Osservabili a spettro continuo. Il linguaggio delle funzioni d'onda

Marcello Colozzo – http://www.extrabyte.info

1 Spettro discreto

Fermiamoci un attimo, giusto il tempo per fare "mente locale". Nelle lezioni precedenti abbiamo parlato di autovettori di operatori, i quali ultimi rappresentano le cosiddette *osservabili quantistiche*, che fondamentalmente sono le grandezze fisiche relative a un assegnato sistema quantistico S_q. Ciò che differenzia le osservabili dalle corrispondenti grandezze classiche (quando questa corrispondenza ha un senso) e che è necessario definire operativamente il procedimento di misura.

Ciò premesso, sia $\mathcal{H}$ uno spazio di Hilbert. Sussiste la seguente definizione:

Definizione 1 *Assegnato $\hat{A} \in end(\mathcal{H})$, si dice* **aggiunto** *di $\hat{A}$ rispetto al prodotto scalare $\langle . \rangle$, l'elemento $\hat{A}^\dagger \in end(\mathcal{H})$ tale che*

$$\left\langle \hat{A}\xi, \eta \right\rangle = \left\langle \xi, \hat{A}^\dagger \eta \right\rangle, \quad \forall \xi, \eta \in \mathcal{H} \tag{1}$$

È facile persuadersi che

$$\forall \hat{A} \in end(\mathcal{H}), \ \exists! \hat{A}^\dagger \in end(\mathcal{H}) \mid \left\langle \hat{A}\xi, \eta \right\rangle = \left\langle \xi, \hat{A}^\dagger \eta \right\rangle, \quad \forall \xi, \eta \in \mathcal{H} \tag{2}$$

In altri termini, esiste ed è unico l'aggiunto di un assegnato operatore lineare. Assegnata una base ortonormale di $\mathcal{H}$ (supponendo $\mathcal{H}$ separabile):

$$\{e_j\}, \quad j = 1, 2, ..., \dim \mathcal{H} \leq +\infty, \tag{3}$$

sia A la matrice rappresentativa di $\hat{A}$ in $\{e_j\}$:

$$\hat{A} \doteq A = \left(a_k^i\right), \quad i, k = 1, ..., \dim \mathcal{H} \tag{4}$$

dove i e k sono rispettivamente l'indice di riga e l'indice di colonna, si dimostra immediatamente che:

$$\hat{A}^\dagger \doteq A^\dagger = \left(a_i^{*k}\right) \tag{5}$$

Cioè la matrice rappresentativa dell'operatore aggiunto è la matrice aggiunta della matrice che rappresenta $\hat{A}$ nella stessa base.

Definizione 2 *L'operatore $\hat{A}$ è* **hermitiano** *se coincide con l'aggiunto, cioè se: $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. Quindi*

$$\left\langle \hat{A}\xi, \eta \right\rangle = \left\langle \xi, \hat{A}\eta \right\rangle, \quad \forall \xi, \eta \in \mathcal{H} \tag{6}$$

Tutto questo si esprime in modo più conciso con la notazione di Dirac. Precisamente, la (1) si scrive:

$$\left\langle \xi | \hat{A} | \eta \right\rangle = \left\langle \eta | \hat{A}^\dagger | \xi \right\rangle, \quad \forall \left| \xi \right\rangle, \left| \eta \right\rangle \in \mathcal{H}, \tag{7}$$

giacché $\langle \eta |$ è il bra in corrispondenza duale con il ket $|\eta\rangle$. Ricordiamo che tale corrispondenza è anti-lineare:

$$\lambda \left| \xi \right\rangle \longleftrightarrow \left\langle \xi \right| \lambda^*, \quad \forall \lambda \in \mathbb{C}, \ \forall \left| \xi \right\rangle \in \mathcal{H}, \tag{8}$$

e

$$\hat{A}\left|\xi\right\rangle \longleftrightarrow \left\langle\xi\right|\hat{A}^{\dagger}, \quad \forall\hat{A}\in end\left(\mathcal{H}\right),\ \forall\left|\xi\right\rangle\in\mathcal{H} \tag{9}$$

