

1 L'Evoluzione Causale in Meccanica Quantistica

Finora abbiamo visto come si descrivono gli stati e le grandezze fisiche di un sistema quantistico a un determinato istante di tempo. Ora vogliamo affrontare il problema di come un sistema quantistico evolve nel tempo. Parleremo di evoluzione causale per intendere che durante l'evoluzione non sono state effettuate misure sul sistema, che lo perturberebbero modificandone l'evoluzione.

Va detto subito che il punto di vista che adotteremo nel descrivere l'evoluzione causale é l'opposto di quello usualmente adottato in fisica classica. In fisica classica gli stati sono caratterizzate dalle condizioni iniziali e dunque non cambiano durante l'evoluzione mentre quelle che evolvono nel tempo sono le grandezze fisiche. Invece in meccanica quantistica, nella presentazione usuale sono gli stati che evolvono nel tempo mentre le grandezze restano costanti nel tempo (a meno che nella loro definizione abbiano una dipendenza esplicita dal tempo). Si può capire questo secondo punto di vista dicendo che gli stati sono legati al sistema fisico in esame, che evolve nel tempo, mentre le grandezze fisiche sono legate agli apparati di misura che si comportano sempre nello stesso modo, (...almeno finché non si rompono), indipendentemente dall'istante in cui vengono adoperati.

Va però anche detto che in M.Q. vi sono diverse formulazioni equivalenti dell'evoluzione causale, che si chiamano visuali. Quella qui presentata é la visuale di Schroedinger. Nella visuale di Heisenberg (che però verrà studiata nel corso di Fisica Teorica del prossimo anno), sono le grandezze fisiche che evolvono mentre gli stati non dipendono dal tempo e coincidono con gli stati iniziali, adottando un punto di vista più simile a quello della fisica classica. Le due visuali sono equivalenti nel senso che i valori medi delle (funzioni delle) grandezze fisiche e i loro spettri sono gli stessi.

Il problema che vogliamo affrontare é dunque il seguente: dato un sistema quantistico che inizialmente al tempo t_0 si trova nello stato descritto dal vettore dello spazio hilbertiano \mathcal{H} , ψ_{t_0} , qual' é lo stato del sistema, ψ_t , all'istante t , assumendo che nell'intervallo di tempo da t_0 a t non si effettuino misure sul sistema ?

1.1 L'Equazione di Schroedinger

Vogliamo ora cercare di dare una risposta euristica a questa domanda discutendo il caso di una particella quantistica *libera*.

Sappiamo che in una teoria ondulatoria si possono costruire pacchetti d'onda a un certo

istante di tempo, t_0 , sovrapponendo onde piane di numero d'onda \vec{k} ,

$$f(\vec{x}) = \int d^3k g(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x})}$$

e se all'onda piana, nel vuoto, di numero d'onda \vec{k} corrisponde la pulsazione $\omega(k)$ il pacchetto evolve nel tempo secondo la legge

$$f_t(\vec{x}) = \int d^3k g(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(k)(t-t_0))} \quad (1)$$

In meccanica quantistica la funzione d'onda rende conto delle proprietà ondulatorie del sistema. Se si tratta di una particella libera, per le relazioni di de Broglie, alla particella di impulso \vec{p} ed energia E corrisponde un'onda di numero d'onda \vec{k} e pulsazione ω tali che

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}; \quad \omega = \frac{E}{\hbar}.$$

Ma per una particella libera

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}.$$

Allora, vista la (1) e le relazioni di de Broglie, è plausibile assumere che, se la funzione d'onda all'istante iniziale (che per comodità assumeremo essere $t_0 = 0$) è

$$\psi_0(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3p \phi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x})}$$

la funzione d'onda all'istante t sia

$$\psi_t(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3p \phi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{p^2}{2m}t)} \quad (2)$$

Consideriamo ora le seguenti derivate parziali della (2) rispetto a t e a \vec{x} :

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_t(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3p \phi(\vec{p}) \left(\frac{-i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{p^2}{2m}t)} \quad (3)$$

$$\vec{\nabla} \psi_t(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3p \phi(\vec{p}) \left(\frac{i\vec{p}}{\hbar} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{p^2}{2m}t)}$$

$$\vec{\nabla}^2 \psi_t(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \int d^3p \phi(\vec{p}) \left(-\frac{p^2}{\hbar^2} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{p^2}{2m}t)} \quad (4)$$

