

Postulato 1. Lo stato di un sistema è descritto da una funzione $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$, detta funzione di stato o funzione d'onda.

I vettori $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ rappresentano le coordinate delle particelle che compongono il sistema, t è il tempo. Matematicamente, la funzione d'onda di un sistema è un vettore di uno spazio di Hilbert. Per i nostri scopi, l'informazione importante è che lo spazio di Hilbert è uno spazio nei numeri complessi in cui è definito il prodotto scalare tra due vettori, detto anche prodotto interno. Il prodotto scalare della funzione con il suo complesso coniugato, $\Psi^*\Psi$, è il modulo quadro della funzione d'onda e ha un significato fisico ben preciso. Supponiamo di avere un sistema costituito da una particella, sia \mathbf{r} la sua posizione e $\Psi(\mathbf{r}, t)$ la sua funzione d'onda, allora:

$$\Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)d\mathbf{r}$$

è la probabilità che la particella si trovi nel volume $d\mathbf{r}$, centrato in \mathbf{r} , al tempo t .

Postulato 2. Ad ogni osservabile corrisponde un operatore Hermitiano.

In realtà questo postulato ha una formulazione più profonda, che indica non solo che le osservabili sono operatori ma anche come questi operatori devono commutare tra loro. In sostanza, se ho due operatori, in generale conta l'ordine con cui essi agiscono su un dato vettore. Implicita nel postulato 2 c'è la scelta delle proprietà di commutazione degli operatori. Noi prenderemo per buone le definizioni di alcuni operatori, in altri casi deriveremo gli operatori partendo dalla loro formulazione classica. Useremo poi le loro proprietà di commutazione per descrivere i casi che affronteremo.

Postulato 3. Dato un sistema in un certo stato ψ , il valore medio che un osservabile Q assume in una serie di misure è dato dal valore di aspettazione $\langle Q \rangle = \langle \psi | Q | \psi \rangle$. I valori che si possono ottenere da una misura dell'osservabile sono esclusivamente gli autovalori q_n di Q , che soddisfano l'equazione $Q|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle$

Postulato 4. La funzione d'onda Ψ di un sistema evolve nel tempo secondo l'equazione di Schrödinger:

$$H|\Psi\rangle = i\hbar|\dot{\Psi}\rangle$$

con $|\dot{\Psi}\rangle = \frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle$

Postulato 5. Gli stati permessi in un sistema di particelle identiche rispettano il principio di simmetria per scambio di particelle. In particolare sono simmetrici se le particelle sono a spin intero (bosoni); antisimmetrici se le particelle hanno spin semintero (fermioni).

Dal postulato 5 si ottiene il **Principio di Esclusione di Pauli**, che stabilisce che 2 fermioni identici non possono occupare lo stesso stato.

Postulati, operatori, commutatori

Il secondo postulato stabilisce che le osservabili in MQ sono rappresentate da operatori hermitiani. In realtà prevede implicitamente che si definiscano degli operatori con opportune proprietà. La scelta non è univoca, in sostanza si decide se esprimere gli operatori in funzione dell'operatore posizione (*rappresentazione posizione*) oppure dell'operatore momento (*rappresentazione momento*). La prima opzione è la più adottata, la usiamo anche noi, ed è quella in cui si definiscono gli operatori:

$$\text{posizione} \quad x \Rightarrow x$$

$$\text{momento} \quad p \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

vedremo come, una volta che si definisce l'operatore posizione, il momento in questa forma è derivabile.

Si dimostra facilmente che p è hermitiano (fatto in aula, vd Griffiths).

Una volta stabilita la rappresentazione adottata, tutti gli operatori di interesse possono essere espressi in funzione di momento e posizione. Ad esempio, l'energia cinetica di una particella, $K = \frac{p^2}{2m}$, diventa in rappresentazione posizione:

$$\text{Energia cinetica} \quad K \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Il terzo postulato stabilisce invece cosa succede quando effettuiamo delle misure delle osservabili. La prima parte stabilisce che il valore medio di un'osservabile Q è pari al suo valore di aspettazione che è definito come:

$$\langle Q \rangle = \frac{\langle \psi | Q | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

dove $|\psi\rangle$ è lo stato del sistema. Se $|\psi\rangle$ è ben definito il numeratore della relazione precedente è 1 e il valore di aspettazione diventa semplicemente:

$$\langle Q \rangle = \langle \psi^* | Q | \psi \rangle$$

Si noti che queste notazioni in cui l'operatore è a *sandwich* tra un bra e un ket sono giustificate dal fatto che consideriamo operatori hermitiani....

