

Capitolo P70 meccanica quantistica

Contenuti delle sezioni

- a. postulati fondamentali della meccanica quantistica p. 2
- b. osservabili continue p. 6
- c. sistemi quantistici stazionari p. 9
- d. momenti angolari e particelle con spin p. 12
- e. particelle con spin $1/2$ p. 13
- g. operatore densità e miscele di stati p. 15

16 pagine

P700.01 Per studiare i sistemi quantici in generale bisogna servirsi di spazi di Hilbert a infinite dimensioni, strutture matematiche il cui studio è piuttosto impegnativo.

Fortunatamente sono stati individuati alcuni modelli di sistemi quantistici di importanza basilare con i quali si sono potuti trattare effetti quantistici basilari (non spiegabili con la fisica newtoniana) collocandoli in spazi di Hilbert finitodimensionali o riferibili a basi numerabili relativamente semplici. Questi modelli hanno potuto essere esaminati quantitativamente con strumenti dell'analisi matematica e dell'algebra degli operatori lineari utilizzando molti risultati ormai classici, in particolare riguardanti equazioni differenziali lineari e funzioni speciali.

Con questi strumenti si sono ottenuti senza particolari difficoltà risultati significativi fisicamente riscontrabili che hanno dato alla meccanica quantistica un ruolo di primo piano per la fisica, per molte tecnologie, per la chimica e successivamente per la biologia.

Accade inoltre che molte nozioni sugli accennati spazi di Hilbert si possono introdurre in modo intuitivo richiamando analogicamente gli spazi a 3 dimensioni sui reali; anzi per illustrare i più semplici sistemi quantistici basta il semplice piano cartesiano: questo è il caso dei sistemi concernenti lo spin di un elettrone o di un nucleone. I modelli più semplici sono anche didatticamente efficaci.

In questo discorso introduttivo quindi faremo riferimento a sommatorie finite anche quando sarebbero necessarie delle serie, al fine di evitare ogni questione di convergenza.

Tratteremo invece solo in modo intuitivo, mediante analogie, le questioni riguardanti spettri continui e vettori impropri.

P70 a. postulati fondamentali della meccanica quantistica

P70a.01 Presentiamo ora i principi di base della meccanica quantistica in modo semplice, considerando osservabili dotate di spettro puramente discreto insistendo soprattutto sui casi di spettri finiti: questo permette di introdurre l'interpretazione probabilistica mediante formule relativamente semplici e che possono essere illustrate cominciando dai semplici spazi di 2 e 3 dimensioni.

Solo nel secondo paragrafo terremo conto della necessità di trattare grandezze con spettri continui, cioè con insiemi continui di autovalori; questi e i corrispondenti autovettori impropri saranno presentati solo intuitivamente come varianti di quelli dei casi discreti.

P70a.02 La meccanica quantistica si pone come primo obiettivo quello di esaminare le grandezze fisiche attribuite a sistemi microscopici rappresentabili come corpi puntiformi (elettroni, nuclei atomici, atomi, ioni, ...) e che spesso vengono chiamati particelle.

Innanzitutto la meccanica quantistica constata che la natura dei processi che consentono di misurare le grandezze fisiche delle particelle impone limiti invalicabili alle precisioni ottenibili quando si misurano simultaneamente certe grandezze, al di là delle difficoltà pratiche della riduzione delle imprecisioni degli strumenti.

In particolare si abbia una particella che si muove in una ben definita direzione, diciamo quella dell'asse Ox , e si vogliano misurare contemporaneamente con elevata precisione la sua posizione x e la sua quantità di moto p_x .

Per far questo si dovrebbe utilizzare un rivelatore con una estensione secondo Ox il più possibile piccola per determinare con precisione x ed il più possibile estesa per misurare accuratamente p_x .

Quindi le due grandezze potranno essere determinate solo con imprecisioni Δx e Δp_x tali che cercando di ridurre la prima si aumenterebbe la seconda e viceversa.

In breve diciamo essere impossibile la misurazione simultanea precisa di posizione e quantità di moto: questo sta alla base del fondamentale **principio di indeterminazione di Heisenberg**.

P70a.03 In sostanza occorre constatare che quando si effettua una misurazione su un sistema microscopico si deve necessariamente modificare il suo stato fisico: una misurazione quindi non può fornire con precisione illimitatamente migliorabile la grandezza che si cerca di misurare.

Di un sistema fisico microscopico quindi si possono fornire solo informazioni affette da imprecisioni.

In altri termini il modello che chiamiamo prequantistico delle particelle che ritiene che lo stato fisico di una di esse in linea di principio possa essere fornito da precise coordinate x, p_x, \dots sulle quali si possono fare previsioni di evoluzione rappresentabili da funzioni come $\mathbf{x}(t)$, $\mathbf{p}(t)$ e altre derivabili o assimilabili a queste può solo valere come approssimazione.

Questa approssimazione si trova essere simile a quella fornita dalla ottica geometrica per il comportamento delle radiazioni elettromagnetiche visibili.

P70a.04 A questo punto si potrebbe assumere una posizione radicale e rifiutare del tutto il modello delle particelle puntiformi, cioè individuabili con le coordinate \mathbf{x} e \mathbf{p} aventi come componenti numeri reali; questo atteggiamento però implicherebbe la messa in discussione della applicabilità degli strumenti dell'analisi infinitesimale e di tanti altri strumenti ampiamente utilizzati dalla fisica classica, prequantistica.

Si sceglie invece un compromesso: si mantiene il modello delle particelle puntiformi, che da ora in poi chiamiamo modello-PQ, modello prequantistico, come elemento di riferimento, si rinuncia alla

possibilità di avanzare previsioni deterministiche sui suoi parametri, cioè alla possibilità di determinare evoluzioni esprimibili mediante traiettorie della forma $\langle \mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t) \rangle$ e si mantiene solo il proposito di effettuare previsioni di tipo approssimato.

Si è anche trovato che queste previsioni possono svilupparsi molto efficacemente esprimendosi in termini probabilistici relativi a misure di probabilità appositamente adottate.

