

Briciole di Meccanica Quantistica

Maurizio Serva

Una premessa

Nissuna umana investigazione si può dimandare vera scienza s'essa non passa per le matematiche dimostrazioni, e se tu dirai che le scienze, che principiano e finiscono nella mente, abbiano verità, questo non si concede, ma si nega, per molte ragioni, e prima, che in tali discorsi mentali non accade esperienza, senza la quale nulla dà di sè certezza. - Leonardo da Vinci (1452-1519).

Un avvertimento

Considerate queste brevi note come una guida che non vi dispensa in alcun modo dal consultare i testi consigliati.

Indice

1	La vecchia teoria dei quanti e quella nuova	3
1.1	Tre evidenze sperimentali che non hanno una spiegazione classica	3
1.2	La vecchia teoria dei quanti	6
1.3	La nuova teoria dei quanti	10
2	Posizione, impulso ed energia: le leggi del moto	16
2.1	Posizione e momento: autostati, autovalori e commutatori	16
2.2	Principio di indeterminazione di Heisenberg	20
2.3	La hamiltoniana e l'equazione di Shrödinger	24
3	L'equazione di Shrödinger in una dimensione	28
3.1	Spettro continuo: il caso libero. Il pacchetto d'onda	28
3.2	Proprietà degli stati legati nel caso unidimensionale	31
3.3	Spettro discreto: l'oscillatore armonico	32
3.4	Spettro sia continuo che discreto: la buca di potenziale	37
3.5	Stati legati dei sistemi con potenziali delta	43
4	L'equazione di Schrödinger in tre dimensioni	46
4.1	Il momento angolare	46
4.2	Il caso libero e l'oscillatore armonico	46
4.3	Forze centrali: l'atomo di idrogeno	46
5	Entanglement, collasso e spin degli elettroni	46
5.1	La notazione di Dirac e l'entanglement quantistico	46

5.2 Il collasso del vettore di stato, il gatto di Schrödinger e la doppia fenditura	51
5.3 Lo spin delle particelle elementari	58
6 Dal paradosso EPR al teletrasporto quantistico	62
6.1 Il paradosso EPR	62
6.2 Il teorema di Bell e la disuguaglianza CHSH	66
6.3 Test sperimentali delle disuguaglianze di tipo Bell	71
6.4 Il teletrasporto quantistico	75
Bibliografia	79



1. La vecchia teoria dei quanti e quella nuova

1.1 Tre evidenze sperimentali che non hanno una spiegazione classica

Interferenza di elettroni: la doppia fenditura

Ci sono diverse evidenze empiriche che non hanno una spiegazione nell'ambito della meccanica classica, La prima delle quali vogliamo parlare è l'esperimento della doppia fenditura.

Come è ben noto le onde, che siano quelle elettromagnetiche o quelle che si formano sulla superficie dell'acqua, sono soggette a diffrazione e interferenza.

La diffrazione è un fenomeno associato alla deviazione della traiettoria di propagazione delle onde quando queste incontrano un ostacolo.

L'interferenza è un fenomeno dovuto alla sovrapposizione, in un punto dello spazio, di due o più onde. Quello che si osserva è che l'ampiezza dell'onda risultante è differente in punti diversi e può variare tra un minimo di ampiezza nulla ed un massimo con ampiezza coincidente con la somma delle ampiezze componenti (a sinistra in figura ??). Nel primo caso si dice che l'interferenza è *distruttiva*, nel secondo che è *costruttiva*. L'interferenza è costruttiva quando le onde interferiscono in fase e distruttiva in caso contrario. Naturalmente tutte le situazioni intermedie sono possibili.

Nell'esperienza effettuata per la prima volta nel 1801 dal medico, linguista, musicologo, egittologo e fisico britannico Thomas Young, la luce di una lampada attraversa una doppia fenditura (si veda lo schema in figura ??) per poi incidere su una lastra. Le bande alternate osservate sulla lastra in tale esperimento (a destra in figura 1) sono la conseguenza dell'interferenza delle due onde passate da due fenditure diverse. Se la differenza della lunghezza di percorso tra le due onde è pari a un numero intero di lunghezze d'onda della luce, esse saranno in fase e quindi l'interferenza sarà costruttiva. Il risultato sarà una banda luminosa sulla lastra. Al contrario, se la differenza della lunghezza di percorso è pari a un numero semi-intero di lunghezze d'onda della luce, esse saranno in controfase e quindi l'interferenza sarà distruttiva. Il risultato sarà una banda scura sulla lastra. Si avranno poi tutte le gradazioni nelle posizioni intermedie.

Assumiamo $D \gg d$, $D \gg x$ e calcoliamo la differenza Δ della lunghezza del cammino dei due raggi nel raggiungere il punto P

$$\Delta = \sqrt{D^2 + \left(x + \frac{d}{2}\right)^2} - \sqrt{D^2 + \left(x - \frac{d}{2}\right)^2} \simeq \frac{dx}{D}. \quad (1)$$

Quindi si avranno bande luminose quando $\Delta = n\lambda$ e bande scure quando $\Delta = (n + 1/2)\lambda$. Le posizioni corrispondenti alle bande luminose saranno quelle in cui $x = n\lambda D/d$ mentre quelle corrispondenti alle bande scure saranno quelle in cui $x = (n + 1/2)\lambda D/d$; ne consegue che le bande saranno approssimativamente equispaziate (come si osserva a destra in figura ??) e la distanza tra due bande luminose (o due bande scure) sarà $\lambda D/d$.

L'esperimento della doppia fenditura fu eseguito per la prima volta utilizzando elettroni da Claus Jönsson dell'Università di Tubinga nel 1961. Fu quindi ripetuto nel 1974 a Bologna da Pier Giorgio Merli, Gianfranco Missiroli e Giulio Pozzi che, a differenza di Jönsson, inviarono un elettrone alla volta sulla lastra fotografica. I risultati dell'esperimento del 1974, nonostante fossero stati pubblicati e nonostante fosse anche stato realizzato un documentario in proposito, furono pressoché ignorati, tant'è che quando nel 1989 il giapponese Akira Tonomura e i suoi collaboratori ripeterono l'esperimento, lo si considerò erroneamente il primo.

La figura 2 è presa da un articolo di Tonomura e collaboratori del 1989. Gli elettroni attraversano a uno a uno una doppia fenditura e impressionano una lastra. Si vede chiaramente il formarsi di bande luminose e di bande scure mano a mano che gli elettroni colpiscono la lastra.

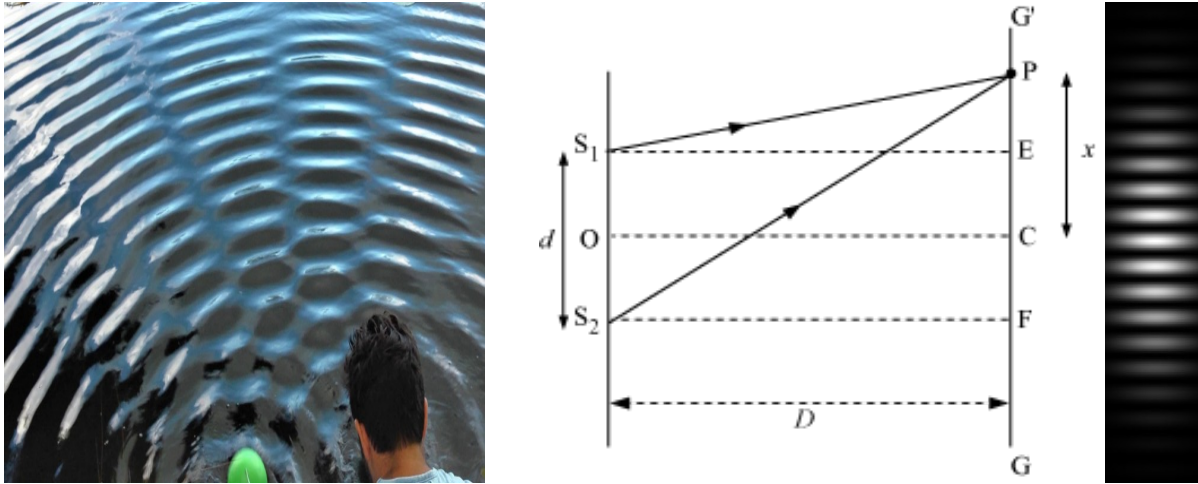


Figura 1. A sinistra l'interferenza di due onde sulla superficie dell'acqua. Si noti come l'interferenza sia *costruttiva* in alcune regioni e *distruttiva* in altre. Al centro lo schema dell'esperimento di Young (1801) in cui la luce di una lampada attraversa una doppia fenditura per poi incidere su una lastra. Il risultato è a destra.

