

1 Stati e Grandezze Fisiche in Meccanica Quantistica

1.1 Spettri e distribuzioni statistiche

In Meccanica Classica le grandezze fisiche sono descritte da funzioni, $f(q, p)$, delle coordinate (generalizzate) q_i e dei loro momenti coniugati p_i e lo stato di un sistema all'istante t_0 é determinato misurando al tempo t_0 le q_i e le p_i . Perci in Meccanica classica i risultati delle misure di qualunque grandezza fisica si possono predire esattamente, almeno in principio, all'istante t_0 o, risolvendo le equazioni del moto, a qualsiasi istante t , conoscendo lo stato del sistema all'istante t_0 . In Meccanica Quantistica, come si é visto, ci non é possibile a causa delle relazioni di indeterminazione di Heisenberg che non permettono di misurare contemporaneamente posizione e impulso con una precisione superiore a quella da esse stabilita. Naturalmente anche in Meccanica Quantistica non si pu rinunciare a fare delle previsioni: bisogna per accontentarsi di *previsioni probabilistiche*. Ci implica un profondo cambiamento di paradigma rispetto alla Meccanica Classica e quindi é necessario, per la descrizione degli stati e delle grandezze fisiche in Meccanica Quantistica, usare strumenti matematici profondamente diversi da quelli che si usano in Meccanica Classica.

Prima di introdurre tale formalismo matematico, vediamo cosa, dalla conoscenza di stati e grandezze fisiche, anche in Meccanica Quantistica si pu e si deve pretendere di potere determinare:

1) *Data una grandezza fisica \mathcal{A} si deve essere in grado di determinare l'insieme dei valori che si possono ottenere da una misura di tale grandezza, indipendentemente dallo stato del sistema.*

Nel gergo della Meccanica Quantistica l'insieme di tali valori si chiama *spettro* di \mathcal{A} e si indica con $Sp\mathcal{A}$. A dire il vero tale problema é presente anche in Meccanica Classica ma qui la risposta é ovvia: lo spettro di \mathcal{A} coincide col codominio della funzione $f(q, p)$ che descrive la grandezza \mathcal{A} e perci in Meccanica Classica tale problema non viene sottolineato. Invece in Meccanica Quantistica la determinazione dello spettro di una grandezza fisica non é cos ovvia e vi sono grandezze con spettro completamente diverso da quello della corrispondente grandezza classica (per esempio il momento angolare che in Meccanica Quantistica ha spettro discreto). In generale $Sp\mathcal{A} = Sp_d\mathcal{A} \oplus Sp_c\mathcal{A}$ dove $Sp_d\mathcal{A}$ ($Sp_c\mathcal{A}$) é lo spettro discreto (continuo) di \mathcal{A}

2) *Data la grandezza \mathcal{A} e lo stato Σ all'istante t , si deve essere in grado di calcolare la probabilit che una misura di \mathcal{A} all'istante t , essendo il sistema nello stato Σ , fornisca un*

risultato contenuto nell'intervallo Δ dell'asse reale, per ogni Δ .

Ovviamente tale probabilità sarà nulla se Δ non contiene nessun punto dello spettro di \mathcal{A} . Se \mathcal{A} ha spettro discreto ha senso parlare della probabilità $P_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_i)$ che la misura di \mathcal{A} dia come risultato $a_i \in Sp_d \mathcal{A}$. Chiaramente $P_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_i)$ coincide con $P_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(\Delta)$ se Δ contiene solo il punto $a_i \in Sp_d \mathcal{A}$ dello spettro discreto di \mathcal{A} .

Le probabilità di cui sopra possono essere calcolate se ad ogni coppia (\mathcal{A}, Σ) viene associata una funzione, non negativa, $w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a)$, $a \in Sp_c \mathcal{A}$, definita sullo spettro di \mathcal{A} , detta *distribuzione statistica*, con le seguenti proprietà :

$$0 \leq w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_i) \leq 1 \quad \text{per } a_i \in Sp_d \mathcal{A} \quad (1.1)$$

$$0 \leq w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a) \quad \text{per } a \in Sp_c \mathcal{A} \quad (1.2)$$

e inoltre

$$\sum_{a_i \in Sp_d \mathcal{A}} w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_i) + \int_{a \in Sp_c \mathcal{A}} w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a) da = 1 \quad (1.3).$$

La probabilità $P_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(\Delta)$ é data in termini della distribuzione statistica da

$$P_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(\Delta) = \sum_{a_i \in \Delta \cap Sp_d \mathcal{A}} w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_i) + \int_{a \in \Delta \cap Sp_c \mathcal{A}} w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a) da \quad (1.4)$$

e in particolare

$$P_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_i) = w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_i) \quad (1.5).$$

Le equazioni (1.1) - (1.5) ci dicono che $w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_i)$ per $a_i \in Sp_d \mathcal{A}$ é la probabilità che una misura di \mathcal{A} , essendo il sistema nello stato Σ , dia come risultato a_i mentre $w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a)$ per $a \in Sp_c \mathcal{A}$ rappresenta la densità di probabilità nel punto a dello spettro continuo. La (1.3) esprime la certezza (probabilità eguale a 1) che la misura di \mathcal{A} dia come risultato un qualunque punto dello spettro di \mathcal{A} .

La corrispondenza tra (\mathcal{A}, Σ) e $w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}$ non é univoca nel senso che ci possono essere diversi stati Σ con la stessa distribuzione statistica rispetto ad \mathcal{A} (che saranno distinti dalle loro distribuzioni statistiche rispetto ad altre grandezze \mathcal{B} , \mathcal{C} etc.). Inoltre non solo alla coppia (\mathcal{A}, Σ) corrisponde la distribuzione statistica $w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a)$ ma anche viceversa, se $w(a)$ é una funzione non negativa, definita sullo spettro di \mathcal{A} , con le proprietà (1.1),(1.2),(1.3), esisteranno degli stati che hanno $w(a)$ come distribuzione statistica rispetto ad \mathcal{A} , fatto abbastanza intuitivo che accetteremo, per ora senza ulteriore giustificazione. Si noti infine che la distribuzione statistica puó essere estesa ad una funzione definita sull'intero asse reale assumendo $w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a) = 0$ per

$a \notin Sp\mathcal{A}$. La conoscenza della funzione di distribuzione statistica $w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a)$ permette inoltre di calcolare il valor medio della grandezza \mathcal{A} nello stato Σ

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma} = \sum_{a_i \in Sp_d \mathcal{A}} a_i w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_i) + \int_{a \in Sp_c \mathcal{A}} a w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a) da \quad (1.6)$$

e anche il valor medio nello stato Σ di qualsiasi grandezza $\mathcal{B} = F(\mathcal{A})$ che sia funzione di \mathcal{A}

$$\langle F(\mathcal{A}) \rangle_{\Sigma} = \sum_{a_i \in Sp_d \mathcal{A}} F(a_i) w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_i) + \int_{a \in Sp_c \mathcal{A}} F(a) w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a) da \quad (1.7)$$

Come esempio possiamo considerare il valor medio nello stato Σ della funzione $\theta_{\Delta}(\mathcal{A})$ dove $\theta_{\Delta}(x)$ é la funzione che vale 1 per $x \in \Delta$ e vale 0 per $x \notin \Delta$. Si vede subito da (1.4) che $\langle \theta_{\Delta}(\mathcal{A}) \rangle_{\Sigma}$ é proprio la probabilitá che la misura di \mathcal{A} essendo il sistema nello stato Σ dia un risultato contenuto nell'intervallo Δ

$$P_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(\Delta) = \langle \theta_{\Delta}(\mathcal{A}) \rangle_{\Sigma} \quad (1.8)$$

Un altro esempio interessante é la fluttuazione $(\Delta\mathcal{A})_{\Sigma,a}$ intorno al generico punto a dell'asse reale (non necessariamente appartenente allo spettro di \mathcal{A}) il cui quadrato é il valor medio della funzione $(\mathcal{A} - a)^2$

$$(\Delta\mathcal{A})_{\Sigma,a}^2 = \langle (\mathcal{A} - a)^2 \rangle_{\Sigma} \quad (1.9)$$

La fluttuazione fornisce un criterio per determinare lo Spettro di \mathcal{A} . Infatti vale il seguente

Teorema:

- a) Se $a \notin Sp\mathcal{A}$, $(\Delta\mathcal{A})_{\Sigma,a}$ é sempre strettamente positivo.
- b) Se a_i appartiene allo spettro discreto di \mathcal{A} esiste almeno uno stato Σ_{a_i} su cui la fluttuazione di \mathcal{A} intorno al punto a_i é nulla.
- c) Se a appartiene allo spettro continuo di \mathcal{A} allora, pur non essendoci stati su cui $(\Delta\mathcal{A})_{\Sigma,a} = 0$, esistono successioni di stati $\Sigma_{a,n}$ su cui la fluttuazione di \mathcal{A} intorno ad a tende a zero per n che tende a ∞ .

