Esercitazione 01

11 ottobre 2024

Meccanica quantistica: starting pack

Vettori di stato

- Lo stato di un sistema è rappresentato da un vettore in uno spazio di Hilbert $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ normalizzato $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.
- Lo stato del sistema è definito a meno di una fase arbitaria $e^{i\phi}|\psi\rangle$ (gauge).
- Data una base discreta $\{|e_k\rangle\}$ ortonormale $\langle e_k|e_l\rangle = \delta_{k,l}$, lo stato si può esprimere come sovrapposizione

$$|\psi\rangle = \sum_k \psi_k |e_k\rangle ,$$

  e la su rappresentazione in tale base è

$$\underline{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \psi_k = \langle e_k|\psi\rangle .$$

- Per spazi di Hilbert infinito-dimensionali si possono definire anche delle basi continue $\{|x\rangle\}$ di vettori non normalizzabili (quindi non appartenenti allo spazio di Hilbert e non associabili a degli stati fisici) ma che soddisfano

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'), \quad \int dx\, |x\rangle\langle x| = \mathbf{I}.$$

  In questa base i vettori di stato si possono esprimere come

$$|\psi\rangle = \int dx\, \psi(x)|x\rangle ,$$

  e

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle ,$$

  è la rappresentazione del vettore in tale base, detta **funzione d'onda** in x.

Osservabili

Ogni grandezza fisica può essere associata a un operatore Hermitiano $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$.

Operatore posizione L'osservabile posizione $\mathbf{x}$ agisce, nello spazio delle funzioni, come

$$\psi(x) \to x\psi(x) .$$

Ha spettro continuo

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

con autostati $\{|x\rangle\}$ normalizzati nel senso delle distribuzioni

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') .$$

Nella base delle posizioni $\{|x\rangle\}$ l'operatore $\mathbf{x}$ è diagonale

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

Rappresentazione di $|\phi\rangle = \mathbf{x}|\psi\rangle$

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \langle x|\mathbf{x}|\psi\rangle = \int dx'\, \langle x|\mathbf{x}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \int dx'\, x'\langle x|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \\ &= \int dx'\, x'\psi(x')\,\delta(x - x') = x\psi(x) . \end{aligned}$$

Operatore quantità di moto È la variabile coniugata a $\mathbf{x}$, e agisce come

$$\psi(x) \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x),$$

con relazione di commutazione canonica

$$[\mathbf{x},\mathbf{p}] = i\hbar.$$

Ha spettro continuo

$$\mathbf{p}|p\rangle = p|p\rangle,$$

con autofunzioni che soddisfano

$$\langle x|\mathbf{p}|p\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|p\rangle = p\langle x|p\rangle,$$

ossia le onde piane

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{N}e^{i\frac{px}{\hbar}}.$$

Per stabilire il valore della normalizzazione N imponiamo

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x') = \int_{-\infty}^{\infty} dp\ \langle x|p\rangle\langle p|x'\rangle = \frac{1}{N^2}\int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{i\frac{p(x-x')}{\hbar}} = \frac{\hbar 2\pi}{N^2}\delta(x-x'),$$

quindi

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{px}{\hbar}}.$$

Gli elementi di matrice nella base delle posizioni sono

$$\langle x|\mathbf{p}|x'\rangle = -i\hbar\delta(x-x')\frac{d}{dx'} = -i\hbar\delta'(x-x')$$

$$\langle x|\mathbf{p}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'\ \langle x|\mathbf{p}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dx'\,\delta'(x-x')\langle x'|\psi\rangle = -i\hbar\psi'(x).$$

Nella base della quantità di moto, un vettore di stato ha come rappresentazione la trasformata di Fourier della funzione d'onda nelle posizioni

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'\ \langle p|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\, e^{-i\frac{px'}{\hbar}}\psi(x').$$

Nella base delle p l'operatore posizione ha elementi di matrice

$$\langle p|\mathbf{x}|p'\rangle = i\hbar\delta(p-p')\frac{d}{dp'} = i\hbar\delta'(p-p').$$

Trasformazioni canoniche

Sono trasformazioni invertibili che corrispondono formalmente a un cambio di sistema di riferimento

$$\mathbf{S}|\psi\rangle = |\psi'\rangle.$$

Se un operatore $\mathbf{A}$ agisce su un vettore di stato in un certo sistema di riferimento come