Dalle eq. (3) e (4) segue

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(\vec{x}) = -\hbar^2 \frac{\vec{\nabla}^2}{2m} \psi_t(\vec{x}) \quad (5)$$

Ricordando che in meccanica quantistica l'impulso, in rappresentazione $\{\mathcal{X}\}$, é dato dall'operatore autoaggiunto

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad (6)$$

possiamo riscrivere la (5) nella forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(\vec{x}) = -\frac{P^2}{2m} \psi_t(\vec{x}) = H \psi_t(\vec{x})$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo usato il fatto che per una particella libera l'hamiltoniana é

$$H = \frac{P^2}{2m}$$

A questo punto é naturale estendere quanto trovato per la particella libera a un generico sistema quantistico assumendo

$$i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial t} = H \psi_t \quad (7)$$

dove H é l'operatore hamiltoniano del sistema. La (7) é la famosa equazione di Schrodinger. Per esempio, per una particella in un potenziale $V(\vec{x})$,

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{X}) \quad (8)$$

e la (7), in rappresentazione $\{\mathcal{X}\}$, diventa

$$i\hbar \frac{\partial \psi_t(\vec{x})}{\partial t} = \left(-\hbar^2 \frac{\vec{\nabla}^2}{2m} - V(\vec{x}) \right) \psi_t(\vec{x}) \quad (9)$$

L'assunzione che ha portato alla (7) é del tutto soddisfacente. Infatti

- a) la (7) é una equazione differenziale del primo ordine nella derivata temporale e quindi ci consente di determinare la ψ_t nota la funzione d'onda iniziale, ψ_0 .
- b) é lineare in ψ_t e questo garantisce il principio di sovrapposizione.
- c) la norma di ψ si conserva nel tempo (si vedrá dopo).

1.2 Equazione di continuitá per la (densitá di)probabilitá

Consideriamo il caso della particella quantistica descritta dall'hamiltoniano (8). Moltiplichiamo la (7) per la funzione d'onda complessa coniugata, $(\psi_t(\vec{x}))^*$ e sottraiamo all'equazione cosí ottenuta la sua complessa coniugata. Si trova

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_t(\vec{x})^* \psi_t(\vec{x})) = \psi_t(\vec{x})^* (H \psi_t)_t(\vec{x}) - (H \psi_t)_t(\vec{x})^* \psi_t(\vec{x}) \quad (10)$$

Si noti che se integriamo la (10) su d^3x si ha

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \|\psi_t\|^2 = (\psi, H\psi) - (H\psi, \psi) = 0$$

che mostra che la norma di ψ é costante nel tempo. Ora dividiamo la (10) per la costante $\|\psi_t\|^2$ e sostituiamo ad H la (8) (e la (6)). Si noti che i termini che contengono il potenziale $V(\vec{x})$ si cancellano e dunque, usando l'identitá

$$\psi^*(\vec{\nabla}^2\psi) - \psi(\vec{\nabla}^2\psi)^* = \vec{\nabla} \cdot [\psi^*(\vec{\nabla}\psi) - \psi(\vec{\nabla}\psi)^*]$$

la (10) diventa

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{|\psi(\vec{x})|^2}{\|\psi\|^2} = -\frac{\hbar}{2mi} \vec{\nabla} \cdot \frac{[\psi^*(\vec{\nabla}\psi) - \psi(\vec{\nabla}\psi)^*]}{\|\psi\|^2} \quad (11)$$

Ma

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

é la densitá di probabilitá e se definiamo la corrente di probabilitá mediante la

$$\vec{j}(\vec{x}) = \frac{\hbar}{2mi} \frac{[\psi^*(\vec{\nabla}\psi) - \psi(\vec{\nabla}\psi)^*]}{\|\psi\|^2}$$

la (11) diventa

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}) = 0.$$

Questa é una equazione di continuitá che rappresenta la conservazione locale della probabilitá.

