2. EVOLUZIONE TEMPORALE IN MECCANICA QUANTISTICA

Introduzione

In questo capitolo riprenderemo l'idea delle funzioni generatrici, concentrandoci su quella di seconda specie (ossia funzione delle vecchie coordinate e dei nuovi impulsi) che come è noto in meccanica classica è facilmente correlabile a un certo tipo di trasformazioni infinitesime delle variabili canoniche. Successivamente, analizzando le caratteristiche dell'evoluzione temporale in meccanica quantistica vedremo come associare effettivamente l'operatore Hamiltoniano all'evoluzione temporale di uno stato. Nella presente trattazione lavoreremo con l'equazione d'onda non relativistica.

Evoluzione temporale in meccanica classica

Per prima cosa ricordiamo che una funzione generatrice di seconda specie adatta a descrivere una generica trasformazione infinitesima può essere del tipo:

$$F_2 = q_i P_i + \epsilon G(q, P, t)$$

2-1

Concentriamoci sul primo termine $q_i P_i$. Evidentemente il suo contributo è l'identità, in quanto, per quanto riguarda le variabili canoniche:

$$\begin{cases} Q_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i \\ p_i = \dfrac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i \end{cases}$$

2-2

Purtuttavia questo termine è dato dal prodotto di una coordinata per un momento coniugato, quindi dimensionalmente non sembra idoneo a rappresentare un'identità che ci immaginiamo piuttosto come un operatore adimensionale (matrice composta da numeri puri). Già da questo risulta evidente la necessità di introdurre una costante che, per una particella priva di vincoli nello spazio, ha le dimensioni di un'azione (o di un momento angolare).

È noto che la funzione generatrice dell'evoluzione temporale infinitesima si scrive:

$$F_2 = q_i P_i + H dt$$

2-3

Pertanto in una logica operatoriale ci immaginiamo che sia il termine *H* ad assumere il ruolo di trasformatore del sistema.

L'operatore di evoluzione temporale nel formalismo quantistico

Per rappresentare l'evoluzione temporale di un sistema nel formalismo dei *ket* utilizziamo la seguente notazione, che individua lo stato iniziale del sistema e il suo evoluto temporale:

$$|a, t_0\rangle \overset{\text{evoluzione da } t_0 \text{ a t}}{\rightarrow} |a, t_0; t\rangle$$

2-4

Assumeremo che i due stati così rappresentati siano legati da un operatore di evoluzione temporale:

$$|a, t_0; t\rangle = U(t, t_0)|a, t_0\rangle$$

2-5

Vediamo quali sono le proprietà immediatamente ricavabili sulla base delle assunzioni della meccanica quantistica.

Per prima cosa, se vogliamo che si conservi la probabilità, lo stato evoluto al tempo generico deve ancora essere normalizzato a 1, per cui:

1. $1 = \langle a, t|a, t\rangle = \langle a, t_0|U^+(t, t_0)U(t, t_0)|a, t_0\rangle = \langle a, t_0|a, t_0\rangle \quad \Leftrightarrow \quad U^+(t, t_0)U(t, t_0) = \mathbf{1}$

2-6

Che è nota come proprietà di unitarietà dell'operatore. **1** rappresenta l'operatore identità. Secondariamente:

2. $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$
3. $\lim\limits_{\Delta t \to 0} U(t_0 + \Delta t, t_0) = \mathbf{1}$
4. $U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)$

2-7

La combinazione di queste proprietà porta alla definizione dell'operatore di evoluzione temporale infinitesimo, che immaginiamo della forma:

$$U(t_0 + dt, t_0) = \mathbf{1} - i\Omega dt$$

2-8

in cui l'operatore Ω deve essere Hermitiano:

$$1 = \langle a, t|a, t\rangle = \langle a, t_0|U^+U|a, t_0\rangle \quad \Rightarrow \quad U^+U = (\mathbf{1} + i\Omega^+ dt)(\mathbf{1} - i\Omega dt) =$$
$$\mathbf{1} + i(\Omega^+ - \Omega)dt + O((dt)^2) \approx \mathbf{1} \quad \Leftrightarrow \quad \Omega^+ = \Omega$$

2-9

Se dunque il primo addendo della F_2 così definita rappresenta la trasformazione identità, traducendo tutto nel linguaggio degli operatori nella meccanica quantistica questo significa che l'Hamiltoniana deve essere imparentata con la seconda parte del generatore:

$$
\begin{array}{ccc}
qP & + & Hdt \\
\downarrow & & \downarrow \\
\mathbf{1} & + & -i\Omega\ dt
\end{array}
$$

