

CAPITOLO 1

Il problema dei fondamenti

La meccanica quantistica esiste ormai da tre quarti di secolo, e non ci sono dubbi sul suo successo come teoria fondamentale per l'interpretazione di un'estesissima serie di fatti fisici, nonché per la previsione di fatti precedentemente sconosciuti, per l'invenzione di nuovi strumenti, componenti, materiali... Insomma, sul piano "pratico" la m.q. appare inattaccabile.

Tuttavia fin dagli inizi della sua storia la m.q. ha dato luogo a profonde controversie quanto alla sua *interpretazione*: questioni come il significato dell'indeterminismo, il rapporto fra macroscopico e microscopico, il ruolo delle operazioni di misura e dell'osservatore, non sono mai state definitivamente risolte. Sono state accantonate in quanto irrilevanti ai fini dell'utilizzo della teoria, ma hanno continuato a essere presenti a molti fisici, specialmente teorici, e alcuni pochi ne hanno continuato a fare l'oggetto principale dei loro interessi scientifici.

Inoltre, se si esce dall'ambito dei fisici professionisti, sono proprio i problemi d'interpretazione quelli che hanno suscitato maggiore attenzione, e hanno anche influito, specialmente sul terreno filosofico. Purtroppo non è facile intendere correttamente il significato dei problemi sopra accennati senza essere in possesso di un adeguato bagaglio di conoscenze tecniche e conoscenze fisiche generali: perciò all'interesse al di fuori della comunità dei fisici non ha sempre corrisposto una corretta presentazione dei problemi e un'accettabile comprensione dei vari risultati.

Anche la divulgazione scientifica si concentra di solito sulle stesse questioni, e qui i risultati sono ancora peggiori: quanto più si cerca di essere semplici nell'esposizione, tanto più alta è la probabilità di travisare sostanzialmente ciò di cui si parla. In buona parte lo stesso si può dire dei tentativi che si fanno per presentare questo capitolo della fisica nella scuola secondaria.

Negli ultimi tempi (ormai misurabili in decenni) lo sviluppo della fisica sperimentale ha reso disponibili strumenti assai più sofisticati, e reso perciò possibili esperimenti che prima potevano essere visti solo come "gedankenexperimente." Anche il lavoro teorico sui fondamenti è proseguito, con alcuni risultati ormai consolidati, sebbene molti dei problemi sopra accennati rimangano aperti.

Tutto quanto precede motiva l'opportunità di dedicare qualche riflessione all'argomento dei fondamenti, che non trova generalmente posto, per più ragioni, nei normali curricula universitari.

Gli elementi essenziali della teoria quantistica

Dedicheremo questo capitolo a un veloce richiamo degli elementi concettuali e matematici che stanno alla base della m.q. Non ci soffermeremo né sulla giustificazione delle asserzioni e delle strutture matematiche, né spenderemo spazio per esaminare il confronto fra teoria ed esperienza: daremo tutto questo per noto. Anche dal punto di vista del rigore matematico ci terremo al livello più semplice possibile, finché ciò sia compatibile con le esigenze della trattazione.

La struttura della m.q. è tutto sommato semplice: occorre introdurre due soli concetti fondamentali, quello di *stato* di un sistema fisico e quello di *osservabile*. Il supporto matematico dell'insieme degli stati possibili per un sistema è uno *spazio vettoriale sui complessi dotato di prodotto scalare*: in molti casi sarà per noi sufficiente considerare uno spazio con numero finito di dimensioni (spesso soltanto 2). Ricordiamo che in molte applicazioni è però necessario introdurre un'infinità numerabile di dimensioni, il che richiede una struttura topologica: in questo caso lo spazio diviene uno *spazio di Hilbert*. Per questo motivo lo spazio verrà sempre indicato con \mathcal{H} , e lo chiameremo per brevità *finito* o *infinito* pensando al numero di dimensioni.

Ciò premesso, il concetto di stato ha una precisa traduzione matematica: quella di *raggio unitario* di \mathcal{H} . Il termine “raggio” designa un sottospazio unidimensionale di \mathcal{H} , ossia l'insieme dei vettori che differiscono tra loro solo per un moltiplicatore scalare (complesso). Il termine “unitario” restringe l'insieme ai vettori di norma 1 (che non formano quindi più un s.s. lineare). Due vettori di uno stesso raggio unitario possono differire solo per un moltiplicatore scalare di modulo 1, ossia per un *fattore di fase* $e^{i\varphi}$ (φ reale).