Presentiamo dunque una impostazione sistematica del formalismo che ha consentito di sviluppare con successo la fisica delle grandezze affette da indeterminazione. Procederemo per punti.

P70a.05 1 Si studiano sistemi fisici \mathbb{S} assegnati a determinati generi che genericamente denotiamo con \mathbb{S} ; ciascun genere viene associato ad un modello-PQ che caratterizza i sistemi di \mathbb{S} mediante variabili e parametri esprimibili con numeri reali.

Ogni genere \mathbb{S} viene trattato in uno spazio di Hilbert $\mathbf{H}_{\mathbb{S}}$ ottenibile dal modello-PQ seguendo criteri ben definiti che riprenderemo più oltre; ogni sistema fisico \mathbb{S} è associato a un versore ψ che per il suo ruolo viene chiamato vettore di stato di \mathbb{S} .

Per esempio un genere di sistema fisico è quello delle particelle puntiformi (di massa m e carica q): esso viene studiato nello spazio di Hilbert $\mathcal{L}(\mathbb{R}^3)$ attraverso vettori di stato costituiti da funzioni-RRRtC, le funzioni del genere $\lceil \mathbb{R}^{\times 3} \mapsto \mathbb{C} \rceil$, a quadrato sommabile e di norma 1.

Il genere di sistema più semplice riguarda lo spin di un elettrone o, più in generale, di un fermione: lo spazio di Hilbert di un tale sistema è il semplice spazio bidimensionale sui complessi \mathbb{C}^2 .

P70a.06 2 Ad ogni grandezza osservabile A relativa al genere \mathbb{S} corrisponde un operatore hermitiano \hat{A} su $\mathbf{H}_{\mathbb{S}}$ ottenibile dalla grandezza prequantistica A con considerazioni coerenti con quelle che hanno portato alla costruzione di $\mathbf{H}_{\mathbb{S}}$.

Per semplicità ora supponiamo che per descrivere il sistema siano sufficienti operatori \hat{A} dotati di spettro puramente discreto $\text{Spec}(\hat{A}) = \{r \in R : |a_r|\}$, per qualche insieme finito R .

Scriviamo le equazioni agli autovalori per \hat{A} come:

$$\hat{A} \phi_{r,m} = a_r \phi_{r,m} \quad \text{con} \quad r \in R, \quad m \in M_r$$

e scegliamo che i vettori $\phi_{r,m}$ abbiano norma 1; supponiamo dunque che il sistema degli autovettori $\mathbf{b}_{\hat{A}} = \{r \in R, m \in M_r : | \phi_{r,m} \}$ costituisca un **sonc**, ossia una base ortonormale completa, di $\mathbf{H}_{\mathbb{S}}$.

L'indice m che consente di distinguere i diversi autovettori linearmente indipendenti relativi all'autovalore a_r e corre nell'insieme M_r viene detto **indice di degenerazione**.

Denotiamo inoltre con $\mathbf{Sbsp}(\hat{A} = a_r)$ il sottospazio delle combinazioni lineari degli autovettori di \hat{A} con autovalore a_r e con $\mathbf{Prj}_{\hat{A}=a_r}$ il relativo proiettore, cioè $\mathbf{Prj}_{\hat{A}=a_r} := \sum_{m \in M+r} |\phi_{r,m}\rangle \langle \phi_{r,m}|$.

P70a.07 3 Nel tempo il vettore di stato subisce una evoluzione e quindi assume la forma $\psi(t)$. La sua evoluzione è retta dalla **equazione di Schroedinger**

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

nella quale \hat{H} denota l'operatore autoaggiunto su $\mathbf{H}_{\mathbb{S}}$ detto **operatore hamiltoniano del sistema** ed è il corrispondente quantistico dalla funzione hamiltoniana esprimente classicamente l'energia totale dei sistemi del genere \mathbb{S} , mentre $\hbar := 1.05459 \cdot 10^{-27}$ erg sec è la **costante di Planck ridotta**.

P70a.08 4 Un vettore di stato $\psi(t)$ rappresenta un insieme di sistemi del genere \mathbb{S} che sono state preparati con le stesse procedure in un istante precedente $t_0 < t$ e sono evoluti nelle stesse condizioni;

dato che ogni preparazione, come ogni misurazione, implica interventi sul sistema, effettuando misurazioni sopra i sistemi \mathbb{S} relativi a $\psi(t)$ sottoposti a misurazioni possono fornire valori diversi sui quali si possono fare solo previsioni statistiche ricavabili da ψ .

P70a.09 5 Lo spettro di un operatore \hat{A} $\text{Spec}_{\hat{A}}$ fornisce l'insieme dei soli valori che si possono ottenere misurando con precisione ideale la grandezza A sui sistemi di genere \mathbb{S} . I vettori di stato $\psi(t)$ appartenenti a un autospazio $\mathbf{Sbsp}_{\hat{A}=a_r}$ forniscono i sistemi per i quali A si può misurare con precisione

Effettuando un'osservazione di A all'istante t sui sistemi sottoposti alla preparazione corrispondente a $\psi(t)$ abbiamo che il quadrato della norma della proiezione di $\psi(t)$ sull'autospazio $\mathbf{Sbsp}(A = a_r)$ fornisce la probabilità di ottenere il valore a_r .

$$\text{Prb}(A = a_r | \psi(t)) := \|\mathbf{Prj}(A = a_r)\psi(t)\|^2 .$$

Questa definizione è giustificata dal fatto che $\mathbf{H}_{\mathbb{S}}$ è esprimibile come somma diretta degli autospazi di \hat{A} e che la norma al quadrato, uguale ad 1, di $\psi(t)$ è data dalla somma, pitagorica, su tutti gli autospazi di \hat{A} delle norme al quadrato delle relative proiezioni di $\psi(t)$.

$$1 = \|\psi(t)\|^2 = \sum_{r \in R} \|\mathbf{Prj}(A = a_r)\psi(t)\|^2 = \sum_{r \in R} \text{Prb}(A = a_r | \psi(t)) ,$$

uguaglianza caratteristica delle distribuzioni di probabilità.

