

Capitolo 3

Aspetti formali della meccanica quantistica

Come abbiamo visto nei capitoli precedenti, i postulati principali della meccanica quantistica su

- (i) come descrivere stati quantistici e come specificare un particolare stato;
- (ii) come uno stato evolve nel tempo;
- (iii) come descrivere le variabili dinamiche; trovare tutti i possibili valori per ogni variabile dinamica e ottenere le probabilità che la misura di una quantità fisica in uno stato dia un determinato risultato,

sono formulati in modo esatto e esauriente nell'approccio di Schrödinger. Prima di procedere ai problemi fisici più realistici in tre dimensioni, ed elaborare le conseguenze delle regole della nuova meccanica in tutta la sua ampiezza, tuttavia, è opportuno fermarci qui a riflettere sulla struttura logica e matematica della teoria e esaminare con più attenzione i concetti principali trattati.

In meccanica quantistica esiste una grande libertà di linguaggio nel modo di descrivere sia gli stati che le variabili; i risultati fisici sono indipendenti dal linguaggio (detto *rappresentazione*) usato. Tale libertà del linguaggio trova una certa analogia anche in meccanica classica (trasformazioni canoniche); tuttavia l'importanza e la portata delle sue conseguenze in meccanica quantistica a nostro parere vanno molto al di là di quanto non accada in meccanica classica.

Questa libertà della scelta delle rappresentazioni significa che i concetti come stati, operatori e evoluzioni temporali, vanno definiti in modo più generale e più astratto. Le descrizioni in diverse rappresentazioni sono collegate fra loro da cosiddette *trasformazioni unitarie*. La teoria delle trasformazioni unitarie fornisce, oltre il chiarimento concettuale, un metodo talvolta molto efficace di soluzioni.

3.1 Rappresentazione delle coordinate e degli impulsi

La funzione d'onda $\psi(x, t)$ rappresenta uno stato quantistico. Più precisamente, essa va considerata come una particolare rappresentazione di uno stato quantistico “ ψ ” come distribuzione in x . Possiamo scrivere, infatti,

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int dx' \delta(x' - x) \psi(x', t) = \int dx' \psi_x^*(x') \psi(x', t) \\ &= \langle x | \psi \rangle,\end{aligned}\tag{3.1}$$

dove abbiamo usato la notazione di Dirac,

$$\int dx' \phi^*(x') \chi(x') \equiv \langle \phi | \chi \rangle.\tag{3.2}$$

Inoltre $\psi_x(x') = \delta(x - x')$ è l'autostato della posizione con autovalore x . In (3.1) la funzione d'onda è espressa come proiezione dello stato “ ψ ” sugli autostati della posizione. Analogamente deve essere possibile proiettare lo stesso stato sugli autostati degli impulsi (per esempio), e considerare la funzione d'onda nella *rappresentazione degli impulsi*. Ciò è fatto ricordando che gli autostati degli impulsi sono dati da:

$$\psi_p(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx'/\hbar},\tag{3.3}$$

i.e.,

$$\psi(p, t) = \langle p | \psi \rangle = \int dx' \psi_p(x')^* \psi(x', t).\tag{3.4}$$

In altre parole la traduzione dalla rappresentazione delle coordinate alla rappresentazione degli impulsi equivale ad una trasformazione di Fourier.

Per esempio, l'autostato della posizione con autovalore x_0 è, nella rappresentazione degli impulsi,

$$\langle p|x_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar}, \quad (3.5)$$

mentre l'autostato dell'impulso con autovalore p_0

$$\langle x|p_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0x/\hbar} \quad (3.6)$$

viene tradotto a

$$\langle p|p_0\rangle = \delta(p - p_0). \quad (3.7)$$

Infine, l' n -simo stato stazionario dell'oscillatore armonico " ψ_n "

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = C_n H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad (3.8)$$

(vedi Cap. 2.1) è descritto, nella rappresentazione degli impulsi, dalla funzione d'onda

$$\psi(p) = \langle p|n\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|n\rangle = \frac{C_n}{\alpha\hbar^{1/2}} (-i)^n H_n(p/\alpha\hbar) e^{-p^2/2\alpha^2\hbar^2} : \quad (3.9)$$

la trasformata di Fourier della funzione d'onda (3.8).

Nella rappresentazione degli impulsi l'impulso è rappresentato da un operatore triviale (numero) $\hat{p} = p$, mentre l'operatore della posizione diventa

$$\hat{x} = +i\hbar \frac{\partial}{\partial p}. \quad (3.10)$$

Si noti la differenza del segno rispetto all'espressione dell'operatore dell'impulso nella rappresentazione usuale. Tale segno è necessario perché valga la relazione fondamentale

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (3.11)$$

Questa relazione è infatti valida in qualsiasi rappresentazione.

3.2 Bra e Ket, Spazio di Hilbert dei vettori

La discussione precedente mette in chiara luce il fatto importante dal punto di vista concettuale: lo stato quantistico è descritto dal raggio di vettori (chiamato *ket*),

$$|\psi\rangle. \quad (3.12)$$

(Inoltre è conveniente introdurre una sorta di vettore coniugato, $\langle\psi|$ chiamato *bra*. Questi terminologie sono stati inventate da Dirac, dalla parola "bracket" in inglese.) La descrizione dello stato " ψ " in termini di una funzione complessa (per esempio) non è che una delle possibili *rappresentazioni*. Gli operatori, equazione del moto, ecc., vanno definiti nello spazio dei tali vettori astratti. In seguito studieremo prima le proprietà generali di questo spazio, lasciando lo studio delle relazioni tra le varie rappresentazioni ai sottocapitoli successivi.

Le proprietà richieste allo spazio \mathcal{H} (dei vettori che rappresentano i possibili stati quantistici di un determinato sistema) sono:

A. \mathcal{H} è uno spazio vettoriale;

B. In \mathcal{H} è definito il prodotto interno (scalare) $\langle\chi|\phi\rangle$ tra due vettori, che è un numero complesso.

C. \mathcal{H} è uno spazio completo (chiuso);

D. \mathcal{H} è uno spazio separabile.

Uno spazio che soddisfa queste proprietà è chiamato *spazio di Hilbert*. (Il concetto di spazio di Hilbert è stato introdotto da D. Hilbert (~1910) come una generalizzazione dello spazio Euclideo n dimensionale R^n (con elementi (x_1, x_2, \dots, x_n)) nel limite $n \rightarrow \infty$. Molte delle proprietà degli spazi di Hilbert sono di conseguenza generalizzazioni naturali di quelle in spazi Euclidei.)

