24.10.22

osservabili compatibili e incompatibili

Supponiamo che 2 operatori abbiano le stesse autofunzioni, ovvero:

$\hat{A}|e_i\rangle = a_i|e_i\rangle$

$\hat{B}|e_i\rangle = b_i|e_i\rangle$

Supponiamo ancora che il sistema si trovi in un autostato ben preciso, $|e_i\rangle$: misurando $\hat{A}$ si trova con certezza $a_i$. Dopo aver fatto la misura, il sistema permane in $|e_i\rangle$, quindi misurando $\hat{B}$ trovi $b_i$ e l'autofunzione rimane ancora $|e_i\rangle$.

Quindi la misura di 2 osservabili una dopo l'altra dà valori precisi a patto che $\hat{A}$ e $\hat{B}$ siano sulla stessa base e la funz. d'onda iniziale sia un autostato $|e_i\rangle$.

Questo vale a prescindere dall'ordine in cui facciamo la misura:

$\hat{B}\hat{A}|e_i\rangle = \hat{B}a_i|e_i\rangle = a_i\hat{B}|e_i\rangle = a_ib_i|e_i\rangle$

$\hat{A}\hat{B}|e_i\rangle = \hat{A}b_i|e_i\rangle = b_i\hat{A}|e_i\rangle = a_ib_i|e_i\rangle$

Questo comporta che $[\hat{A},\hat{B}]|e_i\rangle = 0$, $\forall |e_i\rangle$ della base.

Consideriamo ora il caso in cui A e B non hanno la stessa base:

$\hat{A}|e_i\rangle = a_i|e_i\rangle$

$\hat{B}|e_i'\rangle = b_i|e_i'\rangle$

$|e_i\rangle \neq |e_i'\rangle$

Ripetiamo ora il precedente esperimento, supponendo che lo stato iniziale sia $|e_i\rangle$.

$\hat{A}|e_i\rangle = a_i|e_i\rangle$ l'autostato finale rimane $|e_i\rangle$.

Per poter misurare $\hat{B}$, bisogna decomporre $|e_i\rangle$ sugli autostati di $\hat{B}$:

$|e_i\rangle = \sum_k |e_k'\rangle\langle e_k'|e_i\rangle$

Non sappiamo più che valore di $\hat{B}$ otteniamo! Otterremo un $b_k$ con probabilità $|\langle e_k'|e_i\rangle|^2$.

A questo punto la funzione d'onda è diventata l'autostato di $b_k$, ovvero $e_k'$.

E se misuriamo nuovamente $\hat{A}$? Dovremo decomporre $|e_k'\rangle$ sugli $|e_i\rangle$:

$|e_k'\rangle = \sum_j |e_j\rangle\langle e_j|e_k'\rangle$

Non possiamo prevedere che valore otterremo. Si troverà un $a_j$ con una prob associata $\langle e_j|e_k'\rangle$.

Tutto ciò è formalizzato nel seguente teorema.

TEOREMA -

Condizione necessaria e sufficiente affinché due operatori hermitiani abbiano una base comune è che commutino.

Dim. prima la cond. necessaria. x ipotesi, i 2 op. hanno una base comune:

$\hat{A}|e_i\rangle = a_i|e_i\rangle$

$\hat{B}|e_i\rangle = b_i|e_i\rangle$

Calcoliamo $\langle e_j|[\hat{A},\hat{B}]|e_i\rangle = \langle e_j|AB - BA|e_i\rangle =$

$= (a_j b_j - a_i b_i)\underbrace{\langle e_j|e_i\rangle}_{\delta_{ji}} = 0$

Quindi: $\forall\ |e_i\rangle \Rightarrow [\hat{A},\hat{B}]=0$

La cond. suff. si distingue in 2 casi:

a. degenere

b. non degenere

L'ipotesi è che $[\hat{A},\hat{B}]=0$

b. • $a_i \neq a_j \quad \forall\ i\neq j$ * non degenere

• $b_i \neq b_j \quad \forall\ i \neq j$

Non sappiamo ancora che le basi di $\hat{A}$ e $\hat{B}$ corrispondono.