Si hanno espressioni delle probabilità più dettagliate servendosi di una base $\mathbf{b}_{\hat{A}}$ di autovettori di \hat{A} : in essa si ha la rappresentazione del vettore di stato:

$$\psi(t) = \sum_{r \in R, m \in M_r} c_{rm}(t) \phi_{rm} = \sum_{r \in R, m \in M_r} \phi_{rm} \langle \phi_{rm} | \psi(t) \rangle$$

e per la precedente probabilità

$$\text{Prb}_{A=a_r}(\psi(t)) = \|\mathbf{Prj}_{A=a_r}(\psi(t))\|^2 = \sum_{m \in M_r} \langle \psi(t) | \phi_{rm} \rangle \langle \phi_{rm} | \psi(t) \rangle = \sum_{m \in M_r} |c_{rm}(t)|^2 .$$

Osserviamo che se in un certo istante dell'evoluzione \bar{t} $\psi(\bar{t}) = \phi_{\bar{r}, \bar{m}}$ con $\bar{r} \neq r$, cioè se $\psi(\bar{t})$ è ortogonale all'autospazio $\mathbf{Sbsp}(A = a_r)$,

$$\text{Prb}(A = a_r | \psi(\bar{t})) = \sum_m |\langle \phi_{r,m} | \phi_{\bar{r}, \bar{m}} \rangle|^2 = 0 .$$

Inoltre $\|\psi(t)\| = 1$ implica

$$\left\| \sum_{r,m} c_{rm}(t) \phi_{rm} \right\|^2 = \sum_{r,m,r',m'} c_{rm}^*(t) c_{r'm'}(t) \langle \phi_{rm} | \phi_{r'm'} \rangle = \sum_{rm} |c_{rm}|^2 = 1 ;$$

$$\sum_{r \in R} \text{Prb}(A = a_r | \psi(t)) = 1 .$$

P70a.10 6 Consideriamo due grandezze fisiche A e B compatibili, cioè due grandezze che si possono misurare simultaneamente in modo preciso; esse devono possedere un sonc comune e questo implica che i due corrispondenti operatori \hat{A} e \hat{B} commutino: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{\mathbb{O}}$.

Consideriamo un sonc di autovettori comuni ad \hat{A} e \hat{B} e le corrispondenti equazioni agli autovalori: M

$$\hat{A} \phi_{rsm} = a_r \phi_{rsm} \quad \hat{B} \phi_{rsm} = b_s \phi_{rsm} .$$

In questo caso il vettore di stato si sviluppa come

$$\psi(t) = \sum_{rsm} c_{rsm}(t) \phi_{rsm} = \sum_{rsm} \phi_{rsm} \langle \phi_{rsm} | \psi(t) \rangle ,$$

e la probabilità che una osservazione simultanea di A e B fornisca, risp., i valori a_r e b_s è

$$\text{Prb}(A = a_r, B = b_s | \psi(t)) = \sum_{m \in M_{r,s}} |c_{rsm}(t)|^2 = \sum_{m \in M_{r,s}} |\langle \phi_{rsm} | \psi(t) \rangle|^2 .$$

P70a.11 Nella fisica quantistica dunque si possono solo dare enunciazioni probabilistiche sui risultati delle misure (microscopiche) e per i possibili valori delle grandezze si possono proporre solo distribuzioni di probabilità.

Per studiare le distribuzioni di probabilità di molte osservabili risultano utili e significativi i due parametri valore di aspettazione (media dei valori) e varianza o scarto quadratico medio (valutazione dello sparpagliamento della distribuzione).

Riferiamoci al vettore di stato $\psi(t)$ e alla grandezza A e definiamo come **valore di aspettazione**

$$\text{expv}A(t) := \sum_r a_r \text{Prb}(A = a_r | \psi(t)) = \sum_r a_r \sum_m |c_{rm}(t)|^2$$

e come varianza

$$\begin{aligned} \Delta A &:= \sqrt{\langle (A - \text{expv}A(t))^2 \rangle} \\ &= \sqrt{\sum_r (a_r - \text{expv}A(t))^2 \text{Prb}(A = a_r | \psi(t))} = \sqrt{\sum_{rm} (a_r - \text{expv}A(t))^2 |c_{rm}(t)|^2} . \end{aligned}$$

Nella pratica vengono spesso utilizzate le espressioni

$$\begin{aligned} \text{expv}A(t) &= \langle \psi(t) | \hat{A} \psi(t) \rangle \\ (\Delta A)^2 &= \langle \psi(t) | (A - \text{expv}A(t))^2 \psi(t) \rangle = \|(A - \text{va}A(t))\psi(t)\|^2 . \end{aligned}$$

P70a.12 Consideriamo uno stato quantico che si evolve nel tempo $\psi_k(t)$ e scriviamo il corrispondente proiettore come:

$$\rho_k(t) := |\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)| .$$

Osserviamo che se cambiamo $\psi_k(t)$ nel vettore $e^{i\theta}\psi_k(t)$, otteniamo un oggetto formale empiricamente equivalente in quanto porta alle stesse valutazioni probabilistiche, mentre l'operatore $\rho_k(t)$ non cambia. Si può quindi concludere che questo operatore di proiezione è più sostanziale del vettore $\psi_k(t)$.

In effetti in ogni trattazione quantistica i vettori di stato possono essere sostituiti dai relativi proiettori; l'uso dei proiettori in genere è un po' più pesante, ma in taluni casi risulta vantaggioso: un caso lo vedremo per la trattazione delle miscele quantiche.

Per quanto riguarda l'evoluzione nel tempo dalla equazione di Schroedinger si ricava l'equazione di Liouville-von Neumann per l'evoluzione dell'operatore proiettore

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = -i\hbar [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] .$$

Per il valori di aspettazione della osservabile A si trova invece

$$\text{va}A = \text{Tr}(\hat{\rho}(t)\hat{A}) .$$

P70 b. osservabili continue

P70b.01 Per portare avanti la meccanica quantistica occorre essere in grado di trattare gli operatori che descrivono i sistemi fisici, a cominciare dalla particella caratterizzata solo dalla sua massa m e che può trattarsi come corpo puntiforme.