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = |v\rangle,$$

e, affinché questa azione sia la stessa per ogni sisteme di riferimento, le trasformazioni canoniche devono agire anche sugli osservabili. Introducendo delle identità si ottiene

$$\mathbf{AS}^{-1}\mathbf{S}|\psi\rangle = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{S}|v\rangle,$$

$$\mathbf{AS}^{-1}|\psi'\rangle = \mathbf{S}^{-1}|v'\rangle,$$

e moltiplicando a destra per $\mathbf{S}$ si ottiene

$$\mathbf{SAS}^{-1}\left|\psi'\right\rangle = \left|v'\right\rangle.$$

Definendo l'operatore nel nuovo sistema di riferimento come

$$\mathbf{A}' = \mathbf{SAS}^{-1},$$

si ottiene quanto voluto

$$\mathbf{A}'\left|\psi'\right\rangle = \left|v'\right\rangle.$$

Le trasfromazioni canoniche conservano le regole di commutazione

$$[\mathbf{A},\mathbf{B}] = \mathbf{C},$$

$$\mathbf{S}\left[\mathbf{A},\mathbf{B}\right]\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{SAS}^{-1}\mathbf{SBS}^{-1} - \mathbf{SBS}^{-1}\mathbf{SAS}^{-1} = [\mathbf{A}',\mathbf{B}'] \Rightarrow [\mathbf{A}',\mathbf{B}'] = \mathbf{C}'.$$

Tra le trasformazioni canoniche quelle che hanno significato fisico diretto sono quelle unitarie

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^{\dagger},$$

perché mantengono invariate le normalizzazioni e i prodotti scalari

$$\langle\psi|\eta\rangle = \langle\psi|\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U}|\eta\rangle = \langle\psi'|\eta'\rangle.$$

Le trasfromazioni unitarie trasfromano gli operatori come

$$\mathbf{A}' = \mathbf{UAU}^{\dagger}.$$

Traslazioni

L' operatore di traslazione in 1D è

$$\mathcal{T}_a = e^{-i\frac{\mathbf{p}a}{\hbar}}.$$

- Esso trasla di a la funzione d'onda

  $$\psi(x) \to \psi(x-a),$$

  come appare chiaro dallo sviluppo

  $$\psi(x-a) = \left(\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\right)\psi(x) = \left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\right)^n\right)\psi(x) = e^{-i\frac{\mathbf{p}a}{\hbar}}\psi(x).$$

- Lo si può vedere anche scrivendo esplicitamente la rappresentazione dello stato traslato e inserendo una completezza espressa nella base degli autostati dell'impulso

  $$\langle x|\,\mathcal{T}_a\,|\psi\rangle \quad = \quad \int dp\,\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle\, e^{-i\frac{pa}{\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\, e^{i\frac{p(x-a)}{\hbar}}\tilde{\psi}(p) = \psi(x-a).$$

- Gli elementi di matrice nella posizione sono

  $$\langle x|\mathcal{T}_a|x'\rangle = \delta(x-x'-a),$$

  ossia l'azione dell'operatore di traslazione sull'autostato della posizione è

  $$\mathcal{T}_a\,|x\rangle = |x+a\rangle.$$

- La traslazione è una trasformazione unitaria poiché $\mathbf{p}a$ è hermitiano

  $$\mathcal{T}_a^{\dagger} = \mathcal{T}_a^{-1}$$

- La traslazione lascia invariato l'impulso perché commuta con esso

  $$\left[\mathcal{T}_a^{\dagger},\mathbf{p}\right] = 0 \Rightarrow \mathcal{T}_a\mathbf{p}\mathcal{T}_a^{\dagger} = \mathbf{p}.$$

- Azione della traslazione sull'operatore di posizione:

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

$$\mathbf{x}\mathcal{T}_a\left|x\right\rangle = \mathbf{x}\left|x+a\right\rangle = (x+a)\left|x+a\right\rangle$$
$$\mathcal{T}_a^\dagger\mathbf{x}\mathcal{T}_a\left|x\right\rangle = (x+a)\,\mathcal{T}_a^\dagger\left|x+a\right\rangle$$

ossia

$$\mathcal{T}_a^\dagger\mathbf{x}\mathcal{T}_a = \mathbf{x}+\mathbf{I}a \Rightarrow \bar{\mathbf{x}} = \mathcal{T}_a\mathbf{x}\mathcal{T}_a^\dagger = \mathbf{x}-\mathbf{I}a.$$

Allo stesso risultato si poteva arrivare anche derivando rispetto ad a

$$\frac{\partial}{da}\bar{\mathbf{x}} = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{T}_a\left[\mathbf{p},\mathbf{x}\right]\mathcal{T}_a^\dagger = -\mathbf{I} \Rightarrow \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x}-\mathbf{I}a$$

- In 3D, le traslazioni lungo le differenti direzioni commutano

$$\mathcal{T}_{\vec{r_0}} = e^{-i\frac{\vec{\mathbf{p}}\cdot\vec{r_0}}{\hbar}} = e^{-i\frac{\mathbf{p}_x x_0}{\hbar}}e^{-i\frac{\mathbf{p}_y y_0}{\hbar}}e^{-i\frac{\mathbf{p}_z z_0}{\hbar}} = \mathcal{T}_{x_0}^{(x)}\mathcal{T}_{y_0}^{(y)}\mathcal{T}_{z_0}^{(z)}.$$

- Tutti gli operatori che commutano con il generatore della traslazione sono invarianti per traslazioni.

