

I fondamenti della meccanica quantistica

1. Il principio di indeterminazione

Il principio di indeterminazione, formulato da Heisenberg nel 1927, può essere considerato come il principio fondamentale della meccanica quantistica. Esso infatti ci obbliga a rivedere i concetti fondamentali della fisica classica, ed è proprio da quest'analisi che sono nati i concetti della fisica quantistica.

Il principio afferma che in un qualunque sistema fisico la misura simultanea di due variabili canoniche coniugate q e p è soggetta a una limitazione intrinseca di precisione: se indichiamo con Δq e Δp le imprecisioni delle due misure, queste sono legate dalla *relazione di indeterminazione*

$$(1.1) \quad \Delta q \Delta p \gtrsim \hbar.$$

Per giustificare questa relazione su basi fisiche sono stati proposti diversi esperimenti ideali, dei quali riportiamo brevemente quello detto del *microscopio di Heisenberg*. Immaginiamo di voler misurare la coordinata x e l'impulso p di un elettrone lungo la direzione del moto. Supponiamo di conoscere esattamente il valore di p prima della misura e di voler determinare x osservando l'elettrone con un microscopio, illuminandolo con un raggio di luce che ha una data direzione e lunghezza d'onda λ . Supponiamo che un singolo fotone venga diffuso dall'elettrone in un punto P e passando attraverso l'obbiettivo venga focalizzato nel punto Q di una pellicola fotografica (supponiamo per semplicità che PQ sia ortogonale alla traiettoria dell'elettrone). L'imprecisione della misura di x è almeno pari al potere risolutivo del microscopio, che è dato da

$$(1.2) \quad \Delta x \simeq \frac{\lambda}{\sin \alpha},$$

dove α è la semiapertura del cono sotteso dalla sezione dell'obbiettivo al punto P . D'altra parte il fotone per andare da P a Q può partire da P in una qualunque direzione entro quel cono e questo porta a una indeterminazione Δq_x sulla componente x dell'impulso. Indicando con q il modulo dell'impulso del fotone e con q_x la sua componente lungo x , Δq_x è dato da

$$(1.3) \quad \Delta q_x \simeq q \sin \alpha.$$

Utilizzando la conservazione dell'impulso nell'urto fra fotone ed elettrone per determinare p al momento dell'osservazione, si vede che risulta

$$(1.4) \quad \Delta p = \Delta q_x.$$

Usando poi la relazione di de Broglie $q = 2\pi\hbar/\lambda$, dalle precedenti equazioni si ottiene la relazione

$$(1.5) \quad \Delta x \Delta p \simeq 2\pi\hbar.$$

Osserviamo che mentre Δx e Δp possono essere variate separatamente giocando sui parametri λ e α dell'esperimento, il loro prodotto risulta indipendente da questi parametri. Si deve poi considerare che in un esperimento reale ci sono altre cause di errore che qui non si sono considerate, per cui la relazione di indeterminazione assume la forma di una disuguaglianza, come nella (1.1).

Se analizziamo l'origine fisica della relazione (1.5), ci rendiamo conto che questa è dovuta alla doppia natura ondulatoria e corpuscolare della luce, che è responsabile da un lato (per effetto della diffrazione) della imprecisa localizzazione dell'elettrone e dall'altro della indeterminatezza della traiettoria del fotone. Tuttavia, se anche immaginassimo un'esperienza diversa che non utilizza la luce come mezzo di osservazione, si arriverebbe allo stesso risultato, perché l'elettrone stesso possiede una natura ondulatoria. La relazione di indeterminazione si può quindi ricondurre al dualismo corpuscolare-ondulatorio delle particelle.

Secondo la meccanica quantistica una particella come l'elettrone è descritta da una *funzione d'onda*, che è una funzione complessa $\psi(\mathbf{x}, t)$ a modulo quadro integrabile e normalizzata, cioè tale che $\int |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x = 1$. La forma della funzione ψ , che viene anche chiamata *pacchetto d'onde*, descrive l'aspetto ondulatorio della particella, mentre l'aspetto corpuscolare è dato dall'interpretazione statistica della funzione d'onda. Se ad esempio volessimo misurare la posizione della particella con dei rivelatori, la troveremo in un solo e ben preciso punto \mathbf{x} , mentre a priori abbiamo una distribuzione di probabilità di trovarla in un punto qualsiasi, con una densità di probabilità per unità di volume data da $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$.

Vediamo in un caso semplice come dalla funzione d'onda si possa ricavare la relazione d'indeterminazione. Prendiamo la seguente funzione d'onda, dipendente da una sola variabile spaziale x :

$$(1.6) \quad f(x) = N e^{-x^2/4a^2},$$

dove $N = (2\pi a^2)^{-1/4}$ è la costante di normalizzazione. La densità di probabilità $|f(x)|^2$ è una gaussiana centrata nell'origine. Come indeterminazione Δx prendiamo la standard deviation di x , cioè lo scarto quadratico medio di x dal valor medio, per cui si ha

$$(1.7) \quad (\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |f(x)|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi} a} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/2a^2} dx = a^2,$$

e quindi $\Delta x = a$.

La $f(x)$ può essere sviluppata in integrale di Fourier secondo la formula

$$(1.8) \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk.$$

Questo sviluppo esprime la $f(x)$ come una combinazione lineare continua di onde con ampiezza $F(k)$ e numero d'onde $k = 2\pi/\lambda$. Poiché vale la formula (di Parseval)

$$(1.9) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |F(k)|^2 dk = \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx = 1,$$

si può interpretare $|F(k)|^2$ come la densità di probabilità di trovare la particella con numero d'onde k , ovvero, per la relazione di de Broglie, con impulso $p = \hbar k$.

La funzione $F(k)$ è la trasformata di Fourier della $f(x)$ e risulta

$$(1.10) \quad F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx = \sqrt{2} Na e^{-k^2 a^2}.$$

Questa è ancora una gaussiana centrata attorno a $k = 0$ e con standard deviation

$$(1.11) \quad \Delta k = \frac{1}{2a}.$$

Dalle (1.7) e (1.11) e dalla relazione $\Delta p = \hbar \Delta k$ si ottiene infine

$$(1.12) \quad \Delta x \Delta p = \frac{1}{2} \hbar.$$

Si può dimostrare che la gaussiana è la funzione che rende minimo il prodotto delle indeterminazioni, e quindi per una generica funzione d'onda si dovrà scrivere

$$(1.13) \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar.$$

2. Conseguenze del principio di indeterminazione

Data la piccolezza della costante \hbar nelle unità di misura naturali della fisica classica ($\hbar = 1.0546 \times 10^{-27}$ erg s), gli effetti del principio di indeterminazione sono del tutto trascurabili nel mondo macroscopico¹, mentre diventano essenziali nel mondo atomico e subatomico. Si può quindi affermare che il principio di indeterminazione stabilisce una distinzione assoluta fra sistemi 'grandi' e sistemi 'piccoli' o microsistemi.

Questo principio introduce inoltre il concetto di *grandezze non compatibili*, un concetto del tutto nuovo rispetto alla fisica classica. Si dice che due grandezze sono *compatibili* se si possono misurare contemporaneamente con precisione arbitraria. La (2.1) dice allora che q e p non sono compatibili. In particolare una misura idealmente precisa di q , cioè con $\Delta q = 0$, lascerebbe la corrispondente p del tutto indeterminata, cioè con $\Delta p = \infty$. Questo significa che una misura di p darebbe un risultato qualsiasi con la stessa probabilità. Se q e p non sono compatibili, in generale non lo saranno neppure due grandezze indipendenti $A(q, p)$ e $B(q, p)$.

In meccanica classica una grandezza fisica A prende il nome di 'variabile dinamica' ed è rappresentata da una funzione delle coordinate canoniche q e p , $A = A(q, p)$. È inteso che il valore della funzione deve corrispondere al risultato della misura. È evidente che in meccanica quantistica la relazione $A = A(q, p)$ non può avere lo stesso significato, cioè non si può pensare di dedurre il valore di A dai valori delle coordinate q e p , che non possono essere determinati allo stesso istante. Il valore di A si potrà allora ottenere solo con una misura diretta. Si dice che una grandezza fisica è *definita in modo operativo*, intendendo che essa può essere determinata mediante uno specificato procedimento di misura.

¹ Consideriamo come esempio una sferetta di massa pari a 1 mg e di cui si voglia misurare la posizione del centro con una precisione (raggiungibile con metodi ottici) di $0.1 \mu\text{m} = 10^{-5}$ cm. Dalla relazione (1.13) risulta che l'indeterminazione sulla velocità è dell'ordine di 10^{-19} cm/s, che è di molti ordini di grandezza più piccola della precisione raggiungibile con una misura.

Consideriamo come esempio il momento angolare di un punto materiale rispetto all'origine, definito da $\mathbf{M} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$. Dall'incompatibilità fra le x_i e le p_i si ricavano in particolare le seguenti conseguenze:

- 1) il valore di una componente, per esempio $M_z = xp_y - yp_x$, non può essere dedotto dalla conoscenza delle variabili x, y, p_x, p_y , che non sono fra loro compatibili;
- 2) M_z stesso non è compatibile con nessuna delle variabili x, y, p_x, p_y ;
- 3) due diverse componenti di \mathbf{M} non sono compatibili fra di loro.

La relazione fra grandezze e misure verrà discussa nel prossimo paragrafo, mentre sulla rappresentazione delle grandezze fisiche torneremo al § 6.

Un'altra conseguenza importante del principio di indeterminazione riguarda le equazioni della dinamica. Consideriamo per esempio le equazioni canoniche della meccanica classica

$$(2.1) \quad \begin{cases} \dot{q}(t) = \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_i} \\ \dot{p}(t) = -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q_i} \end{cases}$$

Queste equazioni si possono integrare, e si può quindi determinare completamente il moto del sistema, se si conoscono le condizioni iniziali $q_i(0)$ e $p_i(0)$. Ma poiché queste non possono essere tutte determinate a causa del principio di indeterminazione, ne segue che il moto del sistema rimane indeterminato.

Da questo segue che anche la traiettoria non può essere esattamente determinata. Infatti la traiettoria è definita come la curva percorsa dal punto rappresentativo del sistema nello spazio delle configurazioni, di equazioni parametriche $q_i = q_i(t)$. Classicamente la traiettoria è univocamente determinata dalle condizioni iniziali $q_i(0)$ e $\dot{q}_i(0)$. Ma anche in questo caso, essendo i $\dot{q}_i(0)$ funzioni dei p_i , le condizioni iniziali non possono essere esattamente determinate e quindi anche la traiettoria risulta indeterminata.