Dimostrazione :

a) Se $a \notin Sp\mathcal{A}$, indichiamo con d la minima distanza di a dallo spettro di \mathcal{A} ; allora, per ogni stato Σ ,

$$\begin{aligned} (\Delta\mathcal{A})_{\Sigma,a}^2 &= \sum_{a_j \in Sp_d \mathcal{A}} (a_j - a)^2 w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_j) + \int_{a' \in Sp_c \mathcal{A}} (a' - a)^2 w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a') da' \\ &\leq d^2 \left[\sum_{a_j \in Sp_d \mathcal{A}} w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a_j) + \int_{a' \in Sp_c \mathcal{A}} w_{\Sigma}^{\mathcal{A}}(a') da' \right] = d^2 \end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio si é usata la (1.3).

b) Se $a_i \in Sp_d \mathcal{A}$, consideriamo uno stato Σ_{a_i} la cui distribuzione statistica sia diversa da zero solo nel punto a_i e tale che $w(a_i) = 1$ (si noti che tale distribuzione statistica soddisfa le (1.1)-(1.3)). Allora chiaramente

$$(\Delta \mathcal{A})_{\Sigma, a_i}^2 = \sum_{a_j \in Sp_d \mathcal{A}} (a_j - a_i)^2 w(a_j) = 0$$

poiché, o $w(a_j) = 0$, o $(a_j - a_i) = 0$.

c) Se $a \in Sp_c \mathcal{A}$ consideriamo la successione di stati $\Sigma_{a, n}$ con distribuzione statistica diversa da zero solo negli intervalli $\Delta_a^{(n)}$, centrati in a , tali che $a' \in \Delta_a^{(n)}$ se $a - \frac{1}{2n} \leq a' \leq a + \frac{1}{2n}$ e nulla sull'eventuale parte discreta dello spettro. Inoltre $w_{\Sigma_{a, n}}^{\mathcal{A}}(a') = n$ per $a' \in \Delta_a^{(n)}$ affinché sia soddisfatta la (1.3) (e la (1.2)). Allora

$$((\Delta \mathcal{A}_{\Sigma, a})^2 = \int_{a' \in Sp_p \mathcal{A}} (a' - a)^2 w_{\Sigma_{a, n}}^{\mathcal{A}}(a') da' \leq \frac{1}{n^2} \int_{a' \in Sp_p \mathcal{A}} w_{\Sigma_{a, n}}^{\mathcal{A}}(a') da' = \frac{1}{n^2}.$$

dove nell'ultimo passaggio si é usata la (1.3). Q.E.D.

E' anche interessante considerare la fluttuazione $(\Delta \mathcal{A})_{\Sigma, \langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma}}$ intorno al valor medio $\langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma}$. Vale il seguente

Teorema: *la fluttuazione $(\Delta \mathcal{A})_{\Sigma, a}$, per Σ fissato, ha un minimo non degenero per $a = \langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma}$.*

Dimostrazione: Derivando la (1.9) rispetto ad a e usando (1.3) e (1.6) si trova $\frac{d}{da}(\Delta \mathcal{A})_{\Sigma, a}^2 = -2(\langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma} - a)$ che si annulla per $a = \langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma}$. Inoltre la derivata seconda di (1.9) é $\frac{d^2}{da^2}(\Delta \mathcal{A})_{\Sigma, a}^2 = 2$ e quindi $a = \langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma}$ é un minimo.

Poiché evidentemente piú piccola é la fluttuazione di \mathcal{A} nello stato Σ intorno al valor medio, piú piccola é l'indeterminazione di \mathcal{A} nello stato Σ , assumeremo per convenzione $(\Delta \mathcal{A})_{\Sigma, \langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma}}$ quale misura della indeterminazione della grandezza \mathcal{A} nello stato Σ .

1.2 Stati

Vogliamo ora vedere come si devono descrivere matematicamente gli stati in Meccanica Quantistica. Come detto nella precedente sezione, tale descrizione dovrà permetterci di determinare la distribuzione statistica di ogni grandezza fisica in tale stato ma per avere suggerimenti piú precisi consideriamo l'esempio semplice di una particella unidimensionale. Tale descrizione dovrà:

a) rendere conto degli aspetti corpuscolari del sistema;

b) rendere conto degli aspetti ondulatori del sistema;

c) garantire che le relazioni di indeterminazione di Heisenberg siano automaticamente soddisfatte in modo da rendere compatibili gli aspetti corpuscolare e ondulatorio.

Per quanto riguarda il punto a), assumeremo che esistano le grandezze *posizione*, \mathcal{X} , e *impulso*, \mathcal{P} , e inoltre, poiché non c'è ragione di pensare il contrario, assumeremo che il loro spettro sia continuo e si estenda sull'intero asse reale. Le proprietà corpuscolari si manifestano negli effetti localizzati che si osservano e questi sono assicurati se esistono \mathcal{X} e \mathcal{P} poiché una misura di \mathcal{X} localizza la particella in un intervallo, anche piccolo, dell'asse reale x o una misura di \mathcal{P} restringe il suo impulso ad essere contenuto in un intervallo, anche piccolo, dell'asse reale p .

Per quanto riguarda il punto b), le proprietà ondulatorie sono caratterizzate dai fenomeni di interferenza, che sono conseguenza del *principio di sovrapposizione*: in una teoria ondulatoria la densità dell'intensità dell'onda è determinata dal modulo al quadrato della sua ampiezza d'onda e quando due onde coerenti si sovrappongono le loro ampiezze d'onda si sommano dando luogo ai fenomeni di interferenza. In Meccanica Quantistica l'analogo della densità di intensità è la densità di probabilità cioè la distribuzione statistica $w_{\Sigma}^{\mathcal{X}}(x)$ e dunque per rendere conto delle proprietà ondulatorie dobbiamo assumere che ad ogni stato del sistema sia associata una funzione d'onda complessa, $\psi(x)$, il cui modulo al quadrato sia proporzionale a $w_{\Sigma}^{\mathcal{X}}(x)$. Inoltre per assicurare che la distribuzione statistica, integrata su tutto lo spettro di \mathcal{X} , sia eguale a 1 (eq. (1.3)) dobbiamo assumere che la costante di proporzionalità sia l'inverso della norma al quadrato di $\psi(x)$ che è definita da $\|\psi\|^2 = \int |\psi(x)|^2 dx$. Dunque

$$w_{\Sigma}^{\mathcal{X}}(x) = \frac{|\psi(x)|^2}{\|\psi\|^2} \quad (2.1).$$

Chiaramente perché la (2.1) abbia senso bisogna che la norma di $\psi(x)$ sia minore di ∞ cioè che ψ sia una funzione, complessa, modulo quadro integrabile. In modo analogo, per la simmetria tra \mathcal{X} e \mathcal{P} , si deve assumere per la distribuzione statistica dell'impulso

$$w_{\Sigma}^{\mathcal{P}}(p) = \frac{|\phi(p)|^2}{\|\phi\|^2} \quad (2.2)$$

dove ϕ è una funzione, complessa, modulo quadro integrabile.

Per quanto riguarda il punto c), notiamo che le distribuzioni statistiche di posizione e impulso sono due funzioni reali mentre $\psi(x)$ e $\phi(p)$ sono due funzioni complesse, corrispondenti a 4 funzioni reali. C'è quindi una certa arbitrarietà che può essere sfruttata esprimendo $\phi(p)$

in termini di $\psi(x)$ (o viceversa) in modo tale che le relazioni di indeterminazione siano automaticamente soddisfatte. Tale possibilità si basa su un importante teorema sulle trasformate di Fourier. Prima di enunciare il teorema ricordiamo che la trasformata di Fourier $\tilde{\psi}(k)$ di una funzione $\psi(x)$ modulo quadro integrabile é anch'essa modulo quadro integrabile e ψ e $\tilde{\psi}$ hanno la stessa norma. Inoltre la trasformata di Fourier é invertibile nel senso che se

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \tilde{\psi}(k) \quad (2.3)$$

allora

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ikx} \psi(x) \quad (2.4).$$

Indichiamo con $\bar{x} = \int dx x \frac{|\psi(x)|^2}{\|\psi\|^2}$ e $\bar{k} = \int dk k \frac{|\tilde{\psi}(k)|^2}{\|\psi\|^2}$ i valori medi relativi alle variabili x e k e con Δx e Δk le relative fluttuazioni attorno ai loro valori medi

$$(\Delta x)^2 = \int dx (x - \bar{x})^2 \frac{|\psi(x)|^2}{\|\psi\|^2}$$

e

$$(\Delta k)^2 = \int dk (k - \bar{k})^2 \frac{|\tilde{\psi}(k)|^2}{\|\psi\|^2}.$$

Allora

Teorema

$$(\Delta x)(\Delta k) \geq \frac{1}{2} \quad (2.5)$$

(Non dimostreremo qui questo teorema che sará dimostrato piú avanti nel corso. Possiamo tuttavia convincerci della sua validitá considerando le trasformate di Fourier di alcune funzioni modulo quadro integrabili quali ad esempio la gaussiana, la funzione θ_Δ ecc.)