Nonostante la straordinaria somiglianza con la precedente figura ?? dell'esperienza di Young, la differenza sta nel fatto che gli elettroni sono particelle e non onde, infatti non è difficile distinguere i punti lasciati da singoli elettroni sullo schermo. È piuttosto la probabilità di essere rilevato in un punto dello spazio a comportarsi come un'onda, o piuttosto, come vedremo, questa probabilità si costruisce a partire da una funzione d'onda con proprietà simili a quelle di un'onda ordinaria.

Se l'esperimento venisse ripetuto lasciando aperta la prima fenditura per una metà degli elettroni e la seconda per l'altra metà, le bande alternate sparirebbero. Dato che gli elettroni passano uno per volta, se ne deduce che il singolo elettrone 'vede' entrambe le fenditure e quindi non si può semplicemente dire che sia passato attraverso una di esse.

Si noti che questo esperimento non ebbe nessun rilievo nello sviluppo storico della meccanica quantistica (era ancora un *gedankenexperiment* ossia un esperimento mentale poche decadi fa) ma fa chiaramente percepire la grande differenza di comportamento dei sistemi microscopici rispetto a quelli classici.

Il problema della stabilità degli atomi

La materia è fatta di molecole, che a loro volta sono fatte di atomi. Gli atomi sono costituiti di particelle cariche negative (elettroni) che orbitano intorno a un nucleo composto di particelle positive (protoni) e neutre (neutroni).

Consideriamo l'atomo di idrogeno, che è uno stato formato da un elettrone e da un protone legati dalla forza di Coulomb, che ha potenziale analogo a quello gravitazionale

$$V(\rho) = -\frac{e^2}{\rho}, \quad (2)$$

dove la costante $e = 4.8 \times 10^{-10} \text{ e.s.u.}$ è la carica elettrica elementare (negativa per l'elettrone e positiva per il protone). Ci basterà quindi utilizzare i risultati di meccanica classica per il potenziale newtoniano.

Consideriamo per semplicità il caso di orbite circolari che si hanno quando l'energia meccanica E è pari al minimo del potenziale efficace $-\frac{e^2}{\rho} + \frac{J^2}{2m\rho^2}$ dove $m = 9.11 \times 10^{-28} \text{ g}$ è la massa dell'elettrone. Tale minimo corrisponde al raggio costante $\bar{\rho} = \frac{J^2}{me^2}$ e l'energia è $E = -\frac{e^2}{2\bar{\rho}}$. Inoltre il momento

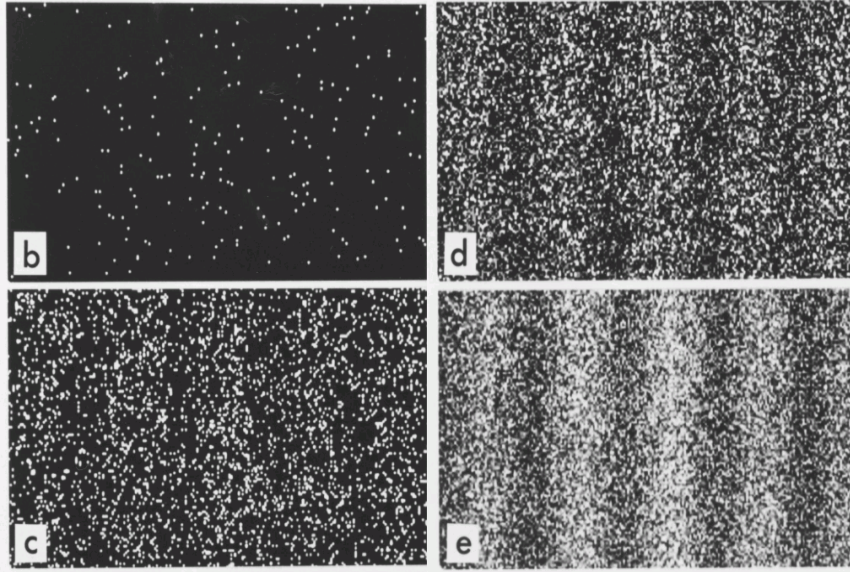


Figura 2. L'esperimento di Tonomura. Le quattro immagini corrispondono alle tracce sulla lastra di 100, 3000, 20000 e 70000 elettroni.

angolare è $J = m\bar{\rho}^2\dot{\theta}$ per cui $\dot{\theta}$ è anch'esso costante. Infine il modulo dell'accelerazione è pari ad $a = \bar{\rho}\dot{\theta}^2 = \frac{e^2}{m\bar{\rho}^2}$

Secondo la teoria classica elaborata dal matematico e fisico scozzese James Clerk Maxwell, una particella carica che ha un moto accelerato emette radiazione elettromagnetica e perde energia. Per un elettrone che si muove con un'accelerazione che ha modulo pari ad a l'energia persa per unità di tempo è

$$-\frac{dE}{dt} = \frac{2e^2}{3c^3} a^2, \quad (3)$$

dove $c = 3 \times 10^{10} \text{ cm} \cdot \text{sec}^{-1}$ è la velocità della luce.

L'orbita non è quindi circolare ma è una spirale dato che a una perdita di energia corrisponde una riduzione del raggio. Tuttavia la frazione di energia persa in una rivoluzione è molto piccola per cui l'orbita può essere considerata approssimativamente circolare per quel che riguarda il moto kepleriano e quindi le relazioni tra energia, raggio e accelerazione rimangono quelle classiche.

Tenendo quindi presente che $E = -\frac{e^2}{2\bar{\rho}}$ e $a = \frac{e^2}{m\bar{\rho}^2}$, dalla (3) si ottiene una equazione di facile soluzione:

$$\bar{\rho}^2 \frac{d\bar{\rho}}{dt} = -\frac{4e^4}{3m^2c^3} \quad \rightarrow \quad \bar{\rho}^3(t) = \bar{\rho}^3(0) - \frac{4e^4}{m^2c^3} t, \quad (4)$$

pertanto l'elettrone cade sul nucleo in un tempo $T = \frac{m^2c^3\bar{\rho}^3(0)}{4e^4}$. Ammettendo che il raggio iniziale sia quello tipico di un atomo di idrogeno, ossia dell'ordine di un angstrom (10^{-8} cm), il tempo necessario al decadimento è dell'ordine di un decimilionesimo di secondo.

In conclusione, secondo la fisica classica un atomo di idrogeno collapsa in un tempo brevissimo, cosa che sicuramente non accade in natura.

Le righe spettrali e la formula di Rydberg

All'inizio della seconda metà dell'800, fu sviluppato lo spettroscopio che permette di separare le diverse lunghezze d'onda di un'emissione luminosa. Se una sostanza gassosa viene portata ad alta

temperatura, si osserva uno spettro di emissione a righe e non uno spettro continuo come ci si aspetta dall'elettrodinamica classica. Ogni elemento ha uno spettro caratteristico, ad esempio lo spettro dell'idrogeno contiene le righe corrispondenti alle lunghezze d'onda, 6562.8, 4861.3, 4340.5, 4101.7,... angstrom. Nella figura 3 si possono osservare le righe del ferro e dell'azoto.

