

## Capitolo 3

# Formalismo della Meccanica quantistica

Nei capitoli precedenti abbiamo imparato a considerare un sistema quantistico come caratterizzato da uno *stato* descritto da una *funzione d'onda* che si richiede contenga tutte le informazioni disponibili sul sistema in quello stato. Tuttavia, procedendo con l'indagine, ci siamo imbattuti nel principio di sovrapposizione, che caratterizza fortemente gli stati di un sistema come elementi di uno spazio vettoriale. La caratterizzazione di questo spazio e degli operatori che agiscono su di esso per produrre le osservabili fisiche porta l'attenzione verso la definizione e le proprietà degli spazi di Hilbert, quali strumenti fondamentali per formulare in modo completo i concetti di base della Meccanica quantistica (nel seguito abbreviata MQ). Essi sono ampiamente illustrati nelle dispense di Metodi Matematici allegate a questo corso, che si consiglia di leggere prima di affrontare questo capitolo.

"A theory with mathematical beauty is more likely to be correct than an ugly one that fits some experimental data."

Paul A.M. Dirac (1902-1984)

Dirac gave general formulation of quantum mechanics, and his relativistic equation for the electron had profound and long-lasting consequences. (Photo Ramsey & Muspratt, 1934.)

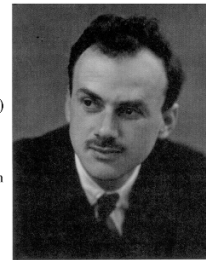


Figura 3.1: *Paul Adrien Maurice Dirac* (1902 - 1984)

### 3.1 Richiami di Meccanica classica hamiltoniana

Sia dato un sistema fisico a  $N$  gradi di libertà, descritto classicamente da coordinate generalizzate lagrangiane  $q = (q_1, \dots, q_N)$  e da una lagrangiana  $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$  e quindi,

introdotti i momenti coniugati  $p = (p_1, \dots, p_N)$

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}$$

da una hamiltoniana

$$H(p, q, t) = p \cdot \dot{q} - \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)$$

per la quale le equazioni del moto classico si scrivono

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad , \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

Ricordiamo la definizione di parentesi di Poisson di due grandezze  $f(p, q, t)$  e  $g(p, q, t)$

$$\{f, g\}_P = \sum_i \left( \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right) = -\{g, f\}_P \quad (3.1)$$

tali che

$$\{q_i, p_j\}_P = \delta_{i,j}$$

e con le quali è possibile scrivere l'evoluzione temporale di una qualunque grandezza fisica come

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\}_P + \frac{\partial f}{\partial t}$$

In un sistema isolato, cioè non soggetto a forze esterne, sia la lagrangiana che l'hamiltoniana non dipendono esplicitamente dal tempo, perciò  $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ . Ciò implica che anche  $\frac{dH}{dt} = 0$ , poiché ovviamente  $\{H, H\}_P = 0$  e quindi l'hamiltoniana (energia totale del sistema) si conserva. Inoltre, ogni quantità  $F$  non esplicitamente dipendente dal tempo avrà un'evoluzione temporale data da  $\frac{dF}{dt} = \{H, F\}_P$  e se inoltre ha parentesi di Poisson nulle con l'hamiltoniana è una quantità conservata del sistema  $\frac{dF}{dt} = 0$ .

## 3.2 Postulati della MQ

Nel seguito riassumiamo tutti i fatti scoperti finora su un sistema quantistico in un insieme coerente di postulati che stanno alla base del formalismo della teoria della MQ.

**Definizione.** Un **raggio** in uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  è una classe di equivalenza di vettori che differiscono l'uno dall'altro per una costante arbitraria non nulla  $\alpha \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$  moltiplicativa:

$$|\psi\rangle \simeq \alpha |\psi\rangle$$

### Postulato n.1: descrizione degli stati di un sistema

*A ciascun sistema fisico quantistico si fa corrispondere uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  complesso e separabile. A ciascun stato del sistema si fa corrispondere, a un fissato tempo  $t$ , un raggio in  $\mathcal{H}$ .*

Lo stato dipende in generale dal tempo  $t$ , anche se per non appesantire la notazione indicheremo questa dipendenza solo quando strettamente necessario.

Normalmente indicheremo lo stato con un vettore appartenente al raggio. Nel caso questo vettore non sia normalizzato a 1, lo si potrà sempre normalizzare dividendolo per la sua norma

$$|\check{\psi}\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\|\psi\|}$$

sempre che  $\|\psi\| < \infty$ . Vedremo in seguito come trattare stati non normalizzabili in cui  $\|\psi\| = \infty$ , che in linea di principio non fanno parte rigorosamente di  $\mathcal{H}$ , che è uno spazio normato.

Da questo postulato discende immediatamente la forma tradizionale del *principio di sovrapposizione*, cioè che se un sistema può stare in uno stato  $|\psi_1\rangle$  e anche in uno stato  $|\psi_2\rangle$ , esso può stare anche in ogni stato che sia combinazione lineare  $\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$ , con arbitrari coefficienti complessi  $\alpha, \beta$ .

Gli stati di un sistema corrispondono dunque a vettori normalizzati e la fase complessiva del vettore non ha in generale senso fisico:  $|\psi\rangle$  e  $e^{i\alpha}|\psi\rangle$ , dove  $|e^{i\alpha}| = 1$ , descrivono lo stesso stato. La fase relativa nella sovrapposizione di due stati è invece rilevante fisicamente: possiamo identificare  $a|\psi\rangle + b|\varphi\rangle$  con  $e^{i\alpha}(a|\psi\rangle + b|\varphi\rangle)$  in quanto appartenenti alla stessa classe di equivalenza, ma non con  $a|\psi\rangle + e^{i\alpha}b|\varphi\rangle$ .

**Definizione.** Un'osservabile è una proprietà di uno stato fisico che in principio può essere misurata.

### Postulato n.2: descrizione delle osservabili fisiche

*Ogni grandezza osservabile  $F(p, q, t)$  del sistema fisico si rappresenta, nel formalismo matematico della MQ, con un operatore lineare hermitiano  $\mathbf{F}$  che opera sullo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  del sistema considerato.*

L'insieme degli autovalori di  $\mathbf{F}$ , detto *spettro*, può essere discreto o continuo, o presentare entrambe le situazioni.

Si noti come in MQ la descrizione di uno stato e delle osservabili su di esso sia ben distinta: lo stato è descritto da un vettore in  $\mathcal{H}$ , mentre le osservabili sono operatori

agenti su tale vettore. In meccanica classica lo stato è invece caratterizzato proprio dalle osservabili, che sono funzioni a valori reali.

L'operatore hermitiano  $F$  soddisfa l'equazione agli autovalori

$$F|k\rangle = f_k|k\rangle$$

in cui gli autovettori  $|k\rangle$  sono tutti tra loro ortogonali e ammette una decomposizione spettrale

$$F = \sum_k f_k E_k = \sum_k f_k |k\rangle\langle k|$$

dove i proiettori  $E_k = |k\rangle\langle k|$  realizzano le proiezioni ortogonali sullo spazio di autovettori appartenenti all'autovalore  $f_k$ . Essi soddisfano le relazioni

$$E_k E_{k'} = \delta_{k,k'} E_k \quad , \quad E_k^\dagger = E_k$$

### Postulato n.3: misura di osservabili fisiche

Una misura è un processo nel quale una informazione relativa allo stato di un sistema fisico è acquisita da un osservatore.

*La misura di una osservabile  $F$  su uno stato  $|\psi\rangle$  generico proietta tale stato su un autovettore  $|k\rangle$  dell'operatore  $F$  e il risultato della misura è il valore del corrispondente autovalore  $f_k$ . L'autovalore  $f_k$  è ottenuto con una probabilità*

$$\mathcal{P}_k = \|E_k|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|E_k|\psi\rangle$$

*ovvero:*

- $\mathcal{P}_k = |\langle k|\psi\rangle|^2$  nel caso di autovalori discreti non degeneri
- $\mathcal{P}_k = \sum_{i=1}^{g_k} |\langle k_i|\psi\rangle|^2$  (dove  $g_k$  è il grado di degenerazione dell'autovalore  $f_k$  e  $\{|k_i\rangle\}$  una base ortonormale dell'autospazio di  $f_k$ ) nel caso di autovalori discreti degeneri
- nel caso di autovalori continui si parlerà invece di densità di probabilità  $\rho(k) = |\langle k|\psi\rangle|^2$  e la probabilità di misurare il sistema con  $F$  compresa tra  $f(k)$  e  $f(k) + dk$  sarà  $\rho(k)dk = |\langle k|\psi\rangle|^2 dk$ .

Da qui si comprende perché si scelgono, per le osservabili fisiche, operatori hermitiani: essi infatti hanno autovalori reali, come ci si aspetta che siano le misure sulle quantità fisiche.

Se poi lo spettro di  $F$  è discreto, si osserverà per la quantità fisica  $F$  un fenomeno di quantizzazione dei valori possibili (come abbiamo visto per esempio con le energie nell'atomo di Bohr).