Esercizi svolti a lezione

Esercizio 1. Data l'Hamiltoniana

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V\left(\mathbf{x}\right),$$

quali sono le condizioni perché sia invariante per traslazioni generiche o per una traslazione specifica di x_0?

Sol: È invariante per traslazioni generiche solo se $V = cost$. Fissato x_0 essa può essere invariante per traslazioni di questo valore se $V\left(x\right) = V\left(x-x_0\right)$ ossia se è una funzione periodica di periodo x_0. In questo caso, l'Hamiltonianan è invariante per tutte le traslazioni di quantità multiple di x_0.

Esercizio 2. Se $\mathcal{T}_{x_0}\left|x\right\rangle = \left|x+x_0\right\rangle$ quanto vale l'elemento di matrice $\left\langle p'\right|\mathcal{T}_{x_0}\left|p\right\rangle$? come si trasforma l'operatore $\mathbf{xp}$ sotto tale trasformazione? E l'operatore $\mathbf{c} = \mathbf{xp}+\mathbf{px}$?

Sol: Poiché $\mathcal{T}_{x_0} = e^{-i\frac{\mathbf{p}x_0}{\hbar}}$ si ha

$$\mathcal{T}_{x_0}\left|p\right\rangle = e^{-i\frac{px_0}{\hbar}}\left|p\right\rangle,$$

e quindi

$$\left\langle p'\right|\mathcal{T}_{x_0}\left|p\right\rangle = e^{-i\frac{px_0}{\hbar}}\left\langle p'|p\right\rangle = e^{-i\frac{px_0}{\hbar}}\delta\left(p-p'\right).$$

Gli operatori in questione si trasformano come

$$\mathcal{T}_{x_0}\mathbf{xp}\mathcal{T}_{x_0}^\dagger = \mathcal{T}_{x_0}\mathbf{x}\mathcal{T}_{x_0}^\dagger\mathbf{p} = \left(\mathbf{x}-x_0\right)\mathbf{p} = \mathbf{xp}-x_0\mathbf{p},$$

$$\mathcal{T}_{x_0}\mathbf{px}\mathcal{T}_{x_0}^\dagger = \mathbf{p}\mathcal{T}_{x_0}\mathbf{x}\mathcal{T}_{x_0}^\dagger = \mathbf{p}\left(\mathbf{x}-x_0\right) = \mathbf{px}-x_0\mathbf{p},$$
$$\mathcal{T}_{x_0}\mathbf{c}\mathcal{T}_{x_0}^\dagger = \mathbf{c}-2x_0\mathbf{p}.$$

Altri esercizi

Esercizio 3. (Svolto con il prof. Ciuchi) Nella base ortonormale $\left|1\right\rangle$, $\left|2\right\rangle$, $\left|3\right\rangle$ l'operatore $\mathbf{A}$ è rappresentato dalla matrice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

1. L'operatore è hermitiano?

2. Quali sono i suoi autovalori e autovettori?

3. Dati gli stati iniziali
$$|\psi_a\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|3\rangle\,,$$
$$|\psi_b\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|1\rangle\,,$$
quali sono nei due casi i possibili risultati di una misura di $\mathbf{A}$ e con quale probabilità. Qual è lo stato finale dopo la misura.