A. \mathcal{H} è uno spazio vettoriale (in seguito scriveremo spesso semplicemente ψ, ϕ , ecc. al posto di $|\psi\rangle, |\phi\rangle$, ecc. :)

$$\psi, \phi \in \mathcal{H} \rightarrow c\psi + d\phi \in \mathcal{H}, \quad (3.13)$$

dove c, d sono numeri complessi (principio di sovrapposizione). In altre parole, in \mathcal{H} la somma dei vettori e la moltiplicazione con numeri complessi sono definiti, con le seguenti proprietà:

$$\begin{aligned} \psi + \phi &= \phi + \psi; \\ (\psi + \phi) + \chi &= \psi + (\phi + \chi) \\ c(\psi + \phi) &= c\psi + c\phi, \\ (cd)\psi &= c(d\psi) \\ 0 \cdot \psi &= \mathbf{0} \\ 1 \cdot \psi &= \psi. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Si noti in particolare che esiste un vettore nullo, $\psi - \psi = \mathbf{0}$. I vettori $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$ sono *linearmente indipendenti* se

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_k\psi_k = \mathbf{0} \quad (3.15)$$

implica

$$c_1 = c_2 = \dots = c_k = 0. \quad (3.16)$$

B. Per ogni coppia di vettori in \mathcal{H} , ψ e ϕ , è definito il loro prodotto scalare $\langle \phi | \psi \rangle \in \mathbb{C}$ (un numero complesso) tale che

$$\begin{aligned} \langle \phi | c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \rangle &= c_1\langle \phi | \psi_1 \rangle + c_2\langle \phi | \psi_2 \rangle; \\ \langle \phi | \psi \rangle^* &= \langle \psi | \phi \rangle \\ \langle \psi | \psi \rangle &\geq 0, \quad (= 0, \quad \text{se e solo se} \quad |\psi\rangle = \mathbf{0}). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Si noti che la prima e la seconda relazioni implicano che

$$\langle c\phi | \psi \rangle = c^* \langle \phi | \psi \rangle. \quad (3.18)$$

In letteratura si trovano a volte notazioni diverse da quella usata qui: per esempio (ψ, ϕ) al posto di $\langle \phi | \psi \rangle$.

Nella rappresentazione delle coordinate il prodotto scalare tra due vettori ψ e ϕ prende la forma esplicita:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int dq \phi^*(q) \psi(q). \quad (3.19)$$

L'ultima delle proprietà sopra ci permette di introdurre la *norma* di un vettore,

$$\|\psi\| \equiv \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (3.20)$$

L'introduzione della norma - la grandezza di ogni vettore - in \mathcal{H} , implica che si può definire la *distanza* tra due vettori ψ e ϕ in modo naturale:

$$\|\psi - \phi\| = \sqrt{\langle \psi - \phi | \psi - \phi \rangle}. \quad (3.21)$$

\mathcal{H} è dunque uno spazio *metrico*. In tale spazio, si può definire il concetto di *limite* di una successione, $\{\psi_n\} = \psi_1, \psi_2, \dots$ col criterio di Cauchy: se ogni $\varepsilon > 0$ esiste un numero intero $N(\varepsilon)$ tale che per $n, m > N(\varepsilon)$ vale

$$\|\psi_n - \psi_m\| < \varepsilon, \quad (3.22)$$

allora la successione converge.

Disuguaglianza triangolare Ogni definizione di distanza deve essere tale che per tre punti qualsiasi dello spazio (che possono essere scelti $\mathbf{0}$, ψ e ϕ) valga

$$\|\psi - \phi\| \leq \|\psi\| + \|\phi\|, \quad (3.23)$$

(dove l'eguaglianza è valida se e solo se $c_1\psi = c_2\phi$, $c_1, c_2 \in \mathbf{C}$.)

La dimostrazione che l'(3.23) è infatti soddisfatta, non è difficile. Si osservi prima

$$\langle \psi - \phi | \psi - \phi \rangle = \|\psi\|^2 + \|\phi\|^2 - 2\text{Re}\langle \phi | \psi \rangle. \quad (3.24)$$

Ma per un numero complesso qualsiasi vale

$$-\text{Re}\langle \phi | \psi \rangle \leq |\langle \phi | \psi \rangle|, \quad (3.25)$$

perciò si avrà la dimostrazione se si può provare la seguente disuguaglianza (disuguaglianza di Schwarz):

$$|\langle \phi | \psi \rangle| \leq \|\phi\| \|\psi\|. \quad (3.26)$$

Per provare la (3.26), basta considerare un vettore,

$$\tilde{\phi} \equiv \phi - \psi \cdot \frac{\langle \psi | \phi \rangle}{\|\psi\|^2}. \quad (3.27)$$

La (3.26) segue dal fatto che la norma di $\tilde{\phi}$ è positivo semidefinito.

C. \mathcal{H} è completo nel senso che ogni successione ψ_1, ψ_2, \dots che soddisfa il criterio di Cauchy converge in \mathcal{H} : cioè $\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n \equiv \psi \in \mathcal{H}$. (Nota: l'insieme $(0, 1)$ non è completo. Per esempio $\lim_{n \rightarrow \infty} (1/n) = 0 \notin (0, 1)$.)

D. \mathcal{H} è separabile. Cioè esiste un sottoinsieme (base) numerabile $S \subset \mathcal{H}$, denso dappertutto in \mathcal{H} . In altre parole ogni vettore $\psi \in \mathcal{H}$ è il limite di una successione $\{\phi_n\}$ in S . (L'insieme di numeri razionali forma una base numerabile e densa dappertutto nello spazio dei numeri reali, perciò \mathbf{R} è separabile.)

La conseguenza più importante di A. – D. è l'esistenza di un sistema completo e ortonormale dei vettori in \mathcal{H} , $\{\psi_n\}$. In altre parole, ogni vettore in \mathcal{H} può essere scritto come

$$\psi = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N c_n \psi_n \equiv \sum c_n \psi_n \quad (3.28)$$

dove i coefficienti di sviluppo c_n sono dati da

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle, \quad (3.29)$$

cioè per ogni vettore è valida la relazione

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi \rangle. \quad (3.30)$$

Questa equivale a

$$\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \mathbf{1}, \quad (3.31)$$

la relazione di completezza, già vista nel Cap.2.1.

Si noti che in uno spazio di Hilbert, il numero massimo di vettori linearmente indipendenti (detto *dimensione* dello spazio) o è finito o è infinito. Nel primo caso, le proprietà C. e D. sono automaticamente soddisfatte e quindi triviali. Viceversa per gli spazi di Hilbert di dimensione infinita, le richieste C. e D. sono fondamentali.