Riguardo alla matrice rappresentativa, la notazione di Dirac ci libera da fastidiosi indici. Intanto una base ortonormale si indica semplicemente con

$$\begin{aligned} &\left\{\left|n\right\rangle\right\}, \quad n=1,2,...,\dim\mathcal{H}\leq+\infty \\ &\left\langle n|n'\right\rangle=\delta_{nn'}, \end{aligned} \tag{10}$$

cosicché gli elementi di matrice (nella base $\{|n\rangle\}$) si indicano con

$$\left\langle n|\hat{A}|n'\right\rangle, \quad n,n'=1,2,...,\dim\mathcal{H} \tag{11}$$

La (6) diventa:

$$\left\langle\xi|\hat{A}|\eta\right\rangle=\left\langle\eta|\hat{A}|\xi\right\rangle, \quad \forall\left|\xi\right\rangle,\left|\eta\right\rangle\in\mathcal{H} \tag{12}$$

Dalla teoria degli operatori sappiamo che gli autovettori di un operatore hermitiano corrispondente ad autovalori distinti, sono ortogonali. Cioè, una volta scritta l'equazione agli autovalori:

$$\hat{A}\left|a_n\right\rangle=a_n\left|a_n\right\rangle, \quad n=1,...,\dim\mathcal{H}, \tag{13}$$

si ha

$$\left\langle a_n|a_{n'}\right\rangle\neq0\Longleftrightarrow n=n', \tag{14}$$

e che gli autovalori sono reali:

$$a_n\in\mathbb{R},\ \ \forall n\in\{1,...,\dim\mathcal{H}\} \tag{15}$$

Normalizzando i singoli autovettori:

$$\left\langle a_n|a_{n'}\right\rangle=\delta_{nn'} \tag{16}$$

Cioè, gli autovettori di un operatore hermitiano costituiscono una base ortonormale. A sua volta ciò implica la ben nota proprietà: una matrice hermitiana è equivalente a una matrice diagonale. La diagonalizzazione si realizza eseguendo il cambiamento di base $\{|n\rangle\}\to\{|a_n\rangle\}$:

$$A_{diag}=\begin{pmatrix} a_1 & 0 & ... & 0 \\ 0 & a_2 & ... & 0 \\ 0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & ... & a_n \end{pmatrix}, \tag{17}$$

avendo denotato con A_{diag} la matrice rappresentativa di $\hat{A}$ nella base dei suoi autovettori.

Osservazione 3 *Siamo nell'ipotesi di assenza di degenerazione dello spettro $\sigma\left(\hat{A}\right)$, per cui la molteplicità geometrica di ogni autovalore è $g_n=1$. $\forall n$. Nel caso contrario ($g_n>1$), nella (17) i singoli autovalori si "ripetono" per un numero di volte pari alla molteplicità geometrica.*

2 Spettro continuo

Supponiamo ora che $\hat{A}$ sia un'osservabile a cui corrisponde un operatore (hermitiano) a spettro continuo. È chiaro che in questo caso, cambia lo spazio di Hilbert, nel senso che avrà una dimensione infinita non numerabile. Non è questa la sede per discutere gli aspetti matematici della non numerabilità della dimensione di $\mathcal{H}$. Fortunatamente, i risultati precedenti si generalizzano mediante la consueta operazione di passaggio al continuo. Ad esempio, condiseriamo l'equazione agli autovalori (13) che qui riscriviamo

$$\hat{A}\left|a_n\right\rangle = a_n\left|a_n\right\rangle, \quad a_n \in \sigma_d\left(\hat{A}\right), \tag{18}$$

Osserviamo innanzitutto che

$$a_n \in \sigma_d\left(\hat{A}\right) \underset{\text{continuo}}{\longrightarrow} a \in \sigma_c\left(\hat{A}\right),$$

dove $\sigma_c\left(\hat{A}\right)$ è lo spettro continuo di $\hat{A}$. Ne consegue che nel caso continuo l'equazione agli autovalori si scrive:

$$\hat{A}\left|a\right\rangle = a\left|a\right\rangle, \quad a \in \sigma_c\left(\hat{A}\right) \tag{19}$$

