

VII. EVOLUZIONE TEMPORALE IN MECCANICA QUANTISTICA

L'evoluzione temporale in meccanica quantistica è governata dall'equazione di Schrödinger: essa è postulata come equazione d'onda per determinare la funzione che descrive il sistema in esame al variare del tempo. Nella sua costruzione interviene in modo essenziale la hamiltoniana del sistema: nella trattazione elementare si parte dalla hamiltoniana classica e la si reinterpreta in termini operatoriali secondo regole di quantizzazione che associano a ogni variabile dinamica classica un operatore autoaggiunto. Il tempo, che non è un osservabile, rimane anche in meccanica quantistica un parametro che serve a etichettare la funzione del sistema nei successivi istanti della sua evoluzione. Questo modo di procedere, che va sotto il nome di *quantizzazione canonica*, è quello seguito finora anche nella formulazione di Dirac basata sullo spazio di Hilbert astratto: il ket che rappresenta il sistema è soggetto all'equazione di Schrödinger che lo modifica nel tempo. Siccome però, per motivi interpretativi, la norma di questo ket deve mantenersi costante, l'evoluzione temporale in definitiva può essere visualizzata come una rotazione nello spazio di Hilbert dello stato che descrive il sistema. Tuttavia, l'analisi di questa rotazione e il rispetto dei postulati fondamentali della meccanica quantistica permettono di individuare descrizioni alternative equivalenti, in cui la dipendenza dal tempo può essere convenientemente attribuita non solo allo stato del sistema, come nell'usuale descrizione di Schrödinger, ma anche agli operatori o contemporaneamente agli stati e agli operatori. Si ottengono così due altri tipi di descrizione: quella di Heisenberg e quella di Dirac.

D'altra parte può essere utile approfondire l'esame del formalismo per comprendere meglio i legami con la descrizione classica e scoprire che anche in meccanica quantistica, accanto a una formulazione hamiltoniana, è possibile una formulazione basata sulla lagrangiana. Questa è la via seguita da Richard Phillips Feynman (1918–1988) con la tecnica dell'integrale su tutti i possibili cammini nello spazio delle fasi per ottenere l'ampiezza di probabilità di un certo evento. In questo modo, il concetto

di traiettoria su cui si fondava tutta la meccanica classica, e che era stato demolito dalla critica di Heisenberg, riemerge come caso limite, fisicamente realizzabile con la massima probabilità fra tutti quelli possibili ¹.

Il capitolo, si conclude con un accenno all'estensione della trattazione quantistica a sistemi non descrivibili mediante un vettore di stato nello spazio di Hilbert: questa situazione si verifica quando l'informazione sul sistema non è la massima consentita dai postulati quantistici, per cui occorre coinvolgere aspetti statistici classici che si sovrappongono a quelli quantistici. Dopo la discussione dei cosiddetti casi puri e casi miscela, viene perciò introdotto l'operatore densità associato al sistema: esso consente una descrizione unificata dell'evoluzione temporale sia dei casi puri, sia dei casi miscela, con un naturale collegamento con la termodinamica e la meccanica statistica classica.

VII.1. Descrizione di Schrödinger

Nella *descrizione di Schrödinger* l'evoluzione temporale di un sistema quantistico isolato è governata dall'equazione

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle, \quad (1.1)$$

in cui per ipotesi la hamiltoniana H del sistema non dipende esplicitamente dal tempo e il ket $|\Psi(t)\rangle$ è un elemento dello spazio di Hilbert astratto. L'equazione di Schrödinger (1.1) è un'equazione differenziale del primo ordine nel tempo: perciò, una volta noto il ket $|\Psi(t_0)\rangle$ a un istante particolare t_0 , che viene assunto come istante iniziale, essa permette di ricavare il ket $|\Psi(t)\rangle$ a ogni successivo istante. In questo senso l'evoluzione dello stato del sistema risulta perfettamente deterministica, almeno fintanto che il sistema rimane sottoposto alla sola sua hamiltoniana e non viene perturbato dall'osservatore, per esempio attraverso un processo di misura che introduce effetti incontrollabili e irreversibili come quello della riduzione di $|\Psi(t)\rangle$.

Secondo i requisiti interpretativi, il ket $|\Psi(t)\rangle$ deve mantenersi normalizzato durante la sua evoluzione temporale all'interno dello spazio di Hilbert. Allora l'insieme dei ket di norma unitaria che rappresentano il sistema nei vari istanti successivi può essere riguardato come le successive posizioni nello spazio di Hilbert occupate dal ket iniziale, come se l'evoluzione temporale fosse una *rotazione* indotta da una trasformazione unitaria dipendente dal tempo. Determinare questa trasformazione deve risultare equivalente alla risoluzione della (1.1).

Si scelga come istante iniziale $t_0 = 0$. Allora deve essere

¹ R.P. Feynman: *The Space-Time Approach to Non-relativistic Quantum Mechanics [L'approccio spazio-temporale alla meccanica quantistica non relativistica]*, *Reviews of Modern Physics* **20** (1948) 367–387. R.P. Feynman e A.R. Hibbs: *Quantum Mechanics and Path Integrals*, Mc-Graw Hill, New York, 1964. Feynman condivise il premio Nobel per la Fisica del 1965 con Sin-Itiro Tomonaga (1906–1979) e Julian Seymour Schwinger (1918–1994) per il fondamentale contributo dato all'elettrodinamica quantistica.

Descrizione di Schrödinger

$$|\Psi(t)\rangle = U_S(t)|\Psi(0)\rangle, \quad (1.2)$$

dove l'operatore $U_S(t)$ è un operatore unitario,

$$U_S^\dagger(t) = U_S^{-1}(t), \quad (1.3)$$

con l'ovvia condizione iniziale

$$U_S(0) = \mathbb{1}. \quad (1.4)$$

Con l'inserimento della (1.2) nella (1.1), questa si traduce in un'equazione di definizione per $U_S(t)$,

$$i\hbar \frac{\partial U_S}{\partial t} = H U_S, \quad (1.5)$$

la cui soluzione risulta

$$U_S(t) = e^{-iHt/\hbar}. \quad (1.6)$$

La (1.6) rappresenta dunque un operatore unitario che soddisfa la (1.4) e che costituisce l'*operatore di evoluzione temporale* nella descrizione di Schrödinger.

Esercizio 1.1

Verificare che, se si sceglie come istante iniziale per la descrizione di Schrödinger l'istante $t = t_0$, l'espressione dell'operatore di evoluzione temporale diventa

$$U_S(t - t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}. \quad (1.7)$$

Esercizio 1.2

Tenendo presente che la forma esponenziale dell'operatore di evoluzione temporale nella (1.6) (o nella (1.7)) è solo simbolica per indicare uno sviluppo in serie,

$$U_S(t) = \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{-iHt}{\hbar} \right)^n, \quad (1.8)$$

verificare che $U_S(t)$ è unitario.

Esercizio 1.3

Verificare che, se H non dipende esplicitamente dal tempo, $U_S(t)$ commuta con H :

$$[H, U_S(t)] = 0. \quad (1.9)$$

Esercizio 1.4

Verificare che per una hamiltoniana $H(t)$ dipendente dal tempo, l'operatore di evoluzione temporale può scriversi nella seguente forma simbolica:

$$U_S(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right\}. \quad (1.10)$$

Esercizio 1.5

Perché nella (1.7) l'operatore di evoluzione temporale $U_S(t - t_0)$ dipende solo dalla differenza $t - t_0$?

La (1.2) è perfettamente equivalente all'equazione di Schrödinger nel fornire lo stato $|\Psi(t)\rangle$, una volta noto lo stato $|\Psi(0)\rangle$ iniziale. In particolare è facile ritrovare la soluzione generale (IV.3.11) per l'equazione di Schrödinger. Si supponga infatti che sia

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad (1.11)$$

dove per semplicità si considera uno spettro puramente discreto; allora lo stato iniziale può essere sviluppato sulla base $\{|n\rangle\}$,

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n a_n |n\rangle, \quad (1.12)$$

e, per la (1.2) e la (1.6), lo stato all'istante t diventa

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-iHt/\hbar} \sum_n a_n |n\rangle \\ &= \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle, \end{aligned} \quad (1.13)$$

in accordo con la (IV.3.11).

Esercizio 1.6

Fissati gli istanti t_1 e t_2 , con $t_2 > t_1$, verificare che se, per una hamiltoniana indipendente dal tempo, all'istante t_1 la funzione d'onda fosse $\Psi^*(\mathbf{r}, t_2)$, all'istante t_2 sarebbe $\Psi^*(\mathbf{r}, t_1)$. Qual è il significato di questo risultato?

VII.2. Il propagatore dell'equazione di Schrödinger

L'equivalenza tra la (1.2) e la (1.1) può essere messa in miglior luce nella rappresentazione delle posizioni, mostrando che la (1.2) è la forma integrale dell'equazione

differenziale (1.1). A tale scopo, si costruisca nello spazio delle posizioni la funzione d'onda che descrive la particella nel punto \mathbf{r}_2 all'istante t_2 a partire dallo stato iniziale $|\Psi(t_1)\rangle$ all'istante t_1 :

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}_2, t_2) &= \langle \mathbf{r}_2 | \Psi(t_2) \rangle \\ &= \langle \mathbf{r}_2 | e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar} | \Psi(t_1) \rangle.\end{aligned}\quad (2.1)$$

Inserendo la spettralizzazione dell'operatore identità nello spazio delle posizioni, si ha

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}_2, t_2) &= \int d\mathbf{r}_1 \langle \mathbf{r}_2 | e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar} | \mathbf{r}_1 \rangle \langle \mathbf{r}_1 | \Psi(t_1) \rangle \\ &= \int d\mathbf{r}_1 K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) \Psi(\mathbf{r}_1, t_1),\end{aligned}\quad (2.2)$$

dove si è definito

$$K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = \langle \mathbf{r}_2 | e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar} | \mathbf{r}_1 \rangle. \quad (2.3)$$

La forma (2.2) mostra chiaramente che la soluzione dell'equazione di Schrödinger all'istante t_2 può essere ottenuta dalla soluzione di un'equazione integrale: se si conosce all'istante iniziale t_1 la particolare soluzione dell'equazione di Schrödinger $\Psi(\mathbf{r}_1, t_1)$, la funzione d'onda per la particella nel punto \mathbf{r}_2 all'istante t_2 è ottenibile sommando tutti i contributi che provengono dalle varie posizioni \mathbf{r}_1 iniziali, ciascuno pesato con la funzione K della (2.3). Questa funzione è l'elemento di matrice dell'operatore di evoluzione temporale nella rappresentazione delle posizioni e, per costruzione, rappresenta l'*ampiezza di probabilità* che la particella, localizzata in \mathbf{r}_1 all'istante t_1 , si trovi all'istante t_2 nel punto \mathbf{r}_2 . Con la sua dipendenza dal tempo, K costituisce il nucleo dell'equazione integrale che descrive la propagazione della soluzione da \mathbf{r}_1 all'istante t_1 verso \mathbf{r}_2 all'istante t_2 . Per questo motivo K viene indicato come il *propagatore* associato all'equazione di Schrödinger.