Questo ci porta subito a osservare che, in contrasto con la semplificazione degli spettri discreti, vi sono grandezze fisiche basilari che presentano spettri parzialmente o interamente continui.

P70b.02 Le prime osservabili con spettro continuo che conviene considerare riguardano la posizione del corpo puntiforme.

Classicamente questa si può esprimere con le coordinate cartesiane in un opportuno riferimento x , y e z . Per tali grandezze talora conviene usare le notazioni equivalenti x_1 , x_2 ed x_3 , oppure può essere conveniente individuare la posizione con il vettore di $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^{\times 3}$ collegato ai precedenti dalla relazione di decomposizione cartesiana $\mathbf{r} = \mathbf{e}_x x + \mathbf{e}_y y + \mathbf{e}_z z = \sum_{i=1}^3 \mathbf{e}_i x_i$.

In meccanica quantistica dobbiamo considerare gli operatori cartesiani \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} oppure l'operatore vettoriale tridimensionale $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{e}_x \hat{x} + \mathbf{e}_y \hat{y} + \mathbf{e}_z \hat{z}$.

P70b.03 Si richiede che ciascuno dei tre operatori scalari abbia come spettro l'intero insieme dei numeri reali \mathbb{R} ; si hanno dunque equazioni agli autovalori della forma

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle, \quad \hat{y} |y\rangle = y |y\rangle, \quad \hat{z} |z\rangle = z |z\rangle,$$

dove $|x_i\rangle$ individua lo stato in cui la posizione lungo l'asse Ox_i è perfettamente determinata.

Si trova che questa entità si può assimilare solo parzialmente ai vettori di uno spazio di Hilbert con norma finita: essa fa parte delle entità che si dicono **vettori impropri dello spazio di Hilbert** e che richiedono un trattamento formale complesso: qui li tratteremo solo intuitivamente.

Per un vettore di stato generico ψ la probabilità di ottenere dalla misurazione della posizione un valore compreso in un volume infinitesimo con centro in \mathbf{r} ed estensione $d_3\mathbf{r}$ è data da $d_3\mathbf{r} \cdot |\langle \mathbf{r} | \psi \rangle|^2$.

In altre parole la densità della probabilità di ottenere dalla misurazione della posizione il valore \mathbf{r} è data da $|\langle \mathbf{r} | \psi \rangle|^2$.

P70b.04 Consideriamo la funzione della posizione $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^{\times 3}$ definita come $\psi(\mathbf{r}) := \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$.

Questa può vedersi come la rappresentazione dello stato ψ nella base dell'operatore $\hat{\mathbf{r}}$ e viene chiamata funzione d'onda della particella. Questa funzione risulta di grandissima utilità in quanto permette di portare avanti molti calcoli servendosi delle nozioni e delle tecniche ampiamente sviluppate nell'ambito dell'analisi matematica e di altri settori della matematica.

Analoga considerazione vale per le funzioni corrispondenti riguardanti sistemi più complessi della particella caratterizzata solo dalla massa. Sostanzialmente risulta utile sviluppare la meccanica quantistica nella base dell'operatore posizione: questa disciplina viene detta meccanica ondulatoria.

P70b.05 Cerchiamo ora l'effetto della applicazione di $\hat{\mathbf{H}}$ al generico stato ψ considerando la rappresentazione del vettore di stato nella base $\{\mathbf{r}' | \mathbf{r}' \in \mathbb{R}^{\times 3}\}$:

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{\mathbf{H}}\psi \rangle = \langle \hat{\mathbf{H}}\mathbf{r}' | \psi \rangle = \mathbf{r}' \langle \mathbf{r}' | \psi \rangle = \mathbf{r}'\psi(\mathbf{r}')$$

Quindi $\hat{\mathbf{H}}$ corrisponde alla moltiplicazione delle funzioni d'onda $\psi(\mathbf{r})$ per il loro argomento.

P70b.06 Passiamo alle componenti cartesiane. Alle osservabili \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} , posizione risp. lungo Ox, Oy, Oz, corrispondono le moltiplicazioni della funzione d'onda $\psi(x, y, z)$ risp. per le coordinate x , y e z .

La probabilità di trovare per la particella nello stato ψ un valore x della posizione per il quale si abbia $\bar{x} \leq x \leq \bar{x} + \Delta x$, $\bar{y} \leq y \leq \bar{y} + \Delta y$ e $\bar{z} \leq z \leq \bar{z} + \Delta z$ è data dall'integrale

$$\int_{\bar{x}}^{\bar{x}+\Delta x} dx \int_{\bar{y}}^{\bar{y}+\Delta y} dy \int_{\bar{z}}^{\bar{z}+\Delta z} dz |\psi(x, y, z)|^2$$

Osserviamo anche che per avere vettori di stato normalizzati deve essere

$$\int_{\mathbb{R}^3} dx dy dz |\psi(x, y, z)|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 = 1$$

Quindi le funzioni d'onda di una particella devono essere funzioni di $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ a valori complessi e a quadrato sommabile. Queste funzioni costituiscono uno spazio di Hilbert che si denota con $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

P70b.07 Nella meccanica classica si assume (presume) di poter conoscere precisamente il moto del corpo puntiforme conoscendo il comportamento della sua posizione e del suo momento lineare o quantità di moto $\hat{\mathbf{p}} := m\dot{\mathbf{v}}$. Tutte le altre grandezze si possono esprimere mediante queste due grandezze chiamate collettivamente “variabili canoniche”.

Nella meccanica ondulatoria si postula che la osservabile $\hat{\mathbf{p}}$ sia espressa come $i\hbar$ grad. Passando alle componenti cartesiane secondo Ox, Oy ed Oz, alle osservabili \hat{p}_x , \hat{p}_y e \hat{p}_z , corrispondono risp. gli operatori differenziali $i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ e $i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$.