3.2.1 Operatori autoaggiunti, variabili dinamiche e lo spettro

Gli operatori sono ora definiti anche essi nello spazio di Hilbert astratto,

$$A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}. \quad (3.32)$$

Se esiste un numero reale C tale che

$$\|A\psi\| < C\|\psi\|, \quad \forall \psi \in \mathcal{H},$$

allora $\|A\|$ è definito come il più piccolo di tale costante C . ($\|A\| = \sup\|A\psi\|/\|\psi\|$; $\forall \psi$.) Un operatore con norma finito è limitato. Se non esiste tale costante finito, l'operatore è illimitato. In meccanica quantistica abbiamo spesso a che fare con operatori illimitati.

(i) L'operatore energia dell'oscillatore armonico,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

è illimitato perché esistono stati ψ_n tali che $H\psi^{(n)} = E_n\psi^{(n)}$, $\|\psi_n\| = 1$, con valori di E_n arbitrariamente grandi.

(ii) L'operatore x è illimitato. Per esempio, gli stati $\psi^{(n)} = \frac{1}{\pi^{1/4}n^{1/2}} e^{-x^2/2n^2}$, sono normalizzati, ma

$$\|x\psi^{(n)}\|^2 = \frac{n^2}{2},$$

e può essere arbitrariamente grande.

(iii) In una dimensione, $\psi(x) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{x^2+a^2}} \in \mathcal{H}$ ma $x\psi \notin \mathcal{H}$.

La necessità di trattare operatori illimitati rende indispensabile porre una condizione più precisa su possibili operatori da associare a variabili dinamiche nella teoria. Infatti un teorema rilevante in questo contesto (Hellinger-Toeplitz) afferma che un operatore definito dappertutto in \mathcal{H} , con la proprietà

$$\langle A\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A\psi\rangle, \quad (3.33)$$

è necessariamente limitato. Segue che per un operatore illimitato, la definizione di “realtà” (che abbiamo chiamato senza molta attenzione “Hermitiano” in una sezione precedente) richiede l'esame del dominio di ogni operatore. Il *dominio* di un operatore A , $\mathcal{D}(A)$, è definito da

$$\psi \in \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H}, \quad \text{se } A\psi \in \mathcal{H}. \quad (3.34)$$

Se per un vettore $\psi \in \mathcal{H}$, esiste un vettore $\eta \in \mathcal{H}$ tale che

$$\langle A\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\eta\rangle, \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(A), \quad (3.35)$$

allora per definizione

$$A^\dagger|\psi\rangle \equiv |\eta\rangle. \quad (3.36)$$

La relazione

$$\langle A\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle. \quad (3.37)$$

è valida per definizione. L'esistenza del vettore η definisce $\mathcal{D}(A^\dagger)$. L'operatore A^\dagger è chiamato aggiunto (o coniugato Hermitiano) dell'operatore A . Dalla definizione segue la relazione,

$$\langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle = (\langle\psi|A|\phi\rangle)^*. \quad (3.38)$$

Un operatore con la proprietà,

$$A^\dagger \psi = A \psi, \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(A), \quad \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(A^\dagger) \quad (3.39)$$

è detto *operatore Hermitiano, o simmetrico*. Se vale anche

$$\mathcal{D}(A^\dagger) = \mathcal{D}(A) \quad (3.40)$$

tale operatore è *autoaggiunto*. Per un operatore autoaggiunto, vale

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle^*, \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(A), \quad (3.41)$$

il suo valor medio in uno stato qualsiasi, e perciò ogni suo autovalore, è reale.

Per postulato, ad ogni variabile dinamica è associato ad un operatore autoaggiunto.

Riportiamo qui due teoremi, senza dimostrazione, che valgono per ogni operatore autoaggiunto:

Teorema

Sia A un operatore autoaggiunto e

$$U(t) \equiv e^{itA} \quad (3.42)$$

con un parametro continuo t . Segue allora che

(a) Se t, s sono reali, $U^\dagger(t) U(t) = \mathbf{1}$, $U(t+s) = U(t) U(s)$;

(b) Per $\phi \in \mathcal{H}$ qualsiasi e per $t \rightarrow t_0$ vale $U(t) \phi \rightarrow U(t_0) \phi$;

(c) Per $\psi \in \mathcal{D}(A)$ qualsiasi vale $\frac{U(t)\psi - \psi}{t} \xrightarrow{t \rightarrow 0} iA\psi$.

(d) Se $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)\psi - \psi}{t}$ esiste, allora $\psi \in \mathcal{D}(A)$

Teorema (Stone)

Se $U(t)$ è un operatore unitario in H e fortemente continuo in t (i.e., soddisfano le proprietà (a) e (b) sopra), allora esiste un operatore autoaggiunto A in H tale che

$$U(t) = e^{itA}. \quad (3.43)$$

In altre parole, gli operatori autoaggiunti sono operatori per i quali valgono molte proprietà note per una matrice Hermitiana. Il valor d'aspettazione di una classe di operatore autoaggiunti del tipo, $A = B^\dagger B$, è semipositivo definito:

$$\langle \psi | B^\dagger B | \psi \rangle \geq 0, \quad (3.44)$$

con l'uguaglianza valida se e solo se $B|\psi\rangle = 0$.

Lo *spettro* di un operatore autoaggiunto A è l'insieme di suoi autovalori propri (autovalori discreti) e autovalori impropri (autovalori continui): I primi corrispondono ai valori λ tale che

$$(A - \lambda_m) |\psi_m\rangle = 0; \quad \|\psi_m\| = 1, \quad m = 0, 1, 2, \dots; \quad (3.45)$$

per lo spettro continuo la condizione è sostituita dal seguente criterio più generale:

Criterio di Weyl:

il valore λ fa parte dello spettro di un operatore A se e solo se esiste una successione ψ_n , tale che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|A\psi_n - \lambda\psi_n\| = 0, \quad \|\psi_n\| = 1 \quad (3.46)$$

Per esempio, nel caso di operatore dell'impulso, l'esistenza della successione

$$\Psi_n = \frac{1}{\pi^{1/4} n^{1/2}} e^{ipx/\hbar} e^{-x^2/2n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.47)$$

dimostra che tutti i valori reali fanno parte dello spettro dell'operatore $p = -i\hbar(d/dx)$. Analogamente, per l'operatore della posizione, si ha

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(x - x_0)\Psi_n\| = 0, \quad (3.48)$$

per la successione

$$\Psi_n = \left(\frac{2n}{\pi}\right)^{1/4} e^{-n(x-x_0)^2}. \quad (3.49)$$

Esercizio: Si dimostri che la (3.46) è infatti soddisfatta dall'operatore $p = -i\hbar(d/dx)$ con la successione (3.47) e con $\lambda = p$. Si verifichi la (3.48). ♠

L'insieme di spettro discreto e spettro continuo forma un insieme chiuso. L'insieme risolvente di un operatore A è per definizione l'insieme di $x \in \rho(A)$ tale che $A - x\mathbf{1}$ ha un operatore inverso limitato,

$$(A - x\mathbf{1})^{-1}, \quad (3.50)$$

(chiamato operatore risolvente di A). L'insieme risolvente è ovviamente un aperto. Il complemento di $\rho(A)$, $\sigma(A)$, (i.e., l'insieme di x , $x \notin \rho(A)$), forma lo spettro dell'operatore A .

