}$$

poichè i valori medi $\overline{x}$ e $\overline{p}$ sono numeri e quindi commutano con qualsiasi operatore. Quindi si ha

$$(\psi \mid [\hat{\alpha},\ \hat{\beta}] \mid \psi) = (\psi \mid i\hbar \mid \psi) = i\hbar. \tag{8.16}$$

Infine si ha

$$(\triangle x)^2(\triangle p)^2 \geq \frac{1}{4} \mid (\psi \mid \{\hat{\alpha},\ \hat{\beta}\} \mid \psi) \mid^2 + \frac{\hbar^2}{4}. \tag{8.17}$$

Infine si ha

$$\triangle x \triangle p \geq 1/2\hbar, \tag{8.18}$$

dove l'uguale vale <u>se e solo se</u> si ha simultaneamente

$$\hat{\alpha} \mid \psi) = \gamma\hat{\beta} \mid \psi), \tag{8.19}$$

con γ costante, e

$$(\psi \mid \hat{\alpha}\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha} \mid \psi) = 0. \tag{8.20}$$