Nella sua forma integrale la (2.2) ricorda quanto succede in ottica col principio di Huyghens, che stabilisce il criterio con cui ricostruire il fronte d'onda a un certo istante come involuppo di tutte le onde emanate dai punti del fronte d'onda a un istante precedente. In questa analogia, l'equazione differenziale di Schrödinger corrisponde alle equazioni di Maxwell.

Ricorrendo agli autostati della hamiltoniana individuati dalla (1.11) è possibile dare una forma esplicita al propagatore:

$$K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = \sum_{nm} \langle \mathbf{r}_2 | n \rangle \langle n | e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar} | m \rangle \langle m | \mathbf{r}_1 \rangle,$$

cioè

$$K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = \sum_n u_n(\mathbf{r}_2) u_n^*(\mathbf{r}_1) e^{-iE_n(t_2-t_1)/\hbar}, \quad (2.4)$$

dove

$$u_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | n \rangle \quad (2.5)$$

sono gli autostati della hamiltoniana nella rappresentazione delle posizioni. La (2.4) indica che il propagatore coinvolge tutto lo spettro della hamiltoniana e perciò la sua determinazione è equivalente a risolvere l'equazione agli autovalori per H .

Il propagatore soddisfa l'equazione di Schrödinger, come si può verificare applicando a K , scritto nella forma (2.4), l'operatore

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - H_2,$$

dove H_2 va inteso come l'operatore hamiltoniano in cui gli operatori di posizione \mathbf{r} e di impulso $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ agiscono sulla coordinata di posizione 2. Si ottiene infatti

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - H_2 \right) K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = 0. \quad (2.6)$$

Per questa ragione e grazie al suo uso in un'equazione del tipo della (2.2), il propagatore costituisce la *soluzione fondamentale* dell'equazione di Schrödinger.

Da un punto di vista strettamente matematico la (2.2) vale anche per $t_2 < t_1$. Tuttavia l'evoluzione temporale regolata dall'equazione di Schrödinger ha significato solo per $t_2 > t_1$, perché t_1 deve coincidere con l'istante in cui il sistema viene preparato inizialmente. Perciò conviene esplicitamente indicare questa limitazione sui valori di t nella definizione (2.3) del propagatore e definire il *propagatore ritardato*:

$$\tilde{K}(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = \langle \mathbf{r}_2 | e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar} | \mathbf{r}_1 \rangle \Theta(t_2 - t_1), \quad (2.7)$$

dove la funzione $\Theta(t_2 - t_1)$ è la funzione gradino di Heaviside²:

$$\Theta(t_2 - t_1) = \begin{cases} 1, & t_2 > t_1, \\ 0, & t_2 < t_1. \end{cases} \quad (2.8)$$

Tenendo presente la (2.6) e la proprietà (cfr. eq. (A.31))

$$\frac{\partial}{\partial t_2} \Theta(t_2 - t_1) = \delta(t_2 - t_1),$$

il propagatore ritardato \tilde{K} soddisfa l'equazione

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - H_2 \right) \tilde{K}(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = i\hbar \delta(t_2 - t_1) K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1).$$

² Oliver Heaviside (1850–1925) introdusse la funzione gradino, che prende il suo nome, per descrivere segnali transienti di tensione nello studio della risposta di un circuito elettrico.

O. Heaviside: *On operators in physical mathematics. I. & II.* [Sugli operatori in fisica matematica. I. & II.], Proceedings of the Royal Society of London **52** (1893) 504–529; **54** (1893) 105–143.

Il propagatore dell'equazione di Schrödinger

Per la presenza della $\delta(t_2 - t_1)$ si può sostituire $t_2 - t_1$ con zero nell'espressione esplicita (2.4) del propagatore K e quindi eseguirvi la somma su n ,

$$\sum_n u_n(\mathbf{r}_2)u_n^*(\mathbf{r}_1) = \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1),$$

col risultato finale:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - H_2\right) \tilde{K}(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = i\hbar \delta(t_2 - t_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1). \quad (2.9)$$

La (2.9) va risolta con la condizione al contorno

$$\tilde{K}(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = 0, \quad t_2 < t_1. \quad (2.10)$$

La soluzione di equazioni del tipo (2.9), in cui l'operatore lineare derivativo applicato a una funzione nel primo membro dell'equazione risulta proporzionale a una delta di Dirac, viene chiamata *funzione di Green*³. Per quanto detto in precedenza, le funzioni di Green servono a trovare le soluzioni della corrispondente equazione differenziale in cui il secondo membro sia zero, trasformandola in equazione integrale.

Esercizio 2.1

Verificare che per una hamiltoniana indipendente dal tempo K e \tilde{K} dipendono solo dalla differenza $t_2 - t_1$.

Esercizio 2.2

Nelle condizioni dell'Esercizio precedente costruire $K(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; E)$ e $\tilde{K}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; E)$ mediante una trasformata di Fourier (spaziale) di $K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1)$ e $\tilde{K}(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1)$, rispettivamente.

Esercizio 2.3

Verificare che per un sistema con invarianza traslazionale e con hamiltoniana indipendente dal tempo (come nel caso della particella libera) K e \tilde{K} dipendono solo dalle differenze $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ e $t_2 - t_1$.

³ Il nome deriva da quello del matematico George Green (1793–1841) che introdusse questo metodo per la risoluzione di equazioni differenziali in un saggio pubblicato a Nottingham nel 1828 (*An Essay on the Application of Mathematical Analysis to the Theory of Electricity and Magnetism [Saggio su un'applicazione di analisi matematica alla teoria dell'elettricità e del magnetismo]*), in cui Green sottolineava il ruolo della funzione potenziale nello studio dei fenomeni elettrici e magnetici. Nello stesso saggio compare anche il lemma di Green relativo all'integrale di volume di una divergenza che si trasforma in un integrale del flusso attraverso la superficie che racchiude il volume stesso.

Esercizio 2.4

Nelle condizioni dell'Esercizio precedente costruire $K(\mathbf{p}, E)$ e $\tilde{K}(\mathbf{p}, E)$ come trasformata di Fourier (spazio-temporale) di $K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1)$ e $\tilde{K}(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1)$, rispettivamente.

Esercizio 2.5

Verificare che $\tilde{K}(\mathbf{p}, E)$ ottenuto nell'Esercizio precedente soddisfa l'equazione

$$(E - H)\tilde{K} = \mathbf{1}.$$

[Suggerimento: si tenga presente per confronto la (2.9).]

Esempio 2.1

In questo esempio si calcola il propagatore per la particella libera: $H = p^2/2m$. Partendo dalla definizione (2.3), si ha

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) &= \langle \mathbf{r}_2 | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} (t_2 - t_1) \right] | \mathbf{r}_1 \rangle \\ &= \int d\mathbf{p}' \int d\mathbf{p}'' \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{p}'' \rangle \langle \mathbf{p}'' | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} (t_2 - t_1) \right] | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r}_1 \rangle \\ &= \int d\mathbf{p}' \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{p}' \rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{p'^2}{2m} (t_2 - t_1) \right] \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r}_1 \rangle, \end{aligned}$$

dove si è inserita una completezza mediante gli autostati simultanei dell'impulso e della hamiltoniana. Tenendo presente che nella rappresentazione delle posizioni questi sono (Esempio VI.1.2)

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi \hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar}, \quad (2.11)$$

si ottiene

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) &= \frac{1}{(2\pi \hbar)^3} \int d\mathbf{p}' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p}' \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) - \frac{p'^2}{2m} (t_2 - t_1) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

L'integrale nella (2.12) può essere eseguito analiticamente. Aggiungendo e sottraendo nell'esponente dell'integrando la stessa quantità, si trova

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) &= \frac{1}{(2\pi \hbar)^3} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)^2}{(t_2 - t_1)} \right] \\ &\quad \times \int d\mathbf{p}' \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \frac{t_2 - t_1}{2m} \left[\mathbf{p}' - \frac{m(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{t_2 - t_1} \right]^2 \right\}. \end{aligned}$$

Il propagatore dell'equazione di Schrödinger

Con la sostituzione di variabile

$$\mathbf{P}' = \mathbf{p}' - \frac{m(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{t_2 - t_1}$$

l'integrazione su $d\mathbf{p}'$ si trasforma in un integrale semplice su $4\pi P'^2 dP'$:

$$K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)^2}{t_2 - t_1}\right] \int_0^\infty P'^2 dP' e^{-\alpha^2 P'^2},$$

dove si è posto

$$\alpha^2 = \frac{i}{\hbar} \frac{t_2 - t_1}{2m}.$$

D'altra parte

$$\int_0^\infty dx x^2 e^{-a^2 x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4a^3},$$

per cui infine si ottiene

$$K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = \left[\frac{m}{2\pi i \hbar (t_2 - t_1)}\right]^{3/2} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)^2}{t_2 - t_1}\right]. \quad (2.13)$$

Si noti la dipendenza temporale secondo $t^{-3/2}$ del fattore che moltiplica l'esponenziale, tipica di un problema tridimensionale.