Le tre **proprietà** per noi fondamentali degli operatori Hermitiani sono:

1. Ha autovalori reali
2. Autovettori di autovalori diversi sono ortogonali
3. I suoi autovettori rappresentano una base completa dello spazio di Hilbert

Le proprietà 1 e 2 sono dimostrabili (vd Griffiths); la 3 lo è solo per il caso di spazi a dimensione finita ma non lo facciamo e la prendiamo come assioma.

Postulato 3 e interpretazione statistica della misura.

Supponiamo di avere il nostro sistema preparato nello stato ψ . Consideriamo un'osservabile Q e il relativo operatore \hat{Q} , di cui conosciamo autostati $|q_n\rangle$ e autovalori q_n . Per le proprietà degli operatori hermitiani, il set di $|q_n\rangle$ costituisce una base ortonormale completa dello spazio di Hilbert in cui operiamo. Possiamo perciò scrivere ψ come:

$$\psi = \sum_n c_n |q_n\rangle$$

con un'opportuna scelta dei coefficienti c_n .

Se andiamo a calcolare ora il valore di aspettazione di Q :

$$\langle Q \rangle = \langle \psi | Q | \psi \rangle = \left(\sum_m c_m^* \langle q_m | \right) Q \left(\sum_n c_n | q_n \rangle \right) = \sum_{n,m} c_m^* c_n q_n \langle q_m | q_n \rangle = \sum_n |c_n|^2 q_n$$

Ma se andiamo a vedere la definizione di valore medio che avevamo dato nell'introduzione al calcolo probabilistico e la confrontiamo con questo abbiamo che:

$|c_n|^2$ è la probabilità di osservare q_n in una misura di Q

Questa derivazione può essere trovata sul McQuarrie (sez. 4.8) in notazione integrale, un utile confronto con la notazione bra e ket utilizzata qui.

Dato quindi un sistema in un certo stato ψ diventa fondamentale saper trovare i coefficienti c_n per poter stabilire con che probabilità osserverò determinati valori di un'osservabile. Si ha semplicemente che:

$$c_n = \langle q_n | \psi \rangle$$

Se vogliamo, nel caso in cui abbiamo a che fare con stati che sono funzioni continue, la precedente relazione equivale a:

$$c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} q_n^*(x) \psi(x) dx$$

I coefficienti c_n sono chiamati anche coefficienti di Fourier, perché il loro utilizzo è del tutto simile a quello che si ha nelle serie di Fourier, che introdurremo in seguito.

Problema 3.27 Griffiths. MISURE IN SEQUENZA

L'operatore associato all'osservabile A, ha due autostati normalizzati ψ_1 e ψ_2 , con autovalori a_1 e a_2 . Anche l'operatore associato all'osservabile B ha due autostati normalizzati φ_1 e φ_2 con relativi autovalori b_1 e b_2 . Gli autostati sono legati dalle seguenti relazioni:

$$\psi_1 = \frac{(3\varphi_1 + 4\varphi_2)}{5}$$

$$\psi_2 = \frac{(4\varphi_1 - 3\varphi_2)}{5}$$

- (a) Viene misurata A e viene ottenuto il valore a_1 . Qual è lo stato del sistema dopo la misura?
La misura ha fatto collassare lo stato iniziale (che nemmeno conosciamo) in ψ_1 . Infatti, abbiamo ottenuto il relativo autovalore.
- (b) Se ora (cioè successivamente alla misura fatta al punto precedente) misuriamo B, quali sono i possibili risultati?
Il sistema si trova nello stato ψ_1 . La probabilità che misurando B io trovi b_n è data da:

$$\langle \varphi_n | \psi_1 \rangle = |c_n|^2$$

Ovvero dal modulo quadro del coefficiente relativo. Nel nostro caso avremo $\frac{9}{25}$ di probabilità di ottenere b_1 e $\frac{16}{25}$ di ottenere b_2