Infine il cosiddetto teorema spettrale, riportato qui anche esso senza dimostrazione, asserisce che per ogni operatore autoaggiunto O esiste un insieme di autovalori (propri e impropri) $\{\lambda_n, \lambda\}$ e relativi operatori di proiezione, (dove abbiamo assunto che lo spettro continuo è $[\lambda_0, \infty)$)

$$\mathcal{P}(\lambda) = \int_{-\lambda_0}^{\lambda} d\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|, \quad \mathcal{P}_n = |n\rangle\langle n|, \quad (3.51)$$

tale che

$$\begin{aligned} \mathbf{1} &= \int d\mathcal{P}(\lambda) + \sum_n \mathcal{P}_n, \\ O &= \int \lambda d\mathcal{P}(\lambda) + \sum_n \lambda_n \mathcal{P}_n, \\ |\psi\rangle &= \int d\mathcal{P}(\lambda) |\psi\rangle + \sum_n \mathcal{P}_n |\psi\rangle, \quad \forall \psi \in \mathcal{H} \end{aligned} \quad (3.52)$$

(vedi la (2.138)).

Queste proprietà garantiscono la consistenza del postulato della meccanica quantistica, (??), (2.112). Infatti, dalle formule delle probabilità (che la misura della quantità O dà o dei valori tra λ e $\lambda + d\lambda$, oppure uno degli autovalori discreti, λ_n):

$$P(\lambda) d\lambda = |\langle\lambda|\psi\rangle|^2 d\lambda; \quad P_n = |\langle n|\psi\rangle|^2, \quad (3.53)$$

si ha per la probabilità totale,

$$\int P(\lambda) d\lambda + \sum_n P_n = \langle\psi|\{\int d\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda| + \sum_n |n\rangle\langle n|\}\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (3.54)$$

3.3 Trasformazioni unitarie

Le quantità fisiche in meccanica quantistica sono in generale associate a elementi di matrice di vari operatori,

$$\langle\phi|O|\psi\rangle. \quad (3.55)$$

Sia U un operatore dotato di un inverso U^{-1} , tale che

$$U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbf{1}; \quad (3.56)$$

cioè

$$U^\dagger = U^{-1}. \quad (3.57)$$

Tale operatore è chiamato *operatore unitario*. Riscriviamo ora (4.382) inserendo due volte l'operatore di identità $\mathbf{1} = U^\dagger U$:

$$\langle \phi | O | \psi \rangle = \langle \phi | U^\dagger U O U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \tilde{\phi} | \tilde{O} | \tilde{\psi} \rangle, \quad (3.58)$$

dove

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}\rangle &\equiv U|\psi\rangle; & |\tilde{\phi}\rangle &\equiv U|\phi\rangle; \\ \tilde{O} &\equiv U O U^\dagger. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Si noti che la norma dello stato rimane invariante:

$$\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle. \quad (3.60)$$

La trasformazione degli stati e degli operatori definita da (3.58), (3.59) è chiamata *trasformazione unitaria*.

Poiché tutte le quantità fisiche trattate in meccanica quantistica si riducono a qualche combinazione di elementi di matrice del tipo (4.382), la teoria è invariante per trasformazioni unitarie arbitrarie.

In altre parole, gli stati e gli operatori in meccanica quantistica sono definiti a meno di trasformazioni unitarie.

3.3.1 Schema di Schrödinger e schema di Heisenberg

Un risultato significativo della meccanica classica (Cap.1.2), è che l'evoluzione temporale $q(t), p(t) \rightarrow q(t+dt), p(t+dt)$ è una successione di *trasformazioni canoniche* infinitesime. Esiste un risultato analogo in meccanica quantistica: l'evoluzione temporale del sistema in meccanica quantistica è una trasformazione unitaria,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle. \quad (3.61)$$

Si noti che la (3.61) è infatti la soluzione formale dell'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad |\psi(t)\rangle|_{t=0} = |\psi(0)\rangle : \quad (3.62)$$

Questa osservazione ci permette di studiare l'evoluzione temporale del sistema in meccanica quantistica da un punto di vista nuovo. Infatti, consideriamo una particolare trasformazione unitaria dipendente dal tempo,

$$U(t) = e^{iHt/\hbar} : \quad (3.63)$$

lo stato e l'operatore generico O si trasformano come:

$$\psi_H = U(t) |\psi(t)\rangle = e^{iHt/\hbar} |\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle; \quad (3.64)$$

$$O_H(t) = U(t) O U(t)^\dagger = e^{iHt/\hbar} O e^{-iHt/\hbar}. \quad (3.65)$$

L'elemento di matrice è naturalmente invariante per tale trasformazione:

$$\langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle = \langle \psi_H | O_H(t) | \psi_H \rangle, \quad (3.66)$$

ma ora l'evoluzione temporale non è più descritto dall'equazione di Schrödinger; essa risiede invece nella dipendenza temporale non banale di operatori. L'equazione del moto per un operatore generico O si ottiene dalla (3.65) ed è:

$$i\hbar \frac{dO_H}{dt} = i\hbar \frac{\partial O_H}{\partial t} + [O_H, H], \quad (3.67)$$

dove il primo termine è presente se l'operatore dipende esplicitamente dal tempo. La (3.67) è nota come **equazione di Heisenberg**. (cfr. l'eq.(1.36) di Sec.1.2.)

La descrizione dell'evoluzione temporale del sistema in meccanica quantistica basata su (3.64), (3.65), (3.67) è chiamata *schema di Heisenberg* (o rappresentazione di Heisenberg). Nello schema di Heisenberg, lo stato non evolve col tempo, l'operatore varia col tempo.