Sol:

1. Sì $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$
2. L'operatore si può scrivere come $\mathbf{A} = \mathbf{I}_1 \oplus \sigma_2$ quindi gli autovalori sono
$$\lambda_1 = 1,\ \lambda_2 = 1,\ \lambda_3 = -1$$
con autovettori
$$|\alpha_1\rangle = |1\rangle\,,\ |\alpha_2\rangle = \frac{|2\rangle + i\,|3\rangle}{\sqrt{2}},\ |\alpha_3\rangle = \frac{|2\rangle - i\,|3\rangle}{\sqrt{2}}.$$
3. Nella base degli autovettori di $\mathbf{A}$
$$\begin{aligned} |\psi_a\rangle &= \sqrt{\frac{2}{6}}\,(|\alpha_2\rangle + |\alpha_3\rangle) - i\sqrt{\frac{1}{6}}\,(|\alpha_2\rangle - |\alpha_3\rangle) = \\ &= \sqrt{\frac{1}{6}}\left[\left(\sqrt{2} - i\right)|\alpha_2\rangle + \left(\sqrt{2} + i\right)|\alpha_3\rangle\right]. \end{aligned}$$
$$P_1 = P_{-1} = \frac{1}{2},$$
$$|\psi_b\rangle = \sqrt{\frac{2}{6}}\,(|\alpha_2\rangle + |\alpha_3\rangle) + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|\alpha_1\rangle\,,$$
$$P_1 = \frac{2}{3}, P_{-1} = \frac{1}{3}.$$

Esercizio 4. Discretizzare l'operatore$-i\frac{d}{dx}$ riducendolo ad una matrice che agisce in uno spazio di dimensione N. Trovarne autovalori e autovettori. Discutere i possibili modi con cui si può effettuare il limite di $N \to \infty$.

Sol: Consideriamo un intervallo finito $x \in [0, L]$ e discretizziamolo introducendo una suddivisione in Nsottointervali di lunghezza $\Delta = \frac{L}{N}$, i cui estremi rappresentano le posizioni discretizzate $x_0 = 0$, $x_1 = \Delta$, …, $x_k = k\Delta$, ….

- La rappresentazione dello stato sarà quindi un vettore discreto
$$\psi(x) \to \underline{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}.$$
- Imponiamo le condizioni periodiche al contorno $\psi_0 = \psi_N$.
- La derivata discreta è il rapporto incrementale
$$\psi'(x) \to \mathbf{D}\psi_l = \frac{\psi_{l+1} - \psi_{l-1}}{2\Delta},$$
per cui
$$-i\mathbf{D} = \frac{1}{2\Delta}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & \dots & i \\ i & 0 & -i & \dots & 0 \\ 0 & i & 0 & \dots & 0 \\ & & \vdots & & \\ -i & 0 & \dots & i & 0 \end{pmatrix},$$
$$(-i\mathbf{D})_{k,j} = -i\frac{1}{2\Delta}\left(\delta_{k+1,j} - \delta_{k-1,j}\right)$$

- L'Hamiltoniana è invariante per traslazioni discrete, per cui mi aspetto che gli autovettori abbiano tutti lo stesso modulo. Assumo quindi che abbiano la forma

$$\alpha_l^{(k)} = Ae^{ikl\Delta},$$

$$\begin{aligned}\left(-i\mathbf{D}\underline{\alpha}^{(k)}\right)_l &= \frac{-i}{2\Delta}\sum_n \left(\delta_{l+1,n} - \delta_{l-1,n}\right)\alpha_n^{(k)} = \frac{-i\left(Ae^{ik(l+1)\Delta} - e^{ik(l-1)\Delta}\right)}{2\Delta i} = \\ &= \frac{Ae^{ikl\Delta}}{\Delta}\sin k\Delta = \frac{\sin k\Delta}{\Delta}\alpha_l^{(k)} = E_k\alpha_l^{(k)},\end{aligned}$$

- Imponendo che $\alpha_0^{(k)} = \alpha_N^{(k)}$ si ottiene $e^{ik\Delta N} = 1$ ossia

$$k = k_n = \frac{2\pi}{N\Delta}n.$$

La legge di dispersione è quindi

$$E_n = \frac{\sin\frac{2\pi n}{N}}{\Delta}$$

- Limite I: $N \to \infty$, $\Delta \to 0$, $L = N\Delta \to \infty$ (Si allarga il dominio e si rende x continua)

$$k_n \to k,$$

$$\frac{2\pi}{N\Delta} \to dk,$$

$$E\left(k_n\right) \to k.$$

- Limite I: $N \to \infty$, $\Delta \to 0$, $L = N\Delta = cost$ (Il dominio è fisso e x è continua)

$$k_n \to k_n,$$

$$E\left(k_n\right) \to E\left(k_n\right)$$

lo spettro non cambia

- Limite I: $N \to \infty$, $\Delta = cost$, $L = N\Delta \to \infty$ (Si allarga il dominio ma la x rimane discreta)

$$k_n \to k,$$

$$\frac{2\pi}{N\Delta} \to dk,$$

$$E\left(k_n\right) \to E\left(k\right) = \frac{\sin k\Delta}{\Delta}$$

lo spettro diventa continuo ma non cambia la dipendenza da k.