Alle dimensioni atomiche, questa indeterminazione è tale che il concetto stesso di traiettoria perde di significato. Consideriamo ad esempio il modello di Bohr dell'atomo di idrogeno, secondo il quale l'elettrone descrive un'orbita circolare di raggio r . Perché il modello abbia senso bisogna che l'orbita possa essere osservata e quindi che si possa misurare una generica coordinata x nel piano del moto con un errore $\Delta x \ll r$. Lasciando p_x indeterminato, cioè con $-p \leq p_x \leq p$, dove p è il modulo dell'impulso sull'orbita, si ha $\Delta p_x \simeq p$ e dalla relazione di indeterminazione segue $\Delta x \gtrsim \hbar/p$. La precedente condizione risulta quindi $pr \gg \hbar$. Ma pr è il momento angolare dell'elettrone, che per la condizione di Bohr è dato da $pr = n\hbar$, dove n è il numero quantico principale. La nostra condizione sull'orbita diventa allora $n \gg 1$ e non è chiaramente soddisfatta per lo stato fondamentale ($n = 1$) né per i primi stati eccitati. Si deve quindi concludere che alla luce del principio di indeterminazione l'orbita dell'elettrone secondo il modello di Bohr non può essere osservata e non ha quindi senso parlarne.

D'altra parte è ben noto che le particelle cariche lasciano delle tracce visibili lungo la loro traiettoria in appositi rivelatori quali le emulsioni fotografiche, le camere a nebbia e le camere a bolle. Ci possiamo rendere conto che l'esistenza di queste tracce è compatibile col principio di indeterminazione a causa della loro larghezza finita, che va da circa $1 \mu\text{m}$ per le emulsioni fotografiche a circa 1mm per le camere a bolle. Se indichiamo con d la larghezza della traccia, l'osservazione della particella in un punto della traiettoria provoca un'indeterminazione angolare

della direzione successiva pari a $\alpha \simeq \Delta p_{\perp}/p \simeq h/pd = \lambda/d$, dove λ è la lunghezza d'onda di de Broglie. Considerando un elettrone non relativistico di 1 KeV si ha $\lambda = 3.9 \times 10^{-9}$ cm e con $d = 1 \mu\text{m}$ risulta $\alpha \simeq 3.9 \times 10^{-5}$, pari a circa 8 secondi d'arco, che è praticamente trascurabile. Il valore di α risulta ancora più piccolo per particelle più pesanti o più energetiche.

3. Stati, grandezze, misure

Consideriamo un sistema meccanico con N gradi di libertà. Classicamente uno stato del sistema è completamente determinato se si conoscono a un dato istante le $2N$ coordinate canoniche (q, p) . Come si è già detto, una grandezza fisica A è rappresentata da una funzione delle q e delle p : $A = A(q, p, t)$ e il valore della funzione a un dato istante corrisponde al risultato di una eventuale misura. Pertanto la misura di una data grandezza in un dato stato del sistema dà sempre un risultato univoco (a parte gli errori).

In meccanica quantistica la situazione è profondamente diversa, poiché le coordinate q_i e p_i non sono compatibili fra di loro e non possono quindi essere tutte utilizzabili per determinare lo stato del sistema. Uno stato del sistema, che chiameremo *stato quantico*, sarà allora determinato dalla conoscenza simultanea di un set massimo di grandezze che siano indipendenti e compatibili fra di loro.

Una grandezza fisica misurabile prende il nome di *osservabile*. Se a un dato istante viene eseguita la misura di una o più osservabili compatibili si dice che si fa un'*osservazione* del sistema e se le osservabili misurate sono in numero massimo si dice che si fa un'*osservazione massima*.

Chiameremo brevemente 'osservazione massima' un set massimo di osservabili indipendenti e compatibili. Per esempio le coordinate lagrangiane q_1, \dots, q_N ovvero i momenti coniugati p_1, \dots, p_N costituiscono due diverse osservazioni massime del sistema. Questo ci mostra che una generica osservazione massima consiste in generale di N grandezze, mentre in meccanica classica questo numero è $2N$.

Sia dunque $\{A_1, A_2, \dots, A_N\}$ un'osservazione massima del sistema e siano $a = \{a_1, a_2, \dots, a_N\}$ i valori osservati di queste grandezze. Lo stato quantico corrispondente lo indicheremo col simbolo $|a\rangle$, secondo la notazione introdotta da Dirac. Se il sistema si trova nello stato $|a\rangle$ e viene eseguita una misura di una delle A_i , il risultato è dato univocamente da a_i . In questo caso diremo che $|a\rangle$ è un *autostato* di A_i .

Ogni osservabile ammette sempre almeno un autostato per ogni possibile risultato della misura. Viceversa, in un dato stato $|a\rangle$ del sistema, la misura di una osservabile B incompatibile con le A_i non potrà dare un risultato univoco. Questo vuol dire che se ripetessimo più volte la misura di B , col sistema sempre nello stato $|a\rangle$, si otterrebbero di volta in volta risultati diversi b_1, b_2, \dots . Il risultato di una singola misura non è quindi prevedibile², ma la meccanica quantistica ci permette di calcolare a priori le probabilità di ottenere i diversi risultati.

Dalla discussione precedente emergono due risultati importanti. Uno è che in generale il risultato di una misura non è —come in meccanica classica— una funzione univoca dello stato. L'altro è che un'osservazione del sistema influisce fortemente su di esso, poiché ne cambia brus-

² Il fatto che una singola misura non possa dare, in generale, un risultato certo è uno degli aspetti più sorprendenti della meccanica quantistica. Da questo trae origine il concetto di *indeterminismo*, che ha avuto una grande importanza anche in campo filosofico.

camente lo stato quantico. Infatti se il sistema si trova inizialmente nello stato $|a\rangle$ e viene fatta la misura di B ottenendo il risultato b_k , dopo la misura il sistema si verrà a trovare nell'autostato $|b_k\rangle$.

4. Il principio di sovrapposizione

Proseguendo questa discussione, ci possiamo porre una domanda. Si è detto che se il sistema è nello stato $|a\rangle$ e si esegue la misura di B , si ha una certa probabilità P_k di trovare il risultato b_k , ovvero —il che è equivalente— di trovare il sistema nell'autostato $|b_k\rangle$, con $k = 1, 2, \dots$. Si potrebbe pensare di esprimere lo stato $|a\rangle$ come una miscela statistica degli autostati $|b_k\rangle$ con pesi P_k . Questa descrizione però non sarebbe corretta poiché, prima di fare la misura, lo stato quantico del sistema è uno stato ben definito, detto *stato puro*, e non una miscela statistica di stati. È possibile allora esprimere lo stato $|a\rangle$ per mezzo degli autostati $|b_k\rangle$? La meccanica quantistica risponde a questa domanda in modo affermativo, dicendo che lo stato $|a\rangle$ è una *sovrapposizione* degli autostati $|b_k\rangle$. Vale in generale il seguente principio:

Principio di sovrapposizione degli stati. *Un generico stato quantico di un sistema si può pensare come una sovrapposizione degli autostati di una data osservabile.*

Vale anche il viceversa, che può essere enunciato in forma generale dicendo che *una sovrapposizione di stati puri è ancora uno stato puro*.

Con il concetto di ‘sovrapposizione’ si intende che lo stato del sistema è costituito allo stesso tempo da tutti gli autostati componenti, ciascuno dei quali interviene non solo con un dato peso statistico, ma in modo coerente, cioè anche con una data ‘fase’. Questo principio potrà essere capito meglio analizzando alcuni esempi fisici, che ci suggeriranno per esso una precisa formulazione matematica.

5. Esempio: stati di polarizzazione di un fotone

Come esempio di sovrapposizione degli stati, discutiamo il caso degli stati di polarizzazione di un fotone. Consideriamo un raggio di luce monocromatica polarizzata linearmente, che si propaga lungo l'asse z . Sia $\boldsymbol{\varepsilon}$ il versore di polarizzazione³, giacente nel piano xy , e facciamo passare il raggio attraverso un filtro polarizzatore, che in questo caso serve come analizzatore della polarizzazione. Il filtro giace nel piano xy e può ruotare attorno all'asse z . Esso ha una direzione caratteristica $\boldsymbol{\varepsilon}_1$, ortogonale all'asse z , che è la direzione della polarizzazione della luce uscente.

Nell'ottica classica si osservano i seguenti fenomeni.

- 1) Se $\boldsymbol{\varepsilon}$ è parallelo a $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ il raggio di luce passa inalterato attraverso il filtro, mentre se $\boldsymbol{\varepsilon}$ è ortogonale a $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ il raggio viene completamente assorbito.
- 2) Se $\boldsymbol{\varepsilon}$ forma un angolo⁴ α con $\boldsymbol{\varepsilon}_1$, la luce uscente è polarizzata lungo $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ ed ha una intensità ridotta, rispetto a quella incidente, di un fattore $\cos^2\alpha$ (legge di Malus).

³ $\boldsymbol{\varepsilon}$ è la direzione di vibrazione del potenziale vettore $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = A_0 \boldsymbol{\varepsilon} \cos(kz - \omega t + \phi)$.

⁴ Poiché dei versori $\boldsymbol{\varepsilon}$ e $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ interessano solo le direzioni e non i versi, possiamo prendere $0 \leq \alpha \leq \pi/2$.

Osserviamo che i casi del punto 1) corrispondono ai casi particolari $\alpha = 0$ e $\alpha = \pi/2$ del punto 2). Secondo la meccanica quantistica il raggio di luce è costituito da un fascio di fotoni identici, ciascuno dei quali può essere rappresentato da un treno d'onde con vettore di propagazione⁵ \mathbf{k} parallelo all'asse z , pulsazione $\omega = ck$ e polarizzazione $\boldsymbol{\varepsilon}$ ortogonale a \mathbf{k} . Poiché ogni fotone agisce come un tutto unico, ci chiediamo cosa accade a un singolo fotone quando incontra il filtro polarizzatore.

Prendiamo, nel piano ottico del filtro, un sistema di assi cartesiani ortogonali x e y , in modo che $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ sia il versore dell'asse x e sia $\boldsymbol{\varepsilon}_2$ il versore dell'asse y .

I casi del precedente punto 1) ammettono una interpretazione ovvia: se la polarizzazione $\boldsymbol{\varepsilon}$ del fotone incidente è parallela a $\boldsymbol{\varepsilon}_1$, allora il fotone passa inalterato, mentre se è parallela a $\boldsymbol{\varepsilon}_2$ il fotone viene assorbito. In questi casi il risultato dell'osservazione è univoco, quindi $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ e $\boldsymbol{\varepsilon}_2$ rappresentano i due autostati della polarizzazione del fotone.