Esercizio 2.6

Calcolare il propagatore nel caso di una particella libera in una dimensione e confrontarne la dipendenza temporale con quella del caso tridimensionale.

Esercizio 2.7

Per un moto libero classico la velocità della particella risulta

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{t_2 - t_1}.$$

Verificare allora che la (2.13) può porsi nella forma

$$K(\mathbf{r}_2, t_2 | \mathbf{r}_1, t_1) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_2 - t_1)} \right)^{3/2} e^{iS(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)/\hbar}, \quad (2.14)$$

dove

$$S(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = \int_{t_1}^{t_2} dt' \mathcal{L}(\mathbf{r}, \mathbf{v}), \quad (2.15)$$

è l'azione della particella libera con lagrangiana

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2. \quad (2.16)$$

Esempio 2.2

La (2.13) rappresenta l'ampiezza di probabilità di trovare la particella localizzata in \mathbf{r}_2 all'istante t_2 , se all'istante t_1 era localizzata in \mathbf{r}_1 . In questo esempio si vuole invece costruire la funzione d'onda della stessa particella che all'istante $t_1 = 0$ è descritta da un'onda piana, autofunzione di H appartenente all'autovalore $E = p^2/2m$,

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right). \quad (2.17)$$

Per la (2.2) e la (2.13), a un istante t successivo si ottiene

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \int d\mathbf{r}' \exp\left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2t}\right] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'\right). \quad (2.18)$$

Siccome

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}' + \frac{m(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2t} = \frac{m}{2t} \left[\mathbf{r}' - \left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}t}{m} \right) \right]^2 + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{p^2}{2m}t,$$

la (2.18) diventa

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) = & \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{p^2}{2m}t \right] \right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \\ & \times \int d\mathbf{r}' \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} \left[\mathbf{r}' - \left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}t}{m} \right) \right]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Con la sostituzione

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}t}{m} \right)$$

e con lo stesso procedimento di integrazione che ha portato alla (2.13), dalla (2.19) si ottiene

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{p^2}{2m} t \right] \right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} 4\pi \int_0^\infty R^2 dR \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} R^2 \right) \\ &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{p^2}{2m} t \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Perciò la particella libera viene rappresentata ancora da un'onda piana, evoluta con il corretto fattore di fase dipendente dal tempo e dall'autovalore di energia $E = p^2/2m$. La (2.20) ha la richiesta forma, $\exp[iS(\mathbf{r}, t)/\hbar]$, con la fase data dall'azione della particella libera: $S = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et$.

VII.3. Descrizione di Heisenberg

Esistono altri tipi di descrizione dell'evoluzione temporale paralleli ed equivalenti a quella della descrizione di Schrödinger. Queste formulazioni alternative risultano possibili riconoscendo ciò che è fisicamente rilevante nella teoria, in quanto confrontabile con il risultato di un'osservazione del sistema. Gli enti matematici della teoria, come i vettori di stato e gli operatori, non sono quantità accessibili mediante un processo di misura; lo sono invece gli autovalori degli operatori e le ampiezze di probabilità che si ottengono dal prodotto scalare tra due vettori nello spazio di Hilbert. Perciò risulta accettabile ogni formulazione che preservi i prodotti scalari tra i vettori e lo spettro posseduto dagli operatori corrispondenti alle osservabili nella descrizione di Schrödinger. Queste condizioni sono soddisfatte in generale dalle trasformazioni unitarie discusse nel paragrafo VI.4: perciò una qualunque trasformazione unitaria dipendente dal tempo può essere applicata ai vettori di stato e agli operatori della descrizione di Schrödinger per costruirne un'altra in cui l'evoluzione temporale avviene secondo leggi equivalenti.

In questo paragrafo viene presentata la *descrizione di Heisenberg*, in cui la dipendenza dal tempo è imposta agli operatori, mentre i vettori di stato sono indipendenti dal tempo. In tale descrizione il vettore di stato $|\Psi_H\rangle$, indipendente dal tempo t , può essere scelto coincidente con quello della descrizione di Schrödinger $|\Psi_S(0)\rangle$ all'istante $t = 0$, in cui si è preparato il sistema. Alternativamente, $|\Psi_H\rangle$ è ottenuto dal vettore di stato $|\Psi_S(t)\rangle$ all'istante generico t mediante l'applicazione della trasformazione inversa dell'operatore di evoluzione temporale $U_S(t)$ della descrizione di Schrödinger:

$$|\Psi_H\rangle = U_S^{-1}(t)|\Psi_S(t)\rangle. \quad (3.1)$$

Di conseguenza, la dipendenza temporale va imposta agli operatori in modo da conservare inalterata la dipendenza temporale dei loro valori di aspettazione. Infatti, in accordo con la (VI.4.13), la trasformazione (3.1) impone che gli operatori F_H nella descrizione di Heisenberg siano definiti dalla seguente trasformazione sugli operatori F_S della descrizione di Schrödinger:

$$\begin{aligned} F_H(t) &= U_S^{-1}(t) F_S U_S(t) \\ &= e^{iHt/\hbar} F_S e^{-iHt/\hbar}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Anche se nella descrizione di Schrödinger gli operatori F_S associati alle osservabili fisiche sono indipendenti dal tempo, nella descrizione di Heisenberg i corrispondenti operatori $F_H(t)$ dipendono dunque dal tempo.

Esercizio 3.1

Verificare che, se non dipende esplicitamente dal tempo nella descrizione di Schrödinger, H continua a non dipendere dal tempo anche nella descrizione di Heisenberg.

L'evoluzione temporale nella descrizione di Schrödinger può essere visualizzata come una rotazione che il vettore di stato normalizzato esegue nello spazio di Hilbert. Invece nella descrizione di Heisenberg il vettore di stato resta immobile: sono gli operatori che *ruotano*. Ma il fatto che l'operatore unitario responsabile della trasformazione (3.1) sia l'inverso dell'operatore di evoluzione di Schrödinger indica che questa rotazione nello spazio di Hilbert avviene in senso opposto a quella di Schrödinger. La situazione ricorda quella delle rotazioni spaziali di un corpo rigido rispetto al sistema di riferimento: si può tenere fermo il sistema di riferimento e ruotare il corpo oppure tenere fermo il corpo e ruotare il sistema di riferimento.

Derivando rispetto al tempo la (3.2), si può stabilire l'equazione di moto per gli operatori $F_H(t)$ nella descrizione di Heisenberg:

$$\begin{aligned} \frac{dF_H}{dt} &= \frac{dU_S^{-1}(t)}{dt} F_S U_S(t) + U_S^{-1}(t) F_S \frac{dU_S(t)}{dt} \\ &= \frac{i}{\hbar} U_S^{-1}(t) H F_S U_S(t) - \frac{i}{\hbar} U_S^{-1}(t) F_S H U_S(t) \\ &= \frac{i}{\hbar} U_S^{-1}(t) [H, F_S] U_S(t). \end{aligned}$$

In virtù della (1.9), si può quindi scrivere l'equazione di moto

$$i\hbar \frac{dF_H}{dt} = [F_H, H], \quad (3.3)$$

che corrisponde alle equazioni del moto classiche (I.1.19): secondo la prescrizione (IV.10.10) per il passaggio dal classico al quantistico, al posto delle variabili dinamiche classiche si sostituiscono i corrispondenti operatori e al posto della parentesi di Poisson compare il commutatore. Nella (3.3) manca un eventuale termine

$\partial F_H / \partial t$, perché per ipotesi manca una dipendenza esplicita dal tempo in F_S . In virtù di questa analogia, la descrizione di Heisenberg può considerarsi la reinterpretazione delle equazioni del moto classiche in termini operatoriali, proprio secondo quanto suggerito da Heisenberg stesso nel costruire la cosiddetta meccanica delle matrici, in cui gli operatori quantistici sono rappresentati appunto da matrici ⁴. Tuttavia, la (3.3) ha validità generale, anche quando all'operatore F non corrisponde un'analogia variabile dinamica classica.

Esercizio 3.2

Per una hamiltoniana

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

verificare che anche in meccanica quantistica si ottengono formalmente le seguenti equazioni

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V(\mathbf{r}), \quad (3.4)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad (3.5)$$

dove però le quantità vanno intese nella descrizione di Heisenberg.

Esercizio 3.3

Utilizzando i risultati dell'Esercizio precedente, ritrovare gli enunciati del teorema di Ehrenfest.

Esercizio 3.4

Definito l'operatore di distruzione $a(t)$, associato all'oscillatore armonico lineare nella descrizione di Heisenberg, verificare la sua esplicita dipendenza temporale

$$a(t) = a(0) e^{-i\omega t}, \quad (3.6)$$

risolvendo l'equazione del moto

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da(t)}{dt} &= [a(t), H] \\ &= \hbar\omega [a(t), a^\dagger(t)a(t)]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

⁴ Cfr. n. 4 p. 106.

VII.4. Descrizione di interazione

In molti problemi di interesse fisico è vantaggioso separare la hamiltoniana nella somma di due contributi,

$$H = H_0 + V, \quad (4.1)$$

quando si conoscano autostati e autovalori di H_0 . La separazione (4.1) è in linea di principio sempre possibile e può essere utilizzata per costruire un tipo di descrizione intermedio tra quella di Schrödinger (in cui la dipendenza temporale è totalmente attribuita ai vettori di stato) e quella di Heisenberg (in cui tale dipendenza è totalmente attribuita agli operatori). Tale descrizione, detta *descrizione di Dirac* o di *interazione*, si caratterizza per la ripartizione della dipendenza temporale sia sui vettori di stato $|\Psi_I(t)\rangle$, sia sugli operatori $F_I(t)$. Posto

$$U_0(t) = e^{-iH_0t/\hbar}, \quad (4.2)$$

analogamente alla (3.1) si definisce:

$$|\Psi_I(t)\rangle = U_0^{-1}(t)|\Psi_S(t)\rangle. \quad (4.3)$$

L'equazione di Schrödinger (1.1) si traduce in un'equazione per $|\Psi_I(t)\rangle$,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_I(t)\rangle = V_I(t) |\Psi_I(t)\rangle, \quad (4.4)$$

dove

$$\begin{aligned} V_I(t) &= U_0^{-1}(t) V U_0(t) \\ &= e^{iH_0t/\hbar} V e^{-iH_0t/\hbar}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Nella descrizione di interazione dunque lo stato $|\Psi_I(t)\rangle$ evolve secondo un'equazione di Schrödinger, in cui compare la hamiltoniana $V_I(t)$ costruita secondo la (4.5). Sia per la $V_I(t)$ che per un qualsiasi operatore nella descrizione di interazione,

$$F_I(t) = U_0^{-1}(t) F_S U_0(t), \quad (4.6)$$

vale un'equazione del moto della forma (3.3), ma con la sostituzione di H con H_0 : si verifica infatti che dalla (4.6) si ottiene

$$i\hbar \frac{dF_I}{dt} = [F_I(t), H_0], \quad (4.7)$$

cioè gli operatori evolvono alla Heisenberg con la hamiltoniana H_0 .