P70b.08 Osserviamo ora che, mentre le componenti della posizione e del momento lineare commutano tra di loro, non commutano invece gli operatori \hat{x}_i e \hat{p}_i : infatti per una funzione sufficientemente regolare $f(x)$

$$\hat{x}(\hat{p}_x f(x)) - \hat{p}_x(\hat{x} f(x)) = i\hbar \left[x \frac{d}{dx} f(x) - \frac{d}{dx} (x \cdot f(x)) \right] = i\hbar f(x) \neq 0.$$

Dunque valgono le regole di commutazione:

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = \hat{0} \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = \hat{0} \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \hat{\delta}_{i,j}.$$

Qui si è utilizzato il pratico operatore delta di Kronecker

$$\hat{\delta}_{i,j} := \begin{cases} \hat{1} & \text{sse } i = j \\ \hat{0} & \text{sse } i \neq j \end{cases}.$$

Quindi si ha che le componenti secondo una direzione della posizione e del momento lineare di una particella non possono essere misurate contemporaneamente in modo preciso.

In effetti una analisi delle esperienze realizzabili ha condotto proprio a questa conclusione e alla formulazione da parte di Heisenberg del principio di indeterminazione, uno dei punti di avvio della meccanica quantistica.

P70b.09 Le altre grandezze osservabili A relative alla particella singola si trattano quantisticamente esprimendole mediante le variabili canoniche \mathbf{r} e \mathbf{p} e quindi sostituendo queste con gli operatori $\mathbf{r} \cdot$ e $i\hbar \nabla$.

Per esempio per gli operatori corrispondenti al momento angolare $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ si trova

$$\widehat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad \widehat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \widehat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Per essi si trovano le regole di commutazione

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y .$$

Osserviamo che nelle due formule precedenti le uguaglianze nella seconda e terza posizione si ottengono dalla prima con le permutazioni circolari della terna (x, y, z) .

P70b.10 Relazioni come la precedente si possono riscrivere efficacemente come

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad \circ .$$

Alternativamente si può usare il cosiddetto **tensore di ordine 3 di Levi-Civita** tensore completamente antisimmetrico

$$\epsilon_{i,j,h} := \begin{cases} 1 & \text{se } (i, j, h) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2) \\ -1 & \text{se } (i, j, h) = (1, 3, 2), (3, 2, 1), (2, 1, 3) \\ 0 & \text{se altrimenti} \end{cases}$$

e scrivere

$$[\widehat{L}_i, \widehat{L}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{i,j,k} \widehat{L}_k .$$

Possiamo subito osservare un fatto che riprenderemo più avanti: le diverse componenti cartesiane del momento angolare non sono compatibili, contrariamente a quanto accade alle componenti della posizione e del momento lineare); quindi non si possono misurare precisamente le componenti nella stessa direzione di questa grandezza vettoriale.

P70b.11 Veniamo alla osservabile di primaria importanza energia totale della particella puntiforme di massa m soggetta a un potenziale $V(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ che esprime le influenze dell'ambiente. L'energia della particella è espressa dalla funzione hamiltoniana

$$H := \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) ;$$

il corrispondente quantistico operatore hamiltoniano è

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) . \quad \text{per cui} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \cdot \psi(\mathbf{r}) .$$

L'operatore hamiltoniano interviene nella equazione di evoluzione per la particella che quindi si può porre nella forma differenziale

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\mathbf{r}) = -\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \cdot \psi(\mathbf{r}) .$$

Questa è la importantissima **equazione differenziale di Schroedinger dipendente dal tempo**.

P70b.12 Le considerazioni precedenti si possono estendere al caso di un sistema costituito da N corpi puntiformi che vengono distinti attraverso l'indice $k = 1, \dots, N$ e che sono caratterizzati con le masse m_k .

Le relative grandezze classiche si esprimono come funzioni delle variabili canoniche posizioni \mathbf{r}_k e momenti lineari \mathbf{p}_k e si trasformano queste negli operatori $\mathbf{r}_k \cdot$ e $i\hbar \nabla_k$.

Per questi valgono le relazioni di commutazione

$$[\hat{x}_k, \hat{x}_h] = [\hat{x}_k, \hat{x}_h] = \hat{0} \quad [\hat{x}_k, \hat{p}_h] = \hat{\delta}_{k,h} i\hbar .$$

P70 c. sistemi quantistici stazionari

P70c.01 Il formalismo degli operatori e le equazioni che abbiamo introdotto e i suoi successivi sviluppi costituiscono una strumentazione per lo studio dei fenomeni microscopici poco intuitiva e che per essere applicata utilmente richiede di sviluppare nozioni e tecniche matematiche impegnative.

P70c.02 La meccanica quantistica peraltro è stata in grado di fornire per una vastissima gamma di fenomeni microscopici spiegazioni ampiamente accettate e coerenti che hanno consentito di prevedere fenomeni osservati successivamente. Essa inoltre ha consentito di realizzare apparecchiature e procedure di grandissima utilità e ha permesso di sviluppare metodi di indagine che hanno portato a importanti avanzamenti in varie discipline.

Innanzitutto si è aperta la strada alla comprensione delle proprietà degli atomi, dei composti chimici, dei corpi cristallini e di molti tipi di materiali.

La meccanica quantistica è inoltre alla base degli sviluppi odierni dell'elettronica, delle telecomunicazioni, di tecnologie di indagine come quelle riguardanti la risonanza magnetica nucleare e l'uso del laser.

Senza di essa non sarebbe stato possibile sviluppare gli strumenti di misura indispensabili per approfondire le conoscenze di sistemi complessi come quelli studiati in chimica molecolare, biologia, meteorologia e astrofisica.

P70c.03 Presentiamo ora come primi esempi di sistemi quantistici alcuni sistemi stazionari relativamente semplici ma basilari. Questi sistemi presentano energie definite e per essi vale la equazione di Schroedinger stazionaria.

Cominciamo con una particella che si può muovere in una sola dimensione.

Per l'oscillatore armonico si trova

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} K x^2$$

$$u_n(x) = N_n \text{Hrmt}_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2}$$

dove compaiono i polinomi di Hermite di grado n definibili con le uguaglianze

$$\text{Hrmt}_0(x) = 1 \quad \text{Hrmt}_1(x) = 2x \quad \text{Hrmt}_{n+1}(x) = 2x \text{Hrmt}_n(x) - 2n \text{Hrmt}_{n-1}(x) \quad \text{per } n = 2, 3, \dots,$$

$$N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}};$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \nu_c \quad \text{per } n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\text{con } \alpha := \left(\frac{mK}{\hbar^2}\right)^{1/4} \quad \text{e } \nu_c := \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{m}}$$

Abbiamo quindi che gli autovettori dell'oscillatore armonico costituiscono un insieme numerabile e che lo spettro delle loro energie è discreto e numerabile.