L'interpretazione del caso 2) non è invece per niente ovvia. Poiché i fotoni incidenti sono tutti uguali, si potrebbe pensare che seguissero tutti la stessa sorte; ma poiché un singolo fotone non si può dividere in due, si deve ammettere che alcuni fotoni passino attraverso il filtro e altri vengano assorbiti. Non possiamo quindi prevedere quale sarà la sorte di un singolo fotone incidente, ma possiamo dire che esso ha una probabilità di passare uguale a $\cos^2\alpha$, poiché sul grande numero dei fotoni del fascio la frazione che passa è appunto data da $\cos^2\alpha$.

Osserviamo anche che i fotoni che passano attraverso il filtro cambiano la loro polarizzazione da $\boldsymbol{\varepsilon}$ a $\boldsymbol{\varepsilon}_1$. Il principio di sovrapposizione afferma nel nostro caso che lo stato di polarizzazione $\boldsymbol{\varepsilon}$ si può pensare, in relazione alla misura fatta con il filtro, come una sovrapposizione dei due autostati con polarizzazione $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ e $\boldsymbol{\varepsilon}_2$, con probabilità rispettivamente $\cos^2\alpha$ e $\sin^2\alpha$.

Possiamo fare un passo avanti osservando che al concetto di 'sovrapposizione' degli stati si può dare il significato formale di *combinazione lineare*, se facciamo corrispondere agli stati di polarizzazione i versori corrispondenti. Infatti scomponendo il versore $\boldsymbol{\varepsilon}$ lungo gli assi x e y si ha:

$$(5.1) \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \cos\alpha \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \sin\alpha \boldsymbol{\varepsilon}_2.$$

Questa relazione ci mostra anche che la probabilità di trovare la polarizzazione del fotone in uno degli autostati $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ o $\boldsymbol{\varepsilon}_2$ è data dal quadrato del relativo coefficiente dello sviluppo.

6. Generalizzazione dei risultati

L'esempio discusso nel paragrafo precedente è particolarmente semplice perché ha a che fare con due stati soltanto. Tuttavia i risultati emersi dalla discussione hanno validità generale e, opportunamente formulati, faranno parte dei postulati della meccanica quantistica. Questi risultati possono essere riassunti nel modo seguente.

1. Possiamo associare a un generico stato quantico di un sistema un elemento $|\psi\rangle$ di un opportuno spazio vettoriale, che chiameremo con Dirac un *vettore 'ket'*. Questo vettore, che sarà preso di norma 1, prende il nome di *vettore di stato*.

⁵ Se il treno d'onde ha una lunghezza l , il numero d'onde $k = |\mathbf{k}|$ non sarà esattamente definito, ma avrà una indeterminazione $\Delta k \simeq 2\pi/l$, ovvero $\Delta k/k \simeq \lambda/l$. Questo fatto è però irrilevante nella presente discussione.

2. Ogni grandezza osservabile A ammette un insieme di autostati $|a_k\rangle$ che chiameremo *autovettori*, almeno uno per ogni possibile risultato a_k della misura.

3. L'insieme degli autovettori costituisce una base ortonormale dello spazio, per cui qualunque vettore di stato può essere espresso come combinazione lineare (in generale a coefficienti complessi) degli autovettori:

$$(6.1) \quad |\psi\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle.$$

Questo sviluppo costituisce l'espressione formale del principio di sovrapposizione.

4. La probabilità P_k di trovare il risultato a_k dalla misura di A è data dal modulo quadro del coefficiente c_k dello sviluppo (6.1):

$$(6.2) \quad P_k = |c_k|^2.$$

Consideriamo lo spazio vettoriale degli stati. La dimensione dello spazio è data dal numero di stati indipendenti del sistema. Nel caso della polarizzazione di un fotone che si propaga in una direzione fissata, gli stati indipendenti sono solo due e questo ci ha permesso di rappresentare gli stati per mezzo di versori nel piano xy . Ma in generale gli stati di un sistema possono essere infiniti. Basti pensare ai modi di oscillazione del campo elettromagnetico in una cavità (caso del corpo nero), ovvero agli stati dell'impulso di una particella confinata in una regione a forma di parallelepipedo, oppure ai livelli energetici di un elettrone in un atomo d'idrogeno. In questi casi lo spazio degli stati deve avere dimensione infinita.

Inoltre lo spazio deve essere dotato di un prodotto scalare. Questo infatti ci permette di ottenere i coefficienti c_k della (6.1) come i prodotti scalari fra gli $|a_k\rangle$ e $|\psi\rangle$, che nel formalismo di Dirac si scrivono

$$(6.3) \quad c_k = \langle a_k | \psi \rangle.$$

Tramite la (6.2), questo ci permette di calcolare le probabilità P_k , che vengono a dipendere unicamente —come deve essere— dallo stato iniziale e dai valori a_k .

Infine il principio di sovrapposizione richiede che qualunque vettore di stato $|\psi\rangle$ possa essere sviluppato secondo la (6.1). Vogliamo richiedere che valga anche il viceversa, cioè che qualunque combinazione lineare convergente degli $|a_k\rangle$ corrisponda a un vettore di stato del sistema. Le proprietà che abbiamo esposto caratterizzano uno spazio di Hilbert. Assumeremo quindi come principio che lo spazio dei vettori di stato sia uno spazio di Hilbert \mathcal{H} .

Vediamo ora come si possono rappresentare le grandezze fisiche. Dalle precedenti discussioni risulta che in meccanica quantistica le osservabili devono avere le seguenti proprietà.

1) A una data osservabile reale A si può associare l'insieme dei valori reali a_1, a_2, \dots , che sono i possibili risultati delle misure. A un dato risultato a_k è poi associato (almeno) un autovettore $|a_k\rangle$.

2) La misura di A in un generico stato $|\psi\rangle$ non dà un risultato univoco. Si può ottenere un qualsiasi risultato a_k con una data probabilità P_k .

3) Due generiche osservabili A e B non sono in generale compatibili. In questo caso non possono esistere stati del sistema che siano allo stesso tempo autostati di A e di B .

È evidente che l'osservabile A non può essere rappresentata da una funzione delle variabili caratteristiche dello stato, poiché questa darebbe sempre un risultato univoco. Un concetto che invece risponde in pieno alle nostre esigenze è quello di *operatore lineare autoaggiunto* nello spazio di Hilbert degli stati. Vediamo come in questo modo si possano soddisfare le proprietà elencate sopra.

1) Indichiamo con \hat{A} l'operatore che rappresenta la grandezza A . Per esso si può scrivere l'equazione agli autovalori

$$(6.4) \quad \hat{A} |a_k\rangle = a_k |a_k\rangle,$$

ed esiste un teorema che assicura che gli autovalori a_k sono reali e gli autovettori $|a_k\rangle$ sono fra loro ortogonali. Questo ci permette di interpretare gli autovalori a_k come i risultati delle misure e gli autovettori $|a_k\rangle$ come i corrispondenti autostati del sistema.

2) Se prendiamo l'insieme degli $|a_k\rangle$, opportunamente normalizzati, come una base ortonormale dello spazio \mathcal{H} , un generico vettore di stato $|\psi\rangle$ può essere sviluppato secondo la (6.1). Se $|\psi\rangle$ non è uno degli autovettori $|a_k\rangle$, una misura di A può dare tutti i risultati a_k contenuti nello sviluppo, con probabilità date dalla (6.2).

3) Fra due operatori \hat{A} e \hat{B} è definito un prodotto $\hat{A}\hat{B}$, che in generale non è commutativo: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Vedremo più avanti che due grandezze sono compatibili se e solo se gli operatori corrispondenti commutano, cioè se $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Si dimostra anche che se e solo se due operatori \hat{A} e \hat{B} commutano, essi ammettono un insieme di autovettori comuni.

7. Sommario del formalismo matematico

Richiamiamo brevemente il formalismo che sarà usato nel seguito. Al sistema fisico che si considera è associato uno spazio di Hilbert \mathcal{H} . Per indicare i vettori di stato, i prodotti scalari e i proiettori useremo le notazioni di Dirac dei vettori *ket*. Sia $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ un operatore lineare autoaggiunto che rappresenta una osservabile del sistema e siano σ_P e σ_C rispettivamente lo spettro discreto e lo spettro continuo di \hat{A} .

Se $a_k \in \sigma_P$ è un autovalore, indichiamo con $|a_k, r\rangle$ un set ortonormale e completo di autovettori, dove $r = 1, \dots, d_k$ (d_k finito o infinito) numera gli eventuali autovettori degeneri indipendenti. Lo spazio (di dimensione d_k) sotteso da questi autovettori degeneri viene chiamato *autospazio* relativo ad a_k . Indicando con \hat{P}_k il proiettore su questo autospazio, si hanno le seguenti equazioni:

$$(7.1) \quad \hat{A} |a_k, r\rangle = a_k |a_k, r\rangle$$

$$(7.2) \quad \langle a_k, r | a_l, s \rangle = \delta_{kl} \delta_{rs}$$

$$(7.3) \quad \sum_r |a_k, r\rangle \langle a_k, r| = \hat{P}_k$$

$$(7.4) \quad \hat{P}_k \hat{P}_l = \delta_{kl} \hat{P}_k; \quad \text{Tr } \hat{P}_k = d_k$$

Se invece $a \in \sigma_C$, non esistono autovettori propri, cioè di norma finita. È utile tuttavia introdurre gli *autovettori generalizzati* $|a, r\rangle$, tali che:

$$(7.5) \quad \hat{A} |a, r\rangle = a |a, r\rangle$$

$$(7.6) \quad \langle a, r | a', s \rangle = \delta_{rs} \delta(a - a')$$

$$(7.7) \quad \sum_r |a, r\rangle \langle a, r| = \frac{d}{da} \hat{P}(a_0, a), \quad a_0 \in \sigma_C$$

dove $\delta(a - a')$ è la distribuzione delta di Dirac e $\hat{P}(a_0, a)$ è il proiettore associato all'intervallo $(a_0, a) \subset \sigma_C$, che si può scrivere nella forma⁶

$$(7.8) \quad \hat{P}(a_0, a) = \int_{a_0}^a \sum_r |a, r\rangle \langle a, r| da.$$

La (7.6) implica che i vettori $|a, r\rangle$ abbiano norma infinita: $\langle a, r | a, r \rangle = \delta(0) = \infty$. Essi pertanto non appartengono allo spazio \mathcal{H} , ma a uno spazio più ampio $\tilde{\Phi}$ (si veda il § 8). Per questa ragione i vettori $|a, r\rangle$ non possono rappresentare stati fisici del sistema, ma possono costituire una base generalizzata in \mathcal{H} , come è mostrato dalla (7.10).