2-10

Usiamo ancora un argomento di natura dimensionale: se Ω ha le dimensioni di un inverso del tempo (affinché il secondo membro sia omogeneo all'operatore identità), l'operatore Hamiltoniano deve essere diviso per una costante con le dimensioni di un'azione (energia per tempo). Chiameremo questa costante $\hbar$:

$$\Omega = \frac{H}{\hbar}$$

2-11

Di conseguenza:

$$U(t + dt, t) = 1 - i\frac{H}{\hbar}dt$$

2-12

E passando ad un intervallo di tempo finito, se H è una costante del moto:

$$U(t + \Delta t, t) = \lim_{n\to\infty}\left(1 - i\frac{H}{\hbar}\frac{\Delta t}{n}\right)^n = e^{-i\frac{H}{\hbar}\Delta t}$$

2-13

A tale risultato si può giungere individuando l'equazione differenziale che permette di calcolare l'operatore di evoluzione temporale su un intervallo finito, utilizzando la proprietà di composizione dell'operatore:

$$U(t + dt, t_0) = \underbrace{U(t + dt, t)}_{\left[1 - i\frac{H}{\hbar}dt\right]}U(t, t_0)$$

2-14

Segue che:

$$dU = U(t + dt, t_0) - U(t, t_0) = \left[1 - i\frac{H}{\hbar}dt - 1\right]\ U(t, t_0) = \left[-i\frac{H}{\hbar}dt\right]U(t, t_0)$$

2-15

Dunque:

$$\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = \left[-i\frac{H}{\hbar}dt\right]U(t, t_0) \quad \Rightarrow \quad ih\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = HU(t, t_0)$$

2-16

Che è nota come equazione di Schroedinger per l'operatore di evoluzione temporale. Se assumiamo che l'Hamiltoniana sia un integrale del moto riconosciamo ancora che la soluzione è del tipo:

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

2-17

Sviluppo in autostati dell'energia

Abbiamo dunque visto che:

$$|a,t_0;t\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)}|a,t_0\rangle$$

2-18

L'espressione precedente si può sviluppare in un set ortonormale completo (ad esempio autovalori dell'energia):

$$|a,t_0;t\rangle = \sum_i |E_i\rangle\langle E_i|\, e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)}\ |a,t_0\rangle = \sum_i e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}|E_i\rangle\langle E_i|a,t_0\rangle$$

2-19

E l'ultimo *braket* può essere sviluppato ulteriormente negli autostati della posizione:

$$|a,t_0,t\rangle = \sum_i e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}|E_i\rangle\langle E_i| \int d^3x'|x'\rangle\ \langle x'|a,t_0\rangle = \sum_i e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}|E_i\rangle \int d^3x'\,\langle E_i|x'\rangle\ \langle x'|a,t_0\rangle$$

2-20

Ponendo:

$$\langle E_i|x'\rangle = u_i^*(x'), \qquad \langle x'|a,t_0\rangle = \psi(x',t_0), \quad c_{E_i}(t_0) = \int d^3x'\,\langle E_i|x'\rangle\,\langle x'|a,t_0\rangle = \int d^3x'\,u_i^*(x')\,\psi(x',t_0)$$

2-21

L'espressione 2-19 può essere riscritta:

$$|a,t_0,t\rangle = \sum_i c_{E_i}(t_0)e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}|E_i\rangle$$

2-22

Che semplicemente ci ricorda come la combinazione ponderata di autostati di energia, evoluta mediante operatore temporale, ci restituisca lo stato del sistema a qualsiasi tempo *t*.

Propagatore

Ripartiamo dalla proiezione dello stato evoluto sul generico autostato della posizione e sviluppiamo utilizzando la completezza degli autostati dell'energia:

$$\langle x|a,t_0;t\rangle = \sum_i \langle x|E_i\rangle\langle E_i|a,t_0\rangle e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)} = \sum_i \langle x|E_i\rangle\langle E_i| \int d^3x' \,|x'\rangle\langle x'|a,t_0\rangle e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)} =$$
$$= \int d^3x' \left\{\left[\sum_i u_i(x)u_i^*(x')\, e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}\right]\psi(x',t_0)\right\} = \int d^3x' \cdot K(x,t;x',t_0)\psi(x',t_0)$$

2-23

Si è quindi definito un oggetto che dipende dagli autostati e dagli autovalori dell'energia, è indipendente dalla configurazione iniziale e deve essere integrato nello spazio come prodotto dello stato iniziale per ottenere l'evoluzione della funzione d'onda:

$$K(x,t;x',t_0) = \sum_i u_i(x)u_i^*(x')\, e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)} = \sum_i e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}\langle x|E_i\rangle\langle E_i|x'\rangle$$