Tornando ora alla discussione del punto c), risulta dal precedente teorema che le relazioni di indeterminazione sono soddisfatte identicamente se si assume che la funzione $\phi(p)$ in (2.2) sia la trasformata di Fourier di $\psi(x)$ nella variabile $\frac{p}{\hbar}$

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \tilde{\psi}\left(\frac{p}{\hbar}\right) \quad (2.6)$$

per cui

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{-px}{\hbar}} \phi(p) \quad (2.7)$$

e

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' e^{\frac{px'}{\hbar}} \psi(x') \quad (2.8)$$

(La costante $\frac{1}{\sqrt{\hbar}}$ nella (2.6) é una costante di normalizzazione scelta per far si' che

$$\|\psi\| = \|\phi\| .)$$

Allora

$$\Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}$$

e quindi dalla (2.5) segue

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{1}{2}\hbar \quad (2.9)$$

e dunque le relazioni di indeterminazione sono automaticamente soddisfatte.

Possiamo dunque concludere che almeno per l'esempio semplice della particella unidimensionale gli stati del sistema sono descritti da funzioni modulo quadro integrabili $\psi(x)$ tali che le distribuzioni statistiche di posizione e impulso sono dati da (2.1) e (2.2) dove $\phi(p)$ in (2.2) é dato in (2.6).

Notiamo che due funzioni modulo quadro integrabili eguali tranne che in un insieme di misura nulla (nel gergo: eguali quasi ovunque) danno luogo a distribuzioni statistiche che forniscono le stesse probabilità e quindi rappresentano lo stesso stato. La classe di equivalenza delle funzioni di una variabile reale, modulo quadro integrabili, eguali quasi ovunque, definiscono un vettore in uno spazio vettoriale di funzioni, che si chiama $L^2(\mathcal{R})$ e che é uno spazio Hilbertiano.

[N.B. per gli spazi Hilbertiani si veda l'appendice A del testo di Sartori].

Notiamo anche che dalle (2.1) e (2.2) segue che i vettori ψ e $\lambda\psi$ con $\lambda \in \mathcal{C}$ numero complesso diverso da zero, danno luogo alle stesse distribuzioni statistiche e quindi rappresentano lo stesso stato. L'insieme

$$\hat{\psi} \equiv \{\lambda\psi \mid \lambda \in \mathcal{C}/0\}$$

di vettori di uno spazio hilbertiano, \mathcal{H} , si chiama *raggio vettore* di \mathcal{H} . Notiamo infine che raggi vettori diversi danno luogo a distribuzioni statistiche diverse per la posizione \mathcal{X} e/o per l'impulso \mathcal{P} e dunque rappresentano stati diversi. Generalizzando dal caso semplice della particella unidimensionale, fin qui trattato, possiamo allora enunciare il primo postulato della Meccanica Quantistica, nella forma

Assioma I: *Vi é una corrispondenza biunivoca tra stati Σ di un sistema quantistico e raggi vettori $\hat{\psi}$ dello spazio di Hilbert \mathcal{H} che descrive il sistema:*

$$\Sigma \iff \hat{\psi} \in \mathcal{H} \quad (2.10).$$

1.3 Grandezze fisiche

Torniamo al nostro sistema semplice della particella unidimensionale. Per tale sistema sappiamo calcolare le distribuzioni statistiche (e quindi i valori medi ecc.) della posizione e dell'impulso e questo potrà fornirci utili suggerimenti su come si devono descrivere le grandezze fisiche in Meccanica Quantistica. A tale scopo riscriviamo i valori medi di \mathcal{X} e \mathcal{P} in una forma piú conveniente. Abbiamo

$$\langle \mathcal{X} \rangle_{\Sigma} = \frac{1}{\|\psi\|^2} \int dx x |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\|\psi\|^2} \int dx (\psi^*(x) x \psi(x)) = \frac{(\psi, X\psi)}{\|\psi\|^2}$$

dove si é introdotto l' "operatore di moltiplicazione"

$$[X\psi](x) = x\psi(x).$$

Abbiamo dunque

$$\langle \mathcal{X} \rangle_{\Sigma} = \frac{(\psi, X\psi)}{\|\psi\|^2} \quad (3.1)$$

In modo analogo risulta che il valor medio di \mathcal{P} nello stato Σ si può riscrivere come

$$\langle \mathcal{P} \rangle_{\Sigma} = \frac{(\psi, P\psi)}{\|\psi\|^2} \quad (3.2)$$

dove abbiamo introdotto l' "operatore di derivazione"

$$[P\psi](x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x).$$

Per dimostrare la (3.2) ricordiamo la formula notevole

$$\int dk e^{ik(x-x')} = 2\pi \delta(x-x') \quad (3.3)$$

dove $\delta(x-x')$ é la δ di Dirac che, agendo sulle funzioni di prova, definisce il funzionale lineare continuo

$$\delta_x[f] = \int dx' \delta(x-x') f(x') = f(x) \quad (3.4).$$

Si noti anche che, usando la (2.8), si ha

$$p\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx (i\hbar \frac{d}{dx} e^{\frac{px}{\hbar}}) \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{\frac{px}{\hbar}} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) \quad (3.5).$$

Il valor medio di \mathcal{P} nello stato Σ é

$$\langle \mathcal{P} \rangle_{\Sigma} = \frac{1}{\|\psi\|^2} \int dp p |\phi(p)|^2 = \frac{1}{\|\psi\|^2} \int dp (\phi^*(p) p \phi(p))$$

Inserendo in quest'ultima equazione la (3.5) e la complessa coniugata della (2.8), integrando prima su p e poi su x' utilizzando (3.3) e (3.4) si ottiene la (3.2). In modo analogo si dimostra che le fluttuazioni di \mathcal{X} e \mathcal{P} nello stato Σ intorno ai numeri reali x e p sono date da

$$(\Delta\mathcal{X})_{\Sigma,x} = \frac{(\psi, (X-x)^2\psi)}{\|\psi\|^2} \quad (3.6)$$

e

$$(\Delta\mathcal{P})_{\Sigma,p} = \frac{(\psi, (P-p)^2\psi)}{\|\psi\|^2} \quad (3.7)$$

Le (3.1), (3.2), (3.6) e (3.7) ci mostrano che, almeno per il calcolo dei valori medi e delle fluttuazioni le grandezze \mathcal{X} e \mathcal{P} sono descritte da operatori lineari, rispettivamente l'operatore di moltiplicazione e l'operatore di derivazione.

Si noti che gli operatori X e P non sono definiti su tutti i vettori di $L^2(R)$ cioè i domini naturali $\mathcal{D}(X)$ e $\mathcal{D}(P)$ di X e di P rispettivamente non coincidono con tutto lo spazio $L^2(R)$. Infatti, poiché gli operatori lineari sono mappe lineari da $L^2(R)$ in $L^2(R)$, affinché $\psi \in \mathcal{D}(X)$ ($\psi \in \mathcal{D}(P)$) bisogna che $X\psi$ ($P\psi$) appartenga a $L^2(R)$ cioè sia una funzione modulo quadro integrabile. (Per esempio se $\psi(x)$ decresce all'infinito come $\frac{1}{x}$, ψ è modulo quadro integrabile ma $\|X\psi\|^2 = \infty$ e dunque $\psi \notin \mathcal{D}(X)$). Analogamente se la trasformata di Fourier di ψ decresce all'infinito come $\frac{1}{p}$, $\psi \notin \mathcal{D}(P)$). Dunque a rigore (3.1), (3.2), (3.6), (3.7) sono definite solo se ψ appartiene ai domini di X , P , $(X-x)^2$ o $(P-p)^2$ rispettivamente. Tuttavia poiché i domini di tali operatori sono densi in $L^2(R)$ esistono successioni di funzioni appartenenti a tali domini che convergono in norma verso ψ e quindi si può dare senso alle (3.1), (3.2), (3.6), (3.7) come limiti di tali successioni anche se ψ non appartiene ai rispettivi domini.

Tornando alla nostra discussione, le (3.1), (3.2), (3.6) e (3.7) ci suggeriscono che le grandezze fisiche \mathcal{A} in Meccanica Quantistica debbano essere descritte da operatori lineari A tali che

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma} = \frac{(\psi, A\psi)}{\|\psi\|^2} \quad (3.8)$$

e

$$(\Delta\mathcal{A})_{\Sigma,a} = \frac{(\psi, (A-a)^2\psi)}{\|\psi\|^2} \quad (3.9).$$

Ma quali operatori lineari ?

I requisiti che dobbiamo richiedere agli operatori perché essi rappresentino grandezze fisiche sono:

Linearità Poiché ψ e $\lambda\psi$ con $\lambda \in \mathcal{C}/0$ rappresentano lo stesso stato bisogna che l'operatore A sia tale che $A\lambda\psi = \lambda A\psi$ affinché i valori medi siano gli stessi per ψ e per $\lambda\psi$ e ciò è assicurato se A è un operatore lineare.