I numeri complessi  $\langle k|\psi\rangle$  sono spesso detti *ampiezze di probabilità*.

Dopo una misura di  $F$  che abbia dato come risultato l'autovalore  $f_k$  il sistema si trova (**collassa**) nello stato rappresentato dall'autostato  $|k\rangle$ . In caso di degenerazione, il sistema si trova nella proiezione dello stato originario  $|\psi\rangle$  nell'autospazio di  $f_k$ . Di conseguenza, ripetendo la misura immediatamente dopo, si ha la certezza di ottenere  $f_k$  di nuovo, poiché il sistema si è ridotto all'autostato  $|k\rangle$ .

#### **Postulato n.4: Dinamica ed evoluzione temporale degli stati**

La dinamica descrive come uno stato evolve nel tempo. In meccanica quantistica, l'evoluzione temporale di un sistema chiuso è descritta da un operatore *unitario*.

L'evoluzione temporale di uno stato  $|\psi(t)\rangle$  è data dall'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

ove  $H$  è l'operatore hamiltoniano

$$H = H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$$

ottenuto considerando come operatori le osservabili posizione  $q$  e momento coniugato  $p$  nella hamiltoniana del sistema.

Vedremo come questa forma astratta dell'equazione di Schrödinger possa essere ricondotta a quella introdotta per l'evoluzione delle funzioni d'onda nel precedente capitolo.

Una osservazione importante è che gli operatori  $\mathbf{q}_i$  e  $\mathbf{p}_j$  in generale non commutano:  $[\mathbf{q}, \mathbf{p}] \neq 0$ , come avremo modo di vedere. Ciò non è un problema per hamiltoniane del tipo “cinetico” + “potenziale”

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{q})$$

ma in casi più complicati potrebbero apparire prodotti delle  $\mathbf{q}$  per le  $\mathbf{p}$  nell'espressione dell'hamiltoniana. Come definire allora il prodotto quantistico?  $\mathbf{qp}$  oppure  $\mathbf{pq}$ ? È evidente che optare per una scelta piuttosto che l'altra porta a due hamiltoniane

quantisticamente diverse. La soluzione parte dalla constatazione, che sarà chiara quando otterremo le forme esplicite di tali operatori, che nessuno dei due prodotti ora menzionati è hermitiano. Tuttavia, la loro combinazione simmetrica

$$\frac{1}{2}\{\mathbf{q}, \mathbf{p}\} = \frac{\mathbf{qp} + \mathbf{pq}}{2}$$

(ove  $\{\cdot, \cdot\}$  rappresenta l'anticommutatore) lo è ed è indifferente all'ordine di  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{q}$ . Quindi adotteremo la convenzione di intendere eventuali prodotti  $qp$  nella hamiltoniana come simmetrizzati per poter dare un significato quantistico univoco all'operatore  $H$ .

### Postulato n.5: Sistemi composti

Consideriamo un sistema composto di due sottoparti A e B. Sia  $\mathcal{H}_A$  lo spazio di Hilbert degli stati del sistema A e  $\mathcal{H}_B$  lo spazio di Hilbert degli stati del sistema B.

Lo spazio di Hilbert degli stati del sistema AB è allora il prodotto tensoriale  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ . Se il sistema A è preparato nello stato  $|\psi\rangle_A$  e il sistema B è preparato nello stato  $|\phi\rangle_B$ , allora lo stato del sistema composto sarà il prodotto  $|\psi, \phi\rangle_{AB} \equiv |\psi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B$ .

Si ricorda velocemente che il prodotto tensoriale agisce in modo tale che se  $\{|i\rangle_A\}$  denota una base ortonormale per  $\mathcal{H}_A$  e  $\{|\mu\rangle_B\}$  una base ortonormale per  $\mathcal{H}_B$ , allora gli stati  $|i, \mu\rangle_{AB} \equiv |i\rangle_A \otimes |\mu\rangle_B$  sono una base ortonormale per  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ , dove il prodotto interno su  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  è definito da

$${}_{AB}\langle i, \mu | j, \nu \rangle_{AB} = \delta_{i,j} \delta_{\mu,\nu}$$

Soffermendosi sul concetto di spazio degli stati di un sistema composito, si definisce come prodotto tensoriale operatoriale  $\mathbf{M}_A \otimes \mathbf{N}_B$  l'operatore che applica  $\mathbf{M}_A$  al sistema A e  $\mathbf{N}_B$  al sistema B. Nella pratica, l'azione di tale operatore sulla base  $|i, \mu\rangle_{AB}$  è

$$\mathbf{M}_A \otimes \mathbf{N}_B |i, \mu\rangle_{AB} = \mathbf{M}_A |i\rangle_A \otimes \mathbf{N}_B |\mu\rangle_B$$

Un operatore che agisca banalmente sul sistema A, può essere denotato con  $\mathbf{I}_A \otimes \mathbf{N}_B$ , dove  $\mathbf{I}_A$  è l'identità su  $\mathcal{H}_A$ . Analogamente, un operatore che agisca banalmente su B si denota con  $\mathbf{M}_A \otimes \mathbf{I}_B$ .

### Osservazioni

I cinque assiomi enunciati forniscono una descrizione matematica completa della meccanica quantistica. Analizzando però queste asserzioni, emergono due stranezze

lampanti: la prima è che l'equazione per la dinamica (ovvero quella di Schrödinger) sia lineare, mentre dalla meccanica classica ci si è abituati a vedere equazioni non lineari per descrivere l'evoluzione temporale di un sistema. La seconda, molto più "stra- vagante", è che vengano presentati due modi decisamente differenti di cambiare lo stato di un sistema, ovvero l'evoluzione temporale ed il processo di misurazione. Guardando al primo dei due, esso ha chiaramente una forma deterministica, in quanto l'evoluzione temporale descritta da un operatore unitario fa sì che, noto lo stato iniziale  $|\psi(t_0)\rangle$ , la teoria permetta di predire lo stato  $|\psi(t)\rangle$  ad un tempo successivo  $t > t_0$ . Dall'altra parte tuttavia, compare la misurazione, che presenta un aspetto solamente probabilistico: la teoria non ci permette di fare previsioni riguardo i risultati di una misurazione, ma soltanto di assegnare ad essi una probabilità. Chiaramente ciò è fonte di non pochi atteggiamenti dubbiosi nei confronti della meccanica quantistica, che non spiega perché il processo di misura sia soggetto a natura probabilistica (a differenza degli altri processi di evoluzione o alterazione del sistema) ma addirittura introduce il concetto come assioma. Lo stesso A. Einstein fu un agguerrito sostenitore dell'incompletezza della meccanica quantistica e non sembrò mai disposto ad accettarne la vera natura. Tuttavia, i dati sperimentali ad oggi sono nettamente in favore della teoria dei quanti, ed essa riveste un ruolo essenziale nella fisica moderna, costituendone le fondamenta.

### 3.3 Operatori e probabilità di transizione

Nel caso finito dimensionale (si vedano le dispense di Metodi Matematici allegate) è immediato rendersi conto che, data una base ortonormale  $\{|i\rangle\}$ , non necessariamente coincidente con la base di autovalori di  $\mathbf{F}$ , l'espressione

$$F_{ij} = \langle j | \mathbf{F} | i \rangle$$

rappresenta l'elemento  $i, j$ -simo della matrice corrispondente a  $\mathbf{F}$ . Nel caso infinito dimensionale si può procedere analogamente e chiedersi quale sia il significato fisico dei numeri

$$F_{k,k'} = \langle k' | \mathbf{F} | k \rangle$$

Diciamo che l'azione di  $\mathbf{F}$  sullo stato  $|k\rangle$  dà in generale un nuovo stato  $|\psi\rangle = \mathbf{F}|k\rangle$  che si può espandere nella base  $|k\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_k \langle k | \psi \rangle |k\rangle$$

Se ora moltiplichiamo scalarmente per  $\langle k' |$  avremo una misura di quanto lo stato  $|\psi\rangle$  possiede come componente nella direzione  $|k'\rangle$ . Coerentemente con il postulato

della misura allora dovremo interpretare questo dato come la ampiezza di probabilità che una misura di  $F$  su  $|\psi\rangle$  dia l'autovalore corrispondente a  $|k'\rangle$ . Però  $|\psi\rangle$  è stato ottenuto operando con  $F$  su  $|k\rangle$  e quindi possiamo dire equivalentemente che  $F_{k,k'}$  misura la ampiezza di probabilità di transizione dallo stato  $|k\rangle$  allo stato  $|k'\rangle$  per via dell'azione di  $F$ . Più correttamente, siccome non è detto che  $|\psi\rangle$  sia normalizzato, si ha che

$$\mathcal{P}_{k \rightarrow k'} = \frac{|\langle k' | \hat{F} | k \rangle|^2}{\langle k | \hat{F}^\dagger \hat{F} | k \rangle} = \frac{|F_{k,k'}|^2}{\sum_l \langle k | \hat{F}^\dagger | l \rangle \langle l | \hat{F} | k \rangle} = \frac{|F_{k,k'}|^2}{\sum_l |F_{k,l}|^2}$$

da la probabilità che per azione di  $F$  si abbia una transizione dallo stato  $|k\rangle$  allo stato  $|k'\rangle$ . Spesso, con abuso di linguaggio, almeno nel caso di autovalori continui, si parla degli  $F_{k,k'}$  come degli *elementi di matrice* dell'operatore  $F$ .

