

Capitolo 5

TRASLAZIONI TEMPORALI

5.1 Operatore di evoluzione temporale

Rivediamo l'esperimento di Stern-Gerlach nella dimensione temporale. Il sistema (singolo atomo) viene preparato nello stato $|\psi(t_0)\rangle$ all'istante t_0 , quindi attraversa il campo magnetico disomogeneo e viene rivelato nello stato $|\psi_k\rangle$ dal rivelatore k -imo all'istante t . La probabilità di transizione viene rappresentata dal modulo quadro dell'ampiezza $\langle \psi_k | \psi(t) \rangle$. In virtù del principio di sovrapposizione lo stato $|\psi(t)\rangle$ è dato da

$$|\psi_t\rangle = \sum \langle \psi_k | \psi_t \rangle |\psi_k\rangle \quad (5.1)$$

L'evoluzione temporale dello stato da t_0 a t si può pensare come una corrispondenza biunivoca tra stati, che definisce un operatore nello spazio degli stati

$$|\psi_t\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\psi_{t_0}\rangle \quad (5.2)$$

L'operatore $\mathbf{U}(\mathbf{t}, \mathbf{t}_0)$ prende il nome di operatore di evoluzione temporale e descrive una traslazione lungo l'asse dei tempi. La probabilità sommata su tutti i possibili stati finali dev'essere ugual ad 1 a prescindere dal tempo t per cui si ha

$$\sum |\langle \psi_k | \psi_{t_0} \rangle|^2 = \sum |\langle \psi_k | \mathbf{U}(t, t_0) | \psi_{t_0} \rangle|^2 \quad (5.3)$$

$$= \sum \langle \psi(t_0) | \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \mathbf{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (5.4)$$

$$= \langle \psi_{t_0} | \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \mathbf{U}(t, t_0) | \psi_{t_0} \rangle \quad (5.5)$$

$$= 1 \quad (5.6)$$

Ne segue che $\mathbf{U}(t, t_0)$ è unitario.

$$\mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{U}(t, t_0) \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) = \mathbf{1} \quad (5.7)$$

assunto che esiste anche l'operatore inverso $\mathbf{U}^{-1}(t, t_0) = \mathbf{U}(t_0, t)$.

L'esistenza dell'operatore $\mathbf{U}(t, t')$ equivale ad assumere che anche in meccanica quantistica le leggi del moto sono deterministiche.

L'operatore di evoluzione per un tempo molto piccolo δt differisce dall'operatore identità per un termine proporzionale a δt

$$\mathbf{U}(t + \delta t, t) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \delta t \mathbf{H}(t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \mathbf{H}(t)} \quad (5.8)$$

dove $\mathbf{H}(t)$ prende il nome di generatore della traslazione temporale, e, in analogia con le corrispondenti trasformazioni canoniche classiche, va identificato con l'osservabile Hamiltoniana del sistema all'istante t . La traslazione per un tempo finito $t' - t$ si ottiene dividendo l'intervallo in N ($\rightarrow \infty$) intervalli infinitesimi tali che $N \cdot \delta t = t' - t$ e quindi dalla legge di composizione segue

$$\mathbf{U}(t', t) = \mathbf{U}(t', t_1)\mathbf{U}(t_1, t_2) \cdots \mathbf{U}(t_{N-1}, t_N)\mathbf{U}(t_N, t) \quad (5.9)$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t\mathbf{H}(t')} e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t\mathbf{H}(t_1)} \cdots e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t\mathbf{H}(t_N)} \quad (5.10)$$

Questa espressione non è sommabile eccetto che in casi eccezionali, cioè quando l'Hamiltoniana presa a tempi diversi commuta con se stessa

$$[\mathbf{H}(t_i), \mathbf{H}(t_j)] = 0 \quad (5.11)$$

Solo in questo caso infatti il prodotto degli esponenziali è uguale allo esponenziale della somma degli esponenti, cioè

$$\mathbf{U}(t', t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t[\mathbf{H}(t')+\mathbf{H}(t_1)+\cdots+\mathbf{H}(t_N)]} \quad (5.12)$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'} d\tau\mathbf{H}(\tau)} \quad (5.13)$$

A questa classe appartiene la Hamiltoniana indipendente dal tempo. In quest'ultimo caso si ha

$$\mathbf{U}(t', t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\cdot(t'-t)} \quad (5.14)$$

Negli altri casi per valutare l'operatore di evoluzione temporale si fa ricorso a metodi di approssimazione di cui si parlerà nel capitolo sulla teoria perturbativa dipendente dal tempo.

