

Meccanica Quantistica

Marco Militello

Indice

1	La crisi della fisica classica	2
1.1	Corpo nero	2
1.2	Effetto fotoelettrico	2
1.3	Effetto Compton	2
1.4	Spettri atomici	3
2	Interferenza e diffrazione onde elettromagnetiche	4
3	La polarizzazione della luce	6
4	De Broglie	8
5	Il principio di indeterminazione	10
6	L'equazione di Schrodinger	11
6.1	Equazione di Schrodinger per una particella libera	11
6.2	Equazione di Schrodinger per un potenziale arbitrario $V(x)$	13
7	Conservazione locale probabilità ed equazione di continuità	15
8	Considerazione sugli operatori: parte I	17
9	Potenziali indipendenti dal tempo e stati stazionari	18
10	Proprietà soluzioni in 1 dimensione	19
11	Considerazioni sugli operatori: parte II	20
12	I postulati della meccanica quantistica	21
13	Richiami spazi di Hilbert	24

Capitolo 1

La crisi della fisica classica

Concetti incompatibili con la fisica classica, che non si riescono a spiegare. Per fisica classica si intende

1. meccanica newtoniana
2. termodinamica fisica statistica classica
3. elettromagnetismo e le leggi di Maxwell
4. relatività ristretta

1.1 Corpo nero

Universalità: stesso spettro di emissione. Basi termodinamiche \rightarrow Kirchoff.

1900 Planck: giunge a risultato giusto, ma partendo da principi sbagliati

$$g(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Ottiene questa relazione grazie a fit dei dati sperimentali; aggiusta i parametri: si ottiene per la prima volta h , la costante di Planck

$$h = 6.6 \times 10^{-34} J \cdot s \quad (1.1)$$

ha la stessa dimensione di un momento angolare

1.2 Effetto fotoelettrico

1905 Einstein

Proposta di Einstein che spiega l'effetto: scambio di energia come multiplo di $h\nu \rightarrow$ QUANTI DI RADIAZIONE.

Nel grafico dell'energia massima in funzione della frequenza, Millikan misurò la pendenza della retta che risultò essere $\frac{h}{e}$. Si continuava però a pensare che l'energia si propagasse nel continuo, mentre durante le interazioni ci fossero scambi a pacchetti. Questa idea viene abbandonata con l'effetto Compton

1.3 Effetto Compton

Raggi-x su un metallo; $E_m \gg E_{legame}$: in questo modo gli elettroni sono visti come liberi.

$$E^2 - p^2 c^2 = m^2 c^4$$

se $v=c$ allora $m=0$. Quindi

$$p^2 c^2 = E^2 = (h\nu)^2 \Rightarrow p = \frac{h\nu}{c}$$

Esperimento

Tratto fotone come particella con $\begin{cases} E = h\nu \\ p = \frac{h\nu}{c} \end{cases}$

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \sin(\theta))$$

onda elettromagnetica non completamente descritta dalle leggi di Maxwell

$\frac{h}{m_e c} \simeq 2.4 \times 10^{-12} m$: lunghezza d'onda di Compton per l'elettrone \Rightarrow ha la dimensione di una lunghezza.
1926 Lewis: assegna nome ai fotoni

1.4 Spettri atomici

Spettro solare ha delle righe nere: radiazione viene assorbita dallo strato esterno del sole e poi viene diffusa, quindi ci arriva meno intensa \Rightarrow righe nere. *He* scoperto grazie allo spettro solare.

1897: scoperta elettrone

Modelli atomici \rightarrow Rutherford: però non riesce a spiegare spettri atomici

Emissione e assorbimento non sono un continuo

Bohr: Energia quantizzata

$$\nu_{mn} = (E_m - E_n) \frac{1}{h}$$

ma non dà alcun tipo di spiegazione

$$m_e v r = n \hbar \quad \text{momento angolare è multiplo intero di } \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Capitolo 2

Interferenza e diffrazione onde elettromagnetiche

Luce descrivibile con fenomeni ondulatori.

Esperimento doppia fenditura: metto uno schermo a una distanza $L \gg \lambda$ dalle fenditure. In ogni punto ho che $I \neq I_1 + I_2$, ma ho che

$$I = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2 \neq |\vec{E}_1|^2 + |\vec{E}_2|^2$$

La differenza di fase vale $d \sin(\theta)$; se la differenza di fase vale $n \frac{\lambda}{2}$ allora ho interferenza distruttiva. Il primo punto di buio si ha per

$$\theta = \frac{n \lambda}{2 d} \text{ con } n = 1$$

Se prendo una lampadina gialla (580 nm) da 100 W, allora vengono emessi $\sim 10^{20}$ fotoni al secondo. Cosa succede se abbasso intensità fino ad avere emissione di un fotone al secondo? L'esperimento della doppia fenditura porta allo stesso risultato precedente; però se ripeto di nuovo l'esperimento la posizione di ogni singolo fotone è diverso, anche se la figura che si viene a creare porta allo stesso risultato. Allora devo introdurre una trattazione probabilistica: posso solo dare distribuzione probabilità

Se chiudo una delle due fenditure non osservo alcuna figura di interferenza: il fotone "sente" la presenza di entrambe le fenditure. Ma con chi interferisce il fotone? Da che fenditura passa?