Densità del dominio Poiché si vuole che i valori medi possano essere definiti per qualunque stato del sistema, uno sarebbe tentato di richiedere che sono accettabili solo gli operatori che hanno per dominio l'intero spazio di Hilbert ma questo sarebbe troppo restrittivo. Abbiamo visto infatti che anche gli operatori di posizione e impulso per la particella unidimensionale hanno un dominio che non coincide con l'intero spazio di Hilbert \mathcal{H} . Per fortuna per poter definire i valori medi su qualunque stato del sistema è sufficiente richiedere che il dominio $\mathcal{D}(A)$ dell'operatore A sia denso in \mathcal{H} . Infatti, sia ψ un vettore di \mathcal{H} che non appartenga al dominio $\mathcal{D}(A)$. Se $\mathcal{D}(A)$ è denso in \mathcal{H} esistono successioni $\psi_n \in \mathcal{D}(A)$ che convergono a ψ e quindi possiamo definire il valor medio di A su ψ come il limite per n tendente a ∞ del valor medio di A su ψ_n .

Hermiticità

[N.B. Un operatore lineare A è hermitiano se, dati due vettori ψ e ϕ appartenenti al suo dominio $\mathcal{D}(A)$,

$$(\phi, A\psi) = (A\phi, \psi) \quad (3.10).$$

Le misure forniscono numeri reali (lo $Sp\mathcal{A}$ è reale) e quindi anche il valor medio $\langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma}$ dato da (3.8) è reale. Ma vale il seguente

Teorema: Condizione necessaria e sufficiente perché $(\psi, A\psi)$ sia reale è che l'operatore A sia hermitiano.

Dimostrazione: che la condizione sia sufficiente è ovvio: basata prendere $\phi = \psi$ nella (3.10). Per dimostrare che la condizione è necessaria assumiamo che (3.8) sia reale. Posto $\chi = \psi + e^{i\alpha}\phi$ con α numero complesso si ha

$$(\chi, A\chi) = (\psi, A\psi) + (\phi, A\phi) + e^{i\alpha}(\psi, A\phi) + e^{-i\alpha}(\phi, A\psi)$$

Poiché $(\chi, A\chi)$, $(\psi, A\psi)$ e $(\phi, A\phi)$ sono reali ne segue che anche la somma degli ultimi due termini è reale e quindi

$$e^{i\alpha}(\psi, A\phi) + e^{-i\alpha}(\phi, A\psi) = e^{-i\alpha}(A\phi, \psi) + e^{i\alpha}(A\psi, \phi)$$

ovvero

$$e^{i\alpha}[(\psi, A\phi) - (A\phi, \psi)] + e^{-i\alpha}[(\phi, A\psi) - (A\psi, \phi)] = 0$$

da cui segue il teorema per l'arbitrarietà di α .

Un operatore hermitiano con dominio denso in \mathcal{H} si dice simmetrico.

Autoaggiuntezza Abbiamo dunque visto che se l'operatore lineare A che rappresenta la grandezza \mathcal{A} è simmetrico possiamo calcolare, dalle (3.8) e (3.9), i valori medi e le fluttuazioni di

\mathcal{A} in qualunque stato Σ del sistema. Inoltre, usando il criterio basato sulle fluttuazioni discusso nella sezione 1.1 di questo capitolo, possiamo in principio determinare lo spettro di \mathcal{A} . Ma ciò non basta. Dato l'operatore A che rappresenta la grandezza \mathcal{A} dovremmo anche essere in grado di determinare per ogni stato Σ la distribuzione statistica $w_{\Sigma}^A(a)$. Condizione necessaria e sufficiente perché ciò sia possibile è che l'operatore A sia *autoaggiunto*. Ma per giustificare questa affermazione c'è ancora una certa strada da fare.

Anticipandone la conclusione possiamo enunciare il secondo postulato della Meccanica Quantistica

Assioma II: *Ogni grandezza fisica \mathcal{A} si può rappresentare in Meccanica Quantistica mediante un operatore A autoaggiunto*

$$\Sigma \implies A \text{ autoaggiunto} \quad (3.11)$$

[N.B. L'aggiunto di un operatore A con dominio denso in \mathcal{H} è definito da

$$(A^\dagger \psi, \phi) = (\psi, A\phi) \quad (3.12)$$

per $\phi \in \mathcal{D}(A)$. Il dominio naturale di A^\dagger è costituito da tutti i vettori $\psi \in \mathcal{H}$ per i quali il secondo membro di (3.12) è finito per ogni $\phi \in \mathcal{D}(A)$ e fornisce una funzione continua di ϕ . Se A è hermitiano (e quindi simmetrico) il secondo membro di (3.12), per la (3.10), è certamente finito e continuo in ϕ per ogni $\psi \in \mathcal{D}(A)$ e per $\psi \in \mathcal{D}(A)$ $A^\dagger \psi = A\psi$. Dunque se A è simmetrico il dominio di A^\dagger in generale contiene il dominio di A : $\mathcal{D}(A^\dagger) \supseteq \mathcal{D}(A)$ il che si riassume nella $A^\dagger \supseteq A$. L'operatore è autoaggiunto se

$$A^\dagger = A$$

cioè se A e A^\dagger hanno eguale dominio.]

Prima di intraprendere il cammino per giustificare la necessità dell'autoaggiuntezza di A vale la pena di illustrare un'altra importante proprietà della descrizione delle grandezze fisiche mediante operatori.

L'algebra degli operatori lineari è non commutativa. Per esempio, come si verifica facilmente, il commutatore degli operatori X e P su un generico vettore ψ su cui è definito, è

$$[X, P]\psi \equiv (XP - PX)\psi = i\hbar\psi$$

e poiché anche il dominio di $[X, P]$ è denso in $L^2(R)$ possiamo anche scrivere

$$[X, P] = i\hbar \quad (3.13)$$

La non commutativit  tra gli operatori autoaggiunti A e B che descrivono due grandezze fisiche \mathcal{A} e \mathcal{B}   in stretto rapporto con le relazioni di indeterminazione tra tali grandezze. Se indichiamo con $(\Delta A)_{\hat{\psi}}$ e $(\Delta B)_{\hat{\psi}}$ le fluttuazioni intorno ai valori medi nello stato descritto da $\hat{\psi}$ (fluttuazioni che come sappiamo rappresentano le indeterminazioni della misura di \mathcal{A} e \mathcal{B}) vale il seguente importante

Teorema: Se A e B sono operatori simmetrici

$$(\Delta A)_{\hat{\psi}}(\Delta B)_{\hat{\psi}} \geq \frac{1}{2} \frac{|(\psi, [A, B]\psi)|}{\|\psi\|^2} \quad (3.14)$$

Dimostrazione: Per semplicit  di scrittura poniamo $\hat{A} = A - \langle A \rangle_{\hat{\psi}}$ e $\hat{B} = B - \langle B \rangle_{\hat{\psi}}$. Notiamo anche che se A e B sono hermitiani $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$   un operatore hermitiano e quindi il suo valor medio rispetto a ψ   reale mentre $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv [A, B]$   antihermitiano e quindi il suo valor medio rispetto a ψ   un numero immaginario puro. Allora abbiamo

$$\begin{aligned} \|\psi\|^4 (\Delta A)_{\hat{\psi}}^2 (\Delta B)_{\hat{\psi}}^2 &= (\psi \hat{A}^2 \psi)(\psi \hat{B}^2 \psi) = \|\hat{A}\psi\|^2 \|\hat{B}\psi\|^2 \geq \\ &\geq |(\hat{A}\psi, \hat{B}\psi)|^2 = |(\psi \hat{A}\hat{B}\psi)|^2 = \frac{1}{4} |(\psi \{\hat{A}, \hat{B}\} \psi) + (\psi [A, B]\psi)|^2 \\ &= \frac{1}{4} |(\psi \{\hat{A}, \hat{B}\} \psi)|^2 + \frac{1}{4} |(\psi [A, B]\psi)|^2 \geq \frac{1}{4} |(\psi [A, B]\psi)|^2 \quad Q.E.D \end{aligned}$$

Per la seconda eguaglianza si   usato il fatto che \hat{A} e \hat{B} sono hermitiani e per la successiva disequaglianza si   usata la disequaglianza di Schwarz. Si noti che se $A = X$ e $B = P$ la (3.14) diventa

$$(\Delta X)_{\hat{\psi}}(\Delta P)_{\hat{\psi}} \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (3.15)$$

che   il principio di indeterminazione di Heisenberg.

Si noti anche che se $A = X$ e B   l'operatore (simmetrico) $K = \frac{1}{i} \frac{d}{dx}$ la (3.14) diventa

$$(\Delta x)\Delta k \geq \frac{1}{2}$$

che   il teorema sulla trasformata di Fourier dato in (2.5).