Esercizio 4.1

Verificare che per un qualunque istante t si ha

$$\langle \Psi_S(t) | F | \Psi_S(t) \rangle = \langle \Psi_H | F_H(t) | \Psi_H \rangle = \langle \Psi_I(t) | F_I(t) | \Psi_I(t) \rangle. \quad (4.8)$$

La soluzione dell'evoluzione temporale nella descrizione di interazione si può ottenere a partire dalla conoscenza dello stato $|\Psi_I(t_0)\rangle$ all'istante t_0 e considerando

$$|\Psi_I(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle, \quad (4.9)$$

dove lo stato all'istante t è ottenuto per applicazione dell'operatore di evoluzione temporale $U(t, t_0)$. Esso può ottenersi partendo dalla definizione (4.3), in cui lo stato di Schrödinger viene riferito all'istante t_0 mediante l'operatore di evoluzione temporale (1.7), e applicando poi l'inversa della (4.3):

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle &= e^{iH_0 t/\hbar} |\Psi_S(t)\rangle \\ &= e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\Psi_S(t_0)\rangle \\ &= e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} e^{-iH_0 t_0/\hbar} |\Psi_I(t_0)\rangle. \end{aligned}$$

Dal confronto di questo risultato con la (4.9) si ottiene un'espressione esplicita per l'operatore di evoluzione temporale della descrizione di interazione:

$$U(t, t_0) = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} e^{-iH_0 t_0/\hbar}. \quad (4.10)$$

L'espressione (4.10) non può ulteriormente semplificarsi, perché in generale H e H_0 non commutano. Dalla sua definizione è però facile verificare le seguenti proprietà di $U(t, t_0)$:

$$U(t, t) = \mathbb{1}, \quad (4.11)$$

$$U(t, t') U(t', t_0) = U(t, t_0) \quad (t_0 \leq t' \leq t), \quad (4.12)$$

$$U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) = U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) = \mathbb{1}. \quad (4.13)$$

D'altra parte, sempre dalla definizione (4.10), risulta anche

$$U(t, t_0) U(t_0, t) = \mathbb{1}, \quad (4.14)$$

da cui

$$U^{-1}(t, t_0) = U(t_0, t) \quad (4.15)$$

e quindi, per la (4.13),

$$U^\dagger(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0). \quad (4.16)$$

La (4.11) rappresenta la condizione iniziale per l'operatore di evoluzione temporale. La (4.12) stabilisce la possibilità di decomporre l'evoluzione temporale di un sistema in contributi intermedi, mentre la (4.15) sottolinea l'aspetto deterministico dell'equazione di Schrödinger, per la quale, in assenza di osservazione, è possibile invertire il senso di scorrimento del tempo e ritrovare lo stato $|\Psi(t_0)\rangle$ a partire dallo stato $|\Psi(t)\rangle$. Infine, la (4.16) conferma che $U(t, t_0)$ è un operatore unitario.

Derivando la (4.10) rispetto a t , si ottiene

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} &= -H_0 U(t, t_0) + e^{iH_0 t/\hbar} H e^{-iH(t-t_0)/\hbar} e^{-iH_0 t_0/\hbar} \\ &= e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar} U(t, t_0), \end{aligned}$$

cioè

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = V_I(t) U(t, t_0). \quad (4.17)$$

Questa può ritenersi un'equazione di definizione per $U(t, t_0)$. Per integrazione della (4.17) stessa, soggetta alla condizione iniziale (4.11), si ha infatti:

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') U(t', t_0). \quad (4.18)$$

La soluzione (4.18) è solo formale e traduce la (4.17) in forma integrale, inglobando automaticamente la condizione iniziale (4.11): la sua utilità è però notevole nel caso in cui l'interazione V si possa considerare piccola, tale da produrre solo una perturbazione sulla situazione descritta da H_0 nella (4.1). In tal caso infatti ha senso riscrivere la (4.18) con procedimento iterativo, sostituendo nell'integrale a secondo membro la stessa espressione (4.18) per $U(t', t_0)$,

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_I(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_I(t_1) V_I(t_2) + \dots, \quad (4.19)$$

ottenendone quindi uno sviluppo in serie di $V_I(t)$. I limiti di integrazione non sono però gli stessi per tutti gli integrali: l'integrale su t_n è limitato superiormente da t_{n-1} . Inoltre nella (4.19) l'ordine con cui compaiono gli operatori $V_I(t)$ è importante, perché non commutano tra di loro.

All'espressione (4.19) si può però dare una forma più simmetrica⁵. A tale scopo si consideri l'integrale doppio nella (4.19). Scambiando dapprima l'ordine di

⁵ Freeman John Dyson (n. 1923): *The Radiation Theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman* [Le teorie della radiazione di Tomonaga, Schwinger e Feynman], *Physical Review* **75** (1949) 486–502; *The S Matrix in Quantum Electrodynamics* [La matrice S in elettrodinamica quantistica], *Physical Review* **75** (1949) 1736–1755.

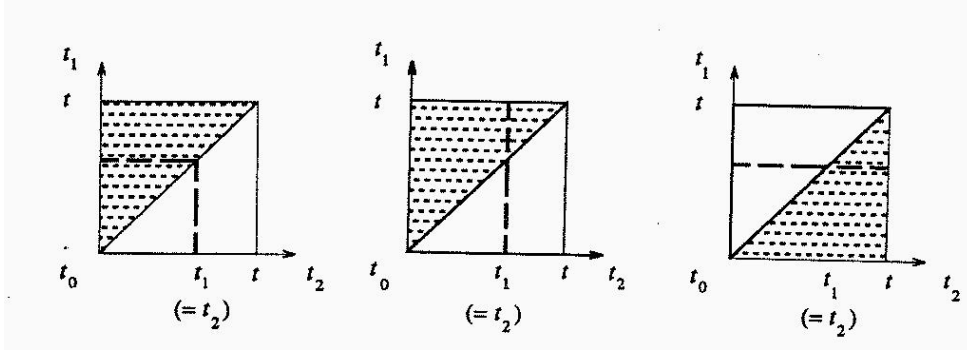


Fig. 4.1. Regioni di integrazione per la (4.20).

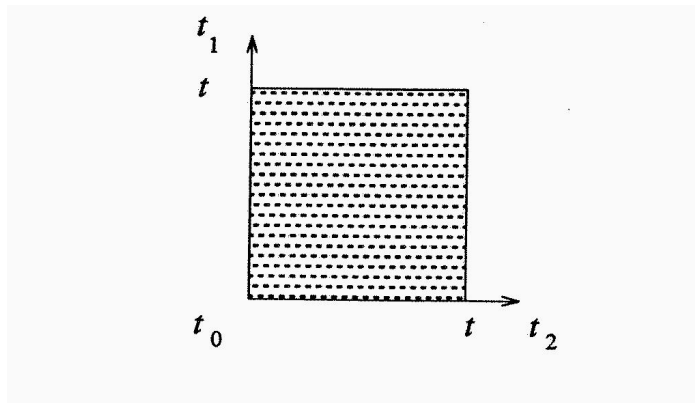


Fig. 4.2. Regione di integrazione per la (4.22).

integrazione (ma conservando $t_2 \leq t_1$) e scambiando poi i nomi delle variabili di integrazione, si ottiene

$$\begin{aligned}
 & \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_I(t_1) V_I(t_2) \\
 &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 V_I(t_1) V_I(t_2) \quad (4.20) \\
 &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 V_I(t_2) V_I(t_1),
 \end{aligned}$$

come si può verificare dalla fig. 4.1, per quanto riguarda i limiti e le regioni di integrazione. Di fatto si osserva che si può integrare sul triangolo tratteggiato in fig. 4.1 e ottenere sempre lo stesso risultato, pur di considerare bene i limiti e l'ordine di integrazione. Conviene allora introdurre l'operatore P , detto *operatore di*

ordinamento cronologico, che ha l'effetto di riordinare gli operatori secondo tempi decrescenti:

$$P[V_I(t_1)V_I(t_2)] = \begin{cases} V_I(t_1)V_I(t_2), & t_1 \geq t_2, \\ V_I(t_2)V_I(t_1), & t_1 \leq t_2, \end{cases} \quad (4.21)$$

In tal modo l'integrale (4.20) può risciversi:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_I(t_1)V_I(t_2) \\ = \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 P[V_I(t_1)V_I(t_2)], \end{aligned} \quad (4.22)$$

in cui ora i limiti sono sempre fissati a t_0 e t . L'integrazione sull'intero quadrato (fig. 4.2) coinvolge una regione di integrazione doppia rispetto al triangolo originale: di qui il fattore 2 a denominatore nella (4.22). Inoltre l'operatore cronologico garantisce che i due triangoli contribuiscano all'integrale in uguale misura.