Esperimenti per capire da che fenditura sia passato il fotone distruggono la figura di interferenza \Rightarrow misura microscopica disturba il fenomeno.

Risultati esperimento:

1. Fotone colpisce schermo in un punto ben preciso \Rightarrow deposita tutta la sua energia $h\nu$
2. Con pochi eventi lo schermo sembra riempirsi in maniera casuale; non sappiamo esattamente dove andrà un fotone, ma possiamo dire dove si sono addensati maggiormente \Rightarrow PROBABILITÀ
3. Se chiudo una fenditura sparisce figura di interferenza: fotone con $\lambda \ll d$ "sente" le 2 fenditure; ogni tentativo di capire da quale fenditura passi il fotone distrugge la figura di interferenza \rightarrow disturbo con la misura. La misura su un sistema microscopico lo può disturbare in maniera significativa.

In fisica classica, date le condizioni iniziali posso completamente determinare il moto di una particella; invece non posso determinare moto di un fotone: fotone ha una certa probabilità di colpire lo schermo proporzionale all'intensità $I(x)$ [probabilità che fotone finisca in un punto preciso dello schermo]

Dualismo onda-particella

In alcuni esperimenti è più facile interpretare come particella altre volte come onda; la vera natura è l'elettrodinamica quantistica

1. La radiazione elettromagnetica si comporta come un flusso di particelle
2. Previsioni sul comportamento sono solo probabilistiche
3. In un certo punto \vec{r} dello schermo al tempo $t \rightarrow$ fotone è portato da campo elettrico $\vec{E}(\vec{r}, t)$ che è soluzione delle equazioni di Maxwell; campo elettrico va interpretato come un'ampiezza di probabilità di trovare un fotone in un istante t in un punto \vec{r}

$$|E(\vec{r}, t)|^2 \rightarrow \text{densità di probabilità}$$

4. Le equazioni di MAXwell sono lineari in $\vec{E} \Rightarrow$ vale principio di sovrapposizione: se E_1, E_2 sono soluzioni delle equazioni di Maxwell allora anche $\vec{E} = \lambda_1 \vec{E}_1 + \lambda_2 \vec{E}_2$ con $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ è soluzione delle equazioni di Maxwell. Principio di sovrapposizione è anche quello che ci permette di spiegare interferenza

"Ogni fotone interfesce solo con se stesso"

Capitolo 3

La polarizzazione della luce

La luce ha una direzione privilegiata. Es.: laser, smartphone

Esperimento

Mettere immagine

Interpretazione classica: c'è onda che si propaga lungo z

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0 \vec{e}_p e^{i(kz - \omega t)} + c.c. \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \omega = 2\pi\nu \quad \lambda\nu = c$$

Il campo elettrico è libero, non ci sono cariche $\Rightarrow \nabla \cdot \vec{E} = 0 \rightarrow \vec{k} \cdot \vec{e}_p = 0$. Quindi trasverso rispetto alla direzione di propagazione

$\vec{k} // \vec{z} \Rightarrow$ il vettore di polarizzazione appartiene al piano perpendicolare alla direzione di propagazione

$$I_0 = |E_0|^2$$

Dopo polarizzazione: $\vec{E}'(\vec{r}, t) = E'_0 \vec{e}_x e^{i(kz - \omega t)}$

$$E'_0 = E_0 \cos\theta \Rightarrow I = I_0 \cos^2\theta$$

Dopo polarizzatore passa solo componente parallela \rightarrow interpretazione che viene data.

Adesso faccio esperimento in cui diminuisco intensità fascio fino a che emetta solo un fotone alla volta.

Conseguenze:

1. Rilevatore o vede il fotone o non lo vede
2. Quando vede fotone lo vede tutto \rightarrow tutta energia $h\nu$
3. se $\begin{cases} \theta = 0 \Rightarrow \text{rilevatore vede tutto fotone} \\ \theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow \text{rilevatore non lo vede mai} \end{cases}$

La probabilità con cui vedo fotone è $\cos^2\theta \Rightarrow$ Numero fotoni arrivato $= N_0 \cos^2\theta$. Ogni singolo fotone può essere rappresentato come miscela di 2 stati

- uno stato con probabilità di passare 1: ψ_x
- uno stato con probabilità di passare 0: ψ_y

Questi valori sono mutualmente esclusivi

4. Descrivo come somma di due stati $\psi_p = \psi_x \cos\theta + \psi_y \sin\theta \rightarrow$ inizio principio di decomposizione spettrale