· $\hat{A}|e_i\rangle = a_i|e_i\rangle$

$0 = \langle e_i|[\hat{A},\hat{B}]e_k\rangle = \langle e_i|\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}|e_k\rangle = \underbrace{(a_i - a_k)}_{a_i \neq a_k\ *}\langle e_i|\hat{B}|e_k\rangle$

$a_i|e_i\rangle$ $\quad a_k|e_k\rangle$

poiché comm. nullo

Otteniamo allora che $\langle e_i|\hat{B}|e_k\rangle = 0$ se $i\neq k$.

$\langle e_i|\hat{B}|e_k\rangle = \delta_{ik} B_{ii}$

Ciò vuol dire che B su questa base è diagonale $\Rightarrow |e_i\rangle$ è base anche x $\hat{B}$.

□

Questo implica che possiamo scrivere $\hat{B}$ come:

$\hat{B} = \sum_i B_{ii}|e_i\rangle\langle e_i|$

che è la rappresentazione dell'operatore sugli elem. della base

a. degenere

$\hat{A}|e_i\rangle = a_i |e_i\rangle$

$\exists$ un sottoinsieme di ket con dimensione $p_i$: $\{ |e_i^\tau\rangle$, con $\tau = 1, \dots, p_i \}$ che hanno lo stesso valore $a_i \to \overset{\exists\, p_i}{\vee}$ autovettori con lo stesso autovalore.

$\hat{A}|e_i^\tau\rangle = a_i |e_i^\tau\rangle$ con $\tau = 1, \dots, \underbrace{p_i}$ ← potrebbero esserci + autovalori degeneri (ognuno con $p_i$ autovett.)

Anche in questo caso, x ipotesi $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

$0 = \langle e_i^\tau | [\hat{A}, \hat{B}] | e_j \rangle = (a_i - a_j) \langle e_i^\tau | \hat{B} | e_j \rangle$

- se $a_i \neq a_j$ vedi caso precedente
- se $a_i = a_j$, ovvero se $e_j \in \{ e_i^\tau \}$:

$0 = \langle e_i^\tau [\hat{A}, \hat{B}] e_i^{\tau'} \rangle = (a_i - a_i) \langle e_i^\tau | \hat{B} | e_i^{\tau'} \rangle$

Gli autostati di $\hat{A}$ non sono necessariamente autostati di $\hat{B}$. Ci mettiamo allora nel sottospazio dei $\overset{p_i}{\vee}$ autovettori con stesso autovalore (autovett. degeneri) e costruiamo una comb. lineare degli $|e_i^\tau\rangle$ che diagonalizza $\hat{B}$ in questo sottospazio. $\hat{A}$ rimane diagonale per qualsiasi combinazione che consideriamo.

Prendiamo la mat $p \times p$ costituita dagli elementi $\langle e_i^\tau | \hat{B} | e_i^{\tau'} \rangle$, con $\tau, \tau' = 1 \dots p$

Diagonalizzo la matrice (sempre diag. perché $\hat{B}$ op. hermitiano) sugli $|e'^{\tau}_i\rangle$ t.c. $\hat{B}|e'^{\tau}_i\rangle = b_i |e'^{\tau}_i\rangle$.
↖ comb. degli $|e_i^\tau\rangle$

Abbiamo allora trovato una base che diagonalizza sia $\hat{A}$ che $\hat{B}$ $\square$

<u>visualizzazione grafica</u>

b. caso non degenere

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} a_1 & & 0 \\ & a_2 & \\ 0 & & \ddots \end{bmatrix} \qquad \hat{B} = \begin{bmatrix} b_1 & & 0 \\ & b_2 & \\ 0 & & \ddots \end{bmatrix}$$

a. caso degenere

blocco non diagonalizzato sulla base usata

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} a_1 & & & & \\ & a_2 & & & \\ & & \underline{a_3} & & \\ & & & \underline{a_3} & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \qquad \hat{B} = \begin{bmatrix} b_1 & & & \\ & b_2 & & \\ & & \begin{bmatrix} x & x \\ x & x \end{bmatrix} B_3 & \\ & & & b_4 \\ & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

Essendo $\hat{B}$ hermitiano gli elementi sulla diagonale sono reali e $b_{ij} = b_{ji}^*$, ovvero gli elem. off-diagonal sono complessi coniugati gli uni degli altri.