Non di rado indicheremo uno stato per mezzo di uno dei vettori appartenenti al raggio unitario corrispondente. Occorrerà però non dimenticare mai l'arbitrarietà del fattore di fase.

Il concetto di osservabile si traduce in quello di *operatore* (lineare) *autoaggiunto* su \mathcal{H} . Se \mathcal{H} è finito, invece di a.a. basta dire *hermitiano*; solo nel caso d'infinito dimensioni i due concetti non coincidono.

Nota: Ci si può chiedere se l'insieme delle oss. coincida con quello degli op. a.a., o se viceversa possano esistere op. a.a che non corrispondono a oss. Come vedremo, questa domanda equivale all'altra: tutti i raggi unitari corrispondono a stati fisicamente realizzabili, oppure l'insieme degli stati è solo un sottoinsieme proprio di quello dei raggi unitari? Si tratta di un problema importante, sul quale ritorneremo. Per ora ci atterremo alla prima alternativa.

Notazioni

Qui adotteremo sistematicamente, per vettori, op., e per altri enti che incontreremo, la *notazione di Dirac*, che differisce da quella in uso in matematica. È apparentemente più pesante, ma presenta sostanziali vantaggi per l'applicazione fisica. Il generico elemento di \mathcal{H} (vettore, anche non unitario) sarà indicato

con un *ket*, ossia con la scrittura

$$|\dots\rangle$$

dove al posto dei “...” scriveremo qualsiasi simbolo o insieme di simboli che risulti conveniente per individuare il vettore. Per esempio, gli stati legati di un atomo d'idrogeno potranno essere descritti da $|n, l, m\rangle$; uno stato di polarizzazione di un fotone potrà essere indicato con $|+\rangle$, ecc.

Gli op. (osservabili) verranno di solito (ma non sempre) indicati con lettere latine maiuscole: pertanto l'azione di un operatore su un vettore potrà essere scritta come

$$M |n, l, m\rangle.$$

È noto che a ogni spazio vettoriale si associa il suo *duale*: nel nostro caso, lo spazio \mathcal{H}^* dei funzionali lineari da \mathcal{H} in \mathbb{C} . (Se \mathcal{H} è infinito, occorre specificare *continui*, ossia *limitati*.) Per uno spazio dotato di prodotto scalare, c'è un anti-isomorfismo naturale fra lo spazio e il suo duale, che fa corrispondere a un vettore u il funzionale

$$u^* : v \mapsto u^*(v) = (u, v) \quad (1-1)$$

(qui siamo temporaneamente tornati all'usuale notazione matematica). Si noti che mentre l'applicazione $u \mapsto u^*$ è definita in modo ovvio dalla (1-1), l'esistenza dell'inversa non è affatto ovvia se lo spazio è infinito: questo è il *teorema di Riesz*.

È importante tener presente che il prodotto scalare (u, v) è *lineare* in v , ma *antilineare* in u : se $u = ax + by$, vale

$$(u, v) = a^*(x, v) + b^*(y, v).$$

Per ricordare questo, Dirac adotta per gli elementi del duale la notazione *bra*:

$$\langle u| \text{ è il duale di } |u\rangle.$$

Coerentemente, il prodotto scalare fra $|u\rangle$ e $|v\rangle$ è indicato con $\langle u|v\rangle$.

Nota: Non sarà sfuggita l'origine dei termini “bra” e “ket”: combinati insieme formano (quasi) “bracket,” ossia parentesi.

In particolare è importante il prodotto $\langle v|v\rangle = \|v\|^2$. Per un vettore *unitario* (o *normalizzato*) $\langle v|v\rangle = 1$.

Per concludere questo elenco di notazioni, occorre ancora ricordare gli *elementi di matrice*. Se A è un op. (anche non a.a.) si chiama elemento di matrice fra i vettori u e v l'espressione (u, Av) . La notazione di Dirac è

$$\langle u|A|v\rangle.$$

Operatori hermitiani e autoaggiunti

Richiamiamo la definizione di *aggiunto* di un op.: si dice che A^+ è aggiunto di A se

$$\forall u, v \quad (u, Av) = (A^+u, v) \quad (1-2)$$

(di nuovo, l'esistenza di A^+ dipende dal teorema di Riesz). C'è anche da ricordare che la definizione di aggiunto appena data vale a rigore solo per op. *limitati*; l'estensione a op. non limitati è possibile sotto certe condizioni, ma qui non insistiamo. Infatti non incontreremo situazioni in cui queste precisazioni matematiche abbiano importanza. (Naturalmente il problema esiste solo se \mathcal{H} è infinito: su uno spazio finito tutti gli op. sono limitati.)