- ψ_x passa con probabilità $|\cos\theta|^2 = \cos^2\theta$

- ψ_y non passa con probabilità $|\sin \theta|^2 = \sin^2 \theta$

Interpretazione probabilistica è sensata perchè $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$

5. Se io ora metto un altro polarizzatore lungo x, tutti i fotoni passeranno perchè ora tutti i fotoni sono ψ_x : dopo polarizzatore lo stato fotone è diventato ψ_x . La misura ha fatto precipitare lo stato del sistema da ψ_p a ψ_x

Capitolo 4

De Broglie

Maxwell introduce andamento ondulatorio della radiazione elettromagnetica, mentre Einstein ipotizza andamento corpuscolare. De Broglie nel 1923 introduce ipotesi andamento ondulatorio elettroni.

Onda $\rightarrow \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t)$; per essere invariante secondo Lorentz $(\vec{k}, \omega), (\vec{p}, E)$ diventano tetravettori

$$|\vec{p}| = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar|\vec{k}| \Rightarrow \frac{h}{|\vec{p}|}$$

Ad ogni particella di massa m è associato $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ e quindi un'onda $\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$

Numericamente

1. Elettroni: $m_e = 0.9 \times 10^{-30} \text{ Kg} = 0.511 \text{ MeV} = 0.511 \times 10^6 \text{ eV}$ [$\text{eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ V} \cdot J$]. Un elettrone non relativistico

$$E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} = \frac{123}{\sqrt{V_{\text{olt}}}} \times 10^{-10} \text{ m}(\text{\AA})$$

$\lambda \simeq 1 \text{\AA} \Rightarrow$ comparabile con raggi-x e distanza atomi cristallo

2. Neutroni termici (bassa temperatura termica):

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_n E}} = \frac{h}{\sqrt{2m_n \frac{3}{2} K_B T}} = \frac{30}{\sqrt{T(\text{Kelvin})}} \times 10^{-10} \text{ m}(\text{\AA})$$

3. Granello polvere: $1 \mu\text{m}$ di dimensione

$$v = 1 \frac{\text{mm}}{\text{s}} \quad m = 10^{-10} \text{ Kg} \Rightarrow \lambda = 6.6 \times 10^{-11} \text{\AA}$$

Non posso vederlo per oggetti macroscopici, ma solo a livello microscopico

Esperimento di Davisson-Germer 1927

Fascio di elettroni su un cristallo di Nichel \rightarrow ogni punto come sorgente \Rightarrow nasce figura di interferenza/diffrazione

Esperimento doppia fenditura con elettroni 1950

Esperimento doppia fenditura con elettrone singolo 1974: Merli-Missiroli-Pozzi

1. Elettrone arriva tutto intero; la carica non si sparpaglia sullo schermo

2. È un grande numero di elettroni che dà origine a figura di interferenza
3. Arrivo sullo schermo sembra un arrivo casuale
4. Interpreto come distribuzione di probabilità
5. Se chiudo una fenditura \Rightarrow sparisce figura interferenza
6. Ogni tentativo di capire da quale fenditura sia passato l'elettrone distrugge la figura di interferenza
7. Cade il concetto di traiettoria

Per conservazione del momento \rightarrow durante interazione con lo schermo c'è trasferimento di momento

Capitolo 5

Il principio di indeterminazione

Traiettoria \rightarrow determinare posizione e velocità della particella istante per istante \Rightarrow determino procedura di misura

Per determinare da quale fenditura sia passata la mia particella pongo uno schermo (1 fenditura), ma particella forma figura di diffrazione al passaggio nella fenditura

Facendo un'analisi degli ordini di grandezza, per una particella che passa da una fenditura di larghezza Δy , con una lunghezza d'onda λ , che forma un angolo θ si ha che

$$\Delta p_y \simeq p\theta = p \frac{\lambda}{\Delta y} = \frac{h}{\Delta y}$$

ottengo così il principio di indeterminazione di Heisenberg

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \simeq h \quad (5.1)$$

più voglio determinare la posizione (minuisco Δy) più aumenta l'intervallo Δp_y ; cade così il concetto di traiettoria.

Questa è un'approssimazione: significato completamente diverso da quello che ricaveremo esattamente

Principio di indeterminazione è l'effetto della perturbazione causata dallo strumento di misura \rightarrow perturbazione ha ruolo essenziale in meccanica quantistica perchè ha lo stesso ordine di grandezza della mia misura

- Elettrone: oltre a carica e massa ha anche un momento magnetico, che è una proprietà dell'elettrone \Rightarrow spin $(\pm \frac{h}{2})$ [elettrone come piccola calamita]

Capitolo 6

L'equazione di Schrodinger

È ricavata da ipotesi plausibili, ma non è dimostrabile; descrive fenomeni quantistici, ma non relativistici.