Questo concetto può essere agevolmente generalizzato dagli autostati a stati generici, semplicemente esprimendoli come combinazioni lineari degli autostati di  $F$ . Si ha quindi che dati due stati generici  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$ , supposti normalizzati, la probabilità di transizione da  $|\psi_1\rangle$  a  $|\psi_2\rangle$  per effetto di  $F$  è

$$\mathcal{P}_{\psi_1 \rightarrow \psi_2} = \frac{|\langle \psi_2 | F | \psi_1 \rangle|^2}{\langle \psi_1 | F^2 | \psi_1 \rangle}$$

### 3.4 Rappresentazione nello spazio delle coordinate

Si consideri l'operatore  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  che applicato a uno stato ne misura la posizione  $\mathbf{x}$ . Gli autovalori di questo operatore sono continui, essendo rappresentati dalle coordinate del sistema e perciò si applicano le osservazioni delle allegate dispense di Metodi Matematici sugli operatori a spettro continuo

$$\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle$$

Gli autostati  $|\mathbf{x}\rangle$  rispettano allora una ortonormalizzazione “a delta”

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

e la relazione di completezza

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| d^3x = 1$$

Uno stato  $|\psi\rangle$  si espande quindi in questa base con coefficienti

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$$



che verranno chiamati *funzione d'onda* del sistema nello stato  $|\psi\rangle$ .<sup>1</sup> L'equazione di Parseval

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3x = 1$$

si legge allora come la richiesta che uno stato fisico sia rappresentato da una funzione d'onda a quadrato sommabile, mentre il prodotto scalare di due stati sarà dato da

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \langle\psi_1|\mathbf{x}\rangle \langle\mathbf{x}|\psi_2\rangle d^3x = \int_{\mathbb{R}^3} \psi_1^*(\mathbf{x}) \psi_2(\mathbf{x}) d^3x$$

Rileggendo la condizione di ortonormalità  $\langle\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle$  come una definizione di funzione d'onda, vediamo che le autofunzioni corrispondenti agli autostati dell'operatore posizione sono le delta di Dirac

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \psi_{\mathbf{x}'}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

che ovviamente non sono funzioni  $\mathbb{L}^2$ , anzi, non sono nemmeno strettamente delle funzioni!

Nella formulazione ondulatoria abbiamo visto come gli operatori rappresentanti certe grandezze potevano essere scritti come operatori differenziali, per esempio  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ , che venivano applicati alla funzione d'onda. Ora ci si chiede quale sia la traduzione di quel linguaggio in quello degli operatori astratti che abbiamo introdotto qui.

In altre parole, dato un operatore hermitiano  $F$  che rappresenta la grandezza fisica  $F$  nello spazio di Hilbert astratto  $\mathcal{H}$ , vogliamo trovare un operatore lineare  $F_{(\mathbf{x})}$  che la rappresenti nello spazio funzionale delle funzioni d'onda, cioè che agisca sulla funzione d'onda  $\psi(\mathbf{x}) = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle$  di un certo stato  $|\psi\rangle$ , resituando un'altra funzione d'onda  $\phi(\mathbf{x}) = \langle\mathbf{x}|\phi\rangle$  che rappresenti lo stato  $|\phi\rangle = F|\psi\rangle$ , ovvero

$$F_{(\mathbf{x})}\psi(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x})$$

Proiettando sulle  $\mathbf{x}$  l'azione dell'operatore  $F$  sullo stato  $|\psi\rangle$  e poi inserendo una relazione di completezza sulle  $\mathbf{x}'$

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}) &= \langle\mathbf{x}|\phi\rangle = \langle\mathbf{x}|F|\psi\rangle = \int \langle\mathbf{x}|F|\mathbf{x}'\rangle \langle\mathbf{x}'|\psi\rangle d^3x' \\ &= \int \langle\mathbf{x}|F|\mathbf{x}'\rangle \psi(\mathbf{x}') d^3x' \end{aligned}$$

---

<sup>1</sup>Continuiamo qui a ignorare, per ora, l'evoluzione temporale degli stati, che tratteremo più avanti.

ovvero

$$\boxed{F_{(\mathbf{x})}\psi(\mathbf{x}) = \int \langle \mathbf{x} | F | \mathbf{x}' \rangle \psi(\mathbf{x}') d^3 x'} \quad (3.2)$$

L'operatore  $F_{(\mathbf{x})}$  così ottenuto sembrerebbe in generale essere un operatore integrale *non-locale*, ovvero tale che per conoscere la sua azione su  $\psi(\mathbf{x})$  dovrei conoscerne gli elementi di matrice su tutto lo spazio  $\mathbb{R}^3$ . Tuttavia, spesso tali elementi di matrice risultano proporzionali a una delta di Dirac, il che equivale a dire che per conoscere l'azione di  $F_{(\mathbf{x})}$  su  $\psi(\mathbf{x})$  basta in realtà conoscere cosa accade a  $\psi(\mathbf{x})$  nell'intorno del punto  $\mathbf{x}$ .

Ciò equivale a richiedere che l'operatore  $F_{(\mathbf{x})}$  sia **locale**, cioè che  $\phi(\mathbf{x})$  in un certo punto  $\mathbf{x}_0$  sia determinata dall'azione di  $F_{(\mathbf{x})}$  dalla sola conoscenza di  $\psi(\mathbf{x}_0)$  e da un numero finito di sue derivate in  $\mathbf{x}_0$ , in altre parole che si tratti di un operatore differenziale, in cui compaiono solo operazioni nell'intorno di un certo punto e non in altri punti distanti dello spazio. Questa richiesta, che appare comunque ragionevole anche in un contesto non-relativistico, è cruciale nell'impostazione di una meccanica (classica o quantistica) relativistica, per garantire la causalità e il mantenimento dell'ordinamento temporale degli eventi.

Chiediamoci ora, anche come esempio illustrativo di quanto appena detto, che forma abbia l'operatore  $\mathbf{x}$  stesso quando agisce nello spazio delle funzioni d'onda, cioè quale sia l'espressione per  $\mathbf{x}_{(\mathbf{x})}$ . Ricordando che  $|\mathbf{x}\rangle$  è autovettore di  $\mathbf{x}$  con autovalore  $\mathbf{x}$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{(\mathbf{x})}\psi(\mathbf{x}) &= \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle \psi(\mathbf{x}') d^3 x' = \int \mathbf{x}' \langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle \psi(\mathbf{x}') d^3 x' \\ &= \int \mathbf{x}' \psi(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^3 x' = \mathbf{x} \psi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Quindi nello spazio delle configurazioni l'operatore posizione è moltiplicativo

$$\boxed{\mathbf{x}_{(\mathbf{x})} = \mathbf{x}}$$

### 3.5 Rappresentazione nello spazio degli impulsi

Analogamente possiamo definire l'operatore  $\mathbf{p}$  corrispondente all'impulso  $\mathbf{p}$  della meccanica classica. Converrà, anziché l'impulso  $\mathbf{p}$  direttamente, usare il vettore d'onda  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ . I suoi autostati

$$\mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle = \mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle$$

rispettano anch'essi una normalizzazione a delta e una relazione di completezza

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad , \quad \int |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| d^3k = 1 \quad (3.3)$$

Si può definire una funzione d'onda nello spazio degli impulsi (o più precisamente dei vettori d'onda) come

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k} | \psi \rangle \quad (3.4)$$

ma la cosa interessante è capire il legame tra questa e la usuale funzione d'onda nello spazio delle coordinate. Introducendo nella (3.4) un insieme completo di autostati ortonormali dell'impulso, usando la loro relazione di completezza, si ottiene

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k} | 1 | \psi \rangle = \int \langle \mathbf{k} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle d^3x$$

Ora,  $\langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x})$  è la funzione d'onda usuale rappresentante lo stato  $|\psi\rangle$ , mentre  $\langle \mathbf{k} | \mathbf{x} \rangle$  è il complesso coniugato della funzione d'onda di uno stato avente numero d'onda ben definito  $\mathbf{k}$ . Questa, secondo l'ipotesi di De Broglie, è l'onda piana

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle$$

Per capire qual è l'espressione di tale funzione d'onda riscriviamo la condizione di ortogonalità (3.3) inserendo una relazione di completezza per gli stati  $|\mathbf{x}\rangle$

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \int \langle \mathbf{k} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{k}' \rangle d^3x = \int \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) d^3x$$

e compariamola con la richiesta che  $\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ . Ricordano la rappresentazione integrale della delta tridimensionale

$$\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} d^3x$$

vediamo subito che possiamo identificare le funzioni d'onda a un certo tempo fissato, diciamo  $t = 0$ , con

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}}$$

e assumeremo queste come le autofunzioni dell'impulso (a tempo, per ora, fissato a  $t = 0$ ). Abbiamo ritrovato così le onde piane in questo formalismo più generale.