Il fatto che l'oscillatore armonico viene utilizzato nelle schematizzazioni di molti processi fisici comporta una chiara indicazione della necessità di servirsi di spazi di Hilbert di infinite dimensioni.

P70c.04 Il fatto che l'energia di un oscillatore armonico possa assumere solo valori discreti costituisce un primo esempio di una situazione che si verifica per tutti i sistemi stazionari e che risulta fondamentale per spiegare il comportamento dei molti sistemi fisici.

Molti sistemi materiali possono presentare una certa stabilità solo se si trovano in stati appartenenti a determinati insiemi discreti e se le corrispondenti energie possono appartenere solo a determinati livelli.

Per l'oscillatore armonico si ha quindi un diagramma dei livelli energetici con il seguente aspetto:

//input pP70c04

In effetti per ogni altro sistema stabile si devono prendere in considerazione analoghi diagrammi di livelli energetici.

Su questi diagrammi si individuano le possibili transizioni tra livelli relativi a energie diverse: transizioni verso livelli maggiori corrispondono a processi di assorbimento di energia dall'esterno da parte del sistema, transizioni verso livelli inferiori corrispondono a processi di emissione di energia verso l'esterno da parte del sistema.

Queste transizioni consentono di spiegare, risp., gli spettri di assorbimento e gli spettri di emissione di potenzialmente tutti i sistemi con composizioni ben definite a cominciare dagli atomi, dagli ioni e dalle molecole più semplici.

Un decisivo grande successo della meccanica quantistica a partire dagli anni 1920 è stata la sua capacità di portare a spiegazione una vastissima gamma dei dati che la spettroscopia aveva raccolti e classificati per decenni.

P70c.05 Un altro sistema molto semplice di elevato interesse è la particella che si può muovere su una superficie sferica. Si tratta di un sistema caratterizzato dal momento di inerzia I

Per l'energia del sistema si trovano gli autovalori:

$$E_n = \hbar \frac{l(l+1)}{2} \quad \text{per } l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

P70c.06 Consideriamo ora il più semplice degli atomi, l'atomo di idrogeno. I suoi stati sono rappresentati da funzioni della forma $\psi(\mathbf{r})$ con $\mathbf{r} \in \mathbf{R}^3$ e la sua energia è data dall'operatore hamiltoniano

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{r} . .$$

Per trovare i livelli energetici degli atomi stabili occorre risolvere l'equazione di Schroedinger relativa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{1}{r} \cdot \psi = E \cdot \psi$$

e considerare solo i valori di E negativi, quelli riguardanti l'atomo stazionariamente stabile.

Risolvendola si trova che per E sono possibili solo determinati valori (sono gli autovalori dell'hamiltoniano) che costituiscono un insieme discreto:

$$E_n = -R \hbar c \frac{1}{n^2} \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

Corrispondentemente si individua uno schieramento discreto di stati:

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = y_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$\text{per } n = 1, 2, 3, \dots, \quad l = 0, 1, \dots, n-1, \quad m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l .$$

P70 d. momenti angolari e particelle con spin

P70d.01 Riprendiamo lo studio dei momenti angolari.

Consideriamo gli operatori momento angolare in unità naturali di \hbar

$$\hat{l}_x := -i \left(y \frac{d}{dz} - z \frac{d}{dy} \right) , \quad \hat{l}_y := -i \left(z \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dz} \right) , \quad \hat{l}_z := -i \left(x \frac{d}{dy} - y \frac{d}{dx} \right) ,$$

operatori per i quali valgono le seguenti regole di commutazione

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i \hat{l}_z \quad \text{O}_{perm} .$$

Introduciamo poi il quadrato del momento angolare $\hat{l}^2 := \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$.

Si trova facilmente che esso commuta con tutte le componenti di $\hat{\mathbf{l}}$.

P70d.02 Quindi si possono considerare autofunzioni comuni per due operatori come \hat{l}_z ed \hat{l}^2 .

Queste si possono trovare risolvendo le relative equazioni agli autovalori e si trova che vi sono autovettori caratterizzati da due parametri ai quali si attribuiscono i ruoli di **numeri quantici**.

Essi possono assumere i seguenti valori interi:

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

e valgono le seguenti relazioni per autovettori e autovalori:

$$\hat{l}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle \quad , \quad \hat{l}_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle$$

Questi autovettori si esprimono convenientemente nelle coordinate polari θ e ϕ :

$$\langle \theta, \phi | l, m \rangle = Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

Queste funzioni sono note come armoniche sferiche e sono esprimibili come:

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = N_{l,m} e^{im\phi} P_l^{|m|}(\cos \theta) ,$$

dove compare la funzione associata di Legendre

$$\text{Plgdr}_l^{|m|}(x) := (-1)^m (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} \text{Plgdr}_l(x) ,$$

espressa a sua volta mediante il polinomio di Legendre ottenibile con le ricorrenze

$$\text{Plgdr}_0(x) = 1 \quad \text{Plgdr}_1(x) = x \quad \text{Plgdr}_l(x) = \text{Plgdr}_{l-1} + P_{l-2} \quad \text{per } l = 2, 3, \dots ;$$

inoltre compare la costante di normalizzazione

$$N_{l,m} = (-1)^{\frac{|m|-m}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} .$$

P70d.03 Il sistema di operatori introdotti in d01 in grado di soddisfare relazioni di commutazione decisamente semplici possono essere studiate con metodi puramente algebrici che conducono a risultati di notevole completezza che estendono i risultati precedenti basati sulla soluzione di equazioni differenziali.

Dalle regole di commutazione si ricavano operatori di innalzamento e abbassamento e il sistema dei possibili numeri quantici

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots \quad m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j .$$

Si possono ottenere tutti gli autovettori applicando potenze dell'operatore di abbassamento.