Viceversa, nella descrizione usuale basata sull'equazione di Schrödinger, chiamata *schema di Schrödinger* (o rappresentazione di Schrödinger), è la funzione d'onda (lo stato) che evolve con il tempo. Ad un istante ($t = 0$) i due schemi coincidono:

$$O_H(0) = O; \quad |\Psi_H\rangle = |\Psi(0)\rangle. \quad (3.68)$$

Un fatto importante è che il commutatore fondamentale *a tempi uguali* ha la stessa forma a qualsiasi istante e indipendente dall'Hamiltoniana:

$$[x_{iH}(t), p_{jH}(t)] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (3.69)$$

La (3.69) segue da $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$: infatti,

$$[x_{iH}(t), p_{jH}(t)] = [e^{iHt/\hbar} x_i e^{-iHt/\hbar}, e^{iHt/\hbar} p_j e^{-iHt/\hbar}] = e^{iHt/\hbar} [x_i, p_j] e^{-iHt/\hbar} = i\hbar \delta_{ij}. \quad (3.70)$$

Si noti che il commutatore usuale nello schema di Schrödinger può essere visto un caso particolare (per $t = 0$) di (3.70). Il fatto che il commutatore fondamentale prende la stessa forma a qualsiasi istante del tempo, è essenziale per la consistenza dell'intera costruzione della meccanica quantistica: un istante particolare (per es. $t = 0$) non può avere nessun significato speciale, vista l'uniformità del tempo.

Vice versa, i commutatori a tempi non uguali,

$$[x_{iH}(t), p_{jH}(t')], \quad [x_{iH}(t), x_{jH}(t')], \quad [p_{iH}(t), p_{jH}(t')], \quad (3.71)$$

contengono informazione dinamica, *i.e.*, dipendono dal sistema.

Esercizio: Risolvere le equazioni di Heisenberg per una particella libera in una dimensione. Calcolare il commutatore a tempi non uguali $[x_H(t), x_H(0)]$. (Risposta: $[x_H(t), x_H(0)] = -i\hbar t/m$.)

Esercizio (Teorema):

Supponiamo che il sistema descritto dalla funzione d'onda $\psi_S(t)$ all'istante $t = 0$ sia autostato di un operatore \hat{f} con autovalore f_0 . La funzione d'onda all'istante t è allora autostato dell'operatore di Heisenberg $\hat{f}_H(-t)$, con lo stesso autovalore f_0 .

3.3.2 Oscillatore armonico

Consideriamo un oscillatore armonico lineare, $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$. L'Hamiltoniana nella rappresentazione di Heisenberg è

$$H_H = U H(x, p) U^\dagger = H(U x U^\dagger, U p U^\dagger) = \frac{p_H^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x_H^2. \quad (3.72)$$

L'equazione di Heisenberg è

$$m\dot{x}_H = p_H; \quad \dot{p}_H = -m\omega^2 x_H, \quad (3.73)$$

di cui soluzione è

$$x_H(t) = x_H(0) \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} p_H(0) \sin \omega t = x \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} p \sin \omega t; \quad (3.74)$$

$$p_H(t) = p_H(0) \cos \omega t - m\omega x_H(0) \sin \omega t = p \cos \omega t - m\omega x \sin \omega t; \quad (3.75)$$

Per esempio, supponiamo che all'istante $t = 0$ il sistema sia descritto da un pacchetto d'onda ψ_0 e che siano noti $\langle \psi_0 | p^2 | \psi_0 \rangle \equiv p_0^2$ e $\langle \psi_0 | x^2 | \psi_0 \rangle \equiv x_0^2$. Per calcolare $\langle \psi(t) | p^2 | \psi(t) \rangle$ nello schema di Schrödinger, è necessario risolvere l'equazione di Schrödinger, e poi calcolare il valor medio di p^2 in $\psi(t)$. Questo problema si risolve facilmente nello schema di Heisenberg:

$$\langle \psi(t) | p^2 | \psi(t) \rangle = \langle \psi_0 | U(t) p^2 U^{-1}(t) | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | p_H(t)^2 | \psi_0 \rangle. \quad (3.76)$$

Ma

$$p_H(t)^2 = p^2 \cos^2 \omega t + m^2 \omega^2 x^2 \sin^2 \omega t - m\omega (xp + px) \cos \omega t \sin \omega t, \quad (3.77)$$

dove abbiamo utilizzato il risultato (3.75); inoltre si noti che

$$\langle \psi_0 | xp + px | \psi_0 \rangle = 0, \quad (3.78)$$

(il primo membro deve essere reale essendo il valor medio di un operatore Hermitiano, ma è puramente immaginario). Segue perciò

$$\langle \psi(t) | p^2 | \psi(t) \rangle = p_0^2 \cos^2 \omega t + m^2 \omega^2 x_0^2 \sin^2 \omega t. \quad (3.79)$$

Analogamente, si trova che

$$\langle \psi(t) | x^2 | \psi(t) \rangle = x_0^2 \cos^2 \omega t + \frac{1}{m^2 \omega^2} p_0^2 \sin^2 \omega t. \quad (3.80)$$

3.4 Stati misti e matrice densità

La descrizione in termini di una funzione d'onda è una descrizione completa del sistema in meccanica quantistica. Ci sono delle situazioni, d'altra parte, nelle quali tale descrizione completa o non è possibile o non è richiesta. Tale situazione sorge, per esempio, nella descrizione di un sottosistema di un sistema più grande: avendo accesso solo ad una parte delle variabili dinamiche, non è possibile descrivere il sottosistema con una funzione d'onda. Un'altro importante esempio dei casi in cui dovremmo abbandonare la descrizione in termini di funzioni d'onda, riguarda i sistemi di molti gradi di libertà (sistemi macroscopici, solidi, gas, ecc.). In questi casi è ovviamente impossibile avere la completa conoscenza della funzione d'onda di (tipicamente) 10^{23} molecole: si dovrà lavorare con quantità mediate in vari modi. Un'analoga situazione statistica è presente nei fasci di particelle (per es., fotoni) parzialmente polarizzati, o non polarizzati. In tutti i casi elencati sopra, quello che caratterizza questi sistemi è la mancanza dell'informazione completa.