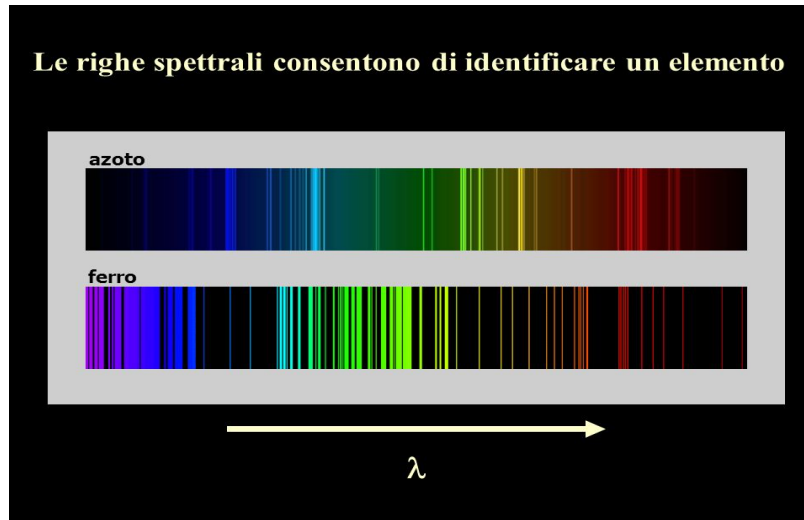


Figura 3. Le righe spettrali di emissione del ferro e dell'azoto. In entrambi casi solo alcune lunghezze d'onda sono presenti, ma queste sono diverse per i due elementi.

Per la lunghezza d'onda di alcune linee spettrali dell'idrogeno, già nel 1885 il fisico svizzero Johann Jakob Balmer aveva trovato una formula empirica. Successivamente il fisico svedese Johannes Robert Rydberg generalizzò questo risultato e stabilì una formula universale per la lunghezza d'onda delle righe spettrali di ogni elemento:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{R}{(m+a)^2} - \frac{R}{(n+b)^2}, \quad (5)$$

dove $R = 109678 \text{ cm}^{-1}$ è una costante universale, chiamata appunto costante di Rydberg mentre a e b sono costanti che dipendono dall'elemento. I valori di n e m sono interi e positivi con $n > m$. Il fatto che le costanti a e b siano diverse per elementi diversi fa sì che ogni elemento possa essere individuato dal suo spettro caratteristico come si vede in figura 3. Questo permette, ad esempio, di determinare la composizione delle stelle.

Per l'idrogeno le costanti a e b sono nulle e questa formula diventa

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{R}{m^2} - \frac{R}{n^2}. \quad (6)$$

Si noti che anche l'assorbimento di energia avviene soltanto per le frequenze per le quali la formula di Rydberg è rispettata.

La (5) rappresentava bene tutte le righe spettrali misurate per i vari atomi e in particolare la formula (6) corrispondeva con grande precisione alle righe dell'idrogeno. A quei tempi restava il problema di interpretare e comprendere il suo significato.

1.2 La vecchia teoria dei quanti

Il modello atomico di Bohr



Figura 4. Max Karl Ernst Ludwig Planck (Kiel, 23 aprile 1858 - Gottinga, 4 ottobre 1947) è stato un fisico tedesco, iniziatore della fisica quantistica e vincitore del Premio Nobel per la fisica nel 1918. Ebbe per primo l'idea dei quanti di energia elettromagnetica (in seguito chiamati fotoni) che concepì per dare una spiegazione dello spettro di corpo nero. La costante fondamentale della meccanica quantistica porta il suo nome.

Il primo periodo della meccanica quantistica inizia nel 1900 quando Planck stabilì l'emissione della radiazione elettromagnetica non avviene in forma continua, come sostiene la teoria elettromagnetica classica, ma in forma discreta in multipli di $h\nu$, dove ν è la frequenza di oscillazione e h è una costante universale, nota appunto come costante di Planck. In questo modo l'energia risulta composta di granuli indivisibili: i quanti. La teoria gli valse il Premio Nobel per la fisica nel 1918.

La nuova meccanica era sostanzialmente un insieme di concetti classici e quantistici. Questi ultimi spiegavano in modo fenomenologico solo alcuni aspetti delle evidenze sperimentali in disaccordo con la fisica classica e quindi la teoria non era considerata soddisfacente.

Soltanto a partire dal 1925, con i lavori del fisico tedesco Werner Karl Heisenberg e del fisico e matematico austriaco Erwin Schrödinger la teoria assume una veste definitiva per quel che riguarda la meccanica non relativistica. L'approccio di Schrödinger si basa sull'equazione omonima ed è quello che noi adotteremo nel corso, l'approccio di Heisenberg, detto anche metodo delle matrici, è del tutto equivalente come fu chiaro sin dagli inizi.

Torniamo ora al primo periodo della meccanica quantistica con il modello atomico proposto nel 1913 dal fisico danese Niels Bohr per spiegare la formula di Rydberg. L'idea di Bohr era che nell'atomo di idrogeno, l'energia dell'elettrone, in interazione coulombiana con il protone, potesse prendere soltanto valori discreti.

Più precisamente, Bohr formulò le seguenti ipotesi sull'atomo:

- l'elettrone può muoversi attorno al nucleo solo lungo certe orbite stazionarie permesse corrispondenti a ben definiti valori quantizzati dell'energia. Ogni orbita stazionaria è definita da un singolo numero intero positivo n (numero quantico principale) con corrispondente energia

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}, \quad (7)$$

dove $h = 6.63 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{sec}$ è la nuova costante che prende il nome da Planck. Al valore

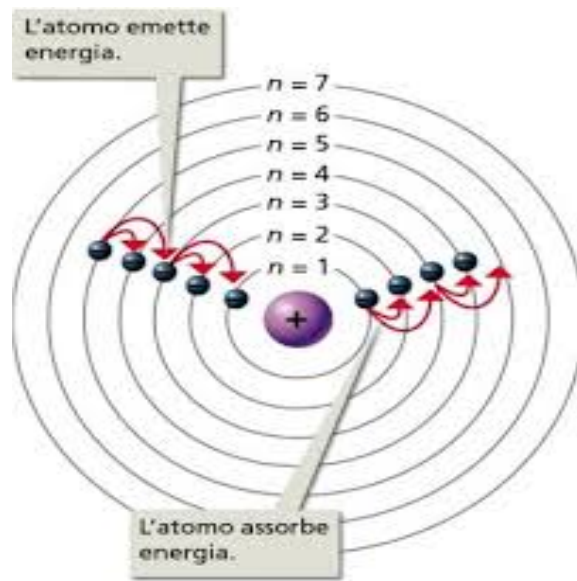


Figura 5. Ogni stato possibile è individuato da un numero intero n positivo. L'atomo emette o assorbe luce solo quando un elettrone compie una transizione, ossia un salto, da uno stato a un altro.

$n = 1$ corrisponde il primo livello, detto livello energetico fondamentale. Finché l'elettrone permane in uno dei possibili stazionari non emette luce;

- l'atomo emette o assorbe luce solo quando un elettrone compie una transizione ossia un salto da uno stato n a un altro m (si vede la figura 5). L'energia emessa o assorbita in tale transizione è

$$E_n - E_m = \frac{Rhc}{m^2} - \frac{Rhc}{n^2} \quad (8)$$

e la frequenza della luce emessa o assorbita è

$$h\nu = \hbar\omega = E_n - E_m, \quad (9)$$

dove, per definizione, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ (acca tagliato);

- l'elettrone che si trova in uno stato stazionario si muove secondo la meccanica classica. Per grandi valori di n gli stati sono energeticamente sempre più vicini e quindi la nuova meccanica è ben approssimata da quella classica per la quale l'energia non è discretizzata (Principio di Corrispondenza di Bohr).

Si noti che l'assunzione che l'energia emessa (o assorbita) sia $h\nu$ è un'ulteriore ipotesi. La spiegazione di questo fenomeno è dovuta ad Albert Einstein che nel 1905 introdusse i quanti di luce. Tuttavia per la sua assunzione Bohr non chiamò in causa il lavoro di Einstein del quale fu un deciso oppositore per molti anni.

Tenendo presente che per la radiazione elettromagnetica si ha $\lambda = \frac{c}{\nu}$, dalle relazioni (8) e (9) si ha immediatamente un'interpretazione della formula di Rydberg (6) in termini di livelli di energia dell'atomo. Il fenomeno delle righe spettrali è quindi spiegato dalla teoria di Bohr. Inoltre, questa rimuove d'autorità il problema del decadimento dell'elettrone (lo stato di energia più bassa non può decadere), fornendo quindi una risposta al problema della stabilità della materia.