È interessante vedere come si scrive la (1-2) nella notazione di Dirac. Partiamo da $(u, v) = (v, u)^*$, ossia $\langle u|v \rangle = \langle v|u \rangle^*$: allora la (1-2) può essere scritta $(u, Av) = (v, A^+u)^*$ ossia

$$\langle u|A|v \rangle = \langle v|A^+|u \rangle^* \quad \text{o anche} \quad \langle v|A^+|u \rangle = \langle u|A|v \rangle^*.$$

È ovvia la definizione di *operatore autoaggiunto*: A è a.a. se $A^+ = A$, ossia se

$$\langle v|A|u \rangle = \langle u|A|v \rangle^*. \quad (1-3)$$

Ancora una volta, è bene sottolineare che in realtà la (1-3) definisce gli op. *hermitiani*: i due concetti (a.a. e hermitiano) coincidono in dimensione finita, mentre in infinite dimensioni gli a.a. sono un sottoinsieme degli hermitiani, per cui la (1-3) non definisce correttamente un op. a.a.

Va però detto che la distinzione, a rigore necessaria, fra hermitiano e a.a. lascia spazio a una possibilità, che si presenta in tutti i casi d'interesse in m.q.: un op. hermitiano non a.a. può possedere *estensioni a.a.* Se questo accade, basta sostituire l'op. originario con una sua estensione a.a.

Se A e B sono a.a., e a, b sono numeri reali, è facile dimostrare che $aA + bB$ è hermitiano. Non è a rigore detto che sia a.a. se \mathcal{H} è infinito, ma non ci preoccupiamo di ciò, perché nei casi che possono interessarci il problema non si presenta. Dunque le oss. formano uno spazio vettoriale sui reali.

Viceversa non è possibile ammettere che sia sempre a.a. AB : infatti $(AB)^+ = B^+A^+$, per cui AB potrà essere a.a. solo se A e B commutano, cosa che in generale non accade. Questo fatto ha importanti conseguenze.

Basi ortonormali, proiettori

Si chiama *base ortonormale* di \mathcal{H} un insieme (finito o numerabile) di vettori $|k\rangle$ unitari e tra loro ortogonali, tale che ogni vettore di \mathcal{H} sia combinazione lineare dei $|k\rangle$:

$$|v\rangle = \sum_k c_k |k\rangle. \quad (1-4)$$

Ancora una volta, la (1-4) è semplice solo se \mathcal{H} è finito (è una somma finita). Altrimenti si tratta di una serie, e l'uguaglianza va intesa nel senso di *convergenza in norma*.

In seguito parlando di una base sottintenderemo sempre che sia ortonormale, a meno di avviso contrario. Si ricordi che dalla (1-4) segue

$$\langle v|v\rangle = \sum_k |c_k|^2. \quad (1-5)$$

In particolare, $\sum_k |c_k|^2 = 1$ se $|v\rangle$ è unitario.

Dal fatto che la base è ortonormale segue subito, prendendo il prodotto scalare della (1-4) per $|m\rangle$:

$$c_m = \langle m|v\rangle$$

e risostituendo nella (1-4):

$$|v\rangle = \sum_k \langle k|v\rangle |k\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k|v\rangle.$$

La seconda scrittura è preferita, perché si presta a un'interessante interpretazione. Possiamo formalmente leggerla così:

$$|v\rangle = \left(\sum_k |k\rangle \langle k| \right) |v\rangle$$

e si vede che l'espressione in parentesi è l'operatore identità I :

$$\sum_k |k\rangle \langle k| = I. \quad (1-6)$$

La scrittura $|k\rangle \langle k|$ non è che il *prodotto tensoriale* di un vettore di \mathcal{H} per uno di \mathcal{H}^* , quindi un op. su \mathcal{H} : lo indicheremo con P_k . Per capirne il significato, appliciamolo a un generico $|u\rangle$:

$$P_k |u\rangle = (|k\rangle \langle k|) |u\rangle = |k\rangle \langle k|u\rangle.$$

Otteniamo un vettore parallelo a $|k\rangle$, ma moltiplicato per il coefficiente $\langle k|u\rangle$, prodotto scalare fra $|k\rangle$ e $|u\rangle$. Si tratta dunque della *proiezione* di $|u\rangle$ su $|k\rangle$. Per questa ragione $P_k = |k\rangle \langle k|$ prende il nome di *proiettore associato al vettore* $|k\rangle$.