Deve contenere:

1. Principio di indeterminazione di Heisenberg \rightarrow incapacità operativa di calcolare traiettoria particella
2. Corretto limite classico \rightarrow quando posso trascurare dettagli quantistici devo riavere fisica classica
3. Equazione lineare per poter sovrapporre soluzioni \Rightarrow principio sovrapposizione. Algoritmo per costruire diffrazione (del tipo $|\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2 \neq |\vec{E}_1|^2 + |\vec{E}_2|^2$) \rightarrow somma coerente di 2 oggetti $\Rightarrow |?|^2$: densità di probabilità
4. Somma coerente richiede lunghezza d'onda \rightarrow ipotesi di De Broglie
5. Per somma coerente non è necessario campo vettoriale; massima semplicità: campi scalari complessi \rightarrow in ogni punto ho bisogno di 2 soli valori, non di 3. Ipotesi valida perchè: $|c_1 + c_2|^2 \neq |c_1|^2 + |c_2|^2$

6.1 Equazione di Schrodinger per una particella libera

Costruzione...

- Particella libera in 1 dimensione
- $f(x)$: campo scalare complesso
- $|f(x)|^2 dx = dP \rightarrow$ probabilità infinitesima di trovare particella tra x e $x + dx \Rightarrow |f(x)|^2$: densità di probabilità
- $\int dP = 1 \rightarrow$ postulato probabilità

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)|^2 = 1$$

- $f(x)$ ampiezza di probabilità (campo quantistico)
- Rappresento particella come pacchetto d'onde molto localizzato; ambito naturale è trasformata di Fourier

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{ikx}$$

Esempio uso gaussiana $g(k) = e^{\alpha(k-k_0)^2}$ che ha come ordine di grandezza della larghezza $\frac{1}{\sqrt{\alpha}}$

$$f(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \quad |f(x)|^2 = \frac{\pi}{\alpha} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}$$

Posso calcolare

$$\begin{cases} \langle x \rangle = \int dx x f(x) \\ \Delta x^2 = \int dx (x - \langle x \rangle)^2 f(x) \end{cases}$$

ottenendo che $\Delta x = \sqrt{\alpha}$ e $\Delta k = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}$ e quindi che

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

In generale si può dimostrare che per qualunque funzione vale che

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

- Se voglio che sia valido De Broglie chiamo: $\hbar k = p \rightarrow k = \frac{p}{\hbar}$

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

che ci rimanda al principio di indeterminazione: la trasformata di Fourier ci dà informazioni sui momenti

- Tutto questo è valido per una particella ad un istante $t = \bar{t} = 0$; devo inserire il tempo: per farlo uso la condizione che il baricentro del pacchetto d'onda soddisfi equazione di Newton \rightarrow posizione classica della particella è il baricentro $\langle x \rangle$ del pacchetto d'onda
- Per un'onda piana qualsiasi vale che $e^{i(kx - w(k)t)}$, ma per le onde elettromagnetiche nel vuoto $w(k) = 2\pi\nu = 2\pi\frac{c}{\lambda} = kc$, quindi

$$e^{ik(x-ct)}$$

ogni singola onda piana si muove con velocità c . Per soddisfare equazioni di Maxwell $f(x, t) \mapsto f(x - ct)$

$$f(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{i(kx - w(k)t)}$$

espandendo attorno a $k_0 \rightarrow w(k) = w(k_0) + (k - k_0) \left(\frac{dw}{dk}\right)_{k_0} + \frac{1}{2}(k - k_0)^2 \left(\frac{d^2w}{dk^2}\right)_{k_0} + \dots$, ponendo $k' = k - k_0$

$$f(x, t) = e^{i(k_0 x - w(k_0)t)} \int dk' g(k') e^{i(x - v_g t)} e^{i\beta t k'^2} \quad v_g = \left(\frac{dw}{dk}\right)_{k_0} \quad \beta = \left(\frac{d^2w}{dk^2}\right)_{k_0}$$

v_g : velocità di gruppo con cui si propaga il centro del pacchetto d'onda.

I pacchetti sono centrati $\rightarrow p_0 = \hbar k_0$

- Impongo equazioni di Newton

$$v_g = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar k_0}{m} \Rightarrow \left(\frac{dw}{dk}\right)_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$$

integrando si ottiene la relazione di dispersione per una particella libera

$$w = \frac{\hbar}{m} \frac{k^2}{2} = \frac{1}{2m\hbar} p^2$$

mettendo insieme

$$f(x, t) = \int dk g(k) e^{i(kx - \frac{\hbar}{2m} k^2 t)} \underbrace{=}_{p=\hbar k} \frac{1}{\hbar} \int dp g(p) e^{\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m} t \right)} \underbrace{=}_{E=\frac{p^2}{2m}} \frac{1}{\hbar} \int dp g(p) e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)}$$