2-24

Tale oggetto prende nome di propagatore. La sua proprietà evidente è che:

$$\lim_{t\to t_0} K(x,t;x',t_0) = \delta(x-x')$$

2-25

Un modo di scrivere il propagatore che ne svela il significato profondo è il seguente:

$$K(x,t;x',t_0) = \langle x''|e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)}|x'\rangle = \langle x|U(t,t_0)|x'\rangle$$

2-26

Diremo pertanto che il propagatore fornisce la proiezione, sull'autostato della posizione x, dell'evoluzione temporale di uno stato inizialmente localizzato in x': rappresenta quindi l'ampiezza di probabilità che una particella originariamente in x' si trovi in x al tempo t. Questa ampiezza è espressa proprio dalla funzione d'onda al tempo t di una particella evoluta a partire da x' al tempo iniziale: in questo senso diciamo che K *propaga* la particella localizzata da un punto ad un altro, da cui il nome di questa funzione.

Poiché è di nostro interesse valutare l'evoluzione ma solo se il tempo risulta successivo all'istante iniziale, è naturale – e conveniente - introdurre la funzione gradino:

$$K(x'',t;x',t_0) = \langle x''|U(t,t_0)|x'\rangle\theta(t-t_0)$$

2-27

Di conseguenza, reintroducendo gli autostati dell'energia:

$$K(x'',t;x',t_0) = \theta(t-t_0)\cdot\sum_i u_i(x'')u_i^*(x')\, e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}$$

2-28

Si ricorda che per l'equazione di Schroedinger dipendente dal tempo si ha:

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H(x,\nabla_x^2)\right]\psi(x,t)=0$$

2-29

Applichiamo allora tale operatore alla funzione propagatore:

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H(x,\nabla_x^2)\right]K(x,t;x',t_0)=\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H(x,\nabla_x^2)\right]\left\{\theta(t-t_0)\cdot\sum_i u_i(x)u_i^*(x')\,e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}\right\}=$$
$$=i\hbar\delta(t-t_0)\cdot\sum_i u_i(x)u_i^*(x')\,e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}-\frac{i}{\hbar}\theta(t-t_0)\sum_i u_i(x)u_i^*(x')\cdot E_i\cdot e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}+$$
$$-\theta(t-t_0)\cdot\sum_i u_i(x)u_i^*(x')\,e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}E_i=i\hbar\cdot\delta(t-t_0)\cdot\sum_i u_i(x)u_i^*(x')\,e^{-i\frac{E_i}{\hbar}(t-t_0)}$$

2-30

Per la presenza della δ l'esponente entro la sommatoria può essere posto pari a 0, per cui:

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H(x,\nabla_x^2)\right]K(x,t;x',t_0)=i\hbar\cdot\delta(t-t_0)\cdot\sum_i u_i(x'')u_i^*(x')$$

2-31

Per quanto riguarda la sommatoria, ricordiamo che possiamo scrivere:

$$\sum_i u_i(x'')u_i^*(x')=\sum_i\langle x''|E_i\rangle\langle E_i|x'\rangle$$

2-32

Per la completezza degli autostati dell'energia, dunque, possiamo eliminare l'operatore risultante dalla somma:

$$\sum_i u_i(x'')u_i^*(x')=\delta(x''-x')$$

2-33

In definitiva, riassemblando il tutto, si ottiene la seguente proprietà per il propagatore *K*:

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H(x,\nabla_x^2)\right]K(x,t;x',t_0)=i\hbar\cdot\delta(t-t_0)\cdot\delta(x-x')$$

2-34

Cioè il propagatore ha le caratteristiche di una funzione di Green per l'equazione di Schroedinger: questo significa che la funzione d'onda evoluta è calcolata mediante prodotto di convoluzione del propagatore con la funzione all'istante iniziale:

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(y,\nabla_y^2)\right]K(y,t) = i\hbar \cdot \delta(t) \cdot \delta(y)$$
$$\psi(x,t) = \langle x|a,t_0;t\rangle = \int d^3x' \cdot K(x-x';t-t_0)\psi(x',t_0)$$

2-35

Bibliografia

Un libro che trasmette le idee principali dell'argomento sviluppato è J.J.Sakurai , "Meccanica Quantistica Moderna". La dimostrazione della proprietà del propagatore è invece ricavata da Cohen-Tannoudji, "Quantum Mechanics, vol. 1".