Si noti che una funzione d'onda di uno stato qualunque si può sviluppare nelle onde piane

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \psi \rangle d^3 k = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{\psi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d^3 k$$

da cui si vede che la funzione d'onda  $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$  nello spazio degli impulsi è la trasformata di Fourier (v. app.??) di quella  $\psi(\mathbf{x})$  nello spazio delle coordinate e viceversa. In particolare le autofunzioni delle coordinate  $\psi_{\mathbf{x}'}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  si scrivono, nello spazio degli impulsi come antitrasformate di Fourier

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{x}'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} d^3 x = \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}}$$

Come si rappresenta l'operatore impulso nello spazio delle coordinate? Applicando la formula (3.2)

$$\mathbf{k}_{(\mathbf{x})} \psi(\mathbf{x}) = \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} | \mathbf{x}' \rangle \psi(\mathbf{x}') d^3 x'$$

e inserendo un set completo di autostati  $|\mathbf{k}'\rangle$

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{(\mathbf{x})} \psi(\mathbf{x}) &= \iint \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle \psi(\mathbf{x}') d^3 x' d^3 k' \\ &= \iint \mathbf{k}' \langle \mathbf{x} | \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle \psi(\mathbf{x}') d^3 x' d^3 k' \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \iint \mathbf{k}' e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \psi(\mathbf{x}') d^3 x' d^3 k' \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \iint (-i \nabla_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} ) \psi(\mathbf{x}') d^3 x' d^3 k' \\ &= -i \nabla_{\mathbf{x}} \int \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') d^3 x' = -i \nabla_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

per ottenere

$$\mathbf{k}_{(\mathbf{x})} = -i \nabla_{\mathbf{x}}$$

ovvero

$$\boxed{\mathbf{p}_{(\mathbf{x})} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{x}}}$$

Per finire, calcoliamo il commutatore tra l'operatore impulso e l'operatore coordinata<sup>2</sup>

$$\begin{aligned} [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j]\psi(\mathbf{x}) &= x_i(-i\hbar\partial_j)\psi(\mathbf{x}) - (-i\hbar\partial_j)(x_i\psi(\mathbf{x})) \\ &= -i\hbar x_i\partial_j\psi(\mathbf{x}) + i\hbar\delta_{i,j}\psi(\mathbf{x}) + i\hbar x_i\partial_j\psi(\mathbf{x}) \\ &= i\hbar\delta_{i,j}\psi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

perciò

$$\boxed{[\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j}}$$

Più in generale, in un sistema descritto da coordinate generalizzate  $q_i$  e momenti coniugati  $p_i$  avremo

$$\mathbf{p}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}$$

e

$$[\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j}$$

Se confrontiamo con l'espressione classica delle parentesi di Poisson

$$\{q_i, p_j\}_P = \delta_{i,j}$$

ne ricaviamo il suggerimento che gli operatori quantistici si comportino come le variabili classiche corrispondenti a patto di sostituire le parentesi di Poisson con i commutatori

$$\{\cdot, \cdot\}_P \rightarrow -\frac{i}{\hbar}[\cdot, \cdot]$$

### 3.6 Ampiezze di transizione

Abbiamo visto che le ampiezze di transizione tra due stati dovute all'azione di un operatore sono date da

$$F_{\psi_1, \psi_2} = \langle \psi_2 | \mathbf{F} | \psi_1 \rangle$$

Nello spazio delle coordinate  $\mathbf{x}$  questo si traduce nel calcolo di un integrale sulle corrispondenti funzioni d'onda. Infatti, inserendo come al solito opportuni set completi

---

<sup>2</sup>Omettiamo qui i pedici  $(\mathbf{x})$  per non appesantire la notazione:  $\mathbf{p}_{(\mathbf{x})}$  e  $\mathbf{x}_{(\mathbf{x})}$  sono indicati semplicemente con  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{x}$ . D'ora in poi i pedici indicanti lo spazio su cui l'operatore è realizzato saranno usati solo in presenza di ambiguità, altrimenti sarà sottinteso sempre che la quantità fisica indicata è un operatore realizzato nello spazio delle coordinate.

di  $|\mathbf{x}\rangle$

$$\begin{aligned} F_{\psi_1, \psi_2} &= \iint \langle \psi_2 | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{F} | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \psi_1 \rangle d^3x d^3x' \\ &= \int \psi_2^*(\mathbf{x}) \left[ \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{F} | \mathbf{x}' \rangle \psi_1(\mathbf{x}') d^3x' \right] d^3x \end{aligned}$$

L'espressione tra parentesi quadre è esattamente la (3.2) e quindi

$$F_{\psi_1, \psi_2} = \int \psi_2^*(\mathbf{x}) \mathbf{F}_{(\mathbf{x})} \psi_1(\mathbf{x}) d^3x$$

Per esempio, volendo calcolare l'ampiezza di transizione da uno stato  $|\psi_1\rangle$  a uno stato  $|\psi_2\rangle$  mediata da un impulso, scriveremo

$$\mathbf{p}_{\psi_1, \psi_2} = \langle \psi_2 | \mathbf{p} | \psi_1 \rangle = -i\hbar \int \psi_2^*(\mathbf{x}, t) \nabla \psi_1(\mathbf{x}, t)$$

### 3.7 Evoluzione temporale

Alle coordinate lagrangiane  $q$  si fa corrispondere un operatore  $\mathbf{q}$  che abbia come autovalori le coordinate stesse, e analogamente ai momenti coniugati  $p$  si fa corrispondere un operatore  $\mathbf{p}$ . Si definisce di conseguenza l'operatore hamiltoniano come

$$\mathbf{H} = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$$

L'equazione (astratta) di Schrödinger postula l'evoluzione temporale di uno stato  $|\psi(t)\rangle$

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \mathbf{H} |\psi(t)\rangle}$$

da cui, poiché  $\mathbf{H}$  è hermitiano ( $\mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger$ ) per i duali

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | \mathbf{H}$$

Calcolando l'evoluzione temporale della norma quadrata

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &= \left( i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | \left( i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right) \\ &= -\langle \psi(t) | \mathbf{H} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \mathbf{H} | \psi(t) \rangle = 0 \end{aligned}$$

vediamo che essa si conserva nel tempo. La normalizzazione di uno stato quantistico è perciò un processo indipendente dal tempo. Uno stato normalizzato a un certo istante, rimane normalizzato per tutta l'evoluzione temporale del sistema quantistico.

D'altro canto lo stato

$$|\dot{\psi}(t)\rangle \equiv \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle$$

è pure esso uno stato dello spazio di Hilbert, perciò possiamo introdurre il concetto di *operatore di evoluzione temporale*, cioè di un operatore che, preso lo stato  $|\psi(t_0)\rangle$  a un istante  $t_0$  lo trasformi in un altro stato  $|\psi(t)\rangle$  all'istante successivo  $t$

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

che soddisfi, ovviamente, alla condizione iniziale

$$\mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1}$$

e che abbia la proprietà di conservare la norma

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\mathbf{U}^\dagger(t, t_0)\mathbf{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

e perciò sia unitario

$$\mathbf{U}^\dagger(t, t_0)\mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{1}$$

Se si considera l'evoluzione temporale da un certo istante  $t_1$  a  $t_2$  e poi da  $t_2$  a  $t_3$  si avrà da un lato

$$|\psi(t_3)\rangle = \mathbf{U}(t_3, t_2)|\psi(t_2)\rangle = \mathbf{U}(t_3, t_2)\mathbf{U}(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle$$

e dall'altro

$$|\psi(t_3)\rangle = \mathbf{U}(t_3, t_1)|\psi(t_1)\rangle$$

da cui si ottiene una importante proprietà di *concatenazione* dell'evoluzione temporale

$$\mathbf{U}(t_3, t_2)\mathbf{U}(t_2, t_1) = \mathbf{U}(t_3, t_1)$$

Inoltre si può mostrare che  $\mathbf{U}$  trasforma in se stesso tutto lo spazio di Hilbert su cui è definito (matematicamente si dice che  $\mathbf{U}$  è chiuso).

Se inseriamo questo operatore nell'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt}\mathbf{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \mathbf{H}\mathbf{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

abbiamo l'equazione operatoriale

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{H} \mathbf{U}(t, t_0) \quad (3.5)$$

che, integrando da  $t_0$  a  $t$ , nel caso l'hamiltoniana abbia una dipendenza *esplicita* dal tempo

$$i\hbar \int_{t_0}^t \frac{d}{dt'} \mathbf{U}(t', t_0) dt' = \int_{t_0}^t \mathbf{H}(t') \mathbf{U}(t', t_0) dt'$$

fornisce

$$\mathbf{U}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathbf{H}(t') \mathbf{U}(t', t_0) dt'$$

Nel caso di hamiltoniana indipendente dal tempo (ovvero di sistema non soggetto a forze esterne, altrimenti detto *sistema isolato*) l'equazione differenziale operatoriale (3.5) può essere formalmente integrata

$$\mathbf{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}}$$

da cui vediamo che l'operatore  $\mathbf{U}$  dipende in realtà solo dalla differenza  $t - t_0$  e quindi l'evoluzione di un sistema isolato è invariante per traslazioni dell'asse temporale.