$$\psi(x, t) = \int dp \phi(p) e^{\frac{i}{\hbar} (px - Et)}$$

- Impongo condizione che

$$\int_{-\infty}^{\infty} dV |\psi(x, t)|^2 = 1$$

- Cerco equazione lineare più semplice che soddisfa ψ :

$$\begin{aligned} - \frac{\delta\psi}{\delta t} &= \int dp \Phi(p) \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \\ - \frac{\delta\psi}{\delta z} &= \int dp \Phi(p) \frac{i}{\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \\ - \frac{\delta^2\psi}{\delta x^2} &= \int dp \Phi(p) \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 p^2 e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \end{aligned}$$

$$i\hbar \frac{\delta\psi}{\delta t} = \frac{1}{2m} \int dp \Phi(p) p^2 e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2\psi}{\delta x^2}$$

EQUAZIONI DI SCHRODINGER di 1 particella libera in una dimensione

$$i\hbar \frac{\delta\psi}{\delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2\psi}{\delta x^2} \quad (6.1)$$

Conclusioni:

- equazione lineare del secondo ordine nelle coordinate spaziali e del primo ordine in quelle temporali
- non è un'equazione relativistica
- ψ è una funzione complessa

Commenti gaussiana centrata in $\frac{\hbar k_0}{m} t$

1. Centro si sposta con velocità $v_g = \frac{\hbar k_0}{m}$
2. La larghezza del pacchetto

$$\Delta x = \frac{\alpha}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 \alpha^4}}$$

aumenta con il tempo; con il passare del tempo è sempre più difficile determinare la posizione

3. L'allargamento di Δx per la particella libera non è una caratteristica del solo pacchetto gaussiano: per ogni distribuzione iniziale, se faccio passare un tempo sufficientemente lungo, la larghezza del pacchetto cresce
4. La distribuzione dei momenti non cambia. $e^{-\frac{\alpha^2}{4}(k-k_0)}$ rimane lo stesso, compreso il valore centrale dei momenti $\hbar k_0$. La distribuzione dei momenti non cambia perchè pacchetto è libero, non ci sono forze \rightarrow MOMENTO CONSERVATO

6.2 Equazione di Schrodinger per un potenziale arbitrario $V(x)$

Per particella libera: $E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{\delta\psi}{\delta t} = \int dp \Phi(p) E e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \\ i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2\psi}{\delta x^2} = \int dp \Phi(p) E e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \end{cases}$ Se ho un potenziale $V(x)$ l'energia vale

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

se moltiplico entrambi i membri per $\int dp \Phi(p) E e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$ ottengo

$$i\hbar \frac{\delta\psi}{\delta t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2}{\delta x^2} + V(x) \right] \psi$$

Se generalizzo in 3 dimensioni ottengo l'equazione di Schrodinger in 3 dimensioni

$$i\hbar \frac{\delta}{\delta t} \psi(t, \vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(t, \vec{x}) + V(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) \quad \vec{x} = (x, y, z) \quad \nabla^2 = \frac{\delta^2}{\delta x^2} + \frac{\delta^2}{\delta y^2} + \frac{\delta^2}{\delta z^2}$$

Per avere interpretazione probabilistica voglio che a ogni tempo valga

$$\int d^3x |\psi(t, \vec{x})|^2 = 1$$

dP è la probabilità infinitesima di trovare particella in un punto \vec{x} nel volume di d^3x

Capitolo 7

Conservazione locale probabilità ed equazione di continuità

È vero sempre che vale la seguente relazione?

$$\int d^3x |\psi(t, \vec{x})|^2 = 1$$

Considero l'equazione di Schrodinger

$$i\hbar \frac{\delta}{\delta t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi$$

e ne faccio il complesso coniugato

$$-i\hbar \frac{\delta}{\delta t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^*$$

Prendo l'equazione

$$\frac{\delta}{\delta t} |\psi|^2 = \frac{\delta}{\delta t} \psi^* \psi = \frac{\delta \psi^*}{\delta t} \psi + \psi^* \frac{\delta \psi}{\delta t}$$

sostituendo con ciò che abbiamo ottenuto dalle due equazioni precedenti si ottiene

$$\frac{\delta}{\delta t} |\psi|^2 = \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi + \psi^* V \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \psi \nabla^2 \psi^* - \psi V \psi^* \right]$$

che in definitiva si ottiene

$$\frac{\delta}{\delta t} |\psi|^2 = -\frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \quad (7.1)$$

Ora posso definire \vec{J} , densità di corrente di probabilità

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

calcolo la divergenza di \vec{J}

$$\text{div} \vec{J} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$$

definendo la densità di probabilità ρ

$$\rho = |\psi(t, \vec{x})|^2$$

l'Equazione 7.1 diventa

$$\frac{\delta \rho}{\delta t} + \text{div} \vec{J} = 0 \quad (7.2)$$

Commenti:

1. \vec{J} è reale: $\vec{J}^* = \vec{J}$

2. A meno di interpretazione l' Equazione 7.2 è uguale all'equazione di continuità della carica elettrica: conservazione della carica locale e non globale

Prendo un volume Ω arbitrario ($\delta\Omega$ è la superficie del volume)

$$\frac{\delta}{\delta t} \int_{\Omega} d^3x \rho(t, \vec{x}) = - \int_{\Omega} d^3x \operatorname{div} \vec{J}(t, \vec{x})$$

usando il teorema di Gauss

$$\frac{\delta}{\delta t} \int_{\Omega} d^3x \rho = \int_{\delta\Omega} \vec{J} \cdot d\vec{s}$$

se Ω è tutto lo spazio

$$\int_{\Omega} d^3x |\psi|^2 = \text{finito}$$

affinchè ψ possa essere integrata deve "morire" all'infinito \Rightarrow non c'è \vec{J}

$$\frac{\delta}{\delta t} \int d^3x |\psi(t, \vec{x})|^2 = 0$$

quindi

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3x |\psi(t, \vec{x})|^2 = \text{cost} = 1 \quad \forall t$$

Capitolo 8

Considerazione sugli operatori: parte I

Capitolo 9

Potenziali indipendenti dal tempo e stati stazionari

$$V(t, \vec{x}) \rightarrow V(\vec{x})$$

Potenziale che non dipende dal tempo non implica che $\psi(t, x)$ non dipenda dal tempo. Cerco soluzioni in una famiglia a variabili separabili

$$\psi(t, \vec{x}) = \phi(\vec{x})T(t)$$

$$i\hbar\phi(\vec{x})\frac{\delta T}{\delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m}T(t)\nabla^2\phi(\vec{x}) + V(\vec{x})T(t)\phi(\vec{x})$$

Divido per $\phi(\vec{x})T(t)$

$$i\hbar\frac{1}{T}\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\phi}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi + V\phi\right] = E(cost)$$

$$i\hbar\frac{dT}{T} = E dt \rightarrow \text{integro} \int_{T_i}^{T_f} \int_{t_i}^{t_f}$$

$$T = ce^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad T(0) = c$$

E interpretabile come energia totale del sistema che è costante, a patto che il potenziale non dipenda dal tempo. Esistono stati particolari, che chiamiamo stati stazionari, che dipendono dal tempo con un puro fattore di fase

$$\psi(t, \vec{x}) = \phi(\vec{x})e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

allora $|\psi| = |\phi|$: non dipende dal tempo

Equazione di Schrodinger per gli stati stazionari

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\vec{x}) + V(\vec{x})\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x}) \quad E = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (9.1)$$

Operatore hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad \underbrace{\quad}_{\text{rapp. coord}} \quad = \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})$$

Allora l'equazione di Schrodinger per gli stati stazionari diventa

$$\hat{H}\phi = E\phi$$

Capitolo 10

Proprietà soluzioni in 1 dimensione

$$\hat{H}\phi = E\phi \iff -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad \phi(x) \in L^2(\mathbb{R})$$

con \hat{H} operatore autoaggiunto o hermitiano

$$(g, f) = \int_{-\infty}^{\infty} dx g^* f$$

1. Spettro discreto

- E_n sono reali
- Autofunzioni corrispondenti ad autovalori di E_n diversi sono ortogonali

$$\phi_1, \phi_2 \quad E_1 \neq E_2 \Rightarrow \int dx \phi_1 \phi_2^* = 0$$

- $\hat{H}\phi = E\phi$ ha una sola soluzione per ogni valore di E : gli stati dello spettro discreto non sono degeneri
- ϕ_n dello spettro discreto sono reali
- ϕ_n corrispondente ad autovalore $(n+1)$ -esimo di energia si azzera per n punti finiti di x
- Se $V(x)$ è una funzione pari ($V(x)=V(-x)$) allora gli stati stazionari $\phi_n(x)$ sono o pari o dispari

2. Spettro continuo: le autofunzioni $\notin L^2(\mathbb{R})$, ma possono essere utilizzate per costruire soluzioni fisiche

- Data $\phi_E \rightarrow \hat{H}\phi_E = E\phi_E \Rightarrow \hat{H}$ è limitato
- $\int_{E-\Delta E}^{E+\Delta E} Ec(E)\phi_E(x) \in L^2(\mathbb{R}) \Rightarrow c(E)$ hanno spettro finito

Capitolo 11

Considerazioni sugli operatori: parte II

Considero i due operatori \hat{x} e \hat{p} e una cenerica osservabile classica $A(\vec{x}, \vec{p})$. A livello quantistico abbiamo $A(\hat{x}, \hat{p})$, ma abbiamo un problema: se a livello classico non c'è preferenza su ordine, in meccanica quantistica cosa succede se A contiene px e non xp ?

$$\frac{xp + px}{2} \mapsto \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2}$$

N.B.