La *risoluzione dell'identità* (detta anche *relazione di completezza*) si può scrivere:

$$(7.9) \quad \sum_k \hat{P}_k + \int_{\sigma_C} d\hat{P}(a_0, a) = \mathbb{1},$$

ovvero, con le notazioni di Dirac:

$$(7.9') \quad \sum_{k,r} |a_k, r\rangle \langle a_k, r| + \int_{\sigma_C} \sum_r |a, r\rangle \langle a, r| da = \mathbb{1}.$$

Ovviamente se lo spettro di \hat{A} è solo discreto, oppure solo continuo, al primo membro delle (7.9) e (7.9') compaiono solo i contributi corrispondenti. Applicando la (7.9') a un generico vettore $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ si ottiene lo sviluppo

$$(7.10) \quad |\psi\rangle = \sum_{k,r} \langle a_k, r | \psi \rangle |a_k, r\rangle + \int_{\sigma_C} \sum_r \langle a, r | \psi \rangle |a, r\rangle da,$$

che generalizza quello delle (6.1) e (6.3).

Applicando l'operatore \hat{A} alle (7.9) e (7.9'), portandolo dentro la sommatoria e l'integrale del primo membro e utilizzando le (7.1) e (7.5), si ottiene:

$$(7.11) \quad \hat{A} = \sum_k a_k \hat{P}_k + \int_{\sigma_C} a d\hat{P}(a_0, a),$$

$$(7.11') \quad \hat{A} = \sum_{k,r} a_k |a_k, r\rangle \langle a_k, r| + \int_{\sigma_C} a \sum_r |a, r\rangle \langle a, r| da.$$

Queste espressioni⁷ rappresentano la *decomposizione spettrale* dell'operatore \hat{A} .

⁶ Le (7.7) e (7.8) valgono $\forall a_0, a \in \sigma_C$ nell'ipotesi che σ_P e σ_C siano insiemi disgiunti.

⁷ Le (7.11) e (7.11') valgono in tutto \mathcal{H} se \hat{A} è limitato. Se invece \hat{A} non è limitato, queste relazioni possono valere solo in un dominio $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$ per ragioni di convergenza.

8. Il rigged Hilbert space *

Il formalismo usato nel paragrafo precedente è stato introdotto in maniera euristica da Dirac verso il 1930, nella prima formulazione assiomatica della meccanica quantistica. Tale formulazione ha poi ricevuto una sistemazione matematica in anni più recenti, con gli sviluppi della teoria delle distribuzioni (Schwartz, ~ 1950), del rigged Hilbert space (Gel'fand, ~ 1960) e della applicazione di questo ai fondamenti della meccanica quantistica (Bohm, ~ 1965). Accenneremo ora brevemente al rigged Hilbert space (spazio di Hilbert 'rivestito').

Si consideri lo spazio di Hilbert \mathcal{H} del sistema fisico. In esso è definita l'algebra \mathcal{A} degli operatori lineari, associativa e con identità, e siano \hat{X}_i ($i = 1, \dots, n$) i generatori dell'algebra, cioè un insieme di operatori essenzialmente autoaggiunti, tale che qualunque operatore \hat{A} sia esprimibile come funzione degli \hat{X}_i ⁸. Posto $\hat{K} = \mathbb{1} + \sum_{i=1}^n \hat{X}_i^2$, \hat{K} risulta essenzialmente autoaggiunto e definito positivo.

Si consideri allora lo spazio lineare Φ , tale che $\forall \varphi, \psi \in \Phi$ sia $(\varphi, \psi)_p \stackrel{\text{def}}{=} (\varphi, \hat{K}^p \psi) < \infty$, $\forall p \in \mathbf{N}$. Si vede subito che, per ogni intero p , $(\varphi, \psi)_p$ ha le proprietà di un prodotto scalare e si può definire la norma p come $\|\varphi\|_p = (\varphi, \varphi)_p^{1/2}$. Per ogni elemento $\varphi \in \Phi$ si può allora definire una famiglia di norme $\|\varphi\|_p$, con $p = 0, 1, 2, \dots$, per cui si ha $0 \leq \|\varphi\|_0 \leq \|\varphi\|_1 \leq \|\varphi\|_2 \leq \dots$. Questo stabilisce in Φ una topologia⁹ τ più forte di quella di \mathcal{H} (per cui è definita solo la norma $p = 0$) e di conseguenza si ha $\Phi \subset \mathcal{H}$. Si dimostra che Φ è completo rispetto a τ e che tutti gli operatori dell'algebra \mathcal{A} sono τ -continui¹⁰ e perciò definiti su tutto Φ .

Si consideri poi un funzionale $f(\varphi)$ antilineare in $\varphi \in \Phi$ (cioè tale che $\bar{f}(\varphi)$ sia lineare in φ) e τ -continuo su Φ , che indicheremo con $f(\varphi) = \langle \varphi | f \rangle$. L'insieme $\{f\}$ di questi funzionali costituisce uno spazio $\tilde{\Phi}$ duale di Φ . Se $f \in \mathcal{H}$, l'ordinario prodotto scalare $f(\varphi) = (\varphi, f)$ è un tale funzionale antilineare e τ -continuo, per cui si ha $f \in \tilde{\Phi}$. Risulta pertanto $\mathcal{H} \subset \tilde{\Phi}$.

In conclusione la terna di spazi Φ , \mathcal{H} e $\tilde{\Phi}$ soddisfa alle relazioni $\Phi \subset \mathcal{H} \subset \tilde{\Phi}$ e viene denominata *rigged Hilbert space* o terna di Gel'fand.

Nello spazio $\tilde{\Phi}$ possiamo stabilire una topologia $\tilde{\tau}$ più debole di quella di \mathcal{H} , come la convergenza debole. Si dice che $\{f_n\}$ converge debolmente a f , con $f_n, f \in \tilde{\Phi}$, se $\langle \varphi | f_n \rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \langle \varphi | f \rangle$, $\forall \varphi \in \Phi$. Si dimostra che $\tilde{\Phi}$ è completo rispetto a $\tilde{\tau}$. In esso però non sono definiti né una norma né un prodotto scalare e non esiste una base numerabile.

Consideriamo come esempio il caso di un punto materiale in una dimensione. Sia $|x\rangle$ l'autovettore generalizzato dell'operatore di posizione \hat{x} , tale che $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$, $x \in \mathbf{R}$. Sia poi $\varphi(x) = \langle x | \varphi \rangle$, con $|\varphi\rangle \in \Phi$, e quindi $|x\rangle \in \tilde{\Phi}$. La τ -continuità di $\varphi(x)$ implica che sia $|x^p \varphi(x)| < \infty$, $\forall x \in \mathbf{R}$, $\forall p, q \in \mathbf{N}$, per cui $\varphi(x)$ appartiene allo spazio di Schwartz. Dalla (7.9') si ha poi $\int \langle x | x' \rangle \varphi(x') dx' = \varphi(x)$, da cui, per definizione della delta di Dirac, si ha $\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$.

* Questo paragrafo ha un carattere essenzialmente formale ed è riportato solo per completezza. A una prima lettura può essere omesso senza compromettere la comprensione del resto.

⁸ Ad esempio per un punto materiale possiamo prendere come generatori le coordinate \hat{x}_i e gli impulsi \hat{p}_i .

⁹ In particolare diremo che una successione (di Cauchy) $\{\varphi_n\}$ τ -converge a φ : $\varphi_n \xrightarrow{\tau} \varphi$, se $\|\varphi_n - \varphi\|_p \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$, $\forall p \in \mathbf{N}$.

¹⁰ Diremo che un operatore \hat{A} è τ -continuo se per ogni successione di Cauchy $\{\varphi_n\}$, tale che $\varphi_n \xrightarrow{\tau} \varphi$, si ha $\hat{A}\varphi_n \xrightarrow{\tau} \hat{A}\varphi$.

9. Stati quantici e loro rappresentazione

Riprendiamo la discussione sugli stati quantici di un sistema, già affrontata nei paragrafi precedenti. Una distinzione importante che dobbiamo fare è quella fra *stato puro* e *miscela statistica di stati*.

Uno stato puro è uno stato esattamente definito dal punto di vista quantistico, cioè uno stato per cui una data osservazione massima $\hat{A} = \{\hat{A}^{(1)}, \hat{A}^{(2)}, \dots, \hat{A}^{(n)}\}$ abbia dato un risultato ben definito, consistente in un insieme di autovalori $a = \{a_{k_1}^{(1)}, a_{k_2}^{(2)}, \dots, a_{k_n}^{(n)}\}$, tutti appartenenti allo spettro discreto. Esempi di stati puri sono gli autostati dell'energia di un oscillatore armonico unidimensionale e gli autostati dell'energia e del momento angolare per gli stati legati dell'atomo d'idrogeno.

A uno stato puro si può quindi associare un vettore $|a\rangle$ dello spazio di Hilbert \mathcal{H} , che è autovettore simultaneo delle $\hat{A}^{(i)}$ con autovalori $a_{k_i}^{(i)}$. Una tale corrispondenza tuttavia non può essere biunivoca, poiché l'autovettore $|a\rangle$ è determinato a meno di una costante moltiplicativa. Possiamo invece stabilire una corrispondenza biunivoca fra uno stato puro e l'insieme di tutti i vettori proporzionali ad $|a\rangle$: $h_a = \{c|a\rangle \mid c \in \mathbf{C}\}$. Tale insieme è un sottospazio unidimensionale di \mathcal{H} , che è l'autospazio degli $\hat{A}^{(i)}$ con autovalori $a_{k_i}^{(i)}$, e viene denominato *raggio*.

Ci possiamo anche restringere all'insieme dei vettori normalizzati $e^{i\alpha}|a\rangle$, con $\langle a|a\rangle = 1$ e $0 \leq \alpha < 2\pi$, detto *raggio unitario*. Potremo quindi affermare, con il 1° postulato, che a uno stato puro del sistema corrisponde un raggio unitario di \mathcal{H} .