Detto  $t_0 = 0$  l'istante iniziale in cui prepariamo il sistema in uno stato  $|\psi_0\rangle$ , possiamo scrivere

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}t} |\psi_0\rangle$$

che appare come una soluzione (formale) dell'equazione differenziale vettoriale di Schrödinger.

### 3.8 Equazione di Schrödinger nello spazio delle coordinate

Moltiplichiamo l'equazione di Schrödinger astratta per  $\langle \mathbf{x} |$  a sinistra

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{H} | \psi(t) \rangle$$

Nel membro di sinistra riconosciamo subito la funzione d'onda

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle$$



mentre nel membro di destra dobbiamo inserire un set completo di autostati  $|\mathbf{x}'\rangle$  in modo da ottenere

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \langle \mathbf{x} | H | \mathbf{x}' \rangle \psi(\mathbf{x}', t) d^3x$$

che, ricordando la (3.2) fornisce

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = H_{(\mathbf{x})} \psi(\mathbf{x}, t)$$

cioè proprio l'equazione di Schrödinger tradizionale sulle funzioni d'onda nello spazio delle coordinate, dove

$$H_{(\mathbf{x})} = H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = H(-i\hbar \nabla, \mathbf{x})$$

che per una particella non relativistica in un potenziale  $V(\mathbf{x})$  si legge

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

come già visto a suo tempo.

Per un sistema a  $N$  gradi di libertà descritto da coordinate lagrangiane  $q_i$  e momenti coniugati  $p_i$  la generalizzazione è immediata

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = H \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, q, t \right) \psi(q, t)$$

Abbiamo così dimostrato l'equivalenza della formulazione astratta della MQ qui illustrata con la originale formulazione a funzioni d'onda proposta da Schrödinger nel 1926.

### 3.9 Valori medi e scarti quadratici medi

Definiamo **valor medio** di una osservabile  $F$ , rappresentata da un operatore hermitiano  $F$ , sullo stato  $|\psi\rangle$  la quantità

$$\langle F \rangle = \frac{\langle \psi | F | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

<sup>3</sup>Il valor medio è una operazione lineare

$$\langle aF + bG \rangle = a\langle F \rangle + b\langle G \rangle$$

---

<sup>3</sup>Si noti che il valor medio è una operazione su un operatore  $F$  dipendente dallo stato  $|\psi\rangle$  su cui agisce. Sarebbe più corretto indicarlo con  $\langle F \rangle_\psi$ , ma per non appesantire la notazione, faremo ricorso a tale scrittura solo in caso di ambiguità.

ma si ponga attenzione che il valor medio di una potenza non è la potenza del valor medio, per esempio

$$\langle F^2 \rangle \neq \langle F \rangle^2$$

Accanto al valor medio di un insieme di valori, è d'uso definire lo **scarto quadratico medio** come la misura dell'incertezza con cui il valor medio è determinato

$$\Delta F = \sqrt{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}$$

Ci chiediamo se esistono stati sui quali ripetute misure di  $F$  danno sempre lo stesso risultato  $f$ , che ovviamente sarà in questo caso identificabile con  $\langle F \rangle$  e per le quali quindi si può azzerare lo scarto  $\Delta F$ . Perché ciò si verifichi deve essere

$$(\Delta F)^2 = \langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle = \frac{\langle \psi | (F - f)^2 | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 0$$

L'operatore  $F - f$  è palesemente hermitiano, perciò possiamo applicarlo una volta al ket e una al bra, ottenendo

$$(\Delta F)^2 = \frac{\| (F - f) | \psi \rangle \|^2}{\| \psi \|^2} = 0$$

che implica che lo stato  $(F - f) | \psi \rangle$  ha norma nulla e perciò coincide con il vettore nullo, da cui

$$F | \psi \rangle = f | \psi \rangle$$

Abbiamo dunque provato il fondamentale

**Teorema.** *Una misura di una osservabile  $F$  su un sistema in uno stato  $|\psi\rangle$  fornisce il valore  $f$  con certezza se e solo se  $|\psi\rangle$  è un autostato di  $F$  e  $f$  il suo corrispondente autovalore.*

Sia allora

$$F | k \rangle = f_k | k \rangle$$

l'equazione agli autovalori per  $F$ . Il valor medio come definito sopra fornisce

$$\langle F \rangle = \frac{\sum_{k'} \sum_k c_{k'}^* c_k \langle k' | F | k \rangle}{\sum_{k'} \sum_k c_{k'}^* c_k \langle k' | k \rangle} = \frac{\sum_k f_k |c_k|^2}{\sum_k |c_k|^2} = \sum_k f_k |a_k|^2$$

Se ora richiamiamo la nozione di valor medio in teoria della probabilità

$$\langle F \rangle = \sum_k \phi_k \mathcal{P}_k$$



Figura 3.2: *Duetto per violino e pianoforte: Einstein e Ehrenfest (schizzo di Emilio Segrè)*

ove  $\phi_k$  sono i possibili valori che  $F$  può assumere e  $\mathcal{P}_k$  le corrispondenti probabilità (tali che, ovviamente,  $\sum_k \mathcal{P}_k = 1$ ) notiamo subito il parallelismo tra  $\mathcal{P}_k$  e  $|a_k|^2$ , in perfetta coerenza col postulato della misura.

Nello spazio delle coordinate il valor medio si ottiene dalla formula

$$\langle F \rangle = \frac{\int \psi^*(q, t) F(q) \psi(q, t) dq}{\int |\psi(q, t)|^2 dq}$$

dove  $F(q) = F(\mathbf{p}(q), \mathbf{q}(q), t) = F(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q}, q, t)$ .

### 3.10 Teorema di Ehrenfest

L'evoluzione temporale di qualunque quantità in MQ è dettata dall'equazione di Schrödinger. Questo è vero anche per i valori medi. Calcoliamo perciò

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle F \rangle_\psi &= \left( \frac{d}{dt} \langle \psi | \right) F | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial F}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | F \frac{d}{dt} | \psi \rangle \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi | HF | \psi \rangle + \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | FH | \psi \rangle \end{aligned}$$

e dunque

$$\boxed{\langle \dot{F} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [F, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial F}{\partial t} \right\rangle} \quad (3.6)$$

dove con  $\dot{x}$  indichiamo la derivata temporale di  $x$ .

Tutte le quantità fisiche  $F$  sono, in formulazione hamiltoniana, funzioni delle coordinate  $q$  e dei momenti coniugati  $p$  ed eventualmente del tempo  $t$ . Corrispondentemente, gli operatori quantistici che le rappresentano sono funzioni degli operatori  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{p}$  e di  $t$

$$\mathbf{F} = F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$$

Ricordiamo che una funzione di un operatore può essere definita come il suo formale sviluppo in serie

$$f(\mathbf{q}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \mathbf{q}^n \quad , \quad g(\mathbf{p}) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n \mathbf{p}^n$$

che permette anche di definire, sempre formalmente, la derivata di una funzione di un operatore rispetto all'operatore

$$\frac{d}{d\mathbf{q}} f(\mathbf{q}) = \sum_{n=0}^{\infty} n f_n \mathbf{q}^{n-1} \quad , \quad \frac{d}{d\mathbf{p}} g(\mathbf{p}) = \sum_{n=0}^{\infty} n g_n \mathbf{p}^{n-1}$$

Ovviamente  $[\mathbf{q}, f(\mathbf{q})] = 0$  e  $[\mathbf{p}, f(\mathbf{p})] = 0$  e più in generale

$$\begin{aligned} [\mathbf{q}, f(\mathbf{q})g(\mathbf{p})] &= f(\mathbf{q})[\mathbf{q}, g(\mathbf{p})] \quad , \quad [\mathbf{q}, g(\mathbf{p})f(\mathbf{q})] = [\mathbf{q}, g(\mathbf{p})]f(\mathbf{q}) \\ [\mathbf{p}, f(\mathbf{q})g(\mathbf{p})] &= [\mathbf{p}, f(\mathbf{q})]g(\mathbf{p}) \quad , \quad [\mathbf{p}, g(\mathbf{p})f(\mathbf{q})] = g(\mathbf{p})[\mathbf{p}, f(\mathbf{q})] \end{aligned}$$

Rimangono quindi da calcolare i commutatori  $[\mathbf{q}, f(\mathbf{p})]$  e  $[\mathbf{p}, f(\mathbf{q})]$ . Per fare ciò, occorre conoscere i commutatori tra una coordinata e le potenze dei momenti, e viceversa

$$\begin{aligned} [\mathbf{q}, \mathbf{p}^2] &= \mathbf{p}[\mathbf{q}, \mathbf{p}] + [\mathbf{q}, \mathbf{p}]\mathbf{p} = 2i\hbar\mathbf{p} \\ [\mathbf{q}, \mathbf{p}^3] &= \mathbf{p}[\mathbf{q}, \mathbf{p}^2] + [\mathbf{q}, \mathbf{p}]\mathbf{p}^2 = 2i\hbar\mathbf{p}^2 + i\hbar\mathbf{p}^2 = 3i\hbar\mathbf{p}^2 \\ &\dots\dots \\ [\mathbf{q}, \mathbf{p}^n] &= i\hbar n\mathbf{p}^{n-1} \end{aligned}$$