Costruendo una comb. lineare riusciamo a diagonalizzare $B_1$:

$$B_1 = \begin{bmatrix} b_1' & 0 \\ 0 & b_1' \end{bmatrix}$$

E A continua ad essere diagonale.

<u>notazione</u>

Dati 2 operatori $\hat{A}$ e $\hat{B}$ che commutano, il ket viene identificato dagli $a_i$ e $b_j$:

- $\hat{A} \mid a_i\, b_j \rangle = a_i \mid a_i b_j \rangle$
- $\hat{B} \mid a_i\, b_j \rangle = b_j \mid a_i\, b_j \rangle$

I $b'_j$ trovati dalla diagonalizzazione di $B_1$ sono diversi tra loro?

Se alcuni autoval. sono uguali, allora conoscere il valore di $a_i$ e $b_j$ non è sufficiente x conoscere l'autostato.

ci sono k autovalori legati a $b_j$

Si cerca allora un terzo operatore $\hat{C}$ che commuti simultaneamente con $\hat{A}$ e $\hat{B}$:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] = 0$$

Etichettiamo allora l'autovettore come $\mid a_i b_j c_k \rangle$ affinché l'autostato risulti <u>univocamente definito</u>.

Una volta trovati tutti gli operatori necessari x fare ciò si dice che si ha <u>RISOLTO</u> la <u>DEGENERAZIONE</u>.

Tutti gli operatori usati sono contemporaneamente diagonali sulla base usata.

Il compito fondamentale della MQ è quindi quello di ricercare il SET COMPLETO* di OSSERVABILI che COMMUTANO per potere porre un LABEL a ogni autostato in modo che esso sia UNIVOCAMENTE IDENTIFICATO

→ complete set of commuting observables

* aggiungendo un'altra oss. che commuta con tutte quelle già presenti, il set è completo se questa oss. è funzione di quelle già presenti nel set.

Per dare una descrizione completa di un sistema, ovvero a dare la max info possibile, dobbiamo determinare il # max di oss. indipendenti e che commutano tra di loro.

Questa è detta OSSERVAZIONE MASSIMA: dato uno stato $|a_i b_j c_k d_\ell \dots\rangle$, misurare $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D}, \dots$ riporterà con certezza i risultati $a_i, b_j, c_k, d_\ell, \dots$

Per fare la ricerca del set si osserva l'hamiltoniano e le simmetrie del problema.

## evoluzione temporale del valor medio di un'osservabile

Consideriamo un'operatore $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p}, t)$ e il generico stato $|\psi(t)\rangle$. Il valore medio sarà:

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \int d^3x \, \psi^*(x,t) \, \hat{A}\left(\hat{x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, t\right) \psi(x,t)$$

e sarà un numero t-dependent. La dipendenza dal tempo arriva sia dall'operatore che dalla funzione d'onda. Per notazione scriviamo il valore medio come:

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

Allora la derivata sarà:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle (t) = \left( \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} | \frac{d}{dt} \psi(t) \rangle$$

$*$

$\psi$ è noto in avanti deve soddisfare S:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

Da essa si ricava:

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | = \langle \psi | \hat{H}^*$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle (t) = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | \left[ \hat{A}(t) \hat{H}(t) - \hat{H}(t) \hat{A}(t) \right] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

$$\boxed{\frac{d\langle \hat{A}\rangle(t)}{dt} = \underbrace{\frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle}_{\text{valor medio del commutatore}} + \underbrace{\left\langle\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right\rangle}_{\text{val. medio della deriv.}}} \quad (*)$$

· limite classico e teorema di Ehrenfest

Consideriamo una part. senza spin in un potenziale stazionario, $V(\hat{\vec{x}})$. L'hamiltoniana sarà:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{x}})$$ non dipende esplicitamente dal tempo!