1.4 Spettro discreto

Sia \mathcal{A} una grandezza fisica con spettro puramente discreto. Sappiamo dalla discussione della sezione 1.1 che per ogni punto $a_i \in Sp\mathcal{A}$ esistono stati Σ_{a_i} sui quali la fluttuazione di \mathcal{A} intorno ad a_i si annulla. Dunque

$$(\Delta \mathcal{A})_{\Sigma_{a_i}}^2 = \frac{(\psi_{a_i} (A - a_i)^2 \psi_{a_i})^2}{\|\psi_{a_i}\|^2}$$

$$= \frac{\| (A - a_i)\psi_{a_i} \|^2}{\| \psi_{a_i} \|^2} = 0 \quad (4.1)$$

dove A é l'operatore simmetrico associato ad \mathcal{A} e ψ_{a_i} é un rappresentativo del raggio vettore $\hat{\psi}_{a_i}$ associato a Σ_{a_i} . Nel secondo passaggio in (4.1), poiché A , essendo simmetrico, é anche hermitiano, si é usata la (2.19). Poiché se uno stato ha norma nulla é lo stato nullo da (4.1) si ha

$$A\psi_{a_i} = a_i\psi_{a_i} \quad (4.2)$$

Gli a_i si chiamano autovalori e i ψ_{a_i} autovettori dell'equazione agli autovalori (4.2). Abbiamo dunque che per una grandezza fisica \mathcal{A} con spettro puramente discreto i punti $a_i \in Sp\mathcal{A}$ del suo spettro si trovano risolvendo l'equazione agli autovalori (4.2).

Alcune importanti proprietá di autovalori e autovettori sono:

1) *Gli autovalori sono reali.* Ovvio; infatti coincidono con i valori medi di A su l'autovettore ψ_{a_i} .

2) *Se $\psi_{a_i}^{(1)}$ e $\psi_{a_i}^{(2)}$ sono due autovettori relativi allo stesso autovalore a_i ogni combinazione lineare $\alpha\psi_{a_i}^{(1)} + \beta\psi_{a_i}^{(2)}$ con α e β numeri complessi é anch'essa autovettore di A con autovalore a_i .* Infatti basta applicare l'operatore A a tale combinazione lineare e usare il fatto che $\psi_{a_i}^{(1)}$ e $\psi_{a_i}^{(2)}$ sono autovettori relativi allo stesso autovalore a_i . Dunque l'insieme di tutti gli autovettori di A relativi allo stesso autovalore a_i costituisce un sottospazio dello spazio di Hilbert \mathcal{H} (che é esso stesso uno spazio di Hilbert separabile con norma e prodotto scalare indotti da \mathcal{H}) detto *autospatio* che indicheremo col simbolo \mathcal{H}_{a_i} .

3) *Autovettori relativi ad autovalori diversi sono ortogonali* e quindi anche i relativi autospazi sono ortogonali.

Dimostrazione:

$$A\psi_{a_i} = a_i\psi_{a_i}$$

$$A\psi_{a_j} = a_j\psi_{a_j}$$

con $a_i \neq a_j$. Prendendo il prodotto scalare della prima per ψ_{a_j} e della seconda per ψ_{a_i} si ha

$$(\psi_{a_j}, A\psi_{a_i}) = a_i(\psi_{a_j}, \psi_{a_i})$$

e

$$(\psi_{a_i}, A\psi_{a_j}) = a_j(\psi_{a_i}, \psi_{a_j})$$

Infine prendendo il complesso coniugato di quest'ultima equazione e sottraendola alla penultima si ha

$$0 = (a_i - a_j)(\psi_{a_j}, \psi_{a_i})$$

e poiché $a_i \neq a_j$ risulta

$$(\psi_{a_j}, \psi_{a_i}) = 0 \quad a_i \neq a_j \quad (4.3)$$

4) *Gli autovalori sono un sottoinsieme finito o, se infinito, numerabile dell'asse reale.* Ciò segue dalla separabilità di \mathcal{H} .

Completezza Poiché gli autospazi relativi ad autovalori diversi sono ortogonali, la loro somma diretta é in generale un sottoinsieme di \mathcal{H} . L'ulteriore importante requisito fisico che dobbiamo imporre é che la loro somma diretta coincida con \mathcal{H}

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{a_i \in SpA} \mathcal{H}_{a_i} \quad (4.4)$$

Se così non fosse, esisterebbero degli stati (quelli appartenenti al sottoinsieme di \mathcal{H} ortogonale alla somma diretta degli \mathcal{H}_{a_i}) sui quali non avrebbe senso misurare \mathcal{A} . (Ricordiamo che \mathcal{A} ha spettro SpA puramente discreto)

La (4.4) é equivalente a chiedere che per ogni $\psi \in \mathcal{H}$

$$\psi = \sum_{a_i \in SpA} \psi_{a_i} \quad (4.5)$$

con $\psi_{a_i} \in \mathcal{H}_{a_i}$ Inoltre da (4.5) segue anche

$$A\psi = \sum_{a_i \in SpA} a_i \psi_{a_i} \quad (4.6).$$

Mostriamo ora come la (4.4) (ovvero la (4.5)) é essenziale per potere calcolare la distribuzione statistica $w(a_i)$ per la grandezza \mathcal{A} essendo il sistema nello stato Σ (descritto dal vettore ψ). Prendendo il prodotto scalare di (4.5) per ψ_{a_j} e usando (4.3) si ha

$$(\psi_{a_j}, \psi) = \|\psi_{a_j}\|^2 \quad (4.7).$$

Inoltre prendendo il prodotto scalare di (4.5) e (4.6) per ψ e dividendo per la norma di ψ al quadrato $(\psi, \psi) \equiv \|\psi\|^2$ si ha

$$1 = \sum_{SpA} \frac{\|\psi_{a_i}\|^2}{\|\psi\|^2} \quad (4.8)$$

e

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\Sigma} \equiv \frac{(\psi, A\psi)}{\|\psi\|^2} = \sum_{SpA} a_i \frac{\|\psi_{a_i}\|^2}{\|\psi\|^2} \quad (4.9)$$

e posto

$$w(a_i) = \frac{\|\psi_{a_i}\|^2}{\|\psi\|^2} \quad (4.10)$$

le (4.8) e (4.9) diventano

$$\sum_{a_i \in Sp\mathcal{A}} w(a_i) = 1 \quad (4.11)$$

e

$$\langle \mathcal{A} \rangle_\Sigma = \sum_{a_i \in Sp\mathcal{A}} a_i w(a_i) \quad (4.12).$$

Da (4.10), (4.11) e (4.12) si vede che $w(a_i)$ soddisfa le (1.1), (1.3) e (1.6) e dunque é giustificato assumere che la $w(a_i)$ definita in (4.10) sia proprio la distribuzione statistica di \mathcal{A} nello stato Σ .

ψ_{a_i} é la proiezione di ψ su \mathcal{H}_{a_i} ma, a meno che \mathcal{H}_{a_i} consista in un unico raggio vettore, non é determinata. Per poter calcolare $w(a_i)$ introduciamo in \mathcal{H}_{a_i} una base completa e ortonormalizzata $\phi_{a_i}^{(r)}$

$$A\phi_{a_i}^{(r)} = a_i\phi_{a_i}^{(r)}$$

con

$$(\phi_{a_i}^{(r)}, \phi_{a_i}^{(s)}) = \delta_{rs}$$

La dimensione dell'autospazio \mathcal{H}_{a_i} , cioé il numero di vettori di \mathcal{H}_{a_i} linearmente indipendenti, rappresenta la degenerazione dell'autovalore a_i e puó essere un numero finito, N_{a_i} , o infinito. Se $N_{a_i} = 1$ l'autovalore a_i é non degenere.

Allora

$$\psi_{a_i} = \sum_r c_{a_i}^{(r)} \phi_{a_i}^{(r)} \quad (4.13)$$

e quindi, inserendo questa in (4.5)

$$\psi = \sum_{a_i \in Sp\mathcal{A}} \sum_r c_{a_i}^{(r)} \phi_{a_i}^{(r)} \quad (4.14)$$

con

$$(\phi_{a_j}^{(r)}, \phi_{a_i}^{(s)}) = \delta_{r,s} \delta_{a_i, a_j} \quad (4.15)$$

Prendendo il prodotto scalare di (4.14) con $\phi_{a_j}^{(s)}$ e tenendo conto di (4.15), si ha

$$c_{a_j}^{(s)} = (\phi_{a_j}^{(s)}, \psi)$$

e quindi le (4.13) e (4.14) diventano

$$\psi_{a_i} = \sum_r \phi_{a_i}^{(r)} (\phi_{a_i}^{(r)}, \psi) \quad (4.16)$$

e

$$\psi = \sum_{a_i \in Sp\mathcal{A}} \sum_r \phi_{a_i}^{(r)} (\phi_{a_i}^{(r)}, \psi) \quad (4.17)$$

Da (4.13) e (4.7) si ha

$$\| \psi_{a_i} \|^2 = \sum_r |(\phi_{a_i}^{(r)}, \psi)|^2 \quad (4.18)$$

Inoltre da (4.10) tenendo conto di (4.18) si ha

$$w(a_i) = \frac{\sum_r |(\phi_{a_i}^{(r)}, \psi)|^2}{\| \psi \|^2} \quad (4.19)$$

Le $\phi_{a_i}^{(r)}$ sono note se si sa risolvere l'equazione agli autovalori (4.2) anche se non sono univocamente determinate data l'arbitrarietà della scelta della base in \mathcal{H}_{a_i} e poiché anche ψ è data, ora si può calcolare la distribuzione statistica $w(a_i)$. Si noti che da (4.18) segue che $w(a_i)$ non dipende dalla base scelta. Abbiamo dunque capito che la completezza (equazioni (4.4) o (4.5)) è essenziale per poter calcolare le distribuzioni statistiche.