Naturalmente questa soluzione rimanda immediatamente a un nuovo problema: come introdurre una regola di quantizzazione di validità generale?

La regola di quantizzazione di Wilson e Sommerfeld

A partire dal 2016 il fisico tedesco Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld e il fisico britannico William Wilson formularono la prima regola universale di quantizzazione generalizzando la teoria di Bohr. Tale regola è anche nota come modello di Wilson-Sommerfeld.

I due fisici ipotizzarono che la variabile azione potesse assumere soltanto dei valori discreti. Più precisamente essi proposero che per tutti i moti periodici la seguente condizione di quantizzazione fosse soddisfatta:

$$A = \frac{1}{2\pi} \oint p dq = n \hbar, \quad (10)$$

dove n è un numero intero positivo.

Dato che l'elettrone in meccanica classica segue orbite kepleriane su un piano determinate dal potenziale $V = -\frac{\alpha}{\rho}$, se ne può immediatamente calcolare l'energia E in termini dell'azione A_ρ corrispondente al moto radiale e dell'azione A_θ corrispondente al moto angolare:

$$E = -\frac{m \alpha^2}{2(A_\rho + A_\theta)^2} = -\frac{m e^4}{2(A_\rho + A_\theta)^2}. \quad (11)$$

Per la seconda uguaglianza basta sostituire α con e^2 in accordo con la (2). La regola di quantizzazione (10) postula che sia A_ρ che A_θ siano multipli interi di \hbar e quindi anche la loro somma. In simboli: $A_\rho + A_\theta = n\hbar$. In definitiva

$$E_n = -\frac{2m \pi^2 e^4}{ch^3} \frac{hc}{n^2} = -\frac{Rhc}{n^2}, \quad (12)$$

che è esattamente l'espressione (7). Si noti che questo risultato definisce la costante di Rydberg R in termini della costante di Planck h , della massa dell'elettrone m , della velocità della luce c e della carica elementare e . Il valore numerico corrisponde a quello osservato sperimentalmente.

A questo punto si sono trovati i livelli di energia dell'atomo e quindi l'energia emessa o assorbita quando l'elettrone compie un salto di stato. Vediamo ora come questo risultato può essere completato associandolo alla lunghezza d'onda della radiazione elettromagnetica emessa nel salto.

Possiamo descrivere il campo elettromagnetico come un oscillatore armonico per il quale classicamente energia e azione sono legate da $E = A\omega = A2\pi\nu$. Dalla regola di quantizzazione ne segue $E_n = nh\nu$, quindi il singolo fotone (il quanto elettromagnetico) ha una energia pari a

$$\epsilon = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (13)$$

come precedentemente ipotizzato da Einstein. Se ammettiamo che l'energia $E_n - E_m = \frac{Rhc}{m^2} - \frac{Rhc}{n^2}$ liberata dal salto di orbita venga emessa sotto forma di un singolo fotone di energia ϵ , si ha come risultato la formula di Rydberg (6).

Si noti che per l'atomo di idrogeno, la (12) è corretta ossia coincide con il risultato della meccanica quantistica moderna, mentre per l'oscillatore armonico la (13) è corretta a meno di una costante additiva pari a $h\nu/2$.

Senza altro, la regola di quantizzazione di Bohr, Wilson e Sommerfeld fu un passo importantissimo nella direzione di una comprensione dei fenomeni quantistici, tuttavia la teoria che ne risultava era un ibrido di meccanica classica e nuovi concetti. Il passo definitivo sarebbe stato compiuto da Schrödinger e Heisenberg.



Figura 6. Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger (Vienna, 12 agosto 1887 - Vienna, 4 gennaio 1961) è stato un fisico austriaco (a sinistra). Vinse il Premio Nobel per la fisica nel 1933 insieme a Paul Dirac. Werner Karl Heisenberg (Würzburg, 5 dicembre 1901 - Monaco di Baviera, 1 febbraio 1976) è stato un fisico tedesco (a destra). Vinse il Premio Nobel per la fisica nel 1932. Sono i due padri della moderna formulazione matematica della meccanica quantistica.

1.3 La nuova teoria dei quanti

Stato di un sistema

Sia $q = (q_1, q_2, \dots, q_n) \in \mathbb{R}^n$ l'insieme delle coordinate di un sistema ($n = 3N$ per un sistema di N particelle, ognuna delle $n = 3N$ variabili q_i coincide una delle tre coordinate di una delle N particelle del sistema). Lo stato di un sistema a ogni istante t è completamente descritto assegnando una funzione d'onda a valori complessi $\psi(q, t)$.

Si noti l'estrema differenza con la meccanica classica per la quale lo stato di un sistema di $3N$ punti materiali a ogni istante t è descritto assegnandone la posizione nello spazio delle fasi ossia assegnando le coordinate della posizione e della quantità di moto di ogni punto materiale per un totale di $6N$ variabili. Questa è una vera rivoluzione, uno strappo enorme rispetto all'idea del mondo concepito dalla meccanica classica.

Naturalmente, quello che serve ora è capire come la funzione d'onda a valori complessi $\psi(q, t)$ possa essere utilizzata per estrarre informazioni sulle le proprietà osservabili del sistema. Per ora ci limiteremo a considerare un solo aspetto, ossia come estrarre informazioni relative alla posizione nello spazio delle fasi.

Probabilità dell'esito di una misura della posizione

Sia $A \subset \mathbb{R}^n$, sia poi $dq = \prod_{i=1}^n dq_i$ l'elemento di volume nello spazio delle configurazioni, allora

$$P_t(A) = \int_A |\psi(q, t)|^2 dq \quad (14)$$

è la probabilità di trovare il sistema in A all'istante t (regola di Born). Questo implica che

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(q, t)|^2 dq = 1, \quad (15)$$

ossia le funzioni d'onda devono essere di quadrato sommabile. In definitiva

$$\rho(q, t) = |\psi(q, t)|^2 \quad (16)$$

è la densità di probabilità associata all'esito di una misura della posizione del sistema.

È importante ribadire e tener ben presente che il vettore di stato quantistico, ossia la funzione d'onda $\psi(q, t)$, costituisce la descrizione completa di un sistema individuale. Quindi bisogna fare attenzione: $\int_A |\psi(q, t)|^2 dq$ non è una probabilità in senso statistico, ossia non è una misura della nostra ignoranza relativa alla posizione del sistema stesso ma è una proprietà intrinseca del singolo sistema che fornisce la probabilità dell'esito di una misura della sua posizione. Non ha quindi senso parlare di posizione nello spazio delle configurazioni prima che questa venga misurata a meno che la funzione d'onda non sia una delta di Dirac, in tal caso la posizione ha un valore oggettivo, indipendentemente dal fatto che si effettui o meno una misura.

L'ambito naturale associato ai vettori di stato quantistici è lo spazio di Hilbert sul quale il prodotto scalare è definito come

$$\langle \phi | \psi \rangle := \int_{\mathbb{R}^n} \phi^*(q, t) \psi(q, t) dq, \quad (17)$$

dove $\psi^*(q, t)$ è il complesso coniugato di $\psi(q, t)$. Si noti che dalla definizione discende immediatamente $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*$ e che la condizione di normalizzazione (15) può essere tradotta come

$$\|\psi\| := \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} = 1. \quad (18)$$

Si noti che ogni funzione d'onda per la quale l'integrale del modulo quadro converge è normalizzabile, per cui ψ e $c\psi$, dove c è una costante complessa qualsiasi diversa da zero, rappresentano lo stesso stato. Se una funzione d'onda non è normalizzata a 1, ci si può sempre ricondurre alla (18) dividendo la funzione per la costante $(\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(q, t)|^2 dq)^{1/2}$ oppure ridefinendo la densità di probabilità come

$$\rho(q, t) = \frac{|\psi(q, t)|^2}{\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(q, t)|^2 dq}. \quad (19)$$

In realtà faremo uso anche di funzioni d'onda non normalizzabili per quali non è possibile definire la relativa densità di probabilità. Per lo più queste funzioni serviranno a descrivere stati nei quali la posizione o altre variabili che caratterizzano il sistema (impulso, energia, ...) hanno un valore certo. Tuttavia le funzioni d'onda non normalizzabili possono sempre essere approssimate con precisione arbitraria da funzioni normalizzabili. Ad esempio una funzione d'onda costante (diciamo uguale a 1) in uno spazio delle configurazioni unidimensionale non è normalizzabile ma può essere sempre approssimata da $\psi_\sigma(x) = e^{\frac{-x^2}{4\sigma^2}}$, nel limite $\sigma \rightarrow \infty$ questa diventa una funzione costante uguale a 1, ma è sempre normalizzabile per ogni σ finito, infatti $\int_{\mathbb{R}} |\psi_\sigma(x)|^2 dx = \sqrt{2\pi}\sigma$.