Rispetto alla indagine mediante equazioni differenziali abbiamo la novità dei valori semidispari per il numero quantico j , evidente generalizzazione del numero quantico l .

Va segnalato che il ruolo dei valori semidispari risulta essenziale per la comprensione dei sistemi quantici collegati alle trasformazioni rotazioni.

P70d.04 Per i momenti angolari orbitali e intrinseci è possibile la determinazione precisa di una sola delle componenti della osservabile vettoriale.

Si può determinare solo la grandezza vettoriale valore di aspettazione di $\hat{\mathbf{J}}$; per essa si trova un moto di precessione intorno all'asse \mathbf{Oz} , in accordo con il comportamento classico corrispondente alla precessione di Larmor.

Questo suggerisce un modello semiclassico per l'osservabile momento angolare: un vettore ruotante intorno ad asse \mathbf{Oz} che presenta fissa la proiezione lungo \mathbf{Oz} e variabili periodicamente le proiezioni lungo gli altri due assi.

P70 e. particelle con spin 1/2

P70e.01 Consideriamo il sistema del singolo spin, gli operatori riguardanti le sue componenti cartesiane $\hat{I}_x, \hat{I}_y, \hat{I}_z$, e gli operatori derivati $\hat{I}^2 := \hat{I}_x^2 + \hat{I}_y^2 + \hat{I}_z^2$, $\hat{I}_p := \hat{I}_x + i\hat{I}_y$ (di innalzamento), $\hat{I}_m := \hat{I}_x - i\hat{I}_y$ (di abbassamento).

P70e.02 Limitiamoci al caso di spin 1/2. Gli stati di questo sistema costituiscono lo spazio bidimensionale che denotiamo con $\mathbf{S}_{1/2}$. Esso viene riferito preferenzialmente agli autovettori comuni a \hat{I}_z e \hat{I}^2 :

$$|\uparrow\rangle := |\alpha\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad \text{e} \quad |\downarrow\rangle := |\beta\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle .$$

Servono anche i proiettori \hat{I}_a e \hat{I}_b relativi ad $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$.

Questi e gli operatori relativi alle coordinate cartesiane si esprimono convenientemente come operatori ket-bra:

$$\begin{aligned} \hat{I}_a &:= |\alpha\rangle\langle\alpha| & \hat{I}_b &:= |\alpha\rangle\langle\beta| \\ \hat{I}_p &:= |\alpha\rangle\langle\beta| & \hat{I}_m &:= |\alpha\rangle\langle\alpha| \\ \hat{I}_x &:= \frac{1}{2}(|\alpha\rangle\langle\beta| + |\alpha\rangle\langle\alpha|) \\ \hat{I}_y &:= \frac{1}{2i}(|\alpha\rangle\langle\beta| - |\alpha\rangle\langle\alpha|) \\ \hat{I}_z &:= \frac{1}{2}(|\alpha\rangle\langle\alpha| + |\alpha\rangle\langle\beta|) \end{aligned}$$

Le precedenti espressioni consentono di ricavare facilmente le loro azioni su $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$. Per essi

$$\begin{aligned} \hat{I}_z|\alpha\rangle &= \frac{1}{2}|\alpha\rangle & \hat{I}_z|\beta\rangle &= \frac{1}{2}|\beta\rangle \\ \hat{I}_p|\alpha\rangle &= 0 & \hat{I}_p|\beta\rangle &= |\alpha\rangle \\ \hat{I}_m|\alpha\rangle &= |\alpha\rangle & \hat{I}_m|\beta\rangle &= 0 \end{aligned}$$

I vettori $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ nell'ordine costituiscono la cosiddetta base canonica di $\mathbf{S}_{1/2}$.

P70e.03 Servono spesso le matrici in questa base: esse si ottengono agevolmente dalle espressioni ket-bra.

Risulta anche evidente che gli operatori sullo spin 1/2 costituiscono uno spazio a 4 dimensioni e si possono esprimere come combinazioni lineari dei quattro operatori ket-bra elementari $\hat{I}_a, \hat{I}_b, \hat{I}_p$ e \hat{I}_m oppure come combinazioni lineari di $\frac{1}{2}\hat{I}, \hat{I}_x, \hat{I}_y$ e \hat{I}_z .

P70e.04 Consideriamo ora il sistema costituito da due spin 1/2. Esso si studia nello spazio quadrato tensoriale di $\mathbf{S}_{1/2}$ che denoteremo con $\mathbf{S}_{1/2,1/2}$.

Una sua base utile è data dalla sequenza lessicografica

$$|\alpha\alpha\rangle \quad |\alpha\beta\rangle \quad |\beta\alpha\rangle \quad |\beta\beta\rangle$$

Tale base lessicografica la denoteremo $B\mathbf{S}_{1/2,1/2}$.

Gli operatori prodotto in questa base sono dati dalle matrici nella tabella che segue.

	1	$2\hat{I}_{2x}$	$2\hat{I}_{2y}$	$2\hat{I}_{2z}$
1	1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1	0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1 0	0 -i 0 0 i 0 0 0 0 0 0 -i 0 0 i 0	1 0 0 0 0 -1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 -1
$2\hat{I}_{1x}$	0 0 1 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 1 0 0	0 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0 0	0 0 0 -i 0 0 i 0 0 -i 0 0 i 0 0 0	0 0 1 0 0 0 0 -1 1 0 0 0 0 -1 0 0
$2\hat{I}_{1y}$	0 0 -i 0 0 0 0 -i i 0 0 0 0 i 0 0	0 0 0 -i 0 0 -i 0 0 i 0 0 i 0 0 0	0 0 0 -1 0 0 1 0 0 1 0 0 -1 0 0 0	0 0 -i 0 0 0 0 i i 0 0 0 0 -i 0 0
$2\hat{I}_{1z}$	1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 -1 0 0 0 0 -1	0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 -1 0 0 -1 0	0 -i 0 0 i 0 0 0 0 0 0 i 0 0 -i 0	1 0 0 0 0 -1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 -1