La condizione di ortogonalità e normalizzazione:

$$\left\langle a_n | a_{n'}\right\rangle = \delta_{nn'} \underset{\text{continuo}}{\longrightarrow} \left\langle a | a'\right\rangle = \delta\left(a - a'\right), \tag{20}$$

dove $\delta\left(x\right)$ è la funzione delta di Dirac. La relazione di completezza $(N = \dim \mathcal{H})$:

$$\sum_{k=1}^{N}\left|a_n\right\rangle\left\langle a_n\right| = \hat{1} \underset{\text{continuo}}{\longrightarrow} \int_{\sigma_c\left(\hat{A}\right)}\left|a\right\rangle\left\langle a\right| = \hat{1} \tag{21}$$

Lo sviluppo di un generico ket negli autovettori di $\hat{A}$:

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_{k=1}^{N} c_n\left|a_n\right\rangle = \sum_{k=1}^{N}\left|a_n\right\rangle\left\langle a_n | \psi\right\rangle \underset{\text{continuo}}{\longrightarrow} \left|\psi\right\rangle = \int_{\sigma_c\left(\hat{A}\right)}\left|a\right\rangle\left\langle a | \psi\right\rangle \tag{22}$$

Per un sistema quanto-meccanico costituito da una particella di massa m, la posizione $\mathbf{x} = (x, y, z)$ e l'impulso $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ sono osservabili a spettro continuo. Le equazioni agli autovalori nel caso unidimensionale si scrivono:

$$\hat{x}\left|x\right\rangle = x\left|x\right\rangle, \qquad x \in (-\infty, +\infty) \tag{23}$$

Analogamente, per l'osservabile impulso:

$$\hat{p}\left|p\right\rangle = p\left|p\right\rangle \tag{24}$$

Se A è un'osservabile per lo stesso sistema, dotata di spettro discreto:

$$\hat{A}\left|a_n\right\rangle = a_n\left|a_n\right\rangle, \tag{25}$$

per cui il ket di stato della particella si scrive:

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_{k=1}^{N} c_n\left|a_n\right\rangle, \tag{26}$$

prestando attenzione al fatto che ora stiamo nuovamente considerando uno spazio di Hilbert con dimensione al più infinito-numerabile. Moltiplicando scalarmente primo e secondo membro dell'equazione precedente per l'autobra della posizione, otteniamo:

$$\psi\left(x\right) = \sum_{k=1}^{N} c_n u_n\left(x\right), \tag{27}$$

dove

$$\psi(x) \overset{def}{=} \langle x|\psi\rangle, \quad u_n(x) \overset{def}{=} \langle x|a_n\rangle, \quad n = 1, 2, ..., N \tag{28}$$

Precisamente

$$\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$$

analogamente per $u_n(x)$. Abbiamo in tal modo scritto il ket di stato nella cosiddetta **rappresentazione delle coordinate** (o x-rappresentazione). La funzione $\psi(x)$ è detta **funzione d'onda** della particella, mentre le funzioni

$$u_1(x), ...u_N(x),$$

si dicono **autofunzioni** di $\hat{A}$ e non sono altro che gli autoket scritti nella rappresentazione delle coordinate. Se anzichè moltiplicare per l'autobra della posizione, moltiplichiamo per l'autobra dell'impulso:

$$\phi(p) = \sum_{k=1}^{N} c_n v_n(p), \tag{29}$$

dove

$$\phi(p) = \langle p|\psi\rangle, \quad v_n(p) = \langle p|a_n\rangle \tag{30}$$

Abbiamo così ottenuto il ket di stato nella **rappresentazione degli impulsi**. (o p-rappresentazione). La funzione $\phi(p)$ è detta **funzione d'onda nello spazio degli impulsi**.

Riferimenti bibliografici

[1] Sakurai J.J., 1990. *Meccanica quantistica moderna*. Zanichelli