Generalizzando questo ragionamento al caso di un integrale n -plo si può infine scrivere lo *sviluppo di Dyson* per l'operatore di evoluzione temporale nella forma

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n P[V_I(t_1) \dots V_I(t_n)], \quad (4.23)$$

in cui tutti gli integrali sono estesi tra t_0 e t . Il fattore $n!$ tiene conto della molteplicità delle regioni di uguale contributo nell'integrale n -plo. In modo simbolico, la (4.23) può essere riscritta

$$U(t, t_0) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' P[V_I(t')]\right\}, \quad (4.24)$$

dove l'esponenziale va inteso nel senso dello sviluppo in serie (4.23).

Esercizio 4.2

Scrivere il propagatore nella descrizione di interazione.

VII.5. Formulazione di Feynman

La formulazione di Feynman si basa sul riconoscimento che la quantità rilevante in meccanica quantistica è l'*ampiezza di probabilità* che si verifichi un certo *evento* nello spazio-tempo. Per esempio, l'evento può essere la registrazione dell'arrivo di

un elettrone su di uno schermo: la probabilità di questo evento si ottiene dal modulo quadrato dell'ampiezza di probabilità, che in generale è un numero complesso.

Lavorare con le ampiezze di probabilità, anziché direttamente con le probabilità come in fisica classica, comporta una descrizione dei fenomeni notevolmente diversa. Se l'elettrone nel suo percorso verso lo schermo ha dovuto attraversare una delle due fenditure praticate in una parete interposta tra la sorgente di elettroni e lo schermo, come nell'esperimento di Young già discusso nel paragrafo III.5, classicamente esistono due cammini alternativi corrispondenti allo stesso evento, ciascuno dei quali caratterizzato quantisticamente da una sua ampiezza di probabilità. Se l'alternativa è reale e non si sa davvero quale sia il cammino effettivamente percorso dall'elettrone, i postulati quantistici impongono che l'ampiezza di probabilità totale sia la *somma* delle ampiezze di probabilità relative a ciascun cammino. Di conseguenza, nella probabilità totale compaiono dei termini di interferenza tra le alternative, come nella (III.5.4), responsabili delle frange di diffrazione rivelate sullo schermo (fig. III.5.2).

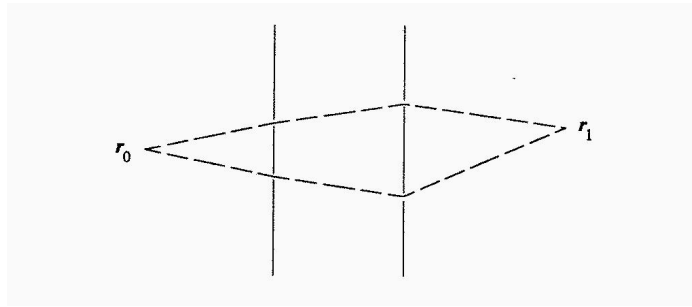


Fig. 5.1. Possibili cammini parziali tra r_0 e r_1 nell'attraversamento successivo di due pareti con fenditure.

D'altra parte, se tra sorgente e schermo sono interposte in successione due pareti con le fenditure (fig. 5.1), l'evento dell'arrivo dell'elettrone sullo schermo può essere decomposto in due stadi intermedi: dapprima l'elettrone deve attraversare la prima parete secondo uno dei cammini possibili dalla sorgente alla prima parete e quindi, attraversata la prima parete, l'elettrone raggiunge lo schermo attraversando la seconda parete secondo uno dei possibili cammini dalla prima parete allo schermo. A ciascuno dei cammini parziali è associata un'ampiezza di probabilità; l'ampiezza di probabilità totale risulta il *prodotto* delle due ampiezze di probabilità relative ai due stadi intermedi del cammino percorso. Questa legge di composizione delle ampiezze di probabilità è contenuta per esempio nella proprietà (4.12) dell'operatore di evoluzione temporale della descrizione d'interazione, ma è una proprietà generale della meccanica quantistica, soddisfatta anche dall'operatore di evoluzione temporale (1.6) o (1.7) associato all'equazione di Schrödinger:

$$\begin{aligned}
 U_S(t - t_0) &= e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \\
 &= e^{-iH(t-t_1)/\hbar} e^{-iH(t_1-t_0)/\hbar} \\
 &= U_S(t - t_1)U_S(t_1 - t_0).
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Se si vuole studiare nello spazio-tempo il verificarsi di un certo evento, come l'arrivo dell'elettrone sullo schermo, ci si può allora ricondurre alla determinazione del propagatore (2.3) e utilizzarne le proprietà caratteristiche delle ampiezze di probabilità. In particolare, se si vuole l'ampiezza di probabilità che l'elettrone, emesso all'istante t_0 nel punto \mathbf{r}_0 , giunga all'istante t nel punto \mathbf{r} , occorre valutare il propagatore $K(\mathbf{r}, t|\mathbf{r}_0, t_0)$: per la (5.1) si può pensare di decomporre l'intervallo di tempo $t-t_0$ in intervalli parziali, scegliendo N istanti intermedi t_i ($i = 1, 2, \dots, N$), equispaziati di Δt ,

$$t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{N-1} < t_N < t. \tag{5.2}$$

Corrispondentemente, il cammino da \mathbf{r}_0 a \mathbf{r} viene spezzato nei contributi parziali relativi alle varie posizioni intermedie \mathbf{r}_i ($i = 1, 2, \dots, N$), raggiunte negli istanti t_i . Allora, utilizzando la spettralizzazione dell'identità nella rappresentazione delle posizioni, si ottiene

$$\begin{aligned}
 K(\mathbf{r}, t|\mathbf{r}_0, t_0) &= \int d\mathbf{r}_N \int d\mathbf{r}_{N-1} \dots \int d\mathbf{r}_2 \int d\mathbf{r}_1 K(\mathbf{r}, t|\mathbf{r}_N, t_N) \\
 &\quad \times K(\mathbf{r}_N, t_N|\mathbf{r}_{N-1}, t_{N-1}) \dots K(\mathbf{r}_2, t_2|\mathbf{r}_1, t_1) K(\mathbf{r}_1, t_1|\mathbf{r}_0, t_0).
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

La (5.3) è coerente col fatto che le ampiezze di probabilità relative ai vari cammini si sommano, mentre l'ampiezza relativa a un particolare cammino è il prodotto delle ampiezze che si riferiscono ai vari tratti di cammino.

L'ampiezza di probabilità totale deve risultare dalla somma dei contributi relativi a tutti i possibili cammini che congiungono il punto iniziale a quello finale: perciò non basta considerare un numero finito di intervalli temporali tra t_0 e t , ma si deve far tendere $N \rightarrow \infty$ (e quindi $\Delta t \rightarrow 0$).

Per realizzare questo programma conviene considerare dapprima il contributo al propagatore che proviene da un cammino parziale per un intervallo di tempo $\Delta t = t'' - t'$ infinitesimo:

$$\begin{aligned}
 K(\mathbf{r}'', t''|\mathbf{r}', t') &= \langle \mathbf{r}'' | e^{-iH(t''-t')/\hbar} | \mathbf{r}' \rangle \\
 &= \langle \mathbf{r}'' | [\mathbb{1} - i\epsilon H] | \mathbf{r}' \rangle, \\
 &= \int d\mathbf{p}'' \langle \mathbf{r}'' | [\mathbb{1} - i\epsilon H] | \mathbf{p}'' \rangle \langle \mathbf{p}'' | \mathbf{r}' \rangle,
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

dove si è inserita la spettralizzazione dell'unità nella rappresentazione degli impulsi e si è posto

$$\epsilon = \frac{t'' - t'}{\hbar}. \quad (5.5)$$

La (5.4) può essere espressa in termini della hamiltoniana classica H_{cl} , definita dalla relazione

$$\langle \mathbf{r}'' | H | \mathbf{p}'' \rangle = \langle \mathbf{r}'' | \mathbf{p}'' \rangle H_{cl}(\mathbf{p}'', \mathbf{r}''). \quad (5.6)$$

La (5.6) è in accordo con le usuali regole di quantizzazione che permettono di far corrispondere un operatore quantistico a una variabile dinamica classica, purché nella hamiltoniana classica non figurino prodotti tra le variabili di posizione e di impulso: questa è la consueta situazione in cui la hamiltoniana classica è costituita dalla somma dell'energia cinetica e di un'energia potenziale dipendente solo dalla posizione ⁶.

Allora, con la (5.6) e ricordando che è (Esempio VI.1.2)

$$\langle \mathbf{r}'' | \mathbf{p}'' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}'' \cdot \mathbf{r}'' / \hbar}, \quad (5.7)$$

la (5.4) diventa

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}'', t'' | \mathbf{r}', t') &= \int d\mathbf{p}'' \langle \mathbf{r}'' | \mathbf{p}'' \rangle \langle \mathbf{p}'' | \mathbf{r}' \rangle [1 - i\epsilon H_{cl}(\mathbf{p}'', \mathbf{r}'')] \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}'' e^{i\mathbf{p}'' \cdot (\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') / \hbar} [1 - i\epsilon H_{cl}(\mathbf{p}'', \mathbf{r}'')]. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Nella (5.8) non si fa più alcun riferimento agli stati o agli operatori nello spazio di Hilbert, ma si è ricondotto il calcolo del propagatore a un'espressione che coinvolge esclusivamente la hamiltoniana classica.

A questo punto si può inserire la (5.8) nella (5.3), con l'intesa che N debba tendere a ∞ :

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3(N+1)}} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{r}_N \int d\mathbf{p}_N \dots \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{p}_1 \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N \mathbf{p}_{n+1} \cdot (\mathbf{r}_{n+1} - \mathbf{r}_n) \right] \prod_{n=0}^N [1 - i\epsilon H_{cl}(\mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{r}_{n+1})], \end{aligned} \quad (5.9)$$

⁶ Tuttavia si possono incontrare casi in cui ci siano prodotti tra le variabili di posizione e di impulso e occorra dare una prescrizione di ordinamento. Qui si prevede di disporre tutti gli operatori di impulso a destra degli operatori di posizione, in modo da poter soddisfare la (5.6). In realtà, esistono infinite prescrizioni possibili. L'unica che permette al propagatore di continuare a soddisfare l'equazione di Schrödinger anche in presenza di campo elettromagnetico è quella di Weyl, in cui per esempio alla variabile classica xp si fa corrispondere l'operatore quantistico simmetrizzato $\frac{1}{2}(xp + px)$.