Va però notato che si ottiene una equazione di continuitá nello spazio ordinario a tre dimensioni solo nel caso di sistemi costituiti da una sola particella. Per sistemi di N particelle, la funzione d'onda, in rappresentazione \mathcal{X} , é una funzione modulo quadro integrabile in $L_2(R^{3N})$, e l'equazione di Schroedinger é un'equazione differenziale nel tempo e in $3N$ variabili spaziali. Un procedimento simile al precedente permette anche in questo caso di ottenere un'equazione di continuitá ma ora nello spazio delle configurazioni a $3N$ dimensioni.

1.3 L'operatore di evoluzione temporale

Se le forze sono conservative l'hamiltoniano non ha una dipendenza esplicita dal tempo. In tal caso la (7) puo' essere integrata formalmente e riscritta nella forma

$$\psi_t = e^{-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)} \psi_{t_0} \quad (12)$$

Le equazioni (12) e (7) sono equivalenti nel senso che la (7) si può ricavare dalla (12) (derivando la (12) rispetto a t) e viceversa. Tuttavia la (12) ha il vantaggio sulla (7) di contenere le condizioni iniziali rappresentate dalla ψ_{t_0} ed è più utile per determinare esplicitamente la ψ_t , come vedremo. Si noti che l'operatore

$$U(t - t_0) = e^{-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)} \quad (13),$$

detto *operatore di evoluzione*, è un operatore unitario: $U^\dagger U = U U^\dagger = 1$ ovvero l'aggiunto $U^\dagger(t - t_0)$ coincide con l'inverso: $U^\dagger(t - t_0) = U^{-1}(t - t_0)$. Ne segue immediatamente che, come anticipato, l'evoluzione temporale conserva la norma dei vettori di stato. Infatti $\|\psi_t\|^2 = (\psi_{t_0} U^\dagger(t - t_0), U^\dagger(t - t_0) \psi_{t_0}) = (\psi_{t_0}, \psi_{t_0}) = \|\psi_{t_0}\|^2$.

Si notino anche le seguenti ovvie proprietà di $U(t - t_0)$:

$$U(0) = 1 \quad (14a)$$

$$U(t - t_1)U(t_1 - t_0) = U(t - t_0) \quad (14b)$$

$$U(t_0 - t) = U^\dagger(t - t_0) \quad (14c)$$

e inoltre

$$\frac{d}{dt}U(t - t_1)|_{t_1=t} = \frac{1}{i\hbar}H$$

La (14 a) ci dice che l'op. di evoluzione da t a t è l'identità; la (14 b) ci dice che fare evolvere il sistema da t_0 a t è lo stesso che farlo evolvere da t_0 a t_1 e poi da t_1 a t ; la (14 c) ci dice che l'op. di evoluzione da t a t_0 è l'inverso dell'op. di evoluzione da t_0 a t . Si noti anche che l'operatore di evoluzione, essendo unitario, è limitato e quindi il suo dominio è l'intero spazio hilbertiano \mathcal{H} . [Non è però che questa proprietà sia essenziale per il calcolo di ψ_t perché H , essendo autoaggiunto, ha dominio denso in \mathcal{H} e ciò è sufficiente].

[N.B. Tra parentesi e fuori programma voglio accennare brevemente al caso non conservativo che verrà visto in modo più approfondito l'anno prossimo nel corso di Fisica Teorica. Se il sistema non è conservativo e quindi l'hamiltoniana $H(t)$ dipende esplicitamente dal tempo, esiste in generale ancora un operatore di evoluzione $U(t, t_0)$, unitario, che soddisfa a proprietà simili alle (14 a, b,c) e con lo stesso significato:

$$U(t, t) = 1 \quad (14d)$$

$$U(t, t_1)U(t_1, t_0) = U(t, t_0) \quad (14e)$$

$$U(t_0, t) = U^\dagger(t, t_0) \quad (14f)$$

e inoltre

$$\frac{d}{dt}U(t, t_1)|_{t_1=t} = \frac{1}{i\hbar}H(t) \quad (14g)$$

Allora l'evoluzione causale del sistema é data da

$$\psi_t = U(t, t_0)\psi_{t_0} :$$

Da questa equazione si può ricavare l'equazione di Schroedinger, derivando tale equazione rispetto a t . Infatti derivando la (14 e) rispetto a t , ponendo $t_1 = t$ e usando (14 g) si ha $i\hbar \frac{d}{dt}U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0)$. Ma ora $U(t, t_0)$ dipende separatamente da t e t_0 e non può essere scritto nella forma (13)].