Possiamo ora enunciare il teorema fondamentale

Teorema: *Condizione necessaria e sufficiente perché valga la proprietà di completezza per un operatore A a spettro puramente discreto è che A sia autoaggiunto.*

Non dimostreremo questo teorema ma possiamo giustificarlo mostrando che se vale la completezza A è autoaggiunto. Infatti sia ψ un vettore appartenente al dominio di A^\dagger (e quindi $\| A^\dagger \psi \| < \infty$). Per la (4.5) si ha

$$\psi = \sum_{a_i \in SpA} \psi_{a_i}$$

dove ψ_{a_i} sono autovettori di A . Poiché A è simmetrico, su tali stati $A^\dagger = A$. Dunque

$$A^\dagger \psi = \sum_{a_i \in SpA} A^\dagger \psi_{a_i} = \sum_{a_i \in SpA} A \psi_{a_i} = A \psi.$$

Perciò anche $\| A \psi \| < \infty$ e quindi ψ appartiene anche al dominio naturale di A .

Un'altra importante conseguenza della proprietà di completezza è che essa permette di definire l'azione di qualunque funzione $F(\mathcal{A})$ di \mathcal{A} su ogni vettore ψ appartenente al dominio di $F(\mathcal{A})$. Infatti per la (4.5))

$$F(A)\psi = \sum_{a_i \in SpA} F(A)\psi_{a_i} = \sum_{a_i \in SpA} F(a_i)\psi_{a_i} \quad (4.20)$$

.

Capita spesso di dover calcolare l'azione di una funzione, anche complicata, $F(A)$ dell'operatore autoaggiunto A , (per esempio, $exp(A)$, $\theta_\Delta(A)$, eccetera) su un vettore ψ di \mathcal{H} (o meglio di $\mathcal{D}(\mathcal{F}(\mathcal{A}))$). Se A ha spettro puramente discreto, la (4.20) è la definizione corretta di $F(A)\psi$.

1.5 Spettro continuo

Consideriamo ora un operatore A (autoaggiunto come vedremo) che descrive la grandezza fisica \mathcal{A} con spettro puramente continuo. Abbiamo visto che per un operatore autoaggiunto a spettro discreto l'equazione agli autovalori e la proprietà di completezza degli autovettori sono essenziali per determinare lo spettro e la distribuzione statistica di A su ogni stato Σ (del suo dominio e, per estensione, di \mathcal{H}) e l'azione di qualunque funzione $F(\mathcal{A})$ su Σ . Ma noi sappiamo che in corrispondenza ai punti a dello spettro continuo di una grandezza fisica \mathcal{A} non esistono stati Σ_a sui quali la fluttuazione di \mathcal{A} intorno ad a si annulli. Perciò l'equazione agli autovalori per l'operatore A con spettro puramente continuo non ammette soluzioni per nessun valore di $a \in SpA$. Come fare ?

Per avere lumi ricorriamo di nuovo all'esempio della particella unidimensionale che già ci ha reso buoni servizi. Per questo sistema sappiamo (anche se non lo abbiamo ancora dimostrato) che le grandezze posizione e impulso hanno spettro puramente continuo che si estende su tutto l'asse reale. Inoltre per queste grandezze sappiamo calcolare le distribuzioni statistiche (equazioni (2.1) e (2.2) con (2.8)). Allora, per orientarci, proviamo a scrivere le equazioni agli autovalori per queste grandezze, pur sapendo che questo non si può fare :

$$X\delta_{x_o}(x) = x_o\delta_{x_o}(x) \quad (5.1)$$

cioé

$$(x - x_o)\delta_{x_o}(x) = 0 \quad (5.2)$$

e

$$Pe_{p_o}(x) = p_o e_{p_o}(x) \quad (5.3)$$

cioé

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - p_o\right)e_{p_o}(x) \quad (5.4)$$

L'equazione differenziale (5.4) può essere risolta e si trova

$$e_{p_o}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_o x} \quad (5.5)$$

(il fattore davanti all'esponenziale é una conveniente normalizzazione). Anche la (5.2) si può formalmente risolvere e la soluzione é la δ di Dirac

$$\delta_{x_o}(x) = \delta(x - x_o) \quad (5.6).$$

(Infatti $x\delta(x)$ é la distribuzione identicamente nulla come si puó vedere applicandola a una funzione di prova). Non solo. Per ogni $\psi \in L^2(R)$, considerandone la trasformata di Fourier, possiamo scrivere

$$\psi(x) = \int dp \phi(p) e_p(x) \quad (5.7)$$

e anche, formalmente,

$$\psi(x) = \int dx' \psi(x') \delta_{x'}(x) \quad (5.8)$$

con

$$(e_p, e_{p'}) \equiv \int dx e_p^*(x) e_{p'}(x) = \delta(p - p') \quad (5.9)$$

e

$$(\delta_x, \delta_{x'}) \equiv \int dy \delta(y - x) \delta(y - x') = \delta(x - x') \quad (5.10).$$

Le (5.7),(5.8) si presentano come relazioni di completezza in cui integrali sullo spettro continuo sostituiscono le somme sullo spettro discreto e le (5.9),(5.10) sono simili a relazioni di ortonormalizzazione (generalizzate). Inoltre (vedi (2.1) e (2.2)) le distribuzioni statistiche si ottengono dai coefficienti $\phi(p)$ e $\psi(x')$ degli sviluppi (5.7) e (5.8) in modo analogo a quello che succede nel caso discreto.

Purtroppo le (5.1) e (5.3) cosi' come le abbiamo scritte sono completamente prive di senso. Infatti X e P , in quanto operatori lineari, sono mappe da (un dominio di) $L^2(R)$ a $L^2(R)$ mentre $e_p(x)$ e $\delta_{x_o}(x)$ non appartengono ad $L^2(R)$. ($e_p(x)$ non é modulo quadro integrabile perché $|e_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$ e quindi $\|e_p\| = \infty$ mentre δ_{x_o} non é neppure una funzione (é una distribuzione temperata)). Tuttavia le (5.1) - (5.10), pur essendo prive di senso dal punto di vista matematico, "suonano" bene e dunque dobbiamo chiederoci se c'é un modo per dar loro un senso matematicamente corretto e preciso. Il modo c'é ma non é immediato e va discusso con cura.

A tale scopo cominciamo a studiare lo spettro degli operatori X e P per la particella unidimensionale utilizzando il criterio basato sulle fluttuazioni discusso nella sezione 1. Male che vada avremo almeno dimostrato che il loro spettro é continuo e si estende su tutto l'asse reale. Cominciamo con l'operatore X e consideriamo la successione di funzioni modulo quadro integrabili $\phi_{x_o}^{(n)}(x)$ definite da

$$\phi_{x_o}^{(n)}(x) = n \quad \text{per} \quad x \in \Delta_{x_o}^{(n)} \quad (5.11)$$

e nulle altrove, dove $\Delta_{x_o}^{(n)}$ sono gli intervalli $\Delta_{x_o}^{(n)} = [x_o - \frac{1}{2n}, x_o + \frac{1}{2n}]$ di larghezza $\frac{1}{n}$ centrati in x_o . Se calcoliamo la fluttuazione di X intorno a x_o su questi stati (la cui norma al quadrato é

uguale a n) troviamo

$$\frac{\| (X - x_o)\phi_{x_o}^{(n)} \|^2}{\| \phi_{x_o}^{(n)} \|^2} = \frac{1}{n} \int_{\Delta_{x_o}^{(n)}} (x - x_o)^2 n^2 dx = \int_{\frac{-1}{2n}}^{\frac{1}{2n}} ny^2 dy = \frac{1}{12n^2} \quad (5.12)$$

Chiaramente tali fluttuazioni tendono a zero per n che tende a ∞ e, poiché x_o é un punto generico dell'asse reale, abbiamo cosi' dimostrato che lo spettro di X é l'intero asse reale. Per l'operatore P si procede in modo analogo. Consideriamo la successione di funzioni modulo quadro integrabili $\chi_{p_o}^{(n)}(x)$ date dalle trasformate di Fourier delle funzioni $\phi_{p_o}^{(n)}(p)$ eguali a n nell'intervallo $\Delta_{p_o}^{(n)}$ dell'asse "p" di larghezza $\frac{1}{n}$, centrato in p_o e uguali a zero altrove e calcoliamo le fluttuazioni dell'operatore P intorno a p_o su gli stati descritti dalle $\chi_{p_o}^{(n)}$. Tenendo conto che le trasformate di Fourier preservano le norme conviene lavorare nello spazio degli impulsi dove il calcolo delle fluttuazioni diventa identico a quello già fatto per l'operatore X . Se ne conclude che anche lo spettro di P é l'intero asse reale.