5.2 Equazioni del moto

Nei casi di sommabilità l'evoluzione temporale dello stato di un sistema è governata semplicemente dalla legge

$$|\psi_{t'}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'} d\tau\mathbf{H}(\tau)} |\psi_t\rangle \quad (5.15)$$

Osserviamo che per la classe delle Hamiltoniane indipendenti dal tempo $\mathbf{U}(t', t)$ dipende solo dalla durata $t' - t$ e non dai due istanti di tempo t e t' separatamente. Infatti una Hamiltoniana indipendente dal tempo non viola l'uniformità del tempo e quindi le proprietà del sistema non dipendono dall'istante scelto come origine dell'asse dei tempi. Hamiltoniane indipendenti dal tempo corrispondono in genere a sistemi isolati o sottoposti a perturbazioni costanti nel tempo.

In generale si ha

$$|\psi_{t'}\rangle = \mathbf{U}(t', t)|\psi_t\rangle \quad (5.16)$$

sicché lo stato del sistema all'istante t' viene determinato univocamente dallo stato all'istante t , ove sia nota la Hamiltoniana nell'intervallo $t' - t$. Pertanto l'evoluzione dinamica di un sistema in MQ è deterministica come in meccanica classica; quello che è profondamente diversa è la nozione di stato, che in MQ ha un significato probabilistico. Consideriamo ad esempio una particella. Classicamente possiamo assegnare una posizione definita $\vec{r}(t)$ allo stato della particella all'istante t , e questa cambia al trascorrere del tempo secondo le leggi della dinamica classica. La posizione $\vec{r}(t)$ evolve in maniera deterministica. Quantisticamente possiamo assegnare una funzione d'onda $\psi(\vec{r}, t)$ alla particella, che

assegna la probabilità di trovarla nei vari punti dello spazio all'istante t . Al trascorrere del tempo $\psi(\vec{r}, t)$ varia secondo le leggi della meccanica quantistica. Ora $\psi(\vec{r}, t)$ e non $\vec{r}(t)$ varia in maniera deterministica.

L'Eq. (16) è di per se una equazione del moto per lo stato di un sistema quantico; alternativamente possiamo formulare le equazioni del moto per gli stati come anche per l'operatore di evoluzione temporale in forma differenziale. Consideriamo una traslazione δt infinitesima

$$|\psi(t + \delta t)\rangle = \mathbf{U}(t + \delta t, t)|\psi(t)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta t \mathbf{H}(t)\right)|\psi(t)\rangle \quad (5.17)$$

Isolando al primo membro il rapporto incrementale dello stato, ricaviamo la cosiddetta **equazione di Schrödinger dipendente dal tempo**

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_t\rangle = \mathbf{H}(t) |\psi_t\rangle \quad (5.18)$$

Per un fissato istante di tempo t_0 arbitrario, lo stato $|\psi(t)\rangle$ si può scrivere $\mathbf{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$, per cui l'equazione precedente si trasforma in una equazione del moto per l'operatore di evoluzione una volta eliminato lo stato ausiliario $|\psi(t_0)\rangle$, cioè

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{H}(t) \mathbf{U}(t, t_0) \quad (5.19)$$

Consideriamo un sistema con Hamiltoniana indipendente dal tempo. Una classe di soluzioni dell'equazione di Schrödinger è quella per cui la dipendenza dal tempo può essere isolata in un fattore di fase, cioè

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right) |\psi\rangle \quad (5.20)$$