Quindi il commutatore

$$[\mathbf{q}, g(\mathbf{p})] = \sum_{n=0}^{\infty} g_n [\mathbf{q}, \mathbf{p}^n] = i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} n g_n \mathbf{p}^{n-1} = i\hbar \frac{d}{d\mathbf{p}} g(\mathbf{p})$$

e più in generale

$$[\mathbf{q}, f(\mathbf{q})g(\mathbf{p})] = i\hbar f(\mathbf{q}) \frac{d}{d\mathbf{p}} g(\mathbf{p}) \quad , \quad [\mathbf{q}, g(\mathbf{p})f(\mathbf{q})] = i\hbar \left( \frac{d}{d\mathbf{p}} g(\mathbf{p}) \right) f(\mathbf{q})$$

da cui è possibile mostrare che

$$[\mathbf{q}, F(\mathbf{q}, \mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} F(\mathbf{q}, \mathbf{p})$$

Procedendo analogamente si può far vedere che

$$[\mathbf{p}, \mathbf{q}^n] = -i\hbar n \mathbf{q}^{n-1}$$

e quindi

$$[\mathbf{p}, f(\mathbf{q})] = -i\hbar \frac{d}{d\mathbf{q}} f(\mathbf{q})$$

e più in generale

$$[\mathbf{p}, g(\mathbf{p})f(\mathbf{q})] = -i\hbar \left( \frac{d}{d\mathbf{p}} g(\mathbf{p}) \right) f(\mathbf{q}) \quad , \quad [\mathbf{p}, f(\mathbf{q})g(\mathbf{p})] = -i\hbar f(\mathbf{q}) \frac{d}{d\mathbf{p}} g(\mathbf{p})$$

da cui è possibile mostrare che

$$[\mathbf{p}, F(\mathbf{q}, \mathbf{p})] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} F(\mathbf{q}, \mathbf{p})$$

L'hamiltoniana è funzione di entrambi  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{q}$ :  $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ . Applicando le regole ora trovate alla (3.6) nel caso delle osservabili  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{p}$  stesse si ottiene

$$\langle \dot{\mathbf{q}} \rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right\rangle \quad , \quad \langle \dot{\mathbf{p}} \rangle = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \right\rangle$$

Ricordando le equazioni del moto classiche in forma hamiltoniana

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad , \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

si vede immediatamente come esse siano sostituite, in MQ, da analoghe equazioni per i valori medi. Utilizzando poi le stesse regole di commutazione per una generica grandezza  $F(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$

$$F(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = \sum_{n,m=0}^{\infty} F_{n,m}(t) \mathbf{p}^n \mathbf{q}^m$$

e ricordando la definizione delle parentesi di Poisson (3.1), si perviene alla dimostrazione del cruciale

**Teorema.** (di Ehrenfest). *I valori medi delle osservabili fisiche evolvono nel tempo come le corrispondenti quantità classiche*

$$\boxed{\langle \dot{F} \rangle = \langle \{F, H\}_P \rangle + \frac{\partial \langle F \rangle}{\partial t}} \quad (3.7)$$

Un confronto tra la (3.7) e la (3.6) giustifica, tra l'altro, la già vista regola di quantizzazione

$$\boxed{\{\cdot, \cdot\}_P \rightarrow -\frac{i}{\hbar}[\cdot, \cdot]}$$

### 3.11 Principio di Heisenberg generalizzato

Si considerino due osservabili  $F$  e  $G$  e uno stato  $|\psi\rangle$ , che supponiamo normalizzato a 1, e si definiscano i vettori

$$|f\rangle = (F - \langle F \rangle)|\psi\rangle \quad , \quad |g\rangle = (G - \langle G \rangle)|\psi\rangle$$

Gli scarti quadratici medi di questi due operatori saranno allora

$$(\Delta F)^2 = \langle f|f\rangle \quad , \quad (\Delta G)^2 = \langle g|g\rangle$$

La diseguaglianza di Schwarz ci fornisce

$$(\Delta F)^2(\Delta G)^2 \geq |\langle f|g\rangle|^2$$

Poiché per qualunque numero complesso  $z$  vale la relazione

$$|z|^2 = [(\operatorname{Re} z)^2 + (\operatorname{Im} z)^2] \geq (\operatorname{Im} z)^2 = \frac{(z - z^*)^2}{(2i)^2}$$

prendendo nel nostro caso  $z = \langle f|g\rangle$

$$(\Delta F)^2(\Delta G)^2 \geq \frac{(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)^2}{(2i)^2}$$

Ora

$$\langle f|g\rangle = \langle \psi|(F - \langle F \rangle)(G - \langle G \rangle)|\psi\rangle = \langle FG \rangle - \langle F \rangle \langle G \rangle$$

e analogamente  $\langle g|f\rangle = \langle GF \rangle - \langle G \rangle \langle F \rangle$ . Perciò

$$(\Delta F)^2(\Delta G)^2 \geq \frac{\langle [F, G] \rangle^2}{(2i)^2}$$

da cui la *relazione di Heisenberg generalizzata*

$$\Delta F \Delta G \geq \left| \frac{\langle [F, G] \rangle}{2i} \right|$$

Poiché due operatori hermitiani sono diagonalizzabili simultaneamente se e solo se commutano, questa relazione ci dice subito che due grandezze commutanti potranno essere determinate simultaneamente con la precisione voluta. Tuttavia grandezze non commutanti non potranno essere determinate simultaneamente a meno di una incertezza proporzionale al loro commutatore.

L'incertezza può essere ridotta a zero per entrambi gli operatori solo se essi commutano. Ciò è in sintonia con il fatto che due operatori ammettono la stessa base ortonormale di autovettori se e solo se commutano. Detto in altro modo, due osservabili possono essere misurate contemporaneamente con incertezza piccola a piacere solo se i corrispondenti operatori sono commutanti. La contemporanea diagonalizzabilità di due operatori e la contemporanea misurabilità delle corrispondenti osservabili sono concetti equivalenti.

Se ora consideriamo gli operatori posizione

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$$

e impulso

$$\mathbf{p} = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right)$$

conoscendone il commutatore  $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{i,j}$  possiamo calcolarne la relazione di Heisenberg

$$\Delta x_i \cdot \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{i,j}$$

Più in generale si avrà che per un sistema descritto da coordinate generalizzate  $q_i$  e momenti coniugati  $p_i$  il commutatore è sempre

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{i,j}$$

da cui segue la relazione di indeterminazione

$$\Delta q_i \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{i,j}$$

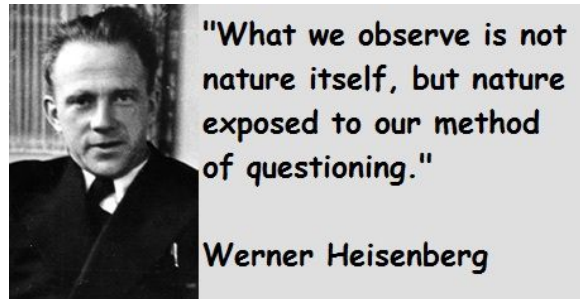


Figura 3.3: *Werner Heisenberg (1901 - 1976)*

È questo il **principio di indeterminazione di Heisenberg**.

Su questo “principio”, che nonostante il nome viene qui dedotto dai postulati della MQ come teorema, si sono spesi fiumi di parole, soprattutto sulle conseguenze per la filosofia della conoscenza. Astenedoci dall’entrare in questo, per altro interessantissimo, problema, vogliamo tuttavia sottolineare come esso metta in crisi il concetto classico di traiettoria, basato sulla conoscibilità contemporanea di posizione e velocità (o equivalentemente, impulso). La traiettoria caratterizzante un moto classico è perciò un concetto da abbandonare in MQ.

Ciò che si può calcolare e confrontare con la misura sperimentale è invece la probabilità che un sistema transisca da un certo stato in un altro per effetto di perturbazioni esterne, tra cui le misure effettuate dall’osservatore. La legge dei grandi numeri assicura che tale probabilità sarà riflessa nella statistica dei risultati di misura quando se ne consideri una notevole quantità, cosa frequente nel mondo quantistico a causa del gran numero di particelle normalmente coinvolte in un processo.