Consideriamo per concretezza il caso di primo tipo: un sistema chiuso Σ e un suo sottosistema, S . Siano x le variabili in S cui abbiamo accesso; q il resto delle variabili in Σ/S che non osserviamo. Anche se il sistema totale è descritto da una funzione d'onda $\Psi(q, x)$, non è vero in generale la fattorizzazione

$$\Psi(q, x) \neq \psi_S(x) \psi_{\Sigma/S}(q); \quad (3.81)$$

il sottosistema S non ha funzione d'onda in generale. Come calcolare allora il valore d'aspettazione di un operatore \hat{f}_x che dipende solo dalle variabili del sottosistema? Secondo la regola standard,

$$\langle f \rangle = \int dq dx \Psi^*(q, x) \hat{f}_x \Psi(q, x), \quad (3.82)$$

dove l'operatore agisce solo sulla dipendenza da x della funzione d'onda. Definiamo ora

$$\rho(x; x') \equiv \int dq \psi(q, x) \psi^*(q, x'), \quad (3.83)$$

chiamata *matrice densità*. Il valor medio è dato allora da:

$$\langle f \rangle = \int dx \{ \hat{f}_x \rho(x; x') \}_{x'=x}. \quad (3.84)$$

La necessità di tenere x e x' distinte nella definizione di $\rho(x; x')$ è evidente: nella (3.84) \hat{f}_x deve agire prima sulla dipendenza da x della matrice densità; va messa $x = x'$ solo dopo tale operazione.

La matrice densità è Hermitiana (considerando x e x' come indici di una matrice):

$$\rho(x; x')^* = \rho(x'; x). \quad (3.85)$$

Inoltre essa obbedisce ad una proprietà importante

$$\text{Tr} \rho = \int dx \rho(x; x) = 1. \quad (3.86)$$

Quest'ultimi segue dalla condizione di normalizzazione della funzione d'onda $\psi(q, x)$.

Gli stati descritti da una matrice densità sono chiamati *stati misti*; quelli descritti da una funzione d'onda sono chiamati *stati puri*.

Il concetto di stato misto è più generale di quello di stato puro, descritto da funzioni d'onda. Infatti, è vero che ogni stato puro può essere considerato uno stato misto di particolare tipo, ma non vice versa. Per uno stato puro, la matrice densità è data semplicemente da (considerando $S = \Sigma$),

$$\rho(x; x') = \psi(x) \psi^*(x'). \quad (3.87)$$

La matrice densità nel caso puro ha una proprietà speciale:

$$\rho^2(x; x') \equiv \int dx'' \rho(x; x'') \rho(x''; x') = \rho(x; x'). \quad (3.88)$$

Per varie applicazioni è più conveniente usare una base generica $|n\rangle$ anziché la base $|x\rangle$ adoperata finora. Riscriviamo (3.82) come

$$\begin{aligned} \langle f \rangle &= \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle \\ &= \int dq dq' \sum_n \sum_m \langle \psi | q, n \rangle \langle q, n | \hat{f} | q', m \rangle \langle q', m | \psi \rangle \\ &= \int dq \sum_n \sum_m \langle \psi | q, n \rangle \langle n | \hat{f} | m \rangle \langle q, m | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.89)$$

dove abbiamo usato la relazione di completezza, nonché il fatto che l'operatore \hat{f} non agisce su q per cui $\langle q, n | \hat{f} | q', m \rangle = \langle n | \hat{f} | m \rangle \delta(q - q')$. Definendo ora la matrice densità

$$\rho_{mn} \equiv \int dq \langle q, m | \psi \rangle \langle \psi | q, n \rangle, \quad (3.90)$$

e l'elemento di matrice

$$f_{nm} = \langle n | \hat{f} | m \rangle, \quad (3.91)$$

il valore d'aspettazione si esprime semplicemente:

$$\langle f \rangle = \text{Tr}(\rho f). \quad (3.92)$$

La quantità $\langle q, n | \psi \rangle$ che appare nell'eq.(3.89) ha un significato semplice: da

$$\begin{aligned}\psi(q, x) &= \sum_n c_n(q) \psi_n(x) \\ \rightarrow c_n(q) &= \int dx \psi_n^*(x) \psi(q, x) = \int dx \langle n | x \rangle \langle q, x | \psi \rangle = \langle q, n | \psi \rangle : \quad (3.93)\end{aligned}$$

cioè $\langle q, n | \psi \rangle$ è il coefficiente di sviluppo della funzione d'onda del sistema totale Σ in termini di stati $\{\psi_n(x)\}$ del sottosistema S . La (3.90) si riscrive allora come

$$\rho_{mn} = \int dq c_m(q) c_n^*(q) \quad (3.94)$$

Segue anche la relazione

$$\rho(x; x') = \sum_{n, m} \psi_n(x) \rho_{nm} \psi_m^*(x'). \quad (3.95)$$

La matrice densità è caratterizzata dalle seguenti proprietà generali:

$$\text{Tr } \rho = 1; \quad (3.96)$$

$$\rho^\dagger = \rho; \quad (\text{Hermiticità}) \quad (3.97)$$

$$0 \leq \rho_{mm} \leq 1; \quad (3.98)$$

$$|\rho_{mn}|^2 \leq \rho_{mm} \rho_{nn}. \quad (3.99)$$

Le proprietà (3.96)-(3.98) sono ovvie. L'ultima proprietà si dimostra direttamente:

$$\begin{aligned}& \rho_{mm} \rho_{nn} - \rho_{mn} \rho_{nm} \\ &= \iint dq dq' [c_m(q) c_m^*(q) c_n(q') c_n^*(q') - c_m(q) c_n^*(q) c_n(q') c_m^*(q')] \\ &= \frac{1}{2} \iint dq dq' [c_m(q) c_n(q') - c_n(q) c_m(q')] [c_m(q) c_n(q') - c_n(q) c_m(q')]^* \\ &\geq 0. \quad (3.100)\end{aligned}$$

Nel caso di uno stato puro, con la funzione d'onda

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x), \quad (3.101)$$

la matrice densità è semplicemente con elementi

$$\rho_{nm} = c_n c_m^*. \quad (3.102)$$

Più generalmente, uno stato è puro se e solo se la relazione

$$\rho^2 = \rho \quad (3.103)$$

è soddisfatta dalla matrice densità.

Esercizio: Dimostrate (3.103) partendo dalla (3.95), e facendo uso della (3.88) e della relazione di completezza. Si verifichi che la (3.102) soddisfa (3.103).