Possiamo ora enunciare come terzo assioma della meccanica quantistica l'assioma che specifica l'evoluzione causale di un sistema:

Assioma III Sia $\hat{\psi}_{t_0}$ il raggio vettore che descrive il sistema all'istante iniziale t_0 e si supponga che tra l'istante t_0 e t non si effettuino misure sul sistema. Allora lo stato all'istante t é descritto dal raggio vettore $\hat{\psi}_t$ dove

$$\psi_t = U(t, t_0)\psi_{t_0} \quad (15)$$

ψ_t, ψ_{t_0} sono due vettori rappresentativi dei raggi vettori $\hat{\psi}_t, \hat{\psi}_{t_0}$ rispettivamente e $U(t, t_0)$ é un operatore unitario.

Per sistemi soggetti a forze conservative la (15) diventa

$$\psi_t = U(t - t_0)\psi_{t_0} = e^{-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)}\psi_{t_0} \quad (16)$$

Si noti che per sistemi conservativi l'operatore di evoluzione $U(t - t_0)$ dipende solo da $t - t_0$ e non da t e t_0 separatamente.

In questo corso considereremo solo sistemi conservativi per i quali dunque l'evoluzione causale é descritta dalla (16).

La (16) é ancora una espressione formale e implicita per la ψ_t . Per ottenere una espressione concreta ed esplicita di ψ_t dobbiamo ricordare qual'é il significato di una espressione come $F(A)\psi$ dove $F(A)$ é una generica funzione dell'operatore autoaggiunto A (che per semplicitá supponiamo a spettro puramente discreto) e ψ é un vettore di \mathcal{H} (o piú precisamente del dominio di $F(A)$). Sia $\{\phi_{a_n}^{(r)}\}$ una base completa e ortonormalizzata di autovettori di A :

$$A\phi_{a_n}^{(r)} = a_n\phi_{a_n}^{(r)}; \quad (\phi_{a_n}^{(r)}, \phi_{a_m}^{(s)}) = \delta^{rs}\delta_{nm}.$$

Sviluppando ψ su tale base si ha:

$$\psi = \sum_r \sum_{a_n \in Sp(A)} \phi_{a_n}^{(r)}(\phi_{a_n}^{(r)}, \psi).$$

Allora:

$$F(A)\psi = \sum_r \sum_{a_n \in Sp(A)} F(a_n)\phi_{a_n}^{(r)}(\phi_{a_n}^{(r)}, \psi).$$

Dobbiamo dunque usare questa stessa regola per dare una espressione esplicita al secondo membro della (16), dove abbiamo appunto una funzione, $e^{-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)}$, dell'operatore autoaggiunto H . Per semplicitá assumiamo anche qui in un primo momento che H abbia spettro puramente discreto. Allora, dalla (16), si puó ottenere l'espressione esplicita di ψ_t mediante la seguente

Ricetta

1. Risolvere il problema agli autovalori per l'hamiltoniana H e determinare un sistema completo di autovettori ortonormalizzato:

$$H\phi_{E_n}^{(r)} = E_n\phi_{E_n}^{(r)} \quad (17)$$

con

$$(\phi_{E_n}^{(r)}, \phi_{E_m}^{(s)}) = \delta^{rs}\delta_{nm}$$

2. Sviluppare il vettore ψ_{t_0} sulla base degli autovettori di H :

$$\psi_{t_0} = \sum_{E_n \in Sp(H)} \sum_r \phi_{E_n}^{(r)}(\phi_{E_n}^{(r)}, \psi_{t_0}) \quad (18).$$

3. Applicare l'operatore $e^{-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)}$ al vettore ψ_{t_0} dato in (18), portandolo a destra di $\sum_{E_n} \sum_r$ e usando il fatto che $e^{-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)}\phi_{E_n}^{(r)} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\phi_{E_n}^{(r)}$, per ottenere:

$$\psi_t = \sum_{E_n \sum_r \in Sp(H)} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\phi_{E_n}^{(r)}(\phi_{E_n}^{(r)}, \psi_{t_0}) \quad (19).$$