Applichiamo $(*)$ a $\hat{\vec{x}}$ e $\hat{\vec{p}}$.

• $\frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{x}}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\underbrace{\hat{\vec{x}}}_{\hat{x}\text{ e }V(\hat{x})\text{ commutano}},\hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{\vec{x}},\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\right]\right\rangle = \frac{1}{i\hbar 2m}\langle\hat{\vec{p}}[\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}}]+[\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}}]\hat{\vec{p}}\rangle$

$\hat{x}$ non dip. da $t$

• $[x_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}$

$$= \frac{1}{m}\langle\hat{\vec{p}}\rangle$$

• $\frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{p}}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\vec{p}},\hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\vec{p}},V(\hat{\vec{x}})]\rangle =$

$\hat{p}$ non dip. da $t$

• $[\hat{p}, f(\hat{x})] = -i\hbar f'(x)$

$$= -\langle\vec{\nabla}V(\hat{\vec{x}})\rangle$$

teorema di Ehrenfest

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{x}}\rangle &= \frac{1}{m}\langle\hat{\vec{p}}\rangle\\ \frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{p}}\rangle &= -\langle\vec{\nabla}V(\hat{\vec{x}})\rangle\end{aligned}} \quad (1)$$

Possiamo ora combinare le equazioni:

$$\rightarrow m\frac{d^2}{dt^2}\langle \hat{x}\rangle = -\langle \vec{\nabla} V(\hat{\vec{x}})\rangle \qquad (2)$$

Nel limite classico:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\vec{x}_{cl}(t) = \frac{1}{m}\vec{p}_{cl} \\ \frac{d}{dt}\vec{p}_{cl}(t) = -\vec{\nabla} V(\underbrace{\vec{x}_{cl}}_{\text{valutato nella pos. della part.}}) \end{cases} \rightarrow m\frac{d^2}{dt^2}\vec{x}_{cl} = -\vec{\nabla} V(\vec{x}_{cl}) \qquad (3)$$

Commenti

i. (1) e (2) non sono banali, in quanto abbiamo ricavato l'eq. di $\mathcal{S}$ a partire da una particella libera. Quindi aver trovato eq. che ricordano il limite classico ci rincuora ♥

ii. In realtà (1) e (2) sono molto diverse da (3).

Avevamo def. $x_{cl}$ come il baricentro della funz d'onda:

$$\bar{x}_{cl} = \langle \hat{x}\rangle = \int d^3x\, |\psi|^2\, \hat{x}$$

(Consideriamo 1D, vale anche in generale)

$$(2):\quad \left\langle \frac{dV}{dx}\right\rangle$$

$$\neq$$

$$(3):\quad \frac{dV(\langle x\rangle)}{d\langle x\rangle}$$

Definiamo $F(x) = -\frac{dV(x)}{dx}$. Quando (1), (2) e (3) coincidono?

$$\langle F(x)\rangle \stackrel{?}{=} F(\langle x\rangle)$$

In mecc. quantistica queste sono oggetti diversi! $\langle F(x)\rangle$ è un integrale, $F(\langle x\rangle)$ è la funz. valutata in 1 punto. Espandiamo attorno al val. centrale:

$$F(x) = F(\langle x\rangle) + (x-\langle x\rangle)F'(\langle x\rangle) + \frac{1}{2}(x-\langle x\rangle)^2 F''(\langle x\rangle) + \dots$$

Affinché le due coincidano, occorre che siano trascurabili le derivate di ordine $\geq 2$:

$$\langle F(x)\rangle = \underbrace{\langle F(\langle x\rangle)\rangle}_{\int|\psi|^2 F(\langle x\rangle) = F(\langle x\rangle)} + \underbrace{\langle (x-\langle x\rangle)\rangle F'(\langle x\rangle)}_{0} = F(\langle x\rangle) + 0 + \dots$$

Se ciò succede allora (2) e (3) corrispondono.

ciò succede se l'incremento della forza risulta trascurabile rispetto al valore della forza calcolata nel punto medio.

→ (1) e (2) soddisfano il lim. classico x forze lentamente variabili sulle dimen. del pacchetto d'onda.