Principio di sovrapposizione

Il principio di sovrapposizione degli stati costituisce uno dei postulati fondamentali della meccanica quantistica. Esso afferma che se ψ_1 e ψ_2 sono due stati possibili, lo stato

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \quad (20)$$

dove c_1 e c_2 sono due costanti complesse arbitrarie, è anch'esso uno stato possibile.

Si noti che in generale

$$|\psi|^2 = |c_1|^2|\psi_1|^2 + |c_2|^2|\psi_2|^2 + 2\text{Re}(c_1^*\psi_1^*c_2\psi_2) \neq |c_1|^2|\psi_1|^2 + |c_2|^2|\psi_2|^2, \quad (21)$$

quindi la sovrapposizione non si applica alle densità di probabilità ma alla funzione d'onda. Questo spiega anche perché nell'esperimento della doppia fenditura le bande di interferenza scompaiono

quando le fenditure non sono contemporaneamente aperte, ma lo è solo la prima per metà degli elettroni e la seconda per l'altra metà. Nel caso in cui entrambe le fenditure sono aperte la funzione d'onda è $\psi = \psi_1 + \psi_2$, dove le due componenti ψ_1 e ψ_2 si riferiscono alla funzione d'onda uscente rispettivamente dalla prima e dalla seconda apertura. In questo caso la densità di probabilità è proporzionale a $|\psi_1 + \psi_2|^2$ (il coefficiente di proporzionalità è assegnato dalla normalizzazione). Nel caso in cui solo una delle fenditure è aperta la funzione d'onda uscente è ψ_1 (prima fenditura aperta) oppure ψ_2 (seconda fenditura aperta). In questo caso la densità di probabilità globale (relativa a tutti gli elettroni rilevati) è proporzionale a $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$ (anche in questo caso il coefficiente di proporzionalità è assegnato dalla normalizzazione). La differenza è che nel primo caso la densità dipende dal termine di interferenza $2Re(\psi_1^*\psi_2)$ che nel secondo caso è assente.

È molto importante notare che la funzione d'onda, che ha un significato probabilistico, si sovrappone come un'onda ordinaria. Questo è un principio fondamentale della meccanica quantistica e da esso segue necessariamente che tutte le equazioni, inclusa l'equazione di Schrödinger devono necessariamente essere lineari rispetto a ψ .

Operatori, operatori lineari e operatori hermitiani

La probabilità della posizione del sistema nello spazio delle configurazioni non esaurisce le informazioni che possiamo ricavare dalla funzione d'onda, questa infatti fornisce le informazioni probabilistiche relative al risultato di una misura relativa ad ogni altra variabile. Per capire come è necessario introdurre nuovi strumenti matematici.

Un operatore \hat{f} trasforma ogni funzione d'onda $\psi = \psi(q, t)$ dello spazio di Hilbert in un'altra funzione d'onda $\hat{f}\psi(q, t)$. Ad esempio la derivata $\frac{\partial}{\partial q_1}$ è l'operatore che trasforma la funzione $\psi(q, t)$ nella funzione $\frac{\partial\psi}{\partial q_1}(q, t)$, il laplaciano $\sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial q_i^2}$ è l'operatore che trasforma la funzione $\psi(q, t)$ nella funzione $\sum_{i=1}^n \frac{\partial^2\psi}{\partial q_i^2}(q, t)$, la moltiplicazione per il modulo della posizione $|q|$ è l'operatore che trasforma la funzione $\psi(q, t)$ nella funzione $|q|\psi(q, t)$.

L'operatore è lineare se $\hat{f}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{f}\psi_1 + c_2\hat{f}\psi_2$ per due funzioni ψ_1 e ψ_2 qualsiasi e per due costanti complesse c_1 e c_2 qualsiasi. È facile verificare che tutti e tre gli operatori degli esempi fatti sopra sono lineari.

L'aggiunto \hat{f}^+ di \hat{f} è definito come l'operatore per il quale l'uguaglianza $\langle \hat{f}^+\phi | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{f}\psi \rangle$ è verificata per ogni coppia di funzioni d'onda. Tenendo conto che la definizione di prodotto implica $\langle \hat{f}^+\phi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{f}^+\phi \rangle^*$ possiamo equivalentemente definire l'aggiunto come l'operatore per il quale l'uguaglianza $\langle \psi | \hat{f}^+\phi \rangle^* = \langle \phi | \hat{f}\psi \rangle$ è verificata per ogni ψ e ϕ .

Un operatore lineare \hat{f} è hermitiano (o autoaggiunto) se vale la seguente proprietà

$$\hat{f}^+ = \hat{f}, \quad (22)$$

che è equivalente a dire che

$$\langle \psi | \hat{f}\phi \rangle^* = \langle \hat{f}\phi | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{f}\psi \rangle \quad (23)$$

deve essere verificata per ogni ϕ e ψ . Tornando agli esempi fatti sopra, vedremo in seguito che $\sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial q_i^2}$ e $|q|$ sono hermitiani mentre $\frac{\partial}{\partial q_1}$ non lo è.

La media di un operatore \hat{f} rispetto allo stato ψ è definita come

$$\langle \hat{f} \rangle := \langle \psi | \hat{f}\psi \rangle, \quad (24)$$

e nel caso di operatori hermitiani essa è sempre reale. Infatti dall'equazione (23) si ha

$$\langle \psi | \hat{f}\psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{f}\psi \rangle. \quad (25)$$

È anche vero che se la media $\langle \chi | \hat{f} \chi \rangle$ di un operatore è reale per ogni funzione χ allora questo è hermitiano. Supponiamo appunto che $\langle \chi | \hat{f} \chi \rangle \in \mathbb{R}$ per ogni χ , ponendo $\chi = \psi + e^{i\alpha} \phi$ abbiamo che $\langle \psi | \hat{f} \psi \rangle + \langle \phi | \hat{f} \phi \rangle + e^{i\alpha} \langle \psi | \hat{f} \phi \rangle + e^{-i\alpha} \langle \phi | \hat{f} \psi \rangle \in \mathbb{R}$ per ogni valore della costante reale α . I primi due termini della somma sono reali per ipotesi, quindi $e^{i\alpha} \langle \psi | \hat{f} \phi \rangle + e^{-i\alpha} \langle \phi | \hat{f} \psi \rangle$ deve essere reale per ogni α . Questo, a sua volta, implica $\langle \psi | \hat{f} \phi \rangle^* = \langle \phi | \hat{f} \psi \rangle$ per ogni ϕ e ψ e quindi, tenendo conto della definizione (23), implica l'hermitianità dell'operatore.

Autovalori, autostati e decomposizione spettrale

Un'ulteriore semplice conseguenza è che gli autovalori di un operatore hermitiano sono tutti reali. Si consideri l'autostato ψ_α e il corrispondente autovalore f_α , ossia sia la funzione $\psi_\alpha = \psi_\alpha(q)$ (indipendente dal tempo) tale che

$$\hat{f} \psi_\alpha = f_\alpha \psi_\alpha, \quad (26)$$

dove f_α è l'autovalore (una costante). Si avrà

$$\langle \psi_\alpha | \hat{f} \psi_\alpha \rangle = \langle \psi_\alpha | f_\alpha \psi_\alpha \rangle = f_\alpha \langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle, \quad (27)$$

dato che $\langle \psi_\alpha | \hat{f} \psi_\alpha \rangle \in \mathbb{R}$ per via della (25), l'autovalore f_α è reale. Si noti che si è implicitamente assunto che $\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = \|\psi_\alpha\|^2$ sia finito, vedremo che questo è vero solo se esiste al più un'infinità numerabile di autovalori (spettro discreto). Nel caso in cui gli autovalori assumono valori con continuità (spettro continuo), gli autostati non sono normalizzabili, tuttavia anche in questo caso si può far vedere, con una procedura di limite, che gli autovalori sono tutti reali.