Come abbiamo accennato all'inizio, un'importante classe di applicazione della matrice densità riguarda la fisica statistica. In fisica statistica, il grande numero di gradi di libertà ci costringe ad un trattamento statistico (Boltzman). La matrice densità $\rho_{mn} = w_{mn}$ in questi casi è chiamata *matrice statistica*. Sia W_i la probabilità (nel senso statistico) che uno dei sistemi microscopici (per es. un atomo) si trovi nell' i -simo stato quantistico,

$$|\psi^{(i)}(t)\rangle = \sum_n a_n^i(t) |\psi_n\rangle, \quad (3.104)$$

dove $\{\psi_n\}$ è una base ortonormale generica (e indipendente dal tempo), scelta una volta per tutte. Sopponiamo inoltre che le probabilità statistiche per i -simo stato siano note. Per esempio, se si tratta di un insieme canonico a temperatura T , e se gli stati $|\psi^{(i)}\rangle$ sono autostati dell'energia, allora

$$W_i = e^{-E_i/kT} / \mathcal{N}, \quad \sum_i W_i = 1, \quad (3.105)$$

dove \mathcal{N} è la funzione di partizione, $\mathcal{N} = \sum_i e^{-E_i/kT}$. Tuttavia, la discussione qui è generale e valida per qualsiasi tipo di distribuzione statistica.

Il valor medio di un operatore f è dunque dato da:

$$\begin{aligned} \langle f \rangle &= \sum_i W_i \langle \psi^{(i)} | f | \psi^{(i)} \rangle \\ &= \sum_i \sum_{m,n} W_i a_m^{(i)*} a_n^{(i)} f_{mn} \\ &= \sum_{m,n} \rho_{nm} f_{mn} = \text{Tr}(\rho \mathbf{f}), \end{aligned} \quad (3.106)$$

dove abbiamo introdotto la matrice densità (statistica)

$$\rho_{nm} = \sum_i W_i a_m^{(i)*} a_n^{(i)}. \quad (3.107)$$

Si osservi che, grazie alla positività $W_i \geq 0$ della probabilità classica, la matrice densità definita qui soddisfa le stesse proprietà (3.96)-(3.99) considerate prima. In ambedue i casi, l'apparizione della matrice densità riflette l'ignoranza da parte nostra, che è rappresentata dalle variabili q nei primi casi; e dalle probabilità statistiche W_i nei secondi.

L'evoluzione temporale della matrice densità segue dal fatto che $|\psi^{(i)}(t)\rangle$ obbedisce all'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^{(i)}(t)\rangle = H |\psi^{(i)}(t)\rangle. \quad (3.108)$$

Poiché

$$a_n^{(i)}(t) = \langle \psi_n | \psi^{(i)}(t) \rangle, \quad (3.109)$$

abbiamo

$$i\hbar \dot{a}_n^{(i)}(t) = \langle \psi_n | H | \psi^{(i)}(t) \rangle = \sum_k a_k^{(i)} H_{nk}. \quad (3.110)$$

Analogamente

$$-i\hbar \dot{a}_m^{(i)*}(t) = \langle \psi^{(i)}(t) | H | \psi_m \rangle = \sum_k a_k^{(i)*} H_{km}. \quad (3.111)$$

Si ha dunque per la matrice densità (3.107):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{nm} &= \sum_i W_i \sum_k (a_m^{(i)*} H_{nk} a_k^{(i)} - a_k^{(i)*} H_{km} a_n^{(i)}) \\ &= \sum_k (H_{nk} \rho_{km} - \rho_{nk} H_{km}) = [\mathbf{H}, \rho]_{nm}. \end{aligned} \quad (3.112)$$

Questa equazione sostituisce, per gli stati misti, l'equazione di Schrödinger o l'equazione di Heisenberg (nello schema di Heisenberg). Formalmente l'eq.(3.112) assomiglia all'equazione di Heisenberg; si noti tuttavia una curiosa (e ben nota) differenza di segno nelle due equazioni.

3.4.1 Polarizzazioni del fotone

Illustriamo ora l'uso della matrice densità, consideriamo lo stato di un fotone, tralasciando tutte le altre proprietà (l'impulso, l'energia, ecc.). Il fatto empirico che ci sono due componenti di luce con determinati valori di lunghezza d'onda, può essere interpretato come presenza di *due stati quantistici* $|1\rangle$ e $|2\rangle$ del fotone. $|1\rangle$ e $|2\rangle$ possono essere presi come due stati di polarizzazioni lineari (e ortogonali); due stati di polarizzazione circolari, ecc. Uno stato *puro* generico sarà descritto dalla funzione d'onda,

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (3.113)$$

dove abbiamo introdotto una notazione vettoriale

$$|1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix};$$

$$\langle 1| = (10); \quad \langle 2| = (01), \quad (3.114)$$

e c_1, c_2 sono numeri complessi sottoposti alla condizione di normalizzazione

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (3.115)$$

I due stati di base sono ortonormali:

$$\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1; \quad \langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = 0. \quad (3.116)$$

Nella notazione (3.114) tale proprietà sono esplicite.

Il sistema di un fotone (dove la polarizzazione è l'unica variabile dinamica) è un esempio di *sistema a due livelli o a due stati*, di cui la Natura è abbondantemente dotata. Altri esempi sono il sistema di spin (il momento angolare intrinseco) di una particella nel caso di spin $1/2$ (e.g. elettrone; vedi il capitolo successivo); i due stati fondamentali della molecola di ammoniaca (NH^3); gli stati fondamentali dello ione della molecola di idrogeno, H_2^+ , ecc. Nonostante la loro semplicità, i sistemi a due stati illustrano molti aspetti caratteristici della meccanica quantistica.

Per esempio, la misura della polarizzazione nello stato (3.113) risulterà il fotone polarizzato nella direzione 1 con probabilità $|c_1|^2$ e nella direzione 2 con probabilità $|c_2|^2$. (Vedi il Cap. 2.1.) Tutti gli operatori del sistema (in particolare, l'Hamiltoniana) sono semplicemente matrici hermitiane 2×2 .

L'operatore che "misura la polarizzazione nella direzione 1 e quella nella direzione 2, agiscono secondo la regola:

$$P_1|1\rangle = |1\rangle; \quad P_1|2\rangle = 0; \quad P_2|2\rangle = |2\rangle; \quad P_2|1\rangle = 0; \quad (3.117)$$

in altre parole

$$P_1 = |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad P_2 = |2\rangle\langle 2| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.118)$$

sono *operatori di proiezione* sugli stati $|1\rangle$ e $|2\rangle$, rispettivamente. La matrice densità nel caso di uno stato puro (3.113) è data da

$$\rho = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* \\ c_1^* c_2 & |c_2|^2 \end{pmatrix}. \quad (3.119)$$

Si ha uno stato misto se il fascio di fotone è parzialmente polarizzato, o non polarizzato. Un fascio non polarizzato (totale ignoranza sullo stato di polarizzazione) è descritto dalla matrice densità,