Poiché, come abbiamo già detto, le successioni $\phi_{x_o}^{(n)}$ (e dunque anche le $\chi_{p_o}^{(n)}$) hanno norma al quadrato eguale a n , esse non convergono in norma. Consideriamo ora le successioni numeriche $(\phi_{x_o}^{(n)}, \psi)$ per ogni $\psi \in L^2(R)$ continua in x_o . Usando il teorema del valor medio abbiamo $(\phi_{x_o}^{(n)}, \psi) = \psi(\xi_n)$ con $\xi_n \in \Delta_{x_o}^{(n)}$ e quindi

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (\phi_{x_o}^{(n)}, \psi) = \psi(x_o) = (\delta_{x_o}, \psi) \quad (5.13)$$

dove con un piccolo abuso di linguaggio si é posto

$$\psi(x_o) = \int \delta(x - x_o)\psi(x)dx \equiv (\delta_{x_o}, \psi)$$

con notazione desunta dal prodotto scalare di vettori di uno spazio hilbertiano. Analogamente, possiamo considerare le successioni numeriche $(\chi_{p_o}^{(n)}, \psi)$ per ogni $\psi \in L^2(R)$ la cui trasformata di Fourier sia continua in p_o . Con un calcolo simile al precedente (qui conviene lavorare nello spazio degli impulsi e poi passare allo spazio delle coordinate) si trova

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (\chi_{p_o}^{(n)}, \psi) = (e_{p_o}, \psi) \quad (5.14)$$

dove di nuovo con un piccolo abuso di linguaggio abbiamo posto $\int e_{p_o}^*(x)\psi(x)dx = (e_{p_o}, \psi)$ Viste le (5.13) e (5.14) possiamo chiederci: c'è un senso in cui si possa dire che la successione delle $\phi_{x_o}^{(n)}$ converge alla δ_{x_o} e la successione delle $\chi_{p_o}^{(n)}$ converge alla e_{p_o} ? La risposta é si! *Si può parlare di convergenza nel senso della convergenza debole o convergenza dei funzionali lineari e continui.*

Ma per giustificare quest'ultima affermazione é necessario fare una pausa per parlare dei funzionali lineari e continui.

Funzionali lineari e continui

Sia \mathcal{V} uno spazio vettoriale di funzioni complesse su cui é definita una certa topologia. Diremo *funzionale lineare continuo* F una mappa che associa ad ogni vettore $v \in \mathcal{V}$ un numero complesso $F[v]$ con le proprietá di essere lineare e continuo.

Linearitá vuol dire che $F[\alpha v_1 + \beta v_2] = \alpha F[v_1] + \beta F[v_2]$ per ogni coppia $v_1, v_2 \in \mathcal{V}$ e per ogni coppia di numeri complessi α, β .

Continuitá vuol dire che per ogni successione $v_n \in \mathcal{V}$ che converge a $v \in \mathcal{V}$ secondo la topologia di \mathcal{V} la successione numerica $F[v_n]$ converge a $F[v]$. L'insieme di tutti i funzionali lineari e continui di \mathcal{V} é esso stesso uno spazio vettoriale topologico, detto *spazio duale*, che viene indicato col simbolo $\tilde{\mathcal{V}}$. La topologia naturale di $\tilde{\mathcal{V}}$ é la topologia debole : la successione $F_n \in \tilde{\mathcal{V}}$ converge a $F \in \tilde{\mathcal{V}}$ se e solo se $\lim_{n \rightarrow \infty} F_n[v] = F[v]$ per ogni $v \in \mathcal{V}$.

Se \mathcal{V} é lo spazio di Hilbert \mathcal{H} , con la sua topologia della norma, ad ogni vettore $\phi \in \mathcal{H}$ si puó associare un funzionale lineare e continuo dato dal prodotto scalare di ϕ con i vettori $\psi \in \mathcal{H}$

$$\phi[\psi] = (\phi, \psi) \quad (5.15)$$

In realtá di funzionali lineari e continui in \mathcal{H} non ve ne sono altri. In altre parole vale l'importante

teorema di Riesz :

Vi é un (quasi-)isomorfismo tra lo spazio hilbertiano \mathcal{H} e il suo duale $\tilde{\mathcal{H}}$

$$\mathcal{H} \simeq \tilde{\mathcal{H}}$$

Il "quasi" si riferisce al fatto che, in base alla nostra definizione, gli spazi duali sono antilineari nel senso che $(\alpha F_1 + \beta F_2)[v] = \alpha^* F_1[v] + \beta^* F_2[v]$ come si vede da (5.15) per il duale dello spazio hilbertiano \mathcal{H} .

In seguito per i funzionali useremo spesso anche la suggestiva notazione ad immagine della (5.15)

$$F[v] \equiv (F, v) \quad (5.16)$$

Il teorema di Riesz é un pó una doccia fredda sulla nostra speranza di dare un senso preciso alle (5.13),(5.14) e quindi alle (5.1),(5.3) perché se si parte da \mathcal{H} si rimane in \mathcal{H} passando al duale, ma per fortuna c' é una via di uscita.

Consideriamo lo spazio \mathcal{S} delle funzioni di prova. \mathcal{S} é lo spazio delle funzioni continue, con derivate continue di ogni ordine e che all'infinito, loro e tutte le loro derivate tendono a zero piú

rapidamente di qualsiasi potenza. Chiaramente é lo spazio migliore che si possa immaginare. La topologia appropriata di \mathcal{S} é la topologia *uniforme*: sono convergenti le successioni di funzioni che convergono uniformemente (punto per punto) assieme alle successioni delle loro derivate di ogni ordine. \mathcal{S} é completo per la topologia uniforme nel senso che ogni successione di vettori di \mathcal{S} che converge uniformemente converge verso un vettore di \mathcal{S} . I vettori di \mathcal{S} sono ovviamente funzioni modulo quadro integrabili e quindi $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$. Dunque in \mathcal{S} si puó introdurre anche la topologia della norma, indotta da \mathcal{H} . Sembra incredibile ma é un teorema che \mathcal{S} é denso in \mathcal{H} per la topologia della norma cioè ogni vettore di \mathcal{H} si puó pensare come limite di una successione di \mathcal{S} che converge in norma.

La topologia uniforme é piú forte della topologia della norma nel senso che tutte le successioni che convergono per la topologia uniforme convergono anche in norma ma non viceversa. Ne segue che lo spazio duale di \mathcal{S} , $\tilde{\mathcal{S}}$, é piú grande di $\tilde{\mathcal{H}}$. Ciò si puó capire osservando che, essendo la topologia uniforme piú forte di quella della norma, ci sono meno successioni convergenti uniformemente che successioni convergenti in norma. Pertanto é piú facile per un funzionale lineare essere continuo per la topologia uniforme che per la topologia della norma e quindi i funzionali lineari, continui in norma (lo spazio $\tilde{\mathcal{H}}$) sono meno di quelli continui per la topologia uniforme (lo spazio $\tilde{\mathcal{S}}$). Abbiamo dunque

$$\mathcal{S} \subset \mathcal{H} \simeq \tilde{\mathcal{H}} \subset \tilde{\mathcal{S}} \quad (5.17).$$

La terna $\mathcal{S}, \mathcal{H} \simeq \tilde{\mathcal{H}}, \tilde{\mathcal{S}}$, si chiama triade hilbertiana, o spazio hilbertiano armato (nel senso di armare una nave, non nel senso bellico).

Lo spazio $\tilde{\mathcal{S}}$, duale dello spazio delle funzioni di prova \mathcal{S} , é lo spazio delle distribuzioni temperate e in esso trovano posto le $e_p(x)$, le δ di Dirac δ_{x_0} , le loro derivate di ogni ordine e molte altre funzioni e distribuzioni.