Gli autostati ψ_α e ψ_β corrispondenti ad autovalori diversi $f_\alpha \neq f_\beta$ di un operatore hermitiano sono ortogonali, infatti l'hermitianità implica

$$\langle \hat{f} \psi_\beta | \psi_\alpha \rangle = \langle \psi_\beta | \hat{f} \psi_\alpha \rangle \rightarrow f_\beta \langle \psi_\beta | \psi_\alpha \rangle = f_\alpha \langle \psi_\beta | \psi_\alpha \rangle \rightarrow \langle \psi_\beta | \psi_\alpha \rangle = 0, \quad (28)$$

questo è vero sia per operatori con spettro discreto che per operatori con spettro continuo.

D'ora in poi indicheremo con le lettere n oppure m gli autovalori f_n oppure f_m e gli autostati ψ_n oppure ψ_m corrispondenti allo spettro discreto e con le lettere u oppure v gli autovalori f_u oppure f_v e gli autostati ψ_u oppure ψ_v corrispondenti allo spettro continuo.

In generale, per operatori con spettro discreto, è possibile trovare una base ortonormale. Infatti, come abbiamo visto, gli autostati corrispondenti ad autovalori diversi sono già ortogonali, poi per ognuno dei sottospazi corrispondenti a uno stesso autovalore si può trovare una relativa base ortonormale. È quindi possibile la decomposizione

$$\psi(q, t) = \sum_n c(n, t) \psi_n(q) \quad (29)$$

con

$$\hat{f} \psi_n = f_n \psi_n, \quad \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{n,m} \rightarrow \langle \psi_m | \hat{f} \psi_n \rangle = f_n \delta_{n,m}, \quad (30)$$

dove $\delta_{n,m}$ è la delta di Kronecker. È utile sottolineare ancora che i valori f_n non sono necessariamente tutti diversi.

Nel caso di operatori con spettro continuo si procede in modo analogo e si ottiene la decomposizione rispetto a una base ortonormale secondo Dirac:

$$\psi(q, t) = \int c(u, t) \psi_u(q) du \quad (31)$$

con

$$\hat{f}\psi_u = f_u\psi_u, \quad \langle \psi_u | \psi_v \rangle = \delta(u - v) \quad \rightarrow \quad \langle \psi_u | \hat{f}\psi_v \rangle = f_v \delta(u - v), \quad (32)$$

dove $\delta(u - v)$ è una delta di Dirac.

Per alcuni operatori lo spettro può essere in parte discreto e in parte continuo (vedremo in seguito degli esempi rilevanti), in tal caso

$$\psi(q, t) = \sum_n c(n, t) \psi_n(q) + \int c(u, t) \psi_u(q) du, \quad (33)$$

dove gli autostati dello spettro continuo sono ortogonali a quelli dello spettro discreto.

Proprietà dei coefficienti della decomposizione spettrale

I coefficienti $c(n, t)$ si ottengono per integrazione come $c(n, t) = \langle \psi_n | \psi \rangle$, infatti, tenendo conto della condizione $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{n,m}$, si ha

$$\langle \psi_n | \psi \rangle = \int \psi_n^*(q) \psi(q, t) dq = \sum_m c(m, t) \int \psi_n^*(q) \psi_m(q) dq = c(n, t), \quad (34)$$

Dove per la seconda uguaglianza si è usato (29). Anche i coefficienti $c(u, t)$ si ottengono per integrazione:

$$c(u, t) = \int \psi_u^*(q) \psi(q, t) dq = \langle \psi_u | \psi \rangle, \quad (35)$$

tenendo stavolta conto della relazione $\langle \psi_u | \psi_v \rangle = \delta(u - v)$ e della (31).

Per gli operatori con spettro discreto, tenendo conto che la funzione d'onda (29) è normalizzata e tenendo conto della condizione $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{n,m}$ si verifica facilmente che $\sum_n |c(n, t)|^2 = 1$. Infatti

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n,m} c^*(m, t) c(n, t) \int \psi_m^*(q) \psi_n(q) dq = \sum_n |c(n, t)|^2. \quad (36)$$

In modo analogo per gli operatori con spettro continuo, tenendo conto che la funzione d'onda (31) è normalizzata e tenendo conto della condizione $\langle \psi_u | \psi_v \rangle = \delta(u - v)$, si verifica facilmente che $\int |c(u, t)|^2 du = 1$, infatti

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \int \int du dv c^*(u, t) c(v, t) \int \psi_u^*(q) \psi_v(q) dq = \int |c(u, t)|^2 du. \quad (37)$$

Infine, per gli operatori con spettro in parte discreto e in parte continuo si verifica (lasciamo tale verifica come esercizio) che $\sum_n |c(n, t)|^2 + \int |c(u, t)|^2 du = 1$.

Probabilità dell'esito di una misura di un'osservabile

Il motivo per il quale abbiamo tanto parlato degli operatori hermitiani dovrebbe essere a questo punto chiaro. Il fatto che gli autovalori (sia discreti che continui) sono reali ci fa pensare che questi possano essere messi in corrispondenza con i valori che una variabile fisica può assumere in seguito a una misura. Inoltre il fatto $c(n, t)$ o le $c(u, t)$ siano di quadrato sommabile ci fa pensare che queste possano essere rispettivamente interpretate come probabilità o densità di probabilità.

Possiamo quindi enunciare il seguente postulato fondamentale: a ogni osservabile fisica f è associato un operatore lineare hermitiano \hat{f} , i valori di una misura di una osservabile sono

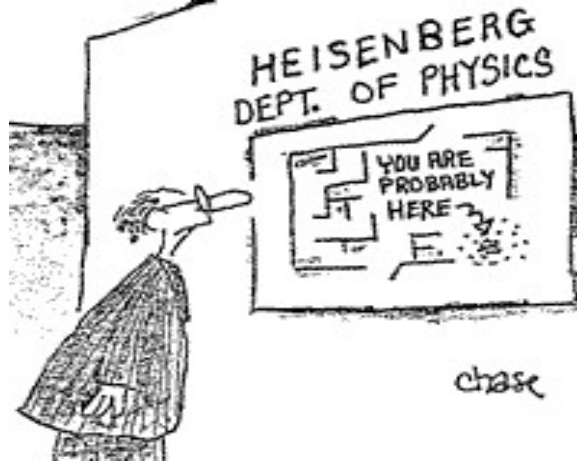


Figura 7. Regola di Born generalizzata: nel caso di variabili discrete, la probabilità che il sistema sia trovato nello stato ψ_n corrispondente al valore f_n della variabile, è $|c(n, t)|^2$; nel caso di variabili continue, la densità di probabilità che il sistema sia trovato nello stato ψ_u , corrispondente al valore f_u della variabile, è $|c(u, t)|^2$

esclusivamente gli autovalori di \hat{f} . In particolare, se lo spettro di \hat{f} è discreto, la variabile prende solo valori discreti (quantizzati), in caso contrario, se lo spettro è continuo, la variabile prende valori continui. Le relative probabilità si calcolano a partire dalla funzione d'onda $\psi(q, t)$.

Possiamo enunciare la regola di Born generalizzata, separando i due casi, quello a spettro discreto e quello a spettro continuo.

Nel caso di variabili discrete, la probabilità che il sistema sia trovato in seguito a una misura nello stato ψ_n , corrispondente al valore f_n della variabile, è $p(n, t) = |c(n, t)|^2$. Si noti che $p(n, t)$ è positiva ed è normalizzata dato che $\sum_n |c(n, t)|^2 = 1$.

Il valore medio $\langle \hat{f} \rangle$ della variabile relativo allo stato $\psi(q, t)$ sarà quindi

$$\langle \hat{f} \rangle = \int \psi^*(q, t) \hat{f} \psi(q, t) dq = \sum_n |c(n, t)|^2 f_n = \sum_n p(n, t) f_n, \quad (38)$$

dove si è fatto uso della (29) e della uguaglianza a destra nella (30).