Questi stati, ove esistano, rivestono grande importanza poichè valori medi di osservabili fisiche \mathbf{O} (indipendenti dal tempo) rispetto a questi stati son costanti nel tempo. Infatti si verifica immediatamente che

$$\langle \psi(t) | \mathbf{O} | \psi(t) \rangle = \langle \psi | \mathbf{O} | \psi \rangle \quad (5.21)$$

e per questo vengono chiamati **stati stazionari**. Un sistema che si trova in uno stato stazionario mantiene nel tempo le sue proprietà fisiche. Applicando su uno stato stazionario l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo, Eq. (19), si trova subito che

$$\mathbf{H}|\psi\rangle = |\psi\rangle E \quad (5.22)$$

Questa equazione rappresenta la condizione affinché uno stato sia stazionario e prende il nome **equazione di Schrödinger indipendente dal tempo**. Riconosciamo nella equazione precedente una tipica equazione agli autovalori, cioè l'equazione agli autovalori per la Hamiltoniana \mathbf{H} . Concludiamo allora che gli stati stazionari del sistema sono gli autostati $|\psi_E\rangle$ appartenenti ai rispettivi autovalori E . La ricerca delle proprietà stazionarie nel tempo di un sistema fisico equivale quindi alla risoluzione dell'equazione agli autovalori per l'Hamiltoniana \mathbf{H} . Studieremo nei prossimi capitoli la risoluzione di questa equazione per una varietà di sistemi quantici.

5.3 Proprietà generali degli autostati della Hamiltoniana

L'equazione di Schrödinger può essere posta in una forma in cui risulta più immediato capire quali proprietà devono avere le sue autofunzioni affinché possano rappresentare stati di un sistema reale. Consideriamo per semplicità il caso di una particella in un potenziale. Consideriamo l'Eq. (18) espressa in termini delle autofunzioni

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) \quad (5.23)$$

Moltiplichiamo questa equazione per $\psi^*(\vec{r}, t)$ e la sua complessa coniugata per $\psi(\vec{r}, t)$, quindi sottraiamo membro a membro. Il termine di potenziale scompare poichè il potenziale è reale (escludiamo nel presente contesto potenziali complessi che vengono usati in MQ per descrivere fenomeni di assorbimento). L'equazione risultante è allora

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^*(\vec{r}, t) \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, t)) \quad (5.24)$$

Introduciamo le due grandezze

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (5.25)$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t)) \quad (5.26)$$

in termini delle quali l'equazione precedente si scrive

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \text{div} \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad (5.27)$$

Questa equazione ha la forma di una equazione di continuità. Per esempio nel caso della fluidodinamica questa equazione rappresenta la conservazione della materia: se consideriamo un volumetto V attraversato da un fluido in movimento la variazione istantanea di fluido all'interno del volumetto, $\int_V dV \frac{\partial \rho}{\partial t}$, è uguale al flusso uscente attraverso la sua superficie S , $\oint_S \vec{j} \cdot \vec{n} dS = \int_V dV \text{div} \vec{j}$. In questo contesto si ha a che fare con grandezze associate alla funzione d'onda; usando il linguaggio della fluidodinamica, chiamiamo $\rho(\vec{r}, t)$ densità di probabilità e $\text{div} \vec{j}(\vec{r}, t)$ densità di corrente di probabilità. L'equazione di continuità precedente esprime allora la conservazione della probabilità associata al moto di un sistema quantico. Affinchè una funzione d'onda possa rappresentare lo stato di un sistema quantico dev'essere continua in ogni punto dello spazio dov'è definita altrimenti nei punti di discontinuità la probabilità non sarebbe definita o avrebbe due valori distinti. Inoltre anche la sua derivata dev'essere continua altrimenti la conservazione della probabilità potrebbe risultare violata. Nel caso in cui il potenziale abbia punti di discontinuità queste due condizioni devono essere imposte esplicitamente per delimitare la classe delle soluzioni fisicamente accettabili, come vedremo nel prossimo capitolo.

5.4 Pacchetti d'onda