Si noti che in realtà P_k dipende solo *dal raggio*, non dal vettore: infatti se si moltiplica $|k\rangle$ per un fattore di fase $e^{i\varphi}$, il duale $\langle k|$ risulta moltiplicato per $e^{-i\varphi}$ e perciò P_k resta invariato.

Possiamo dunque riscrivere la (1-6)

$$\sum_k P_k = I$$

che prende il nome di *relazione di completezza*, ed esprime il fatto che i vettori $|k\rangle$ formano una base, ossia che ogni vettore è combinazione di questi.

I P_k hanno altre proprietà interessanti. In primo luogo, calcoliamo

$$P_k^2 = P_k P_k = |k\rangle\langle k| \cdot |k\rangle\langle k| = |k\rangle\langle k|k\rangle\langle k| = |k\rangle\langle k| = P_k.$$

Dunque i P_k sono *idempotenti*.

Cerchiamo ora P_k^+ . Per definizione dovrà essere

$$\langle u|P_k^+|v\rangle = \langle v|P_k|u\rangle^* = \langle v|k\rangle^* \langle k|u\rangle^* = \langle u|k\rangle \langle k|v\rangle = \langle u|P_k|v\rangle$$

e da qui si vede che $P_k^+ = P_k$: i P_k sono *autoaggiunti*.

Chiameremo in seguito *proiettore* ogni op. a.a. idempotente. Per ragioni che saranno chiare in seguito, i proiettori del particolare tipo $|k\rangle\langle k|$ si chiamano *unidimensionali* o *puri*.

Autovalori, autovettori, autostati

Richiamiamo la definizione di autovettore e autovalore di un op. A : si dice che $|A'\rangle \neq 0$ è autovettore di A con autovalore A' se

$$A |A'\rangle = A' |A'\rangle.$$

Si osservi la notazione: è tradizionale designare un autovettore con l'autovalore cui appartiene. Di regola useremo per gli autovettori lo stesso simbolo dell'op., con uno o più apici.

Si dimostra che gli autovalori di un op. hermitiano *sono reali* e che gli autovettori appartenenti ad autovalori diversi *sono ortogonali*.

Va osservato che se $|A'\rangle$ è autovettore di A per l'autovalore A' , lo stesso è vero per qualsiasi suo multiplo scalare: quindi a ogni autovalore è associato l'intero sottospazio unidimensionale così generato. In particolare, tutti i vettori del raggio unitario, ossia dello stato corrispondente. È perciò naturale parlare di *autostato*.

Può però accadere che gli autovettori associati a un dato autovalore formino un sottospazio di \mathcal{H} di dimensione $n > 1$. In questo caso si dice che l'autovalore è *degenere*, con degenerazione n (o n volte degenere). Allora anche l'autostato non è unico.

Se \mathcal{H} è finito si dimostra che *ogni op. hermitiano possiede una base* (ortonormale) *di autovettori*. Non è detto che tale base sia unica, come è mostrato dal caso limite dell'op. I , per il quale ogni base va bene. Se e solo se gli autovalori sono tutti non degeneri, ossia se esistono tanti autovalori distinti quanta la dimensione di \mathcal{H} , allora la base è unica.

Se \mathcal{H} è infinito, la situazione è ben più complicata: può accadere che un op. a.a. abbia un'infinità numerabile di autovalori e di autovettori che formano

una base; ma può anche accadere che non abbia affatto autovettori, e sono possibili molti casi intermedi. Il teorema valido per spazi finiti si generalizza (von Neumann) nella forma di *decomposizione spettrale*, ma non è qui il caso di occuparsene.

È utile il seguente risultato: *gli autovalori di un proiettore possono essere solo 0 e 1*. Sia infatti P il proiettore, $|P'\rangle$ un suo autovettore per l'autovalore P' . Da $P^2 = P$, applicando ambo i membri a $|P'\rangle$, si ottiene $P'^2 |P'\rangle = P' |P'\rangle$. Dato che il vettore $|P'\rangle$ non è nullo, deve essere $P'^2 = P'$. ■

Sia P un proiettore, \mathcal{S} il s.s. di \mathcal{H} appartenente all'autovalore 1 di P . Ciò significa che per ogni $|x\rangle \in \mathcal{S}$ è $P|x\rangle = |x\rangle$. Sia poi $|1k\rangle, |0l\rangle$ una base di autovettori di P : $|1k\rangle$ appartengono all'autovalore 1, $|0l\rangle$ all'autovalore 0. Dunque gli $|1k\rangle$ formano una base di \mathcal{S} , gli $|0l\rangle$ una base del complemento ortogonale \mathcal{S}' . Per un generico $|x\rangle$ sarà

$$|x\rangle = \sum_k |1k\rangle \langle 1k|x\rangle + \sum_l |0l\rangle \langle 0l|x\rangle.$$