### 3.12 Insieme completo di osservabili commutanti

Una osservabile  $F$  determina, tramite la diagonalizzazione del corrispondente operatore hermitiano  $F$ , un sistema ortonormale di autovettori che, se non c’è degenerazione, descrive tutto lo spazio di Hilbert. Se però esiste qualche autospazio di  $F$  degenerare (cioè di dimensione maggiore di 1), la base ortonormale in questo sottospazio non può essere determinata univocamente da  $F$ . Se  $k$  è il numero quantico associato agli autovalori di  $F$ , esistono in altre parole altri indici, che indichiamo genericamente con  $l$ , che indicano i vettori ortonormali nello spazio di Hilbert completo del sistema, che non sono determinabili da  $F$

$$F|\psi_{k,l}\rangle = f_k|\psi_{k,l}\rangle$$

Un’altra osservabile  $G$  il cui operatore  $G$  commuti con  $F$ , avrà lo stesso sistema di autovettori e sarà misurabile simultaneamente ad  $F$ . Nel caso vi sia degenerazione, può avvenire che  $G$  “risolva” le degenerazioni di  $F$ , ovvero presenti autospazi di dimensione 1 laddove  $F$  presenta degenerazione

$$G|\psi_{k,l}\rangle = g_l|\psi_{k,l}\rangle$$

In questo caso l’ambiguità nella scelta della base di autovettori di  $F$  in un suo autospazio degenerare può essere rimossa adottando la base non ambigua di  $G$  in quel sottospazio, ovvero scegliendo vettori della base che siano contemporaneamente autovettori di  $F$  e di  $G$ . Se questa scelta di diagonalizzazione simultanea di  $F$  e  $G$  porta



a una rimozione di tutte le degenerazioni si dice che il sistema costituito dalle osservabili mutualmente commutanti  $F$  e  $G$  è un **insieme completo di osservabili commutanti** (nel seguito denominato **ICOC**).

Se  $G$  non basta a rimuovere tutte le degenerazioni del sistema, occorrerà cercare un'altra osservabile  $M$  commutante con  $F$  e con  $G$  che sia in grado di distinguere gli autovettori che sono degeneri sia per  $F$  che per  $G$ . In questo caso l'ICOC è composto dall'insieme  $\{F, G, M\}$ . Se nemmeno questa terza osservabile risolve tutte le degenerazioni se ne cercherà una quarta, e così via.

Se una delle osservabili scelte è l'energia, che corrisponde all'operatore hamiltoniano  $H$ , le altre osservabili nell'ICOC devono commutare con  $H$ , il che significa che sono costanti del moto. In questo caso, quindi, la scelta delle osservabili dell'ICOC va effettuata all'interno delle grandezze che siano quantità conservate del sistema classico.

Attenzione a non confondere il concetto di completezza di uno spazio di Hilbert con il concetto ora introdotto di insieme completo di osservabili.

### 3.13 Equazione di Schrödinger stazionaria

Se  $H$  non dipende esplicitamente da  $t$ , le soluzioni dell'equazione di Schrödinger per un sistema a  $N$  gradi di libertà descritti da coordinate lagrangiane  $q_i$  possono essere fattorizzate

$$\Psi(q, t) = \psi(q)\phi(t)$$

e, inserite nell'equazione stessa, danno

$$\frac{i\hbar}{\phi(t)} \frac{d\phi}{dt} = \frac{H\psi(q)}{\psi(q)}$$

Il primo membro dipende solo da  $t$  e il secondo solo dalle  $q$ . Perciò essi possono rimanere uguali al variare di  $t$  o delle  $q$  solo se entrambi sono uguali a una costante, che chiameremo  $E$ . La parte temporale deve perciò soddisfare

$$i\hbar \frac{d\phi}{dt} = E\phi(t)$$

da cui la soluzione

$$\phi(t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

in cui  $A$  è una costante arbitraria. Se vogliamo normalizzare tale parte temporale, basta porre  $A = 1$ , poiché  $|e^{-\frac{i}{\hbar}Et}| = 1$ . La parte spaziale deve invece soddisfare l'equazione

$$H\psi(q) = E\psi(q)$$

cioè l'equazione agli autovalori per l'hamiltoniana  $H$ , da cui vediamo che il significato fisico di  $E$  è quello di energia totale del sistema nello stato  $|\psi\rangle$ . I possibili valori di  $E$ , chiamiamoli  $E_n$  saranno quindi determinati dall'equazione agli autovalori di  $H$ , detta anche equazione di Schrödinger indipendente dal tempo o **equazione di Schrödinger stazionaria**

$$\boxed{H\psi_{n,(k)}(q) = E_n\psi_{n,(k)}(q)} \quad (3.8)$$

dove gli autostati  $\psi_{n,k_1\dots k_N}$  sono etichettati da un indice  $n$  (discreto o continuo) corrispondente agli autovalori  $E_n$  e da un eventuale altro insieme di indici  $(k) = \{k_1, \dots, k_N\}$  corrispondenti a possibili degenerazioni dell'autospazio di  $E_n$ , normalmente detto **livello di energia  $n$ -simo**.

L'ambiguità nella scelta degli  $\psi_{n,(k)}$  può essere rimossa se si identificano altri operatori  $G_1, \dots, G_N$  che commutino con  $H$  (e quindi rappresentino costanti del moto) che costituiscano un ICOC  $= \{H, G_1, \dots, G_N\}$ . Se, accanto alla (3.8) consideriamo anche le equazioni agli autovalori

$$G_i\psi_{n,(k)}(q) = g_{k_i}\psi_{n,(k)}(q)$$

le funzioni d'onda  $\psi_{n,(k)}$  saranno determinate univocamente e identificate dagli indici  $n, k_1\dots k_N$  che vengono frequentemente detti numeri quantici dello stato corrispondente alle  $\psi_{n,(k)}$  che viene anche indicato semplicemente come  $|n, k_1\dots k_N\rangle$ . Inoltre le  $\psi_{n,(k)}$  potranno essere singolarmente normalizzate costituendo così un sistema ortonormale che descrive tutto lo spazio di Hilbert.

La funzione d'onda completa di definita energia  $E_n$ , ovvero corrispondente al livello  $n$ -simo, si scrive quindi

$$\Psi_n(q, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt} \sum_{(k)} A_{n,(k)}\psi_{n,(k)}(q) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\Psi_n(q)$$

dove  $A_{n,(k)}$  sono dei coefficienti della sovrapposizione di autofunzioni normalizzate  $\psi_{n,(k)}$ . Questo stato ha una dipendenza temporale data semplicemente da una fase  $e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}$  che, come sappiamo, è irrilevante nella definizione di uno stato quantistico in quanto ha modulo quadro 1. Infatti la corrispondente densità di probabilità è

$$|\Psi_n(q, t)|^2 = \sum_{(k)} |A_{n,(k)}\psi_{n,(k)}(q)|^2$$

che, come si vede chiaramente, non dipende da  $t$ . Per questo motivo gli stati di definita energia sono detti **stati stazionari**. Si noti che la somma è solo sugli indici di degenerazione  $(k)$  e solo in tal caso la fase che dà la dipendenza temporale di  $\Psi_n$  può essere fattorizzata davanti a tutta la somma.

Un generico stato è la sovrapposizione di autostati di definita energia

$$\Psi(q, t) = \sum_n B_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \Psi_n(q)$$

dove l'indice  $n$  etichetta le possibili energie corrispondenti agli stati stazionari  $\Psi_n(q)$ . Nel caso uno stato sia sovrapposizione di più livelli energetici, le corrispondenti fasi  $e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$  assumono valori diversi (perché diverse sono le  $E_n$ ) e non possono essere fattorizzate. La dipendenza temporale di un tale stato è dunque non banale e lo stato non è stazionario.

### 3.14 Stati quasi stazionari e vita media

Si supponga che, in un sistema isolato, con uno spettro di energie continuo, uno stato abbia energia definita a meno di una incertezza  $\Delta E$ , ovvero costituisca un pacchetto di onde stazionarie

$$\Psi(q, t) = \int_0^\infty C(E) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \Psi_E(q) dE$$

o, a livello di stati ket

$$|\Psi(t)\rangle = \int_0^\infty C(E) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} |E\rangle dE \quad (3.9)$$

ove  $|E\rangle$  rappresentano gli autostati dell'hamiltoniana  $H$ .<sup>4</sup>

$$H|E\rangle = E|E\rangle$$

Supponendo  $|\Psi\rangle$  opportunamente normalizzato, sarà

$$\int_0^\infty |C(E)|^2 dE = 1$$

Gli autostati stazionari  $|E\rangle$  sono ortonormalizzati dalla richiesta

$$\langle E|E'\rangle = \delta(E - E')$$

accompagnata dalla completezza

$$\int_0^\infty |E\rangle \langle E| dE = 1$$

---

<sup>4</sup>Abbiamo qui usato il valore stesso di  $E$  come numero quantico anziché  $n$ , cosa conveniente nel caso continuo.

I coefficienti dello sviluppo  $C(E)$  possono essere pensati come una specie di funzione d'onda nello spazio delle energie per il sistema e vengono dette *funzioni in rappresentazione energia*.  $|C(E)|^2$  darà la distribuzione di probabilità di trovare energia  $E$  in seguito a una misura sullo stato  $|\Psi\rangle$ .