Naturalmente per ottenere una espressione concreta di ψ_t é necessario rappresentare i vettori delle equazioni (17),(18),(19) in qualche rappresentazione. Per esempio per una particella (priva di spin) in rappresentazione $\{\mathcal{X}\}$ le (17),(18),(19) diventano:

$$H\phi_{E_n}^{(r)}(\vec{x}) = E_n\phi_{E_n}^{(r)}(\vec{x}) \quad (20)$$

$$\psi_{t_0}(\vec{x}) = \sum_{E_n \in Sp(H)} \sum_r \phi_{E_n}^{(r)}(\vec{x})(\phi_{E_n}^{(r)}, \psi_{t_0}) \quad (21)$$

$$\psi_t(\vec{x}) = \sum_{E_n \in Sp(H)} \sum_r e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} \phi_{E_n}^{(r)}(\vec{x}) (\phi_{E_n}^{(r)}, \psi_{t_0}) \quad (22).$$

dove

$$(\phi_{E_n}^{(r)}, \psi_{t_0}) = \int d^3x \phi_{E_n}^{(r)*}(\vec{x}) \psi_{t_0}(\vec{x}) \quad (23)$$

e

$$(\phi_{E_n}^{(r)}, \phi_{E_m}^{(s)}) \equiv \int d^3x \phi_{E_n}^{(r)*}(\vec{x}) \phi_{E_m}^{(s)}(\vec{x}) = \delta^{rs} \delta_{nm} \quad (24)$$

Chiaramente in questa ricetta il punto essenziale é il punto 1. La soluzione del problema dinamico in meccanica quantistica consiste nel risolvere l'equazione agli autovalori dell'hamiltoniana. Una volta risolto questo problema i punti 2. e 3. sono ovvi e si riducono a calcolare prodotti scalari tra vettori.

Naturalmente, come in meccanica classica, anche in meccanica quantistica sono pochi i casi che si sanno risolvere esattamente. Spesso ci si deve accontentare di soluzioni approssimate.

L'estensione di questa ricetta al caso in cui l'hamiltoniana abbia spettro continuo o misto é ovvia. Per ogni punto dello spettro continuo, l'equazione agli autovalori ha soluzioni

$$H \phi_E^{(r)} = E \phi_E^{(r)}$$

ma ora $\phi_E^{(r)}$ sono autofunzionali ortonormalizzati in senso generalizzato cioe'

$$(\phi_E^{(r)}, \phi_{E'}^{(s)}) = \delta^{rs} \delta(E - E')$$

e le (18),(19) diventano

$$\psi_{t_0} = \sum_{E_n \in Sp_d(H)} \sum_r \phi_{E_n}^{(r)} (\phi_{E_n}^{(r)}, \psi_{t_0}) + \int_{E \in Sp_c(H)} dE \sum_r \phi_E^{(r)} (\phi_E^{(r)}, \psi_{t_0})$$

e

$$\psi_t = \sum_{E_n \in Sp_d(H)} \sum_r e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} \phi_{E_n}^{(r)} (\phi_{E_n}^{(r)}, \psi_{t_0}) + \int_{E \in Sp_c(H)} dE \sum_r e^{-\frac{i}{\hbar} E (t-t_0)} \phi_E^{(r)} (\phi_E^{(r)}, \psi_{t_0})$$

Concludiamo questo capitolo chiedendoci quando il valor medio di una grandezza fisica \mathcal{A} in uno stato Σ non dipende dal tempo. Tenendo conto dell'equazione di Schroedinger (7) (e della sua complessa coniugata) abbiamo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_t, A\psi_t) = (\psi_t [A, H] \psi_t) \quad (25)$$

Si vede dalla (25) che il valor medio $(\psi, A\psi)$ non dipende dal tempo in due casi:

a) Per ogni stato ψ , se A commuta con H :

$$[A, H] = 0$$

b) Per ogni operatore A se $\psi = \psi_E$ é autostato di H :

$$H\psi_E = E\psi_E$$

poiché in tal caso la (25) diventa

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_{E,t} A \psi_{E,t}) = (\psi_{E,t} [A, E] \psi_{E,t}) \quad (25)$$

o, in modo piú diretto, perché $\psi_{E,t} = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi_E$, e quindi

$$(\psi_{E,t} A \psi_{E,t}) = (\psi_E A \psi_E)$$