Maurice M. Mizrahi: *The Weyl correspondence and path integrals* [La corrispondenza di Weyl e gli integrali sui cammini], Journal of Mathematical Physics **16** (1975) 2201.

Per una discussione su questo punto, oltre che in generale sulla formulazione di Feynman, si veda ad esempio il quaderno di Marco Roncadelli e Antonio Defendi: *I cammini di Feynman*, Quaderni di Fisica Teorica, Università di Pavia, 1992.

con le condizioni

$$\mathbf{r}_{N+1} = \mathbf{r}, \quad \mathbf{p}_{N+1} = \mathbf{p}. \quad (5.10)$$

Se, come nelle ipotesi, $N^{-1} \sum_n H_{cl}(\mathbf{p}_n, \mathbf{r}_n)$ nel limite $N \rightarrow \infty$ tende a un limite finito, si può sostituire $1 - i\epsilon H_{cl}$ con $\exp(-i\epsilon H_{cl})$. Perciò, avendo in mente di fare poi questo limite, si può riscrivere la (5.9) nella forma:

$$K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3(N+1)}} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{r}_N \int d\mathbf{p}_N \dots \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{p}_1 \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \Delta t \sum_{n=0}^N \left[\frac{\mathbf{p}_{n+1}(\mathbf{r}_{n+1} - \mathbf{r}_n)}{\Delta t} - H_{cl}(\mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{r}_{n+1}) \right] \right\}. \quad (5.11)$$

Nel limite $N \rightarrow \infty$ l'insieme delle variabili discrete \mathbf{r}_n e \mathbf{p}_n diventa l'insieme dei valori successivi assunti dalle funzioni $\mathbf{r}(t)$ e $\mathbf{p}(t)$ e la somma sull'indice n diventa un integrale sul tempo. Perciò finalmente l'ampiezza di transizione diventa

$$K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) = \int (D\mathbf{r}) \int (D\mathbf{p}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' [\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - H_{cl}(\mathbf{p}, \mathbf{r})] \right\}, \quad (5.12)$$

dove (nel limite $N \rightarrow \infty$)

$$(D\mathbf{r})(D\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3(N+1)}} \prod_{n=1}^N d\mathbf{r}_n d\mathbf{p} \prod_{n=1}^N d\mathbf{p}_n. \quad (5.13)$$

L'integrale temporale nella (5.12) è l'azione classica S calcolata lungo la generica traiettoria che collega la posizione iniziale a quella finale:

$$S = \int_{t_0}^t dt' [\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - H_{cl}(\mathbf{p}, \mathbf{r})]. \quad (5.14)$$

Per ottenere il propagatore occorre dunque sommare su tutte le possibili traiettorie, cioè su tutti i cammini $\mathbf{p}(t)$ nello spazio degli impulsi e su tutti i cammini $\mathbf{r}(t)$ nello spazio delle posizioni, pesando ogni traiettoria con il corrispondente fattore $e^{iS/\hbar}$: tutti i cammini contribuiscono ugualmente in modulo, mentre la fase dei loro contributi è l'azione classica (5.14) in unità di \hbar . Nel calcolo dell'ampiezza di probabilità viene così coinvolto l'insieme di tutte le traiettorie all'interno dell'intero spazio delle fasi e non solo la traiettoria che una particella classica effettivamente descriverebbe. In questo senso il propagatore diventa un *integrale funzionale sui cammini*⁷.

⁷ Come lo stesso Feynman precisava nel suo lavoro originale, in realtà danno un contributo non nullo solo i cammini per i quali la traiettoria $x(t)$ è tale che sia $\Delta x \sim (\Delta t)^{1/2}$ e che corrispondono a zig-zag tipiche del moto browniano.

Va inoltre precisato che la denominazione in uso di *integrale funzionale sui cammini* è *impropria*, perché da un punto di vista strettamente matematico l'integrale di Feynman *non* è un'integrale su uno spazio di funzioni, ma più semplicemente una somma su un insieme di funzioni.

Per una hamiltoniana classica del tipo

$$H_{cl}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (5.15)$$

è possibile effettuare l'integrazione sugli impulsi esplicitamente, in quanto (cfr. Esempio 2.1)

$$\int d\mathbf{p} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \Delta t \left(\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \frac{p^2}{2m} \right) \right] = \left(\frac{2\pi \hbar m}{i \Delta t} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 \Delta t \right]. \quad (5.16)$$

Perciò risulta

$$\begin{aligned} \int (D\mathbf{p}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' [\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - H_{cl}(\mathbf{p}_n, \mathbf{r}_n)] \right\} \\ = \left(\frac{m}{2\pi \hbar i \Delta t} \right)^{3(N+1)/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) \right\}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

dove

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r}) \quad (5.18)$$

è la lagrangiana classica. Allora, per una hamiltoniana classica del tipo (5.15), la (5.12) diventa

$$K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) = \mathcal{N} \int (D\mathbf{r}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) \right\}, \quad (5.19)$$

che è la *formula di Feynman* per il propagatore come integrale funzionale sui cammini. La costante di normalizzazione \mathcal{N} deriva dal fattore $[m/2\pi \hbar i \Delta t]^{3(N+1)/2}$ e diverge nel limite $N \rightarrow \infty$, $\Delta t \rightarrow 0$, ma ciò è irrilevante per i risultati. Infatti le quantità fisicamente interessanti sono elementi di matrice di operatori F del tipo

$$\frac{\langle \mathbf{r}, t | F | \mathbf{r}_0, t_0 \rangle}{\langle \mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0 \rangle} = \frac{\langle \mathbf{r}, t | F | \mathbf{r}_0, t_0 \rangle}{K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0)},$$

dove anche il numeratore può essere ottenuto come un integrale funzionale,

$$\langle \mathbf{r}, t | F | \mathbf{r}_0, t_0 \rangle = \mathcal{N} \int (D\mathbf{r}) F_{cl} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) \right\}, \quad (5.20)$$

in cui compare l'espressione della variabile dinamica classica F_{cl} corrispondente all'operatore F . Perciò la costante di normalizzazione \mathcal{N} si elimina nel rapporto.

La formulazione di Feynman è dunque basata sulla lagrangiana, piuttosto che sulla hamiltoniana; essa perciò ha il pregio di poter essere applicata anche in contesti

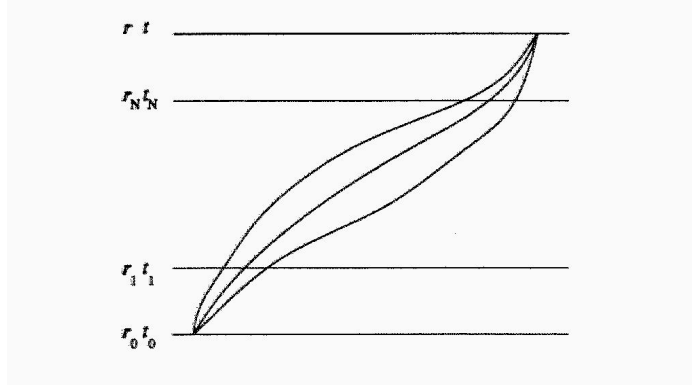


Fig. 5.2. I cammini di Feynman.

più generali della meccanica quantistica non relativistica, quali ad esempio si presentano in una teoria dei campi quantistici, in cui la teoria viene costruita a partire dalla lagrangiana. La presenza inoltre dell'integrale d'azione nell'espressione del propagatore permette di ritrovare in modo intuitivo il limite classico della meccanica quantistica. Infatti la situazione della fisica classica corrisponde al caso in cui in generale piccole variazioni della traiettoria producono variazioni d'azione grandi rispetto a \hbar , mentre tipicamente la meccanica quantistica affronta problemi in cui anche grandi variazioni di traiettoria comportano solo variazioni d'azione confrontabili con \hbar . Dunque classicamente il contributo $e^{iS/\hbar}$ di una traiettoria può essere in generale cancellato dal corrispondente contributo $e^{iS'/\hbar}$ di una traiettoria vicina con $S' \sim S + \pi \hbar$. Tuttavia esiste una sola traiettoria effettivamente descritta dal sistema e che viene individuata dal principio di minima azione: per costruzione, traiettorie vicine a questa hanno un'azione di poco diversa e producono quindi un'interferenza costruttiva nella somma sui possibili cammini. Allora, siccome il contributo principale al propagatore proviene dai cammini vicini alla traiettoria classica e siccome tutti contribuiscono approssimativamente con lo stesso ammontare, in prima approssimazione si può porre:

$$K(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) \sim \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{L}(\mathbf{r}_{cl}, \dot{\mathbf{r}}_{cl}) \right\}, \quad (5.21)$$

dove interviene solo la lagrangiana valutata lungo la traiettoria classica. In realtà però all'integrale funzionale contribuisce tutta una fascia di cammini vicini alla traiettoria classica, nella quale l'azione varia meno di $\pi \hbar$ (fig. 5.2): per un problema al limite classico questa fascia è molto stretta, mentre per un tipico problema quantistico la fascia diventa molto ampia e il concetto di traiettoria classica perde di significato. In questo modo la formulazione lagrangiana di Feynman mette a fuoco l'essenziale differenza tra la fisica classica e quella quantistica, riappropriandosi dei risultati della fisica classica come caso particolare.

VII.6. Casi puri e casi miscela

Finora la descrizione quantistica di un sistema fisico ha riguardato casi in cui lo stato del sistema è definito assegnando un ket nello spazio di Hilbert o la sua corrispondente funzione d'onda in una rappresentazione prescelta. Il sistema risulta completamente caratterizzato se il suo stato è autostato simultaneo dell'insieme completo di operatori che commutano tra di loro, ivi compresa la hamiltoniana. Questo stato infatti corrisponde alla preparazione del sistema con la massima informazione possibile, come risultato di un complesso di misurazioni sulle osservabili compatibili associate a questo insieme completo di operatori che commutano. L'evoluzione temporale del sistema è poi governata dall'equazione di Schrödinger.