Se applichiamo P :

$$P|x\rangle = \sum_k P|1k\rangle \langle 1k|x\rangle + \sum_l P|0l\rangle \langle 0l|x\rangle = \sum_k |1k\rangle \langle 1k|x\rangle \quad (1-7)$$

perché per definizione $P|1k\rangle = |1k\rangle$ mentre $P|0l\rangle = 0$. La (1-7) mostra che

$$P = \sum_k |1k\rangle \langle 1k|,$$

e questa insieme alla (1-6) fornisce

$$I - P = \sum_l |0l\rangle \langle 0l|.$$

Ma la (1-7) si legge anche in un altro modo. Sappiamo che ogni vettore $|x\rangle$ può essere scomposto, in modo unico, nella somma di due vettori, uno $|x1\rangle$ appartenente a \mathcal{S} , l'altro $|x0\rangle$ appartenente a \mathcal{S}' . L'effetto di P su $|x\rangle$ è di cancellare $|x0\rangle$ e lasciare inalterato $|x1\rangle$: in altre parole, P effettua la *proiezione ortogonale* di un qualsiasi vettore nel suo sottospazio all'autovalore 1. Ecco giustificato il nome di proiettore.

Ovviamente l'argomento si può invertire: dato un s.s. di \mathcal{H} , ad esso si associa un ben preciso proiettore che ha autovalore 1 su quel s.s. e autovalore 0 sul s.s. ortogonale. C'è dunque una corrispondenza biunivoca fra proiettori e s.s.

Sia A un'oss., e $|k\rangle$ una base di autovettori con gli autovalori $A^{(k)}$. È facile dimostrare che si può scrivere A come una somma:

$$A = \sum_k A^{(k)} P_k = \sum_k |k\rangle A^{(k)} \langle k|. \quad (1-8)$$

Basta infatti prendere un generico vettore $|x\rangle$, svilupparlo nella base $|k\rangle$, e applicare A .

Concludiamo questo argomento enunciando un problema: abbiamo visto che ogni oss. ha una base di autovettori. Se abbiamo due diverse oss., ciascuna avrà la sua base di autovettori; ma possono essere la stessa? Sotto quali condizioni? La risposta sta nel seguente teorema, che non dimostriamo: *condizione nec. e suff. perché due oss. A, B abbiano una base comune di autovettori è che esse commutino:*

$$[A, B] = AB - BA = 0.$$

Decomposizione spettrale

Possiamo formulare la (1-8) in un altro modo, più espressivo. Allo scopo, osserviamo che le somme nella (1-8) contengono più termini con lo stesso $A^{(k)}$ se questo autovalore è degenere, e che la somma dei corrispondenti P_k è ancora un proiettore. Infatti $P_k = |k\rangle\langle k|$ e posto provvisoriamente

$$Q = \sum P_k = \sum |k\rangle\langle k|$$

con la somma estesa a un qualsiasi insieme di k , avremo

$$Q^2 = \sum P_k \sum P_l = \sum_{kl} |k\rangle\langle k| |l\rangle\langle l| = \sum_{kl} |k\rangle\langle k|l\rangle\langle l| = \sum_k |k\rangle\langle k| = Q$$

per l'ortonormalità dei $|k\rangle$.

Indichiamo allora con $\mathcal{S}^{(k)}$ il s.s. di \mathcal{H} corrispondente all'autovalore $A^{(k)}$, e ridefiniamo P_k come il proiettore associato a $\mathcal{S}^{(k)}$; il che è quanto dire che ogni vettore di $\mathcal{S}^{(k)}$ appartiene all'autovalore 1 di P_k , mentre ogni vettore del suo complemento ortogonale, e quindi ogni vettore di $\mathcal{S}^{(l)}$ per $l \neq k$, appartiene all'autovalore 0. Con questa nuova notazione la (1-8) si legge come segue: l'oss. A è la somma dei proiettori associati ai s.s. $\mathcal{S}^{(k)}$, moltiplicati ciascuno per il corrispondente autovalore.

Questa si chiama la *decomposizione spettrale* dell'osservabile A , e si dimostra (von Neumann) che in una forma più generale la stessa decomposizione vale per qualsiasi op. a.a., anche in dimensione infinita e anche se l'op. non è limitato.