1. A noi interessano operatori Hermitiani: $\hat{x}\hat{p}$ non è hermitiano

$$(\hat{x}\hat{p})^+ = \hat{p}^+ \hat{x}^+ = \hat{p}\hat{x} \neq \hat{x}\hat{p}$$

ma

$$\left(\frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2} \right)^+ = \frac{\hat{p}^+ \hat{x}^+ + \hat{x}^+ \hat{p}^+}{2} = \frac{\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p}}{2} = \frac{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}}{2}$$

2. $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$

Capitolo 12

I postulati della meccanica quantistica

Ipotesi meccanica quantistica: ogni sistema descritto da funzione d'onda $\psi(t, \vec{x})$.

Voglio prendere misura di un'osservabile A ; considero tutti i sistemi descritti dalla stessa funzione d'onda $\psi(\vec{x})$

Cosa succede se misuro A ? Generalmente succede che non avrò lo stesso risultato, INDIPENDENTEMENTE dagli errori di misura. Misuro $A_1, A_2, A_3, \dots, A_i$, che possono essere sia valori discreti (per semplicità il caso che analizziamo), sia continui

Mi aspetto che

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dx \psi^*(x) \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) \psi(x)$$

corrisponda al valore classico, quindi

$$\sum_i^N \frac{a_i}{N} \sim \langle \hat{A} \rangle$$

Per lo scarto quadratico medio posso scrivere l'equivalente di quello che otteniamo classicamente

$$(\Delta \hat{A})^2 = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2$$

$$SQM = \int dx \psi^* (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \psi \quad (12.1)$$

Esistono casi in meccanica quantistica in cui, data ψ , ottengo sempre lo stesso risultato di misura?

Se esiste ψ che mi fa ottenere sempre lo stesso risultato, allora $SQM = 0$; ciò significa che esiste uno stato particolare $\bar{\psi}$ che rende nullo l'integrale 12.1

$$(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \bar{\psi}$$

Se esiste una $\bar{\psi}$ per cui la misura è sempre la stessa allora deve valere la seguente relazione

$$\hat{A} \psi_a = a \psi_a \quad \text{EQUAZIONE AGLI AUTOVALORI}$$

NON abbiamo detto che $\{a\}$ siano gli unici valori delle misure

Adesso prendo uno stato generico ψ e faccio una certa misura di un'osservabile; pochissimo tempo dopo faccio di nuovo stessa misura della stessa grandezza: se non lascio evolvere il sistema, mi aspetto di ottenere lo stesso risultato, perchè non ho perturbato il sistema \rightarrow riproducibilità in piccolo

Questa è una ragionevole assunzione, non la posso dimostrare

Se faccio una misura e ottengo il valore a_3 , e subito dopo ottengo lo stesso valore, allora lo stato subito dopo la prima misura si deve essere trasformato nello stato ψ_3 : solo su questo stato ho la certezza di avere di nuovo a_3 . Allora la prima misura deve aver trasformato pesantemente il sistema \rightarrow lo proietta su uno degli autostati ($\psi \mapsto \psi_a$)

SE É COSÍ ALLORA GLI UNICI RISULTATI POSSIBILI DI UNA MISURA SONO GLI AUTOVALORI DELL'OSSERVABILE MISURATA

Commenti:

1. Se ψ generica fosse autofunzione di A (ψ_{a_j}): allora prima misura mi darebbe sempre a_j
2. Se ψ non è autofunzione di A: allora ψ deve precipitare su ψ_{a_j} perchè seconda misura deve essere a_j
3. Le osservabili sono rappresentate da operatori i cui autovalori sono tutti e soli i valori di una misura
4. All'atto della misura funzione precipita su autovettore corrispondente ad autovalore misurato

In maniera imprevedibile precipitiamo su autostato. A priori non possiamo sapere su quale autostato precipito. Possiamo solo e soltanto ottenere i valori a_j

Possiamo prevedere con quale probabilità arriviamo su certo autostato?

Suppongo di fare esperimento su diversi sistemi con valore ψ , per farmi idea statistica di ciò che ottengo

- se ψ coincide con ψ_{a_3} allora $Prob(a_3) = 1$
- se $\psi \simeq \psi_{a_3}$ allora $Prob(a_3) \sim 1$

1. Probabilità devono essere proporzionali a coefficienti di sviluppo in serie della ψ su ψ_{a_i}
2. Deve valere principio di sovrapposizione delle ampiezze

$$\psi = \sum_{i=1}^N c_i \psi_i$$

Per avere interpretazione probabilistica

$$\int dx \psi^* \psi = 1$$

Se gli autovettori fossero ortogonali:

$$\int dx \psi^* \psi = \sum_i \sum_j \int dx c_i^* \psi_{a_i}^* c_j \psi_{a_j} = \sum_i c_i^* c_i \delta_{a_i a_i} = \sum_i |c_i|^2 = 1$$

allora posso interpretare $|c_i|^2$ come probabilità di ottenere a_i . Se ortogonali allora buona congettura che $|c_i|^2$ è una probabilità