- (c) Ora misuriamo di nuovo A. Che probabilità ho di ottenere a_1 ?
Mi trovo ora in un autostato di B. Per dare la risposta devo innanzitutto esprimere gli autostati di A in base B... Volendo essere eleganti, possiamo scrivere le relazioni che legano gli stati del testo del problema in forma matriciale:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/5 & 4/5 \\ 4/5 & -3/5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$$

E, trovare la matrice inversa per scrivere le relazioni opposte. Nel caso specifico la matrice è autoinversa, cioè è l'inversa di sé stessa:

$$\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/5 & 4/5 \\ 4/5 & -3/5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

Ora, la domanda del problema è mal posta.

Potrò avere a_1 come risultato con probabilità $9/25$ se al punto precedente avevo ottenuto b_1 e con probabilità $16/25$ se avevo ottenuto b_2 . Ma se faccio la misura al punto (b) senza guardare il risultato, allora la probabilità di ottenere a_1 alla fine sarà: $9/25 * 9/25 + 16/25 * 16/25 = 0.5392...$

Derivazione del Principio di Indeterminazione

Siano A e B due osservabili definite in uno spazio in cui il sistema si trova in un generico stato ψ .

Consideriamo la deviazione standard delle variabili. Dalla definizione che avevamo dato nei richiami di calcolo delle probabilità, per l'osservabile A avremo:

$$\sigma_A^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$$

Che ora nella notazione bra ket per il nostro sistema diventa:

$$\sigma_A^2 = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle$$

che sfruttando l'hermitianità dell'operatore diventa:

$$\sigma_A^2 = \langle (A - \langle A \rangle)\psi | (A - \langle A \rangle)\psi \rangle = \langle f | f \rangle$$

definendo $|f\rangle = (A - \langle A \rangle)\psi$ per semplificare la scrittura.

Allo stesso modo per B avremo:

$$\sigma_B^2 = \langle (B - \langle B \rangle)\psi | (B - \langle B \rangle)\psi \rangle = \langle g | g \rangle$$

definendo $|g\rangle = (B - \langle B \rangle)\psi$.

Ora, l'ineguaglianza di Schwarz¹ dice: $\langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2$.

Se consideriamo che $\langle f | g \rangle$ è in generale un numero complesso z e che per ogni complesso z vale:

$$|z|^2 = [\text{Re}(z)]^2 + [\text{Im}(z)]^2 \geq [\text{Im}(z)]^2 = \left[\frac{1}{2i}(z - z^*) \right]^2$$

Possiamo scrivere:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} [\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle] \right)^2$$

Esplicitiamo ora $\langle f | g \rangle$ e sviluppiamone la formulazione sfruttando il fatto che A e B sono hermitiani:

$$\begin{aligned} \langle f | g \rangle &= \langle (A - \langle A \rangle)\psi | (B - \langle B \rangle)\psi \rangle = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (AB - A\langle B \rangle - \langle A \rangle B + \langle A \rangle \langle B \rangle) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | AB | \psi \rangle - \langle B \rangle \langle \psi | A | \psi \rangle - \langle A \rangle \langle \psi | B | \psi \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle = \langle AB \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \\ &= \langle \mathbf{AB} \rangle - \langle \mathbf{A} \rangle \langle \mathbf{B} \rangle \end{aligned}$$

¹ Per dimostrarla, definite un terzo vettore $|\gamma\rangle = |g\rangle - \frac{\langle f | g \rangle}{\langle f | f \rangle} |f\rangle$ e applicate la proprietà del prodotto interno: $\langle \gamma | \gamma \rangle \geq 0$.