Nel caso di variabili continue la densità di probabilità che il sistema sia trovato nello stato ψ_u , corrispondente al valore f_u della variabile, è $\rho(u, t) = |c(u, t)|^2$. Si noti che $\rho(u, t)$ è positiva ed è normalizzata dato che $\int du |c(u, t)|^2 = 1$.

Il valore medio $\langle \hat{f} \rangle$ della variabile, relativo allo stato $\psi(q, t)$, sarà quindi

$$\langle \hat{f} \rangle = \int \psi^*(q, t) \hat{f} \psi(q, t) dq = \int |c(u, t)|^2 f_u du = \int \rho(u, t) f_u du, \quad (39)$$

dove si è fatto uso della (31) e dell'uguaglianza a destra nella (32).

Nelle ultime due formule si vede chiaramente che la media ha una struttura probabilistica ordinaria. È facile verificare che entrambe le formule rimangono valide se al posto dell'operatore \hat{f} si prende in considerazione l'operatore \hat{f}^m con m intero positivo. In tal caso infatti gli autostati sono sempre quelli relativi a \hat{f} ma gli autovalori sono $(f_n)^m$ (caso discreto) o $(f_u)^m$ (caso continuo). Per cui

$$\langle \hat{f}^m \rangle = \sum_n p(n, t) (f_n)^m, \quad (40)$$

nel caso discreto e

$$\langle \hat{f}^m \rangle = \int \rho(u, t) (f_u)^m du, \quad (41)$$

nel caso di spettro continuo.

È importante ribadire nuovamente che il vettore di stato quantistico, ossia la funzione d'onda $\psi(q, t)$, costituisce la descrizione completa di un sistema individuale. Quindi bisogna fare attenzione: la probabilità $|c(n, t)|^2$ e la densità di probabilità $|c(u, t)|^2$ non hanno un significato statistico, ossia non sono una misura della nostra ignoranza relativa alla posizione del sistema stesso ma sono una proprietà intrinseca del singolo sistema. Non ha quindi senso dire che la variabile ha un valore f_n o f_u prima che questa venga misurata a meno che la funzione d'onda non sia un autostato dell'operatore \hat{f} , in tal caso la variabile ha un valore oggettivo, indipendentemente dal fatto che si effettui o meno una misura.

2. Posizione, impulso ed energia: le leggi del moto

2.1 Posizione e momento: autostati, autovalori e commutatori

Autostati e autovalore degli operatori posizione e momento

Si consideri per ora un sistema a un grado di libertà ($n=1$), ossia un punto materiale che smuove in una dimensione. In questo caso la funzione d'onda $\psi(x, t)$ dipenderà dall'unica coordinata x (oltre che dal tempo). Si definisce l'operatore posizione \hat{x} come l'operatore che moltiplica la funzione d'onda $\psi(x, t)$ per x , ossia:

$$\hat{x}\psi(x, t) = x\psi(x, t). \quad (42)$$

È facile verificare che questo operatore è hermitano, infatti risulta in modo banale

$$\langle \phi | \hat{x} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x, t) x \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} [\hat{x} \phi(x, t)]^* \psi(x, t) dx = \langle \hat{x} \phi | \psi \rangle. \quad (43)$$

Gli autostati $\psi_{x_0}(x)$ di questo operatore, corrispondenti all'autovalore x_0 sono

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \rightarrow \hat{x}\psi_{x_0}(x) = x\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x). \quad (44)$$

Lo spettro è continuo, infatti tutti i valori reali di x_0 sono possibili, questo si riflette nel fatto che

$$\langle \psi_{x_0} | \psi_{x_1} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) \delta(x - x_1) dx = \delta(x_0 - x_1). \quad (45)$$

Si noti che utilizzando la (35) risulta $c(x_0, t) = \psi(x_0, t)$, pertanto la densità di probabilità di trovare il sistema in x_0 all'istante t è data da $\rho(x_0, t) = |c(x_0, t)|^2 = |\psi(x_0, t)|^2$. Questo significa che la regola di Born relativa alla sola posizione è un caso particolare della regola di Born generalizzata relativa a una qualsiasi osservabile (non era scontato).

L'operatore impulso \hat{p} (o quantità di moto o momento) è invece definito come

$$\hat{p}\psi(x, t) = -i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x}. \quad (46)$$

Anche in questo caso è facile verificare che questo operatore è hermitiano, infatti risulta in modo banale

$$\langle \phi | \hat{p} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-i\hbar \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} \right)^* \psi(x, t) dx = \langle \hat{p} \phi | \psi \rangle, \quad (47)$$

dove l'uguaglianza tra i due integrali si ottiene per integrazione per parti, tenendo conto che le funzioni d'onda sono di quadrato sommabile e quindi si annullano a $\pm\infty$. Gli autostati $\psi_p(x)$ di questo operatore, corrispondenti all'autovalore p sono

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \rightarrow \hat{p}\psi_p(x) = -i\hbar \frac{\partial \psi_p(x)}{\partial x} = p\psi_p(x). \quad (48)$$

Lo spettro è continuo, infatti tutti i valori reali di p sono possibili, questo si riflette nel fatto che

$$\langle \psi_{p_0} | \psi_{p_1} \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{(p_1-p_0)x}{\hbar}} dx = \delta(p_0 - p_1). \quad (49)$$

Applicando la (35) risulta che

$$c(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{px}{\hbar}} \psi(x, t) dx \quad (50)$$

e quindi che la densità di probabilità di avere p come risultato della misura dell'impulso è $\rho(p, t) = |c(p, t)|^2$.

Si noti che la lunghezza d'onda associata allo stato in (??) è quella per la quale le fasi px/\hbar e $p(x + \lambda)/\hbar$ differiscono di 2π ed è quindi $\lambda = h/p$. Questa è la lunghezza d'onda rilevante nell'esperimento della doppia fenditura.

Se il sistema è composto da N particelle, per ognuna di esse si definiscono gli operatori posizione e gli operatori impulso. Per una data particella si ha $\hat{x}_i \psi = x_i \psi$ con $i = 1, 2, 3$ e $\hat{p}_i \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_i}$.

Con un certo abuso di notazione gli operatori posizione e impulso di una particella nello spazio a tre dimensioni possono essere scritti in forma vettoriale come $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}$, $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$. I relativi autostati, possono essere quindi indicati da $\psi_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x})$ con autovalore vettoriale \mathbf{x}_0 e $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$ con autovalore vettoriale \mathbf{p} .

Ci si convince facilmente che $\psi_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}) = \psi_{x_0}(x)\psi_{y_0}(y)\psi_{z_0}(z)$ e $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \psi_{p_x}(x)\psi_{p_y}(y)\psi_{p_z}(z)$, basta infatti verificare per ogni componente, ad esempio, $\hat{z}\psi_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}) = z_0\psi_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x})$. Si noti che qui abbiamo usato x, y, z, x_0, y_0, z_0 e p_x, p_y, p_z , invece delle corrispondenti variabili con indici $i = 1, 2, 3$, per evitare un'aggrovigliarsi di pedici.

Prodotto e commutatore di operatori: il commutatore fondamentale

Il prodotto $\hat{f}\hat{g}$ di due operatori è anch'esso un operatore ed è definito da

$$\hat{f}\hat{g}\psi = \hat{f}(\hat{g}\psi). \quad (51)$$

In generale gli operatori $\hat{f}\hat{g}$ e $\hat{g}\hat{f}$ sono diversi. Si definisce commutatore di \hat{f} e \hat{g} l'operatore

$$[\hat{f}, \hat{g}] = \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}. \quad (52)$$

Se $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$ si dice che i due operatori commutano, altrimenti, se $[\hat{f}, \hat{g}] \neq 0$, si dice che non commutano.