Se la preparazione del sistema è invece incompleta, ma lo stato del sistema è ancora assegnato con un vettore $|\Psi\rangle$ nello spazio di Hilbert, si può sempre esprimere $|\Psi\rangle$ come sovrapposizione lineare di vettori appartenenti a una base completa ortonormale:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle. \quad (6.1)$$

Se la base $\{|\alpha\rangle\}$ è l'insieme degli autostati dell'operatore A , i coefficienti *complessi* c_{α} , normalizzati in modo che sia $\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 = 1$, rappresentano l'ampiezza di probabilità che una misura della variabile dinamica associata ad A coincida con l'autovalore α . Questo significa che, se si compie la misurazione di A su un insieme di numerose repliche identiche del sistema descritto da $|\Psi\rangle$, la frequenza statistica con cui compare il valore α è pari a $|c_{\alpha}|^2$. Ma per il sistema nello stato $|\Psi\rangle$ in generale si può solo calcolare il valore di aspettazione di un qualunque altro operatore B ,

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \langle \Psi | B | \Psi \rangle \\ &= \sum_{\alpha \alpha'} c_{\alpha}^* c_{\alpha'} \langle \alpha | B | \alpha' \rangle, \end{aligned} \quad (6.2)$$

che rappresenta il valore medio delle misure di B su ciascun elemento dell'insieme di repliche identiche del sistema.

La comparsa nella (6.2) dei coefficienti c_{α} nella forma quadratica $c_{\alpha}^* c_{\alpha'}$, che può assumere valori sia positivi sia negativi, è responsabile di un'interferenza fra i diversi termini della sovrapposizione lineare (6.1): questa è una situazione tipicamente quantistica, mentre classicamente, di fronte a diverse possibilità alternative riguardanti un insieme statistico, il valor medio viene costruito come somma di soli termini positivi dati dalle probabilità relative alle varie possibilità.

I casi visti finora, in cui gli aspetti statistici sono esclusivamente di natura quantistica, sono denominati *casi puri*. Essi non esauriscono però tutte le situazioni che si possono verificare per un sistema quantistico. L'incompletezza dell'informazione sullo stato iniziale può coinvolgere aspetti statistici simili a quelli classici e dare origine ai cosiddetti *casi miscela*.

Per esempio gli elettroni emessi da un filamento caldo hanno valori di energia cinetica dispersi in modo statistico; similmente i fotoni emessi da una sorgente di luce termica hanno una polarizzazione distribuita secondo le leggi della statistica classica. Se si vuole dare una descrizione quantistica di questi sistemi, occorre incorporare nel formalismo della meccanica quantistica anche questo tipo di informazione incompleta. La situazione può essere descritta pensando che esiste una certa frazione p_1 di elementi dell'insieme che si trovano nello stato $|\Psi_1\rangle$, un'altra frazione p_2 nello stato $|\Psi_2\rangle$, e così via: perciò lo stato del sistema ha una certa probabilità p_1 di essere individuato dallo stato $|\Psi_1\rangle$, una certa probabilità p_2 di essere individuato dallo stato $|\Psi_2\rangle$, ecc. Allora in questo caso la descrizione coinvolge una miscela degli stati $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, \dots$, pesati con dei numeri *reali positivi*, p_1, p_2, \dots , che rappresentano le probabilità che questi stati hanno di comparire nella miscela. Naturalmente si deve avere

$$0 \leq p_1, p_2, \dots \leq 1, \quad (6.3)$$

$$\sum_n p_n = 1. \quad (6.4)$$

Occorre inoltre tenere presente che la miscela non coinvolge necessariamente stati $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, \dots$ reciprocamente ortogonali. Per esempio si può pensare a un fascio di luce con componenti di polarizzazione dirette secondo direzioni alternative, più numerose delle due linearmente indipendenti realizzabili: lo stato $|\Psi_i\rangle$ di ciascuna componente di polarizzazione può essere espresso come combinazione lineare degli stati che descrivono le due polarizzazioni linearmente indipendenti, senza per questo essere ortogonale allo stato $|\Psi_j\rangle$ di un'altra componente di polarizzazione. Ogni componente poi interviene nella miscela con il peso p_i che caratterizza la sua probabilità.

La situazione è dunque ben diversa da quella fornita da uno sviluppo del tipo (6.1). Nel confronto delle previsioni con i risultati di una misurazione effettuata su un sistema descritto da un caso miscela, l'aspetto probabilistico interviene a due livelli diversi: la probabilità associata al verificarsi di un certo risultato contiene un aspetto quantistico e un aspetto classico. Si supponga di volere misurare la quantità A . La probabilità quantistica riguarda la probabilità $P_i(\alpha)$ di trovare il valore α se il sistema fosse descrivibile in termini di un solo stato $|\Psi_i\rangle$. Pensando di sviluppare $|\Psi_i\rangle$ come nella (6.1),

$$|\Psi_i\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^i |\alpha\rangle, \quad (6.5)$$

questa probabilità è

$$P_i(\alpha) = |c_{\alpha}^i|^2. \quad (6.6)$$

La (6.6) può anche scriversi in una forma,

Operatore densità

$$P_i(\alpha) = \langle \Psi_i | P_\alpha | \Psi_i \rangle, \quad (6.7)$$

che ne evidenzia l'interpretazione come valore medio dell'operatore di proiezione sullo stato $|\alpha\rangle$,

$$P_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|. \quad (6.8)$$

Ma l'eventualità che $P_i(\alpha)$ sia la frequenza statistica con cui compare il valore α deve essere pesata dalla probabilità classica p_i con cui lo stato $|\Psi_i\rangle$ interviene nella miscela che caratterizza il sistema. Per avere la probabilità totale di trovare il valore α occorre dunque pesare ogni $P_i(\alpha)$ con il suo peso statistico p_i e sommare su tutti i contributi della miscela:

$$P(\alpha) = \sum_i p_i P_i(\alpha). \quad (6.9)$$

Da questa relazione si vede che il caso puro è recuperato come caso particolare quando tutte le p_i sono nulle, eccetto una, che per la (6.4) risulta pari a 1.

Nel prossimo paragrafo viene presentato un metodo unificato per la descrizione dell'evoluzione temporale dei casi puri e dei casi miscela, che permette anche il collegamento diretto con la statistica classica.

VII.7. Operatore densità

La (6.2) coinvolge le espressioni quadratiche

$$\rho_{\alpha'\alpha} \equiv c_{\alpha'}^* c_\alpha = \langle \alpha' | \Psi \rangle \langle \Psi | \alpha \rangle, \quad (7.1)$$

che si possono considerare gli elementi di matrice sulla base $\{|\alpha\rangle\}$ dell'operatore di proiezione sullo stato $|\Psi\rangle$:

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|. \quad (7.2)$$

La (6.2) può dunque risciversi anche nella forma seguente:

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \sum_{\alpha\alpha'} \rho_{\alpha'\alpha} \langle \alpha | B | \alpha' \rangle \\ &= \sum_{\alpha'} \langle \alpha' | \rho B | \alpha' \rangle. \end{aligned}$$

Introducendo il simbolo Tr per indicare la *traccia* di una matrice, cioè la somma dei suoi elementi diagonali, si ottiene dunque

$$\langle B \rangle = \text{Tr} (\rho B). \quad (7.3)$$

Dalla condizione di normalizzazione di $|\Psi\rangle$,

$$1 = \sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \Psi \rangle \langle \Psi | \alpha \rangle,$$

segue la condizione di normalizzazione per l'operatore ρ :

$$\text{Tr } \rho = 1. \quad (7.4)$$

Quando si considera l'evoluzione temporale del sistema descritto da $|\Psi\rangle$, in osservanza dell'equazione di Schrödinger,

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle, \quad (7.5)$$

anche l'operatore $\rho(t)$ viene corrispondentemente a dipendere dal tempo e la sua evoluzione temporale può essere dedotta ancora dall'equazione di Schrödinger:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) &= \left(\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle \right) \langle \Psi(t)| + |\Psi(t)\rangle \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi(t)| \right) \\ &= \frac{1}{i \hbar} H |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| - \frac{1}{i \hbar} |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| H, \end{aligned}$$

cioè

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [H, \rho(t)]. \quad (7.6)$$

L'uso dell'operatore ρ , determinato dalla (7.6) con la proprietà (7.4), è dunque sufficiente a caratterizzare completamente lo stato del sistema e a costruire, secondo la (7.3), i valori di aspettazione delle osservabili. Incidentalmente, l'uso dell'operatore ρ , grazie alla sua definizione (7.2), elimina l'eventuale arbitrarietà nella fase $e^{i\phi}$ con cui viene definito lo stato $|\Psi\rangle$.

Questa trattazione, sviluppata per i casi puri, offre il vantaggio di poter essere convenientemente estesa anche ai casi miscela. Si definisca infatti il proiettore sullo stato $|\Psi_i\rangle$, che interviene nella miscela:

$$\rho_i = |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|. \quad (7.7)$$

Allora, secondo la (6.7) e la (7.3), la probabilità $P_i(\alpha)$ di trovare su questo stato il valore α per l'osservabile A è

$$P_i(\alpha) = \text{Tr} (\rho_i P_{\alpha}). \quad (7.8)$$

La probabilità totale (6.9) relativa al caso miscela si ottiene sommando le varie probabilità parziali (7.8), pesate ciascuna con i pesi statistici p_i della miscela:

Operatore densità

$$\begin{aligned} P(\alpha) &= \sum_i p_i P_i(\alpha) \\ &= \sum_i p_i \text{Tr}(\rho_i P_\alpha), \end{aligned}$$

cioè

$$P(\alpha) = \text{Tr}(\rho P_\alpha), \quad (7.9)$$

dove si è posto

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i. \quad (7.10)$$

Per la (7.7) l'operatore ρ , che viene indicato come *operatore densità*⁸, risulta definito dalla relazione:

$$\rho = \sum_i |\Psi_i\rangle p_i \langle \Psi_i|. \quad (7.11)$$

Se gli stati $|\Psi_i\rangle$ sono un insieme completo ortonormale, la (7.11) fornisce la risoluzione spettrale della ρ in termini dei suoi autovalori p_i e dei suoi autostati $|\Psi_i\rangle$. Dato che i pesi p_i sono numeri reali positivi, dalla (7.11) e dalla (6.3) seguono le condizioni:

$$\rho^\dagger = \rho, \quad (7.12)$$

$$\langle \Psi | \rho | \Psi \rangle \geq 0, \quad \forall |\Psi\rangle. \quad (7.13)$$

Inoltre la traccia di ρ vale

$$\text{Tr} \rho = \sum_i p_i \text{Tr} \rho_i = \sum_i p_i,$$

cioè

$$\text{Tr} \rho = 1. \quad (7.14)$$

Dunque l'operatore densità è un operatore *autoaggiunto, definito positivo* e a *traccia unitaria*.