Il valore di aspettazione su  $|\Psi\rangle$  è allora

$$\langle H \rangle = \int E |C(E)|^2 dE \equiv E_0$$

Su un gran numero di misure, otterremo una distribuzione statistica di energie  $E = E_0 \pm \Delta E$ . Quando la dispersione è piccola:  $\Delta E \ll E_0$  si dice che  $|\Psi\rangle$  è uno **stato quasi stazionario**. In tal caso avremo una distribuzione fortemente piccata attorno a  $E_0$ . Assumeremo che tale distribuzione sia lorentziana<sup>5</sup>

$$|C(E)|^2 = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (3.10)$$

Essa viene di solito detta *legge di Breit e Wigner* e può essere ricavata da una funzione in rappresentazione energia dello stato  $|\Psi\rangle$  del tipo

$$C(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{\Gamma}}{(E - E_0) + i\frac{\Gamma}{2}}$$

Si noti come, nel limite di  $\Gamma \rightarrow 0$ , la distribuzione (3.10) tenda a una delta di Dirac

$$\lim_{\Gamma \rightarrow 0} |C(E)|^2 = \delta(E - E_0)$$

producendo una distribuzione di energie infinitamente piccata in  $E_0$ , ovvero uno stato di definita energia (stazionario)  $|\Psi_{E_0}\rangle$ .

Si noti che in una distribuzione lorentziana il valor medio  $\langle H \rangle$  e la varianza  $\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$  divergono. Dunque per definire il valore di aspettazione  $\langle E \rangle$  e l'incertezza  $\Delta E$  non si possono usare le formule tradizionali. Però possiamo ancora definire il valore di aspettazione come la moda o la mediana, entrambe coincidenti e uguali a  $E_0$ . Notiamo inoltre che il parametro  $\Gamma$  ha il significato di semilarghezza della curva lorentziana a mezza altezza e perciò assumeremo  $\Delta E = \Gamma$  come stima della nostra incertezza sulla misura di  $E$ .

---

<sup>5</sup>Ciò si giustifica dall'osservazione che l'intensità delle righe spettrali atomiche decresce dal centro della riga proprio con una legge di tipo lorentziano.

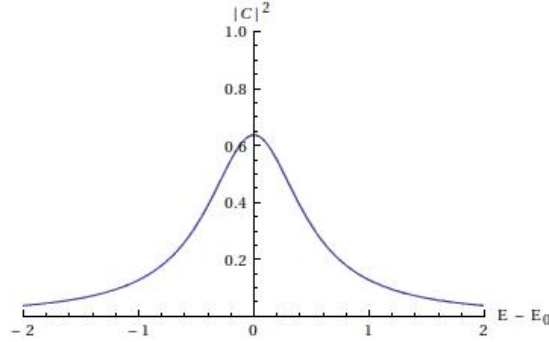


Figura 3.4: *Distribuzione di Breit e Wigner* ( $\Gamma = 1$ )

La dipendenza temporale dello stato quasi stazionario è data dall'integrale (3.9). La probabilità che ha il sistema di trovarsi dopo un tempo  $t$  ancora nello stato  $|\Psi(0)\rangle$  è data da

$$W(t) = |\langle \Psi(t) | \Psi(0) \rangle|^2$$

Calcoliamo dunque l'ampiezza

$$\langle \Psi(t) | \Psi(0) \rangle = \int_0^\infty |C(E)|^2 e^{\frac{i}{\hbar} E t} dE = \frac{\Gamma}{2\pi} \int_0^\infty \frac{e^{\frac{i}{\hbar} E t}}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} dE$$

L'integrale può essere valutato approssimativamente per  $\Gamma \ll E_0$  usando tecniche nel piano complesso (lemma di Jordan) e fornisce

$$\langle \Psi(t) | \Psi(0) \rangle = e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar} t} e^{\frac{i}{\hbar} E_0 t}$$

e la probabilità cercata risulta

$$W(t) = e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} t}$$

La probabilità di permanenza del sistema nel suo stato iniziale decresce dunque col tempo secondo una legge esponenziale. Dopo un tempo

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}$$

tale probabilità è diminuita di un fattore  $\frac{1}{e} \approx \frac{1}{3}$ . Al tempo  $\tau$  così definito viene dato il nome di vita media. Questo perché se il sistema è costituito da un insieme di  $N$  particelle (con  $N$  molto grande) che hanno una probabilità di decadere (cioè transire in un altro stato dopo un tempo  $t$ ) nel tempo  $\tau$  metà delle particelle iniziali saranno decadute. Nel caso dei decadimenti, si assume che la probabilità di decadere di una particella tra un tempo  $t$  e  $t + dt$  è indipendente da  $t$  e ciò implica proprio la forma lorentziana della distribuzione.

### 3.15 Relazione di indeterminazione energia-tempo

La vita media di uno stato è dunque intrinsecamente connessa con la larghezza  $\Gamma$  della distribuzione lorentziana, ovvero con la indeterminazione  $\Delta E$  dell'energia dello stato quasi stazionario

$$\tau \Delta E = \hbar$$

Prendendo la vita media come misura della durata media temporale  $\Delta t$  di uno stato quasi stazionario, abbiamo la relazione

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar$$

che suggerisce un principio di indeterminazione anche per la coppia energia-tempo.

Più formalmente questa relazione può essere ottenuta considerando uno stato  $|\Psi(t)\rangle$  che non sia autostato di  $H$ . Il valor medio dell'energia su questo stato sarà

$$E_0 = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

e non dipende dal tempo se il sistema è isolato. L'energia in questo stato è definita a meno di una indeterminazione

$$\Delta E = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}$$

Sia ora  $F$  una generica osservabile non dipendente esplicitamente dal tempo. Il valor medio  $\langle F \rangle$ , per il teorema di Ehrenfest, si evolve come

$$\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, F] \rangle \quad (3.11)$$

e l'incertezza nella misura di  $F$  è data dallo scarto quadratico medio

$$\Delta F = \sqrt{\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}$$

connesso a quello di  $H$  dalla relazione generale di indeterminazione tra operatori non commutanti

$$\Delta H \Delta F \geq \frac{1}{2} |\langle [H, F] \rangle| \quad (3.12)$$

Combinando le (3.11) e (3.12) si ha

$$\Delta H \Delta F \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle F \rangle \right|$$

Se ora indichiamo con  $\Delta t$  l'intervallo di tempo in cui il valor medio di  $F$  varia di una quantità pari a  $\Delta F$

$$\Delta t = \frac{\Delta F}{\left| \frac{d}{dt} \langle F \rangle \right|}$$

possiamo riscrivere la relazione di indeterminazione come

$$\boxed{\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Questa relazione di indeterminazione può essere interpretata come il tempo  $\Delta t$  che in media può sopravvivere uno stato di un sistema che abbia energia definita con un'incertezza  $\Delta E$ . In MQ può essere violata la conservazione rigorosa dell'energia totale di un sistema isolato di una violazione  $\Delta E$ , ma solo per un tempo minore o uguale a  $\Delta t$ . Per esempio posso creare una coppia virtuale elettrone - positrone dal vuoto, per la quale occorre una energia  $2m_e c^2 \approx 1.022$  MeV, ma tale coppia dovrà annichilirsi e sparire nel vuoto entro un tempo  $\Delta t = \hbar/2\Delta E \approx 3 \cdot 10^{-21}$ s

### 3.16 Parità

Consideriamo ora la trasformazione discreta  $P$  che manda

$$\mathbf{x} \xrightarrow{P} -\mathbf{x}$$

Essa è detta *inversione spaziale* o **parità** ed equivale a scambiare una terna cartesiana destrorsa con una sinistrorsa.

Pensandola come un operatore applicato ad uno stato, vogliamo trovare i suoi autovalori

$$P|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

Applicando però la trasformazione di parità due volte di seguito si ritorna al punto di partenza

$$P^2 = 1 \quad \text{ovvero} \quad P^2|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

D'altro canto

$$P^2|\psi\rangle = \lambda P|\psi\rangle = \lambda^2|\psi\rangle$$

Ne segue che

$$\lambda^2 = 1 \quad \implies \quad \lambda = \pm 1$$

e quindi ci sono solo due autovalori possibili  $\lambda = \pm 1$ .

L'implementazione nello spazio delle coordinate di questo operatore è

$$P_{(\mathbf{x})}\psi(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x})$$

Dunque una qualunque funzione d'onda pari

$$\psi(-\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x})$$

sarà autofunzione di  $P$  con autovalore  $+1$ , mentre una funzione d'onda dispari

$$\psi(-\mathbf{x}) = -\psi(\mathbf{x})$$

sarà autofunzione con autovalore  $-1$ .

È vero anche in questo caso che le autofunzioni sono un insieme completo nello spazio di Hilbert? Sì, perché qui abbiamo uno spazio di Hilbert finito dimensionale di dimensione 2 ed è noto che, data una funzione qualunque  $f(x)$  definita su tutto  $\mathbb{R}$ , da essa possiamo sempre definire una funzione pari  $f_p(x)$  e una dispari  $f_d(x)$  come

$$f_p(x) = \frac{f(x) + f(-x)}{2} = f_p(-x) \quad , \quad f_d(x) = \frac{f(x) - f(-x)}{2} = -f_d(-x)$$

Sommando queste due definizioni si ottiene

$$f(x) = f_p(x) + f_d(x)$$

da cui risulta evidente che ogni funzione può sempre scriversi come la combinazione lineare di una funzione pari e di una dispari.