[N.B. Per evitare fraintendimenti forse é utile chiarire un punto che illustreremo assumendo per essere concreti che \mathcal{H} sia lo spazio $L^2(R)$ per il quale il prodotto scalare é dato da $(\phi, \psi) = \int dx \phi^*(x)\psi(x)$; allora considerando i funzionali lineari continui

$$\phi[\psi] = (\phi, \psi) = \int dx \phi^*(x)\psi(x)$$

che definiscono lo spazio duale $\tilde{L}^2(R)$, possiamo dire che i vettori di $\tilde{L}^2(R)$ sono le funzioni modulo quadro integrabili $\phi^*(x)$ e infatti $\tilde{L}^2(R)$ é antilineare nel senso che $(\alpha\phi_1 + \beta\phi_2)^*(x) = \alpha^*\phi_1^* + \beta^*\phi_2^*$. Ma possiamo anche considerare lo spazio lineare $\tilde{L}^{2\dagger}(R)$, che é isomorfo (non quasi-isomorfo) a $L^2(R)$, formato dai vettori, ϕ , complessi coniugati di $\tilde{L}^2(R)$ e in seguito non sottilizzeremo troppo sulla differenza tra $\tilde{L}^2(R)$ e $\tilde{L}^{2\dagger}(R)$. In modo analogo per i funzionali

di $\tilde{\mathcal{S}}$, spingendo ancora un poco piú in lá l'analogia col prodotto scalare in $L^2(R)$, possiamo scrivere

$$F[s] = (F, s) = \int dx F^*(x) s(x)$$

e dire che i vettori dello spazio (antilineare) $\tilde{\mathcal{S}}$ sono gli $F^*(x)$ ma potremo anche considerare lo spazio (lineare) $\tilde{\mathcal{S}}^\dagger$ i cui vettori sono $F(x)$ senza sottilizzare troppo sulla differenza tra $\tilde{\mathcal{S}}$ e $\tilde{\mathcal{S}}^\dagger$] Torniamo ora alla nostra discussione sul modo di dare un senso matematicamente corretto alle (5.1),(5.3).

Notiamo che \mathcal{S} é certamente contenuto nei domini naturali di X e P e risulta :

a) \mathcal{S} é invariante per l'azione di X e P . Cioé per ogni $s \in \mathcal{S}$ si ha $Xs \in \mathcal{S}$ e $Ps \in \mathcal{S}$.

[N.B. Il codominio di X (di P) ristretto ad \mathcal{S} é l'insieme di tutte le funzioni di prova che (le cui trasformate di Fourier) si annullano in $x = 0$ (in $p = 0$) ma poiché tali sottoinsiemi sono densi in \mathcal{S} (per la topologia uniforme) le loro chiusure per la topologia uniforme coincidano con l'intero spazio \mathcal{S} .]

b) Gli operatori X , P ristretti a \mathcal{S} sono continui per la topologia uniforme [N.B. Un operatore A ristretto ad \mathcal{S} é contnuo per la topologia uniforme se, per ogni sucessione $s_n \in \mathcal{S}$ che converge a $s \in \mathcal{S}$ secondo la topologia uniforme cioè $u\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} s_n = s$ per $s_n, s \in \mathcal{S}$, allora anche $u\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} As_n = As$ dove con $u\text{-}\lim$ si intende il limite secondo la topologia uniforme.]

Se valgono le proprietà a) e b), é possibile estendere gli operatori X e P all'intero spazio duale $\tilde{\mathcal{S}}$ attraverso le definizioni

$$(XF)[s] \equiv F[Xs] \tag{5.18}$$

e

$$(PF)[s] \equiv F[Ps] \tag{5.19}$$

Si noti che i secondi membri delle (5.18), (5.19) descrivono funzionali lineari di \mathcal{S} (per la a)) che sono continui (per la b)). Le (5.18) e (5.19) estendono gli operatori X e P a $\tilde{\mathcal{S}}$ attraverso la definizione dell'aggiunto come risulta piú chiaro usando per i funzionali la notazione suggerita dal prodotto scalare

$$(XF, s) = (F, Xs)$$

e

$$(PF, s) = (F, Ps).$$

Ora le (5.1) e (5.3) hanno un senso matematicamente preciso e determinano lo spettro di X e P mentre le (5.7) e (5.8) permettono di calcolarne le distribuzioni statistiche mediante le (2.1) e (2.2) .

In base a un teorema importante che estende al caso di operatori con spettro continuo quello enunciato per gli operatori con spettro discreto, quanto fatto per gli operatori X e P (che sono autoaggiunti) si può estendere ad ogni altro operatore A se e solo se A é *autoaggiunto*.

Ad essere pignoli, non per tutti gli operatori autoaggiunti A lo spazio delle funzioni di prova \mathcal{S} é quello adatto da cui partire. Per certi operatori A é necessario partire da un sottospazio di \mathcal{H} , diciamo $\mathcal{S}(A)$, con una topologia piú forte della norma, (diverso da \mathcal{S}) e da questo costruire lo spazio duale $\tilde{\mathcal{S}}(A)$ su cui estendere A . Ma per tutti gli operatori con cui avremo a che fare lo spazio delle funzioni di prova \mathcal{S} e il suo duale, lo spazio delle distribuzioni temperate $\tilde{\mathcal{S}}$, saranno sufficienti.

L'operatore A può essere esteso allo spazio duale $\tilde{\mathcal{S}}$ attraverso la definizione dell'aggiunto

$$(AF, s) = (F, As) \quad (5.20)$$

e per l'operatore A cosi' esteso si può scrivere una equazione agli autovalori

$$AF_a = aF_a \quad (5.21)$$

Il teorema allora ci assicura che per ogni punto dello spettro (continuo) di A la (5.21) ammette soluzioni (autofunzionali) e tra queste se ne può estrarre un insieme, $F_a^{(r)}$, col quale costruire una relazione di completezza generalizzata

$$\psi = \int da \sum_r F_a^{(r)}(F_a^{(r)}, \psi) \quad (5.22)$$

dove r é un indice di degenerazione. La (5.22) é l'analogo delle (5.7) e (5.8) per gli operatori X e P . Se formalmente al posto della ψ a secondo membro della (5.22) si sostituisce la (5.22) stessa, si trova

$$\psi = \int da da' \sum_{r,s} F_a^{(r)}(F_a^{(r)}, F_{a'}^{(s)})(F_{a'}^{(s)}\psi)$$

che é consistente con (5.22) se si assume

$$(F_a^{(r)}, (F_{a'}^{(s)})) = \delta_{r,s}\delta(a - a') \quad (5.23)$$

che definisce formalmente il simbolo $(F_a^{(r)}, (F_{a'}^{(s)}))$ altrimenti privo di significato. La (5.23), analoga alle (5.9),(5.10) per gli operatori P e X , si può considerare una relazione di ortonormalizzazione generalizzata, analoga alla (4.15) nel caso dello spettro discreto. A rigore la $(F_a^{(r)}, \psi)$ cioè il funzionale $F_a^{(r)}[\psi]$ é ben definito solo se $\psi \in \mathcal{S}$ ma poiché \mathcal{S} é denso in \mathcal{H} per la topologia della norma $(F_a^{(r)}, \psi)$ può essere definito come limite su successioni di \mathcal{S} che

convergono in norma a ψ per ogni $\psi \in \mathcal{H}$ tranne che in un insieme di misura nulla sullo spettro di A . Il fatto che non sia definito su un insieme di misura nulla dello spettro di A é irrilevante per l'esistenza dell'integrale (5.22).

[N.B.Per essere piú precisi il teorema ci dice che gli autofunzionali $F_a^{(r)}$ forniscono una relazione di completezza generalizzata nel senso che si ha

$$(\phi, \psi) = \int da \sum_r (\phi, F_a^{(r)})(F_a^{(r)}, \psi) \quad (5.24)$$

con $\phi, \psi \in \mathcal{S}$ dove si é posto $(\phi, F_a^{(r)}) = (F_a^{(r)}, \phi)^*$.Ma poiché \mathcal{S} é denso in \mathcal{H} per la topologia della norma, la (5.24) vale quasi ovunque sullo spettro di A anche se $\phi, \psi \in \mathcal{H}$ e dunque ha senso scrivere la (5.22).]

Si noti anche che mentre $F_a^{(r)}$ é un funzionale di $\tilde{\mathcal{S}}$ (o meglio di $\tilde{\mathcal{S}}^\dagger$), per ogni intervallo Δ

$$\int_\Delta da F_a^{(r)}(F_a^{(r)}, \psi) < \infty$$

é modulo quadro integrabili cioé appartiene a (l sottospazio di $\tilde{\mathcal{S}}$) \mathcal{H}

Da (5.22) (o da (5.24)) segue che la distribuzione statistica di A nello stato (descritto da) ψ é

$$w(a) = \frac{\sum_r |(F_a^{(r)}, \psi)|^2}{\|\psi\|^2} \quad (5.25)$$

e infine, se $G(A)$ é una generica funzione di A ,

$$G(A)\psi = \int da \sum_r G(a) F_a^{(r)}(F_a^{(r)}, \psi) \quad (5.26).$$

Abbiamo cosi' risolto completamente il problema di determinare spettro e distribuzione statistica per un operatore A con spettro puramente continuo e di definire l'azione di una generica funzione, $G(A)$, di A su ψ .

Come fare per un operatore a spettro misto a questo punto é ovvio.