Oltre al caso degli stati puri si possono presentare i casi seguenti.

i) Il sistema non è completamente determinato, cioè l'osservazione fatta sul sistema non è un'osservazione massima.

ii) Vengono misurate delle osservabili con spettro continuo, come la posizione o l'impulso di una particella. In questo caso, una misura di una tale osservabile \hat{A} fatta con qualunque strumento reale, non potrà mai dare esattamente un valore $a \in \sigma_C$, ma sarà sempre affetta da un certo errore sperimentale δa e sarà espressa dal risultato $a \pm \delta a$.

iii) Il sistema è costituito da un insieme statistico di sistemi identici, per esempio di atomi, che si trovano in diversi stati quantici. In questo caso lo stato di un sistema generico non può essere descritto da uno stato puro, ma si ha a che fare con una miscela statistica di stati.

Il caso *i)* si può ricondurre al *iii)* assegnando arbitrariamente la stessa probabilità a tutti i valori delle grandezze non misurate, mentre il caso *ii)* si può ricondurre a quello dello stato puro nel limite ideale in cui $\delta a \rightarrow 0$. Si parla infatti comunemente di autostati dell'energia o dell'impulso anche nel caso di stati non legati, per cui i valori di queste grandezze appartengono al continuo. Dal punto di vista concettuale si deve però tener presente che si tratta di estrapolazioni ideali a stati che non possono essere fisicamente realizzati. Questa estrapolazione si riflette nel fatto che i relativi vettori di stato hanno norma infinita.

In definitiva gli stati di un sistema possono essere di due tipi: stati puri o miscele statistiche di stati. Anche nel caso di una miscela statistica, lo stato del sistema si può rappresentare con un ente matematico. Infatti la seconda parte del 1° postulato afferma che qualsiasi stato fisico può essere rappresentato da un operatore \hat{W} , detto *operatore statistico* (o anche *operatore densità*). L'informazione fisica necessaria per specificare lo stato, e quindi l'operatore \hat{W} , è data dalla distribuzione statistica dei risultati di una data osservazione.

Per arrivare a definire l'operatore statistico, partiamo dal caso dello stato puro, che si può

pensare come un caso particolare di miscela. Si è visto che a uno stato puro corrisponde un raggio (unitario) h_φ di \mathcal{H} . D'altra parte ad h_φ è associato un proiettore $\hat{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$, con $\text{Tr} \hat{P}_\varphi = \dim(h_\varphi) = 1$, e tale che $h_\varphi = \hat{P}_\varphi \mathcal{H}$. Pertanto allo stato puro si può anche associare il proiettore \hat{P}_φ e si può identificare \hat{W} con \hat{P}_φ :

$$(9.1) \quad \hat{W} = \hat{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|.$$

Consideriamo adesso il caso di una osservabile (o più in generale di una osservazione massima) \hat{A} con spettro discreto. Supponiamo di avere una collezione di molti sistemi identici, che si possono trovare in diversi stati quantici, e di compiere la misura di \hat{A} su un sistema generico. Siano $a_k \in \sigma_P$ i possibili risultati della misura e w_k le relative probabilità (corrispondenti alle frequenze con cui i valori a_k vengono ottenuti ripetendo la misura). Allora \hat{W} è dato da

$$(9.2) \quad \hat{W} = \sum_k w_k \hat{P}_k = \sum_k w_k |a_k\rangle\langle a_k|,$$

dove $\hat{P}_k = |a_k\rangle\langle a_k|$ è il proiettore sul raggio relativo ad a_k .

Questa espressione estende la (9.1) al caso di una distribuzione statistica di stati puri. Essa ha la stessa forma della rappresentazione spettrale (7.11) (per la sola parte discreta) e ci dice che gli autovalori di \hat{W} sono le probabilità w_k , tali che

$$(9.3) \quad 0 \leq w_k \leq 1, \quad \sum_k w_k = 1.$$

Dalle (9.2) e (9.3) segue che \hat{W} è un operatore limitato (con norma $\|\hat{W}\| \leq 1$), autoaggiunto, semidefinito positivo (indicheremo questa proprietà con $\langle \hat{W} \rangle \geq 0$) e con traccia uguale a 1¹¹. Esplicitamente si ha:

$$(9.4) \quad \|\hat{W}\| \leq 1; \quad \hat{W}^\dagger = \hat{W}; \quad \langle \hat{W} \rangle \geq 0; \quad \text{Tr} \hat{W} = 1.$$

Queste proprietà saranno richieste a \hat{W} in ogni caso. Osserviamo che la proprietà della traccia corrisponde, nel caso di uno stato puro, a quella che il vettore di stato sia normalizzato.

Dalla (9.2), utilizzando le relazioni (7.4) con $d_k = 1$, si ottiene:

$$(9.5) \quad \text{Tr} \hat{W}^2 = \sum_k w_k^2 \leq 1$$

e l'uguaglianza si può avere soltanto se per un solo valore $k = k_0$ si ha $w_{k_0} = 1$, e $w_k = 0$ per tutti gli altri $k \neq k_0$, cioè soltanto nel caso di uno stato puro. Pertanto la condizione di stato puro si può scrivere

¹¹ Questo si vede facilmente prendendo gli $|a_n\rangle$ come base ortonormale in \mathcal{H} . Dalla (9.2) si ha infatti:

$$\text{Tr} \hat{W} = \sum_k w_k \sum_n \langle a_n | a_k \rangle \langle a_k | a_n \rangle = \sum_k w_k = 1.$$

$$(9.6) \quad \text{Tr } \hat{W}^2 = \text{Tr } \hat{W} = 1.$$

Dovendo avere traccia finita, l'operatore \hat{W} non può avere spettro continuo. Pertanto, se l'osservabile \hat{A} ha spettro continuo con autovettori generalizzati $|a\rangle$, \hat{W} non può essere espresso nella forma¹² $\int_{\sigma_C} g(a) |a\rangle\langle a| da$, che sarebbe la naturale generalizzazione¹³ della (9.2).

La matrice che rappresenta \hat{W} in una data base prende il nome di *matrice densità*. In particolare nella base $\{|a_k\rangle\}$, dalla (9.2) si ha

$$(9.7) \quad W_{kl} = \langle a_k | \hat{W} | a_l \rangle = w_k \delta_{kl},$$

cioè la matrice W è diagonale, con elementi dati dalle probabilità w_k .

Questo è un caso particolare di una proprietà generale che si può enunciare come segue. Siano: \hat{W} l'operatore statistico del sistema, \hat{B} una data osservabile, b_k un generico autovalore e $|b_k, r\rangle$ ($r = 1, \dots, d_k$) il corrispondente set di autovettori degeneri. Allora la probabilità che una misura di \hat{B} dia il risultato b_k è data dalla seguente somma degli elementi diagonali della matrice densità nella base $\{|b_k, r\rangle\}$:

$$(9.8) \quad w(b_k) = \sum_r \langle b_k, r | \hat{W} | b_k, r \rangle,$$

dove la somma su r rappresenta la somma sulle probabilità di tutti i valori delle grandezze compatibili con \hat{B} che non vengono misurate.

Se invece \hat{B} ha uno spettro continuo e $b \in \sigma_C$, vale un'equazione analoga alla (9.8):

$$(9.9) \quad w(b) = \sum_r \langle b, r | \hat{W} | b, r \rangle,$$

dove $w(b)$ rappresenta in questo caso la densità di probabilità per unità di intervallo di b .

Le (9.8) e (9.9) si estendono immediatamente al caso che \hat{B} sia un insieme di osservabili compatibili e b_k (ovvero b) sia un corrispondente insieme di autovalori. Se poi \hat{B} è un'osservazione massima, l'autospazio di b_k ha dimensione $d_k = 1$ e la somma su r scompare.

La (9.8), utilizzando l'espressione (7.3) per il proiettore $\hat{P}(b_k)$ sull'autospazio di b_k , si può riscrivere nella forma

$$(9.10) \quad w(b_k) = \text{Tr} [\hat{P}(b_k) \hat{W}],$$

che è formalmente indipendente dalla base scelta. Le equazioni (9.8) e (9.10) per la probabilità sono quelle che compariranno nel 4° postulato.

¹² Infatti, scegliendo in \mathcal{H} una qualunque base numerabile e ortonormale $\{|u_n\rangle\}$, si avrebbe:

$$\text{Tr} (|a\rangle\langle a|) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_n \langle u_n | a \rangle \langle a | u_n \rangle = \langle a | a \rangle = \infty.$$

¹³ Per questa generalizzazione ci sarebbe anche la difficoltà che $g(a)$ non potrebbe essere identificata con la densità di probabilità — come sarebbe naturale —, per ragioni dimensionali.

La (9.8) può essere facilmente verificata nei due casi seguenti.

a) Se il sistema si trova in uno stato puro con vettore di stato $|\psi\rangle$, l'operatore statistico, secondo la (9.1), è dato da $\hat{W} = |\psi\rangle\langle\psi|$, per cui la (9.8) dà

$$(9.11) \quad w(b_k) = \sum_r \langle b_k, r | \psi \rangle \langle \psi | b_k, r \rangle.$$

D'altra parte la probabilità $w(b_k)$ è data dalle (6.2) e (6.3) estese al caso degenero, cioè da

$$(9.11') \quad w(b_k) = \sum_r |\langle b_k, r | \psi \rangle|^2,$$

che coincide con la (9.11).

b) Se il sistema si trova in una miscela di stati puri, autostati di una osservazione massima \hat{A} , \hat{W} è dato dalla (9.2) e quindi $w(b_k)$, in base alla (9.8), risulta

$$(9.12) \quad w(b_k) = \sum_n w(a_n) \sum_r \langle b_k, r | a_n \rangle \langle a_n | b_k, r \rangle.$$

Questa relazione esprime $w(b_k)$ come la somma su tutti i possibili stati intermedi $|a_n\rangle$ della probabilità composta data dal prodotto della probabilità $w(a_n)$ che il sistema dato si trovi nello stato $|a_n\rangle$ per la probabilità che in tale stato la misura di \hat{B} dia il risultato b_k . Questa espressione è fisicamente corretta, e quindi la (9.8) è verificata.

10. I postulati della meccanica quantistica

Dopo aver presentato gli elementi fondamentali della fisica quantistica e del relativo formalismo matematico, passiamo alla enunciazione formale dei postulati.