P70e.05 Gli operatori per il sistema di due spin 1/2, operatori sullo spazio a 4 dimensioni $\mathbf{S}_{1/2,1/2}$, si possono considerare vettori di uno spazio a 16 dimensioni e si possono esprimere come combinazioni lineari dei 16 operatori ket-bra elementari:

$$|\alpha\alpha\rangle\langle\alpha\alpha| \quad |\alpha\alpha\rangle\langle\alpha\beta| \quad |\alpha\alpha\rangle\langle\beta\beta| \quad \dots \quad |\beta\beta\rangle\langle\beta\beta| \quad |\beta\beta\rangle\langle\alpha\beta|$$

Per esempio

$$2\hat{I}_{1x}2\hat{I}_{2z} = |\alpha\alpha\rangle\langle\beta\beta| - |\alpha\beta\rangle\langle\beta\beta| + |\beta\alpha\rangle\langle\alpha\alpha| - |\beta\beta\rangle\langle\alpha\beta|$$

È anche chiaro come i precedenti 16 operatori sono esprimibili come combinazioni lineari dei 16 ket-bra elementari e che costituiscono una base alternativa per gli operatori del sistema dei due spin 1/2.

P70 g. operatore densità e miscele di stati

P70g.01 Per lo studio di molti fenomeni fisici, a in particolare per lo studio dell’NMR, si rende necessario analizzare il comportamento di popolazioni di sistemi microscopici.

Si tratta di esaminare una popolazione di sistemi microscopici (o di particelle) ciascuno dei quali si può trovare in uno “stato puro” di particella singola che si evolve nel tempo.

Denotiamo con $\mathbf{S} = \{\psi_k(t) \mid k \in K\}$ l’insieme dei possibili stati puri.

Una popolazione di queste particelle viene descritta statisticamente mediante una distribuzione di probabilità (classica) che anch’essa in genere si evolve nel tempo

$$\mathbf{p} = \{p_k(t) \mid k \in K\} \quad \text{con} \quad \sum_{k \in K} p_k = 1 .$$

Qui $p_k(t)$ dà la frazione di particelle che nell’istante t si trova nello stato $\psi_k(t)$. La conoscenza della collezione \mathbf{S} e della distribuzione \mathbf{p} individua una cosiddetta miscela di stati quantici.

Per lo sviluppo di calcoli effettivi gli stati $\psi_k(t)$ vanno riferiti ad uno o più sono scelti adeguatamente. Denotiamo una tale base con $\mathbf{b}_R = \{|r\rangle \mid r \in R\}$. Consideriamo quindi

$$\psi_k(t) = \sum_{r \in R} c_{k,r}(t) |r\rangle \quad c_{k,r}(t) = \langle r | \psi_k(t) \rangle = |c_{k,r}(t)| e^{i\theta_{k,r}} .$$

P70g.02 Per trattare le miscele di stati quantici viene utilizzato l’operatore chiamato **operatore densità** o operatore statistico. Questo operatore nel caso limite della distribuzione che si riduce a uno stato puro, $p_k = \delta_{k,\bar{k}}$, coincide con il corrispondente proiettore

$$\rho_{\bar{k}}(t) := |\psi_{\bar{k}}(t)\rangle\langle\psi_{\bar{k}}(t)| .$$

In generale l’operatore densità associato alla distribuzione di probabilità $\mathbf{p} := \{p_k(t) \mid k \in K\}$ si definisce come:

$$\widehat{\rho}_{\mathbf{p}}(t) := \sum_{k \in K} p_k(t) \hat{\rho}_k .$$

Vediamo come questi operatori vengono rappresentati in una base $\mathbf{b}_R = \{|r\rangle \mid r \in R\}$.

$$\hat{\rho}_{\bar{k}}(t) = \sum_{r,s \in R} c_{\bar{k},r} c_{\bar{k},s}^*(t) |r\rangle\langle s| = \sum_{r,s \in R} \rho_{\bar{k},rs} |r\rangle\langle s| .$$

Quindi il proiettore relativo a uno stato puro è rappresentato dalla matrice con le seguenti componenti diagonali e nondiagonali:

$$\forall r \in R : \rho_{\bar{k},rr} = \langle r | \hat{\rho}_{\bar{k}}(t) | r \rangle = |c_{\bar{k},r}(t)|^2 ,$$

$$\forall r, s \in R \text{ con } r \neq s : \rho_{\bar{k},rs} = \langle r | \hat{\rho}_{\bar{k}}(t) | s \rangle = c_{\bar{k},r}(t) c_{\bar{k},s}^*(t) = |c_{\bar{k},r}(t)| |c_{\bar{k},s}(t)| e^{i(\theta_{k,r} - \theta_{k,s})} .$$

P70g.03 Per una generica miscela si trova invece:

$$\hat{\rho}_{\mathbf{p}}(t) = \sum_{r,s \in R} \overline{c_{\mathbf{p},r}(t) c_{\mathbf{p},s}^*(t)} |r\rangle\langle s| \quad \text{ove} \quad \overline{c_{\mathbf{p},r}(t) c_{\mathbf{p},s}^*(t)} := \sum_k p_k c_{k,r}(t) c_{k,s}^*(t) ;$$

la barra sovrapposta, qui e in seguito esprime la media sugli stati puri $\psi_k(t)$ pesati dalle probabilità p_k . Quindi le componenti diagonali e nondiagonali della matrice dell’operatore densità per la miscela \mathbf{p} sono:

$$\forall r \in R : \rho_{\mathbf{p},rr} = \sum_{k \in K} p_k |c_{k,r}(t)|^2 ,$$

Alberto Marini

$$\forall r, s \in R \text{ con } r \neq s : \rho_{\mathbf{p},rs} = \sum_{k \in K} p_k |c_{k,r}(t)| |c_{k,s}(t)| e^{i(\theta_{k,r} - \theta_{k,s})}.$$

Essi esprimono, risp., la popolazione attesa per lo stato $|r\rangle$ e le coerenze attese tra gli stati $|r\rangle$ ed $|s\rangle$.

L'esposizione in <https://www.mi.imati.cnr.it/alberto/> e https://arm.mi.imati.cnr.it/Matexp/matexp_main.php