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.120)$$

di modo che la media della polarizzazione 1 o 2 è, rispettivamente,

$$\langle P_1 \rangle = \text{Tr}(P_1 \rho) = \frac{1}{2}; \quad \langle P_2 \rangle = \text{Tr}(P_2 \rho) = \frac{1}{2}. \quad (3.121)$$

Lo stato di polarizzazione parziale è generalmente rappresentato da

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \xi_3 & \xi_1 - i\xi_2 \\ \xi_1 + i\xi_2 & 1 - \xi_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \sigma_i \xi_i) \quad (3.122)$$

con

$$\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 \leq 1, \quad (3.123)$$

e

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.124)$$

sono le matrici di Pauli. ξ_1, ξ_2, ξ_3 (reali) sono chiamati parametri di Stokes. È facile vedere che

$$\rho^2 = \rho, \quad (3.125)$$

se

$$\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 = 1: \quad (3.126)$$

in questo caso il sistema è puro. $1 - \xi_1^2 - \xi_2^2 - \xi_3^2$ è una misura della nostra ignoranza sullo stato di polarizzazione. ξ_3 descrive il grado di polarizzazione nelle direzioni 1 e 2, per es.

$$\langle P_1 \rangle = \text{Tr} P_1 \rho = \frac{1 + \xi_3}{2} = \begin{cases} 1 & \text{se } \xi_3 = 1, \\ 0 & \text{se } \xi_3 = -1 \end{cases}. \quad (3.127)$$

Analogamente ξ_1 descrive il grado di polarizzazione lineare nelle direzioni che fanno angolo $\pm \frac{\pi}{4}$ con quelle di 1 e 2, come si vede costruendo l'operatore di proiezione,

$$P'_1 = |1'\rangle \langle 1'|, \quad P'_2 = |2'\rangle \langle 2'|, \quad |1'\rangle = \frac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |2'\rangle = \frac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (3.128)$$

e calcolando $\langle P_1 \rangle$, etc. Infine ξ_2 dà la misura di polarizzazioni circolari, corrispondenti agli autostati

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + i|2\rangle); \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i|2\rangle). \quad (3.129)$$

3.5 Funzioni di Green

Un concetto importante in meccanica quantistica è quello di *ampiezza di probabilità* per due successivi eventi, i.e., che una particella che si trovava al punto $x = x_0$ all'istante $t = t_0$ si trovi al punto x in un istante successivo t . Data la nota evoluzione temporale della funzione d'onda, tale ampiezza, chiamata *funzione di Green*, è data formalmente da:

$$G(x, x_0; t, t_0) = \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle. \quad (3.130)$$

Si noti che la funzione di Green è intimamente collegata al concetto di funzione d'onda: G è la funzione d'onda del sistema, che all'istante $t = t_0$ era un autostato della posizione, $\psi(x, t_0) = \delta(x - x_0)$. Infatti,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(x, x_0; t, t_0) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle \\ &= \langle x | H e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle = H_{Sch} \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle \\ &= H_{Sch} G(x, x_0; t, t_0) \end{aligned} \quad (3.131)$$

(vedi l'Appendice sulla Meccanica Matriciale), e $G(x, x_0; t_0, t_0) = \langle x | x_0 \rangle$.

La probabilità che la particella si trovi nell'intervallo $(x, x + dx)$ all'istante t qualsiasi è data da $|G(x, x_0; t, t_0)|^2 dx$.

Per semplicità di notazione, qui e in seguito ci limiteremo a scrivere le formule per sistemi uni-dimensionali; la generalizzazione a sistemi di dimensione più grande o a sistemi con più di una particella, è ovvia.

L'importanza della funzione di Green sta nel fatto che se la funzione di Green di un sistema è nota una volta per tutte, la soluzione dell'equazione di Schrödinger con una condizione al contorno arbitraria,

$$\Psi(x, t)|_{t=t_0} = \Psi_0(x, t_0), \quad (3.132)$$

è espressa con aiuto di $G(x, x_0; t, t_0)$:

$$\Psi(x, t) = \int dx' G(x, x'; t, t_0) \Psi_0(x', t_0). \quad (3.133)$$

Cioè la conoscenza della funzione di Green equivale alla soluzione dell'equazione di Schrödinger generale.

Esecizio: Si dimostri che $\Psi(x, t)$ soddisfa sia l'equazione di Schrödinger che la condizione al contorno a $t = t_0$.

In questo proposito, vale la pena di menzionare che esiste un formalismo della meccanica quantistica equivalente a quello standard basato sull'equazione di Schrödinger, chiamato *integrale sui cammini* (Feynman), in cui la funzione di Green occupa il luogo centrale.

La (3.130) può essere riscritta in un'altra forma utile, inserendo due volte la relazione di completezza

$$\mathbf{1} = \sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|, \quad (3.134)$$

dove $|\Psi_n\rangle$ è l' n -simo autostato dell'energia. Si ha allora,

$$G(x, x_0; t, t_0) = \sum_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \Psi_n(x) \Psi_n^*(x_0), \quad (3.135)$$

dove è stata usata l'ortonormalità degli stati $|\Psi_n\rangle$.

In casi semplici la funzione di Green può essere calcolata esplicitamente. Prendiamo per esempio il caso di una particella unidimensionale libera. Dopo le sostituzioni:

$$E_n \rightarrow \frac{p^2}{2m}; \quad \Psi_n(x) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}; \quad \sum_n \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dp \quad (3.136)$$

nella formula (3.135), si ha

$$\begin{aligned} G(x, x_0; t, t_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-ip^2(t-t_0)/2m\hbar} e^{ip(x-x_0)/\hbar} \\ &= e^{im(x-x_0)^2/2\hbar(t-t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp - \frac{i(t-t_0)}{2m\hbar} \left[p - \frac{m(x-x_0)}{t-t_0} \right]^2 \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m\hbar}{i(t-t_0)}} e^{im(x-x_0)^2/2\hbar(t-t_0)} \left(\int_C d\xi e^{-\xi^2} \right), \end{aligned} \quad (3.137)$$

dove il contour C dell'integrazione su ξ è lungo la linea retta $(1+i)\alpha$; $\alpha = -\infty \rightarrow \infty$. L'integrale dà $\sqrt{\pi}$ perciò si ottiene

$$G(x, x_0; t, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2i\hbar\pi(t-t_0)}} e^{im(x-x_0)^2/2\hbar(t-t_0)} \quad (3.138)$$

per una particella libera.

Esercizio: Si calcoli, all'istante $t > t_0$, la funzione d'onda di una particella libera, descritta da un pacchetto d'onda

$$\psi_0(x, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} e^{-x^2/4a^2}, \quad (3.139)$$

all'istante iniziale $t = t_0$.