⁸ Anche se è propriamente un operatore, e non una matrice, spesso ρ viene anche chiamato *matrice densità*: evidentemente ciò presuppone di darne una rappresentazione matriciale. L'operatore densità fu introdotto da J. von Neumann: *Mathematische Begründung der Quantenmechanik, loc. cit.* (n. 3 p. 251).

Se tutti i p_i sono nulli eccetto uno, la somma nella (7.11) si limita a un solo termine come nella (7.2), valida per il caso puro. In questo caso l'operatore densità risulta un proiettore: $\rho^2 = \rho$. In generale però

$$\rho^2 \neq \rho. \quad (7.15)$$

Come nel caso puro, anche nel caso miscela la misurazione di un'osservabile ha l'effetto improvviso di una proiezione nel sottospazio corrispondente all'autovalore misurato. Se l'osservazione effettuata sul sistema ha mostrato che si trova in un autostato dell'operatore A appartenente al sottospazio \mathcal{H}_α , l'operatore densità dopo la misura viene ridotto a operare esclusivamente in questo sottospazio, cioè diventa quella che si chiama la sua *restrizione* al sottospazio \mathcal{H}_α . Da un punto di vista matematico, se $P_{\mathcal{H}_\alpha}$ è il proiettore sul sottospazio \mathcal{H}_α , a meno di una costante di normalizzazione, la restrizione di ρ risulta $P_{\mathcal{H}_\alpha} \rho P_{\mathcal{H}_\alpha}$. La costante di normalizzazione è fissata dal fatto che anche la traccia della restrizione deve essere unitaria e quindi deve essere uguale all'inverso di $\text{Tr}(P_{\mathcal{H}_\alpha} \rho P_{\mathcal{H}_\alpha}) = \text{Tr}(\rho P_{\mathcal{H}_\alpha}) = p_\alpha$, dove p_α è il peso originale con cui il sottospazio \mathcal{H}_α entra nella definizione della miscela descritta da ρ . Perciò l'effetto di una misurazione è quello indicato nella relazione seguente:

$$\rho \rightarrow \text{misurazione} \rightarrow \frac{P_{\mathcal{H}_\alpha} \rho P_{\mathcal{H}_\alpha}}{\text{Tr}(\rho P_{\mathcal{H}_\alpha})}. \quad (7.16)$$

Con l'operatore densità si può calcolare il valore di aspettazione di un qualsiasi operatore B , generalizzando anche al caso miscela la formula (7.3), ricavata per il caso puro. Infatti in questo calcolo, coerentemente con i postulati generali della meccanica quantistica, occorre valutare la media degli autovalori β di B , pesati ciascuno con la probabilità di trovare per B l'autovalore β . Ma questo, per la (7.9), comporta

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \sum_{\beta} \beta P(\beta) \\ &= \sum_{\beta} \beta \text{Tr}(\rho P_{\beta}) \\ &= \text{Tr}\left(\rho \sum_{\beta} \beta P_{\beta}\right). \end{aligned}$$

D'altra parte

$$\sum_{\beta} \beta P_{\beta} = \sum_{\beta} |\beta\rangle \beta \langle \beta|$$

è la rappresentazione spettrale dell'operatore B . Perciò

$$\langle B \rangle = \text{Tr}(\rho B). \quad (7.17)$$

Operatore densità

Questa formula è analoga a quella dell'equazione (I.2.43) per il calcolo del valor medio di un'osservabile mediante la funzione densità $\rho(p, q)$ dell'insieme statistico classico, dove l'integrazione sulle variabili canoniche sostituisce l'operazione di traccia. Perciò, come in fisica classica il sistema fisico viene completamente caratterizzato dalla conoscenza della funzione densità, così in meccanica quantistica l'informazione sul sistema è tutta contenuta nell'operatore densità.

Questa analogia persiste anche durante l'evoluzione temporale. Per un sistema descritto inizialmente dall'operatore densità (7.11), gli stati $|\Psi_i\rangle$ si modificano nel tempo secondo l'equazione di Schrödinger, senza modificare i pesi p_i . All'istante t l'operatore densità risulta

$$\rho(t) = \sum_i p_i \rho_i(t),$$

dove gli operatori $\rho_i(t)$ seguono la legge del moto (7.6) del caso puro. Perciò anche in generale l'equazione del moto per l'operatore densità risulta

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [H, \rho(t)]. \quad (7.18)$$

Esattamente in accordo con le regole di quantizzazione, questa legge corrisponde all'equazione di Liouville (I.2.39) della meccanica statistica. Perciò viene indicata come *equazione di Liouville quantistica* o *equazione di Liouville–von Neumann*.

Esercizio 7.1

Verificare che la (7.18) può essere dedotta utilizzando l'operatore di evoluzione temporale $U_S(t)$ della descrizione di Schrödinger e ponendo

$$\rho(t) = U_S(t) \rho(0) U_S^{-1}(t). \quad (7.19)$$

Esercizio 7.2

Partendo dalla definizione (7.11), verificare che la (7.19) è la corretta espressione di $\rho(t)$ nella descrizione di Schrödinger.

Esercizio 7.3

Confrontare l'equazione (7.18) con l'equazione del moto (3.3) per un operatore nella descrizione di Heisenberg e discuterne la differenza.

Esercizio 7.4

Verificare che la relazione (IV.10.4) per la dipendenza temporale del valor medio di un operatore vale anche nel caso miscela, quando il valor medio è calcolato secondo la (7.17).

Se la hamiltoniana H non dipende esplicitamente dal tempo, la (7.18) può essere risolta formalmente:

$$\rho(t) = e^{-iHt/\hbar} \rho(0) e^{iHt/\hbar}. \quad (7.20)$$

Questa soluzione possiede una dipendenza dal tempo simile a quella della descrizione di Heisenberg (3.2), ma con gli operatori di evoluzione invertiti. Ciò però non deve allarmare, in quanto l'operatore densità *non* è un operatore della descrizione di Heisenberg e la (7.18) *non* è l'equazione del moto della descrizione di Heisenberg, ma piuttosto l'analogo quantistico dell'equazione di Liouville (I.2.39).

Attraverso la definizione dell'operatore densità si possono allora trattare in modo unificato sia i casi puri, sia i casi miscela; inoltre la corrispondenza tra la (7.17) e la (I.2.43) da un lato e tra l'equazione di Liouville e quella di Liouville–von Neumann dall'altro permette di estendere alla descrizione quantistica i risultati fondamentali della fisica macroscopica ricordati nel paragrafo I.2.

Esempio 7.1

La corrispondenza tra classico e quantistico, consentita dall'uso dell'operatore densità, permette di estendere la descrizione quantistica a sistemi in equilibrio termodinamico con l'ambiente circostante alla temperatura T . A tal fine basta interpretare in termini di operatore quantistico la funzione densità (I.2.49),

$$\rho = Z^{-1} e^{-\beta H}, \quad (7.21)$$

dove H è l'operatore hamiltoniano, $\beta = 1/kT$, con k costante di Boltzmann, e

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} \quad (7.22)$$

è la funzione di partizione quantistica che normalizza la ρ : $\text{Tr} \rho = 1$. Scegliendo la base $\{|n\rangle\}$ degli autostati di H , l'operatore densità risulta una matrice diagonale,

$$\rho_{nm} = \delta_{nm} Z^{-1} e^{-\beta E_n}, \quad (7.23)$$

mentre la funzione di partizione risulta

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad (7.24)$$

a conferma del nome di *somma sugli stati* (= *Zustandsumme*) attribuitole da Boltzmann.

Nota la funzione di partizione quantistica, i risultati della termodinamica statistica classica possono essere trasferiti senza difficoltà al caso quantistico. Per esempio si possono ridefinire l'energia E , l'entropia S e l'energia libera (di Helmholtz) F , pur di sostituire nelle corrispondenti formule (I.2.55), (I.2.59) e (I.2.62) la funzione di partizione quantistica (7.22) a quella classica. In particolare, ricordando la definizione (I.2.44) data in generale da Boltzmann per l'entropia, si può porre

$$S = -k \text{Tr} (\rho \ln \rho). \quad (7.25)$$

Operatore densità

Esercizio 7.5

Verificare che la funzione di partizione di un oscillatore armonico lineare in equilibrio termico con l'ambiente è

$$Z = \frac{e^{-\hbar\omega/2kT}}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}}. \quad (7.26)$$

Esercizio 7.6

Verificare che la matrice densità (7.23) per un oscillatore armonico lineare in equilibrio termico con l'ambiente è

$$\rho_{nm} = \delta_{nm} e^{-n\hbar\omega/kT} (1 - e^{-\hbar\omega/kT}). \quad (7.27)$$

Esercizio 7.7

Verificare che l'energia media di un oscillatore armonico lineare in equilibrio termico con l'ambiente è

$$E = \langle H \rangle = \text{Tr}(\rho H) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (7.28)$$

Esercizio 7.8

Confrontare il risultato (7.28) con quello di Planck (II.2.25).

Esercizio 7.9

Estendere la (7.28) al caso di N oscillatori armonici isotropi in tre dimensioni e discuterne il limite per alte temperature. Confrontare il risultato con la (I.2.58).