I principi base della meccanica quantistica sono espressi da un certo numero di postulati. Il loro numero — e quindi anche il contenuto — non è però fissato in maniera standard, come per i principi della meccanica classica, e può variare da un testo a un altro. Noi, essenzialmente per ragioni di chiarezza, formuleremo un elenco di sette postulati distinti, richiedendo soltanto che essi siano indipendenti dal punto di vista concettuale, anche se possono esserci fra di essi delle relazioni abbastanza naturali, suggerite dal formalismo matematico. Di questi postulati, solo due (il 3° e il 4°) hanno un carattere predittivo sulle osservazioni fisiche, mentre gli altri cinque hanno un carattere essenzialmente descrittivo e formale; di questi ultimi, tre (1°, 5° e 6°) riguardano gli stati quantici e due (2° e 7°) le osservabili.

Postulato 1: gli stati quantici

A un dato sistema fisico S è associato uno spazio di Hilbert \mathcal{H}_S .

Ad ogni stato puro del sistema corrisponde un raggio unitario di \mathcal{H}_S , che contiene tutte le informazioni fisiche sul sistema.

Si può anche dire, in maniera equivalente:

Uno stato puro è rappresentato da un vettore $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_S$, detto vettore di stato, normalizzato e determinato a meno di un fattore di fase.

Più in generale:

Ad ogni stato quantico del sistema corrisponde un operatore \hat{W} lineare, limitato, autoaggiunto, semidefinito positivo e con traccia uguale a 1, detto operatore statistico.

Postulato 2: le osservabili

Ad ogni osservabile reale A relativa al sistema S corrisponde un operatore lineare autoaggiunto \hat{A} nello spazio \mathcal{H}_S .

Postulato 3: i valori delle misure

Il campo dei valori possibili per le misure di una osservabile A è dato dallo spettro dell'operatore \hat{A} corrispondente.

Postulato 4: probabilità di un risultato

Se il sistema si trova nello stato puro rappresentato dal vettore normalizzato $|\psi\rangle$, la probabilità che una misura dell'osservabile \hat{A} dia come risultato un valore $a_k \in \sigma_P$ è data da

$$(10.1) \quad w(a_k) = \langle \psi | \hat{P}(a_k) | \psi \rangle = \sum_r |\langle a_k, r | \psi \rangle|^2,$$

dove $\hat{P}(a_k)$ è il proiettore sull'autospazio di \hat{A} relativo all'autovalore a_k , dato dalla (7.3).

La (10.1) rappresenta un'estensione delle equazioni (6.2) e (6.3) al caso di un autospazio degenere. A sua volta la (10.1) può essere estesa immediatamente al caso della misura simultanea di più osservabili compatibili.

Se invece il risultato della misura di \hat{A} appartiene allo spettro continuo, esso avrà sempre un certo errore e sarà espresso nella forma $a \pm \delta a$. In questo caso si ha:

La probabilità che una misura di \hat{A} dia un risultato compreso nell'intervallo $(a_1, a_2) \in \sigma_C$ è data da

$$(10.2) \quad w(a_1, a_2) = \langle \psi | \hat{P}(a_1, a_2) | \psi \rangle = \int_{a_1}^{a_2} \sum_r |\langle a, r | \psi \rangle|^2 da,$$

dove per il proiettore $\hat{P}(a_1, a_2)$ si è utilizzata l'espressione (7.8).

Facendo il limite $a_2 - a_1 = \delta a \rightarrow 0$, possiamo definire la densità di probabilità per unità di intervallo di a come segue:

$$(10.3) \quad w(a) = \lim_{\delta a \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\delta a} w(a, a + \delta a) \right],$$

e supporremo che $w(a)$ sia una funzione reale, continua e non negativa di a . Dalla (10.2) si ricava allora che la densità di probabilità $w(a)$ è data da

$$(10.4) \quad w(a) = \sum_r |\langle a, r | \psi \rangle|^2.$$

Ovviamente le (10.2) e (10.4) si estendono subito al caso della misura simultanea di più osservabili.

Si verifica facilmente che le espressioni date dalle (10.1) e (10.4) soddisfano ai requisiti delle probabilità. In primo luogo si vede subito che $w(a_k)$ e $w(a)$ sono non negative. Inoltre, per la somma di tutte le probabilità (incluso l'integrale sulla parte continua) si ottiene:

$$(10.5) \quad \sum_k w(a_k) + \int_{\sigma_C} w(a) da = \sum_{k,r} \langle \psi | a_k, r \rangle \langle a_k, r | \psi \rangle + \int_{\sigma_C} \sum_r \langle \psi | a, r \rangle \langle a, r | \psi \rangle da = \langle \psi | \psi \rangle = 1,$$

dove si è usata la relazione di completezza (7.9').

Consideriamo ora il caso più generale di una miscela statistica di stati. Si ha allora:

Se lo stato del sistema è descritto dall'operatore statistico \hat{W} , la probabilità che la misura di una o più osservabili compatibili \hat{A} dia il risultato $a_k \in \sigma_P$ è data da

$$(10.6) \quad w(a_k) = \sum_k \langle a_k, r | \hat{W} | a_k, r \rangle = \text{Tr} [\hat{P}(a_k) \hat{W}].$$

Nel caso continuo, la probabilità di trovare un valore di a compreso in un intervallo finito (a_1, a_2) si ottiene dalla (10.6) sostituendo $\hat{P}(a_k)$ con $\hat{P}(a_1, a_2)$. La densità di probabilità per unità di intervallo della variabile $a \in \sigma_C$ è data da

$$(10.7) \quad w(a) = \sum_r \langle a, r | \hat{W} | a, r \rangle.$$

Postulato 5: riduzione dello stato

Se il sistema si trova nello stato puro rappresentato dal vettore normalizzato $|\psi_0\rangle$ e viene eseguita una misura di una o più osservabili compatibili \hat{A} ottenendo il risultato (o il set di risultati) $a_k \in \sigma_P$, allora, subito dopo la misura, il sistema si trova in un nuovo stato puro $|\psi_1\rangle$ dato da

$$(10.8) \quad |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{P}(a_k) |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r \langle a_k, r | \psi_0 \rangle |a_k, r\rangle,$$

dove $\hat{P}(a_k)$ è il proiettore sull'autospazio relativo ad a_k e N è un fattore di normalizzazione, il cui modulo risulta $|N| = \langle \psi_0 | \hat{P}(a_k) | \psi_0 \rangle = w(a_k)$, mentre la fase rimane arbitraria.

Osserviamo che il vettore di stato finale $|\psi_1\rangle$ è autovettore di \hat{A} con autovalore a_k , come deve essere. In particolare, se \hat{A} rappresenta un'osservazione massima, $|\psi_1\rangle$ coincide con $|a_k\rangle$, a meno di un fattore di fase, indipendentemente dallo stato iniziale.

Se invece il risultato della misura appartiene allo spettro continuo ed è compreso nell'intervallo (a_1, a_2) , il vettore di stato dopo la misura è dato da

$$(10.9) \quad |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{P}(a_1, a_2) |\psi_0\rangle.$$

Si può osservare che in questo caso $|\psi_1\rangle$ rappresenta ancora uno stato puro, ma esso non è un autovettore di \hat{A} , ma solo un autovettore approssimato, tanto più approssimato quanto più piccolo è $\delta a = a_2 - a_1$ ¹⁴.

Più in generale, supponiamo che il sistema prima dell'osservazione sia descritto dall'operatore statistico \hat{W}_0 . Allora, se la misura ha dato il risultato $a_k \in \sigma_P$, dopo la misura l'operatore statistico del sistema è dato da

$$(10.10) \quad \hat{W}_1 = \frac{1}{N} \hat{P}(a_k) \hat{W}_0 \hat{P}(a_k),$$

dove $N = \text{Tr} [\hat{P}(a_k) \hat{W}] = w(a_k)$. Se invece il risultato della misura è compreso nell'intervallo $(a_1, a_2) \in \sigma_C$, allora \hat{W}_1 è dato dalla formula che si ottiene dalla (10.10) sostituendo, negli argomenti di \hat{P} e w , a_k con (a_1, a_2) .

Postulato 6: equazione del moto

Supponiamo che il sistema si trovi in uno stato puro rappresentato, in funzione del tempo, dal vettore di stato $|\psi(t)\rangle$. Nella meccanica quantistica non relativistica si postula che $|\psi(t)\rangle$ obbedisca alla seguente equazione del moto:

$$(10.11) \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle,$$

dove \hat{H} è un operatore lineare autoaggiunto che corrisponde, nella meccanica classica, alla hamiltoniana del sistema e pertanto viene chiamato operatore hamiltoniano, o semplicemente hamiltoniana (quantistica).

Se invece lo stato del sistema è descritto dall'operatore statistico $\hat{W}(t)$, questo obbedisce alla seguente equazione temporale:

$$(10.12) \quad i\hbar \frac{d}{dt} \hat{W}(t) = [\hat{H}, \hat{W}(t)].$$

Facciamo alcune rapide osservazioni. Anzitutto l'equazione (10.11) può essere giustificata col seguente ragionamento. Supponiamo che il sistema sia isolato e consideriamo il vettore $|\psi_E(t)\rangle$ che rappresenta uno stato di energia E ben definita e indipendente dal tempo. In virtù della relazione di Planck $E = \hbar\omega$, se E è ben definita lo sarà anche ω , e quindi lo stato deve corrispondere a un fenomeno periodico (un'onda o più in generale un vettore di stato) con pulsazione ω . Si può quindi supporre che $|\psi_E(t)\rangle$ dipenda dal tempo secondo la legge

¹⁴ Infatti, ponendo $a_1 = a$, $a_2 = a + \delta a$ e usando per il proiettore la (7.8), dalla (10.9) si ottiene

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \int_a^{a+\delta a} \psi_0(a') |a'\rangle da',$$

dove $\psi_0(a') = \langle a' | \psi_0 \rangle$ e $|N| = \int_a^{a+\delta a} |\psi_0(a')|^2 da'$. Se allora poniamo $|\phi\rangle = (\hat{A} - a) |\psi_1\rangle$ si ottiene

$$\langle \phi | \phi \rangle = \frac{1}{|N|} \int_a^{a+\delta a} (a' - a)^2 |\psi_0(a')|^2 da' < (\delta a)^2$$

e pertanto $\|(\hat{A} - a) |\psi_1\rangle\| < \delta a$, che dimostra l'asserto.

$$(10.13) \quad |\psi_E(t)\rangle = e^{-i\omega t} |u_E\rangle, \quad \text{con } |u_E\rangle = |\psi_E(0)\rangle.$$

Ponendo questa espressione nella (10.11) si ottiene

$$(10.14) \quad \hat{H} |u_E\rangle = \hbar\omega |u_E\rangle = E |u_E\rangle,$$

che è l'equazione agli autovalori di \hat{H} . Pertanto l'operatore \hat{H} , che ha come spettro i valori dell'energia, rappresenta appunto l'osservabile energia, che classicamente corrisponde alla hamiltoniana.