E similmente:

$$\langle g|f\rangle = \langle \mathbf{B}\mathbf{A}\rangle - \langle \mathbf{A}\rangle\langle \mathbf{B}\rangle$$

Ne segue che:

$$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle \mathbf{A}\mathbf{B}\rangle - \langle \mathbf{B}\mathbf{A}\rangle = \langle \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A}\rangle = \langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\rangle$$

dove

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \equiv \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A}$$

è definito come il **commutatore** tra i due operatori A e B.

Abbiamo quindi:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\rangle \right)^2$$

che è il principio di indeterminazione nella sua forma più generale.

Quello che ci dice è che se due operatori commutano allora posso conoscere i valori esatti di entrambi (cioè entrambe le deviazioni standard possono essere nulle). Viceversa, se non commutano, se misuro il valore di una delle due osservabili allora l'indeterminazione sull'altra mi diverge.

Due operatori che commutano si dicono anche **compatibili**.

Misura e CSCO

Due operatori compatibili hanno un set comune di autovettori.

È facile da vedere. Supponiamo che A e B siano due operatori compatibili e che $|f\rangle$ sia un autovettore di A :

$$A|f\rangle = f|f\rangle$$

Se considero il ket $B|f\rangle$ e faccio operare su di esso A , avrò:

$$AB|f\rangle = BA|f\rangle = fB|f\rangle$$

Quindi $B|f\rangle$ è anch'esso autovettore di A con autovalore f .

Ma allora dovrò poterlo scrivere come $B|f\rangle = f'|f\rangle$, ovvero come un multiplo di $|f\rangle$ se voglio che sia autovettore di A con autovalore f . Quindi $|f\rangle$ è anche autovettore di B .

Attenzione, nei passaggi precedenti e più precisamente nella frase che ho scritto in blu, c'è nascosta l'assunzione che non ci sia degenerazione di A . Se A è degenerare su f , ovvero se ci sono più autovettori di A che danno sempre f come autovalore, allora quell'assunzione non è valida. In generale avrò invece che $|f\rangle$ potrà essere scritto come combinazione lineare di autovettori di B .

Non dimostriamo questa ultima generalizzazione, ma vediamo quali conseguenza comporta sulla misura delle variabili di un certo sistema.

Se abbiamo un operatore A senza livelli degeneri, allora i suoi autovettori, chiamiamoli $|f_a^n\rangle$, saranno in grado di identificarmi univocamente uno stato del sistema dopo che avrò effettuato una misura di A (ovvero, misuro A , ottengo il valore a_n ed il sistema mi collassa nel relativo autostato $|f_a^n\rangle$).

Se però A ha un autovalore degenerare, chiamiamolo a_m , e una misura di A mi dà proprio a_m come risultato, allora lo stato del sistema non sarà definito univocamente, perché sarà uno dei diversi autovettori di che hanno a_m come autovalore o una qualsiasi loro combinazione lineare!

Questo comporta che nonostante io abbia effettuato una misura di un operatore, non sia in grado di descrivere univocamente il mio sistema.

Per farlo devo introdurre un secondo operatore, B , che commuti con A e che NON sia degenerare nel sottospazio degli autovettori di A riferiti a a_m . Una misura di B successiva a quella effettuata di A , mi darà dei valori b_n con una certa distribuzione di probabilità e mi permetterà di definire lo stato del sistema come uno degli autovettori $|f_{a,b}^n\rangle$, che saranno autovettori sia di A che di B . Nel caso in cui B risolva solo parzialmente la degenerazione nel sottospazio considerato, mi servirà un ulteriore operatore C e così via....

L'obiettivo è quindi di identificare, per un dato sistema, un set di variabili che mi permettano di definire, attraverso gli autovettori comuni, in modo univoco lo stato di un sistema. Questo insieme di operatori è chiamato CSCO (*Complete Set of Commuting Operators*). La misura di tutte le osservabili che formano un CSCO si definisce **osservazione massima** del sistema. Dopo che è stata effettuata un'osservazione massima,

il sistema può dirsi preparato in uno stato ben definito. L'ordine in cui le diverse misure che portano ad una osservazione massima non conta, perché comunque stiamo misurando operatori commutanti.

Come nota finale, si tenga presente che per un dato sistema in generale ci sono più CSCO possibili, la scelta non è univoca.