Data $\psi = \sum c_i \psi_{a_i}$

$$\int dx \psi_{a_j}^* \psi = \int dx \psi_{a_j}^* \sum c_i \psi_{a_i} = c_j$$

Conseguenze formali:

Se " a_j " sono tutti e soli i valori di misura allora devono essere reali \rightarrow autovettori ortogonali. Esiste classe di operatori che ha sempre autovalori reali \rightarrow spazio di Hilbert con operatori hermitiani o autoaggiunti

I postulati

1. Qualunque stato quantistico è descritto vettore di stato (ket) $|\psi\rangle$ che vive in uno spazio di Hilbert
2. Ad ogni quantità misurabile A è associato operatore \hat{A} che agisce su spazio di Hilbert; \hat{A} è hermitiano ed è chiamato osservabile
3. I soli possibili risultati di una misura di una quantità sono gli autovalori associati ad \hat{A}

4. Supponendo di avere uno spettro discreto e non degenerare, allora quando osservo A su stato normalizzato $|\psi\rangle$

$$P(a_n) = |\langle \psi_{a_n} | \psi \rangle|^2$$

dove ψ_{a_n} è autovettore normalizzato associato ad autovalore a_n dell'operatore \hat{A}

5. Supponendo di avere uno spettro discreto e non degenerare, se faccio misura di A descritto da stato $|\psi\rangle$ e ottengo a_n allora la misura successiva si trova su $|\psi_{a_n}\rangle$ corrispondente ad a_n
6. L'evoluzione temporale $|\psi(t)\rangle$ obbedisce all'equazione di Schrodinger

$$i\hbar \frac{\delta}{\delta t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

$\hat{H}(t)$ osservabile associata all'energia totale del sistema \rightarrow hamiltoniana

Capitolo 13

Richiami spazi di Hilbert

Uno spazio di Hilbert è uno spazio vettoriale, normato (norma segue da definizione prodotto scalare) e completo. Perché usiamo uno spazio di Hilbert?

1. Sovrapposizione di funzioni d'onda voglio che siano funzioni d'onda: spazio lineare

$$\psi_1, \psi_2 \in H \Rightarrow \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \in H \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$$

2. Prodotto scalare è un numero complesso

$$(\phi, \psi) = \langle \phi | \psi \rangle = \int d^3x \phi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x})$$

3. $L^2(\mathbb{R})$ funzioni a quadrato sommabile

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3x |\psi(\vec{x})|^2 < +\infty$$

Proprietà prodotto scalare

- $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*$
- È lineare nel secondo argomento $\Rightarrow \langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle$
- È antilineare nel secondo argomento $\Rightarrow \langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle$

Norma

È un numero reale ≥ 0

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 = ||\psi||^2$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 0 \iff \psi(\vec{x}) = 0$$

Basi ortonormate

1. $|n\rangle$ con $n = 1, 2, \dots$ tale che $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$
2. Trasformate di Fourier, polinomi di Hermite \Rightarrow basi improprie (continue)

Spazio completo

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |n\rangle \quad \psi_n = \langle n|\psi\rangle$$

$$|\phi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n |n\rangle$$

Allora

$$\langle \psi|\phi\rangle = \sum_{n,m} \psi_n^* \phi_n \langle n|m\rangle = \sum_n \psi_n^* \phi_n$$

Notazione di Dirac

Serve qualcosa di più astratto per descrivere lo stato della particella; ad esempio $\psi(\vec{x}), \phi(\vec{p})$ portano stesse informazioni, solo che a volte le coordinate vengono indicate con le x, altre volte con le p $\Rightarrow |\psi\rangle$. Indico lo stato fisico di un sistema con un KET $|\psi\rangle$; allo spazio dei ket associo un BRA $\langle\phi|$ spazio duale: spazio dei funzionali lineare nello spazio di Hilbert, dato $\langle\phi|$ prendo un elemento dello spazio H e ci associo un numero complesso.

Se ho ket

$$|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$$

il suo duale vale

$$\langle \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2| = \lambda_1^* \langle \psi_1| + \lambda_2^* \langle \psi_2|$$

Quindi lo spazio dei ket è lineare, mentre lo spazio dei bra è antilineare

$$\langle \psi|\phi\rangle = \sum_n \psi_n^* \phi_n = (\psi_1^*, \psi_2^*, \dots, \psi_n^*) \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix}$$

Possiamo rappresentare $|\phi\rangle$ con i suoi coefficienti su una data base e li organizziamo in un vettore colonna, mentre rappresentiamo $\langle\psi|$ in un vettore riga. Per passare da $|\psi\rangle$ a $\langle\psi|$ devo fare il trasposto e il complesso coniugato