Viceversa, se \hat{H} rappresenta l'osservabile energia, devono valere le equazioni (10.14) e, per la relazione di Planck, la (10.13). D'altra parte, per il principio di sovrapposizione, qualunque vettore di stato $|\psi(t)\rangle$ può essere sviluppato in serie degli autovettori $|\psi_E(t)\rangle$, e quindi, dalla linearità di \hat{H} , segue che $|\psi(t)\rangle$ soddisfa alla (10.11).

L'equazione (10.12) si può a sua volta ricavare facilmente dalla (10.11) nei casi in cui $\hat{W}(t)$ sia dato dalle (9.1) (stato puro) o (9.2).

È interessante discutere la condizione che \hat{H} sia autoaggiunto. Nel caso considerato sopra di un sistema isolato, questa risulta naturale perché \hat{H} rappresenta l'osservabile energia. Tuttavia la (10.11) deve valere anche per sistemi non isolati, in cui l'energia non si conserva. In generale la condizione che \hat{H} sia autoaggiunto si può ricavare da quella che il vettore di stato si mantenga sempre normalizzato, come è richiesto dal 1° postulato. Infatti, derivando rispetto al tempo la relazione $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$, e usando la (10.11) e la sua aggiunta, si ottiene

$$(10.15) \quad \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H} - \hat{H}^\dagger | \psi(t) \rangle = 0,$$

e poiché $|\psi\rangle$ è arbitrario, ne segue $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$.

Postulato 7: corrispondenza fra osservabili e operatori

Dato un sistema con n gradi di libertà, la scelta di un sistema di coordinate lagrangiane q_1, q_2, \dots, q_n determina uno schema di quantizzazione¹⁵.

Fissato un tale schema, alle variabili canoniche q_i, p_i ($i = 1, \dots, n$) sono associati degli operatori autoaggiunti \hat{q}_i, \hat{p}_i , che obbediscono alle seguenti relazioni di commutazione, dette canoniche:

$$(10.16) \quad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0; \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0; \quad [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}\mathbb{1}.$$

Inoltre ad ogni variabile dinamica classica $A_{cl}(q_i, p_i)$ è associato un operatore autoaggiunto $\hat{A} = A(\hat{q}_i, \hat{p}_i)$, che è una funzione degli operatori \hat{q}_i e \hat{p}_i e può anche dipendere esplicitamente dalla costante di Planck \hbar . La sua dipendenza dagli argomenti \hat{q}_i e \hat{p}_i è fissata da una opportuna "regola di quantizzazione" e deve essere tale da soddisfare al "principio di corrispondenza":

¹⁵ Mentre in meccanica classica la scelta delle variabili lagrangiane è del tutto arbitraria e i risultati fisici per la dinamica del sistema sono indipendenti da questa scelta, in meccanica quantistica i risultati che si ottengono con scelte diverse delle q_i , non legate da una trasformazione puramente puntuale, possono differire per termini di ordine \hbar , a causa delle relazioni di commutazione (10.16).

$$(10.17) \quad A(\hat{q}_i, \hat{p}_i) \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} A_{cl}(q_i, p_i).$$

Il limite $\hbar \rightarrow 0$ è un limite formale in cui \hbar viene considerato come un parametro variabile e mandato a zero sistematicamente in tutte le relazioni, incluse le (10.16). In questo limite le variabili \hat{q}_i e \hat{p}_i commutano tutte fra di loro e possono essere identificate con le variabili classiche q_i e p_i . Questo limite viene considerato come il *limite classico* della teoria.

Il principio di corrispondenza stabilisce quindi una corrispondenza fra le grandezze classiche $A_{cl}(q_i, p_i)$ e le osservabili quantistiche $A(\hat{q}_i, \hat{p}_i)$, richiedendo che le funzioni A_{cl} e A possano differire solo per termini di ordine \hbar . Se non ci sono in $A(\hat{q}_i, \hat{p}_i)$ ambiguità dovute all'ordinamento delle variabili, le due funzioni si possono prendere uguali. Questa prescrizione viene chiamata *principio dell'analogia classica*.

11. Valore di aspettazione e indeterminazione di una osservabile

In questo e nei prossimi paragrafi vogliamo discutere alcune importanti conseguenze dei postulati.

Il 4° postulato ci dà la distribuzione della probabilità a priori di ottenere tutti i possibili valori di una osservabile, quando il sistema si trova in un dato stato quantico. Possiamo in particolare calcolare i due parametri principali della distribuzione, che sono il valor medio e lo scarto quadratico medio dalla media o standard deviation.

Il valor medio di una osservabile \hat{A} , dato che si tratta di una media calcolata a priori, prende il nome di *valore di aspettazione* e si indica col simbolo $\langle \hat{A} \rangle$. Dalla definizione classica di valor medio si ha:

$$(11.1) \quad \langle \hat{A} \rangle = \sum_k a_k w(a_k) + \int_{\sigma_C} a w(a) da.$$

Se lo stato del sistema è uno stato puro rappresentato dal vettore $|\psi\rangle$, usando per le probabilità le formule (10.1) e (10.4) e utilizzando la rappresentazione spettrale di \hat{A} data dalla (7.11'), si ottiene

$$(11.2) \quad \begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_{k,r} a_k \langle \psi | a_k, r \rangle \langle a_k, r | \psi \rangle + \int_{\sigma_C} a \sum_r \langle \psi | a, r \rangle \langle a, r | \psi \rangle da \\ &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Se invece lo stato è descritto dall'operatore statistico \hat{W} , dalle (10.6), (10.7) e (7.11) si ricava

$$(11.3) \quad \begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_k a_k \text{Tr} [\hat{P}(a_k) \hat{W}] + \int_{\sigma_C} a \text{Tr} \left[\frac{d}{da} \hat{P}(a_0, a) \hat{W} \right] da \\ &= \text{Tr} (\hat{A} \hat{W}). \end{aligned}$$

In particolare si osserva che le espressioni (10.1) e (10.6) delle probabilità, altro non sono che i valori di aspettazione dei relativi proiettori.

La standard deviation ci dà una misura della dispersione dei risultati delle misure attorno al valor medio. In meccanica quantistica, come grandezza a priori, essa rappresenta piuttosto l'indeterminazione con cui una osservabile \hat{A} può essere conosciuta in un dato stato quantico del sistema, e la indicheremo con ΔA .

Secondo la definizione classica di scarto quadratico medio dalla media, ΔA è dato da

$$(11.4) \quad \Delta A = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle^{\frac{1}{2}} = \left(\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Possiamo vedere che è sempre $\Delta A \geq 0$, e si ha $\Delta A = 0$ solo se il sistema si trova in uno stato puro, autovettore di \hat{A} . Infatti, utilizzando la (11.2) per il valore di aspettazione di $(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2$, si ottiene:

$$(11.5) \quad (\Delta A)^2 = \sum_k (a_k - \langle \hat{A} \rangle)^2 w(a_k) + \int_{\sigma_C} (a - \langle \hat{A} \rangle)^2 w(a) da \geq 0,$$

poiché tutti i termini della sommatoria e la funzione integranda sono non negativi. Inoltre, perché sia $\Delta A = 0$ deve essere

$$(11.6) \quad \begin{cases} (a_k - \langle \hat{A} \rangle)^2 w(a_k) = 0, & \forall a_k \in \sigma_P \\ (a - \langle \hat{A} \rangle)^2 w(a) = 0, & \forall a \in \sigma_C \end{cases}$$

La seconda condizione segue dal fatto che il primo membro è una funzione continua di a e quindi non può essere diversa da zero solo in punti isolati. D'altra parte $w(a_k)$ e $w(a)$ non possono essere tutte nulle a causa della condizione (10.5).

Pertanto l'unica soluzione delle (11.6) è

$$(11.7) \quad \begin{cases} w(a_k) = \delta_{km}, & \langle \hat{A} \rangle = a_m \\ w(a) = 0, & a \in \sigma_C \end{cases}$$

dove l'indice m corrisponde a uno particolare degli autovalori a_k . Risulta quindi che lo stato del sistema per cui di ha $\Delta A = 0$ è dato dall'autovettore¹⁶ $|a_m\rangle$.

12. Condizione di compatibilità fra osservabili

Vogliamo trovare la condizione di compatibilità fra due osservabili indipendenti, rappresentate dagli operatori autoaggiunti \hat{A} e \hat{B} . La definizione di compatibilità che abbiamo dato nel § 2 richiede che le due grandezze possano essere misurate —anche a istanti diversi ma molto vicini fra loro— in modo che il risultato della prima misura non venga alterato dalla seconda. In questo modo i risultati delle due misure possono essere utilizzati entrambi per caratterizzare

¹⁶ Quanto detto, tuttavia, vale solo nel caso che l'autovalore a_m sia non degenere. Se invece a_m è degenere d_m volte, e quindi l'autospazio $\hat{P}(a_m)\mathcal{H}$ ha dimensione d_m , allora lo stato del sistema può anche essere una miscela di stati, tutti appartenenti a questo autospazio.

lo stato del sistema. In altre parole, lo stato del sistema dopo la misura sarà rappresentato da un autovettore simultaneo, vero o approssimato, di \hat{A} e di \hat{B} .

Volendo considerare in generale anche il caso dello spettro continuo, richiederemo come condizione di compatibilità che, se le misure delle due osservabili vengono fatte in successione, lo stato finale del sistema dipenda soltanto dai risultati delle misure, ma non dall'ordine in cui queste sono state eseguite. Supponiamo allora che il sistema si trovi in un arbitrario stato puro $|\psi\rangle$ e che vengano eseguite le misure di \hat{A} e di \hat{B} , ottenendo rispettivamente i valori a e b , dove indichiamo sinteticamente con a i due possibili casi: $a = a_k$ se $a_k \in \sigma_P$, ovvero $a = a \pm \delta a$ se $a \in \sigma_C$, e analogamente per b .

Se prima viene eseguita la misura di \hat{A} e poi quella di \hat{B} , lo stato finale si ottiene applicando due volte le equazioni (10.8) ovvero (10.9), e risulta¹⁷

$$(12.1) \quad |\psi'\rangle = N' \hat{P}(b) \hat{P}(a) |\psi\rangle,$$

dove N' è una costante di normalizzazione, $\hat{P}(a)$ indica il proiettore sull'autospazio di a_k ovvero il proiettore associato all'intervallo $(a - \delta a, a + \delta a)$, a seconda dei casi, e analogamente per $\hat{P}(b)$.

Se invece viene eseguita prima la misura di \hat{B} e poi quella di \hat{A} , lo stato finale sarà

$$(12.2) \quad |\psi''\rangle = N'' \hat{P}(a) \hat{P}(b) |\psi\rangle.$$

Ma se \hat{A} e \hat{B} sono compatibili, lo stato finale deve essere lo stesso nei due casi e quindi $|\psi'\rangle$ e $|\psi''\rangle$ possono al più differire per un fattore di fase. Poiché lo stato iniziale $|\psi\rangle$ è arbitrario, si ottiene la condizione

$$(12.3) \quad \hat{P}(a) \hat{P}(b) = \lambda \hat{P}(b) \hat{P}(a),$$

dove λ è una costante. Moltiplicando ambo i membri dell'equazione a sinistra e a destra per $\hat{P}(a)$ (ovvero per $\hat{P}(b)$) e usando la proprietà di idempotenza dei proiettori, ne segue che è $\lambda = 1$, per cui la (12.3) diventa

$$(12.4) \quad [\hat{P}(a), \hat{P}(b)] = 0.$$

La (12.4) deve valere qualunque siano i valori (o gli intervalli) di a e di b . Dalla decomposizione spettrale (7.11) degli operatori \hat{A} e \hat{B} segue allora che la (12.4) implica¹⁸

$$(12.5) \quad [\hat{A}, \hat{B}] = 0.$$

¹⁷ Si suppone che la seconda misura segua immediatamente la prima, in modo che lo stato finale della prima misura coincida con lo stato iniziale della seconda.

¹⁸ Se \hat{A} e \hat{B} hanno solo uno spettro discreto, la deduzione della (12.5) può essere molto più semplice. Infatti in questo caso possiamo richiedere che lo stato finale sia un autovettore simultaneo di \hat{A} e di \hat{B} , con autovalori rispettivamente a_k e b_l : $|\psi'\rangle = |a_k, b_l, r\rangle$. Su tali stati si ha $[\hat{A}, \hat{B}] |a_k, b_l, r\rangle = 0$; ma poiché essi formano una base in \mathcal{H} , ne segue che deve valere la (12.5).

Si vede facilmente che vale anche il viceversa, cioè che se $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, allora le osservabili \hat{A} e \hat{B} sono compatibili. Infatti la (12.5) implica¹⁹ la (12.4) e questa a sua volta implica l'uguaglianza degli stati finali (12.1) e (12.2) e quindi la compatibilità delle osservabili. Si può quindi enunciare il seguente

Teorema. *Condizione necessaria e sufficiente perché due osservabili siano compatibili è che gli operatori che le rappresentano commutino fra loro.*

13. Relazione di indeterminazione

Benché il principio di indeterminazione non sia incluso esplicitamente fra i postulati della meccanica quantistica, esso può essere tuttavia dedotto dai postulati stessi per mezzo del formalismo matematico. Ci proponiamo di dimostrare in generale che fra due osservabili non compatibili \hat{A} e \hat{B} vale una relazione di indeterminazione del tipo $\Delta A \Delta B > 0$. Consideriamo in particolare il caso che il sistema si trovi in uno stato puro $|\psi\rangle$.

Introduciamo per convenienza gli scarti rispetto alla media

$$(13.1) \quad \begin{cases} \hat{A}_0 = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \\ \hat{B}_0 = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \end{cases}$$

Dalle (11.4) e (11.2) si hanno allora per ΔA e ΔB le espressioni

$$(13.2) \quad \begin{cases} (\Delta A)^2 = \langle \psi | \hat{A}_0^2 | \psi \rangle \\ (\Delta B)^2 = \langle \psi | \hat{B}_0^2 | \psi \rangle \end{cases}$$

Moltiplicando membro a membro si ottiene:

$$(13.3) \quad \begin{aligned} (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 &= \|\hat{A}_0 | \psi \rangle\|^2 \|\hat{B}_0 | \psi \rangle\|^2 \geq |\langle \psi | \hat{A}_0 \hat{B}_0 | \psi \rangle|^2 \\ &= |\langle \psi | \frac{1}{2} [\hat{A}_0, \hat{B}_0] + \frac{1}{2} \{\hat{A}_0, \hat{B}_0\} | \psi \rangle|^2 \\ &= |\frac{i}{2} \langle \psi | -i[\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi | \{\hat{A}_0, \hat{B}_0\} | \psi \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4} \langle -i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle \{\hat{A}_0, \hat{B}_0\} \rangle^2 \\ &\geq \frac{1}{4} \langle -i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2 \end{aligned}$$

dove nel primo passaggio si è usato il fatto che \hat{A}_0 e \hat{B}_0 sono autoaggiunti; il secondo rappresenta la disuguaglianza di Schwarz; nel terzo si è introdotto l'anticommutatore $\{\hat{A}_0, \hat{B}_0\} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}_0 \hat{B}_0 + \hat{B}_0 \hat{A}_0$; successivamente si sono usate: la relazione $[\hat{A}_0, \hat{B}_0] = [\hat{A}, \hat{B}]$ e le proprietà per cui il

¹⁹ I proiettori si possono esprimere per mezzo degli operatori nella forma seguente:

$$\hat{P}(a) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_a} (z\mathbb{1} - \hat{A})^{-1} dz,$$

dove Γ_a è un circuito chiuso nel piano complesso di z che circonda l'autovalore a ovvero l'intervallo $(a - \delta a, a + \delta a)$ sull'asse reale.

commutatore di due operatori autoaggiunti è anti-autoaggiunto e il valore di aspettazione di un operatore autoaggiunto è un numero reale.

In definitiva dalla (13.3) si ottiene la relazione di indeterminazione

$$(13.4) \quad \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle -i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$$

In particolare se $\hat{A} = \hat{q}$ e $\hat{B} = \hat{p}$ sono variabili canoniche coniugate, per la terza delle (10.16) si ha $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ e la (13.4) ci dà quindi la relazione di indeterminazione di Heisenberg

$$(13.5) \quad \Delta q \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar.$$

Se invece \hat{A} e \hat{B} sono compatibili, si ha $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, da cui si ottiene $\Delta A \Delta B \geq 0$, e quindi non c'è relazione fra ΔA e ΔB , come era da aspettarsi.

Si può dimostrare che la disuguaglianza di Schwarz $\langle \hat{A}_0^2 \rangle \langle \hat{B}_0^2 \rangle \geq |\langle \hat{A}_0 \hat{B}_0 \rangle|^2$, che è stata usata nella (13.3), vale anche se lo stato del sistema è una miscela di stati, nel qual caso il valore di aspettazione è dato dalla (11.3). Pertanto il risultato espresso dalla (13.4) ha validità generale.

14. Operatore di evoluzione

L'equazione del moto (10.11) determina l'evoluzione del vettore di stato in funzione del tempo. Poiché si tratta di un'equazione differenziale del primo ordine in t , la sua soluzione $|\psi(t)\rangle$ al tempo t è determinata dalla condizione iniziale $|\psi(t_0)\rangle$ all'istante t_0 . Deve quindi esistere un operatore $\hat{U}(t, t_0)$, detto *operatore di evoluzione*, tale che

$$(14.1) \quad |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle.$$

L'operatore $\hat{U}(t, t_0)$ deve essere unitario affinché la norma di $|\psi(t)\rangle$ si mantenga costante. Infatti si deve avere

$$(14.2) \quad \begin{aligned} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1, \quad \forall |\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{H}_S \end{aligned}$$

da cui segue

$$(14.3) \quad \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1}.$$

L'operatore $\hat{U}(t, t_0)$ gode inoltre delle seguenti proprietà:

$$(14.4) \quad \hat{U}(t_0, t) = \hat{U}^{-1}(t, t_0)$$

$$(14.5) \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$$

$$(14.6) \quad \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0)$$

$$(14.7) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$$

di cui la prima segue dal confronto della (14.1) con quella che si ottiene scambiando t con t_0 ; le due successive sono ovvie e l'ultima segue applicando l'equazione del moto (10.11) alla (14.1), per l'arbitrarietà di $|\psi(t_0)\rangle$.

L'operatore di evoluzione è univocamente determinato dall'equazione differenziale del primo ordine (14.7) e dalla condizione iniziale (14.5). Nel caso che la hamiltoniana \hat{H} non dipenda dal tempo, esso è dato formalmente da

$$(14.8) \quad \hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)},$$

dove l'esponenziale, come funzione di \hat{H} , è definito tramite lo sviluppo in serie di potenze. Si verifica facilmente che l'espressione (14.8) per $\hat{U}(t, t_0)$ soddisfa a tutte le equazioni (14.3-7).

Se \hat{H} dipende dal tempo, l'espressione di $\hat{U}(t, t_0)$ è più complicata di una semplice funzione esponenziale, perché in generale $\hat{H}(t)$ e $\hat{H}(t')$ non commutano fra loro per $t \neq t'$. L'equazione differenziale (14.7) e la condizione iniziale (14.5) si possono riassumere nell'equazione integrale

$$(14.9) \quad \hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') \hat{U}(t', t_0) dt',$$

come si verifica immediatamente. Questa può essere formalmente risolta col seguente procedimento iterativo. Come primo passo poniamo, al posto di $\hat{U}(t', t_0)$ nell'integrale, l'espressione del secondo membro della (14.9) ottenendo

$$(14.10) \quad \hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{H}(t') \hat{H}(t'') \hat{U}(t'', t_0).$$

Iterando il procedimento si ottiene infine per $\hat{U}(t, t_0)$ la serie

$$(14.11) \quad \hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n).$$

Il termine n -esimo della serie si può riscrivere nella forma

$$(14.12) \quad \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n T[\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n)],$$

dove si è introdotto il cosiddetto *prodotto T-ordinato* degli operatori $\hat{H}(t_i)$, in cui questi sono ordinati temporalmente per argomenti t_i crescenti verso sinistra, come accade nella (14.11). In questo modo la serie (14.11) si può riscrivere nella seguente forma, detta *esponenziale T-ordinato*:

$$(14.13) \quad \hat{U}(t, t_0) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt' \right].$$

Questa è un'espressione formale, che è definita mediante lo sviluppo in serie di potenze dell'esponenziale, dove il termine n -esimo è dato proprio dalla (14.12).

Concludiamo osservando che, nel caso che gli operatori $\hat{H}(t_i)$ a tempi diversi commutino fra loro, l'ordinamento temporale è superfluo e la (14.13) si riduce a un esponenziale ordinario, che corrisponde alla ovvia generalizzazione della (14.8).