Si verifica facilmente che per le tre componenti di posizione e impulso della stessa particella $\hat{p}_i \hat{x}_i \psi = \hat{x}_i \hat{p}_i \psi - i\hbar \psi$, infatti

$$\hat{p}_i \hat{x}_i \psi = -i\hbar \frac{\partial(x_i \psi)}{\partial x_i} = -i\hbar x_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} - i\hbar \psi = \hat{x}_i \hat{p}_i \psi - i\hbar \psi, \quad (53)$$

analogamente si verifica che $\hat{p}_i \hat{x}_j \psi = \hat{x}_j \hat{p}_i \psi$ se $i \neq j$.

Si ottiene quindi il commutatore fondamentale

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{i,j}, \quad (54)$$

si verificano inoltre facilmente le seguenti relazioni

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (55)$$

Infine è facile verificare che impulsi e momenti corrispondenti a particelle diverse commutano sempre, come del resto qualsiasi coppia di variabili appartenenti a particelle distinte.

Si noti l'analogia formale tra il commutatore fondamentale e le parentesi di Poisson fondamentali. In un certo senso la meccanica quantistica si ottiene sostituendo le variabili classiche con i relativi operatori in modo che

$$\{f, g\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{f}, \hat{g}]. \quad (56)$$

Vedremo che questa analogia diventa ancora più stretta quando si considera la dinamica.

Nei prossimi esercizi mostreremo alcuni operatori hermitiani che si ottengono come combinazioni di \hat{q} e \hat{p} (ad esempio $\hat{x}^2 = x^2$, $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, $\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} = -2i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} - i\hbar$). Questo è importante, perché in meccanica quantistica, come in meccanica classica, tutte le variabili rilevanti (energia, momento angolare,...) si ottengono come combinazione di impulso e posizione di uno o più punti materiali.

Dimostriamo infine che due operatori hermitiani commutano se e solo se esiste una base di autovettori comune. In tal caso si dice che sono compatibili, nel caso contrario che sono incompatibili. Per semplicità facciamo riferimento al caso di spettro discreto, il caso di spettro continuo è del tutto analogo.

Se esiste una base di autovettori comune ψ_n tale che $\hat{f}\psi_n = f_n\psi_n$ e $\hat{g}\psi_n = g_n\psi_n$ si avrà per qualsiasi funzione d'onda $\psi = \sum_n c(n)\psi_n$:

$$[\hat{f}, \hat{g}]\psi = \sum_n c(n)(\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f})\psi_n = \sum_n c(n)(f_n g_n - g_n f_n)\psi_n = 0 \quad (57)$$

e quindi necessariamente il commutatore $[\hat{f}, \hat{g}]$ è identicamente nullo. Letto al contrario, questo risultato implica che se due operatori non commutano, non possono avere una base comune.

Supponiamo ora che i due operatori commutino e consideriamo un qualsiasi autostato ψ_n dell'operatore \hat{f} , si avrà quindi

$$\hat{f}\hat{g}\psi_n = \hat{g}\hat{f}\psi_n = \hat{g}f_n\psi_n = f_n\hat{g}\psi_n \quad (58)$$

e quindi $\hat{g}\psi_n$ è ancora un autostato di \hat{f} con autovalore f_n . Se gli autostati di \hat{f} sono tutti non degeneri, ossia non ci sono due autostati di \hat{f} con stesso autovalore, si ha necessariamente che $\hat{g}\psi_n$ e ψ_n differiscono solo per una costante moltiplicativa, in altre parole $\hat{g}\psi_n = g_n\psi_n$. Ne discende quindi che i due operatori hanno la stessa base e il teorema è dimostrato.

Se invece all'autovalore f_n corrispondono più stati ortonormali ψ_l , dalla (58) possiamo solo dedurre che $\hat{g}\psi_n = \sum_l \gamma_{n,l}\psi_l$, dove la somma va solo su stati ψ_l con stesso autovalore f_n di \hat{f} . Tuttavia, in ogni sottospazio generato dall'autovalore f_n è possibile trovare una base per la quale gli autostati sono anche autostati di \hat{g} , ossia $\gamma_{n,l}$ è diagonale e quindi $\hat{g}\psi_n = \gamma_{n,n}\psi_n = g_n\psi_n$ dove abbiamo posto per definizione $g_n = \gamma_{n,n}$.

In definitiva si trova sempre una base per la quale $\hat{g}\psi_n = g_n\psi_n$ e contemporaneamente $\hat{f}\psi_n = f_n\psi_n$, questo significa che la variabile f e la variabile g possono assumere contemporaneamente un valore certo come risultato di una misura.

Al contrario, come vedremo tra poco, esiste una limitazione fondamentale alla possibilità di misurare contemporaneamente e con precisione il valore di due variabili con operatori non commutanti.

Esercizi

- Si mostri che, analogamente alle parentesi di Poisson, i commutatori soddisfano l'identità di Jacobi $[\hat{f}, [\hat{g}, \hat{h}]] + [\hat{g}, [\hat{h}, \hat{f}]] + [\hat{h}, [\hat{f}, \hat{g}]] = 0$.
- Si mostri che $(\hat{f}\hat{g})^+ = \hat{g}^+\hat{f}^+ = \hat{g}\hat{f}$, dove la seconda uguaglianza vale solo se \hat{g} e \hat{f} sono entrambi hermitiani. Conseguentemente e analogamente $(\hat{f}_1\hat{f}_2\dots\hat{f}_L)^+ = \hat{f}_L^+\hat{f}_{L-1}^+\dots\hat{f}_1^+ = \hat{f}_L\hat{f}_{L-1}\dots\hat{f}_1$.
- Si mostri che gli operatori $i[\hat{f}, \hat{g}]$, $\hat{f}\hat{g} + \hat{g}\hat{f}$ e $\hat{f} + \hat{g}$ sono tutti hermitiani se \hat{f} e \hat{g} sono entrambi hermitiani.
- Sia $G(\hat{x})$ l'operatore tale che $G(\hat{x})\psi(x, t) = G(x)\psi(x, t)$ dove $G(x)$ è una funzione reale della x . Si mostri che $G(\hat{x})$ e \hat{p}^n , con n intero non negativo, sono entrambi hermitiani. Si usi il risultato per mostrare che anche l'operatore hamiltoniana $\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ è hermitiano.
- Si dica quali tra i seguenti operatori $\hat{x}\hat{p}$, $\hat{p}\hat{x}$, $\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}$, $\hat{p}\hat{x}\hat{p}$, $\hat{p}^2\hat{x}$ e $\hat{x}\hat{p}^2$ sono hermitiani.
- Si calcolino i commutatori (sarebbe meglio dire si semplifichi l'espressione dei commutatori) $[\hat{p}^2, \hat{x}]$ e $[\hat{p}, \hat{x}^2]$ e li si confronti con gli analoghi classici $\{p^2, x\}$ e $\{p, x^2\}$.
- Si calcoli $[\hat{p}, G(\hat{x})]$ dove $G(x)$ è una qualsiasi funzione derivabile della x e lo si confronti con l'analogo classico, $\{p, G(x)\}$.
- Si calcolino i commutatori $\hat{c}_1 = [\hat{p}^2\hat{x}, \hat{x}]$ e $\hat{c}_2 = [\hat{x}\hat{p}^2, \hat{x}]$ e si costruisca almeno un operatore hermitiano che sia una combinazione lineare di \hat{c}_1 e \hat{c}_2 .

Esercizi svolti

- Si calcoli il commutatore $[\hat{x}^3, \hat{p}^3]$ e si dica se è hermitiano.

È immediato verificare che questo operatore non è hermitiano, anzi è antihermitiano. Si ha infatti $[\hat{x}^3, \hat{p}^3]^+ = (\hat{x}^3\hat{p}^3 - \hat{p}^3\hat{x}^3)^+ = (\hat{x}^3\hat{p}^3)^+ - (\hat{p}^3\hat{x}^3)^+ = \hat{p}^3\hat{x}^3 - \hat{x}^3\hat{p}^3 = -[\hat{x}^3, \hat{p}^3]$. Per i passaggi qui sopra abbiamo utilizzato la proprietà $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$ e l'hermitianità dei due operatori \hat{p} e \hat{x} .

Per semplificare il commutatore utilizziamo come unico ingrediente l'uguaglianza $[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$. Avremo allora $[\hat{x}^3, \hat{p}^3] = \hat{x}^3\hat{p}^3 - \hat{p}^3\hat{x}^3 = \hat{x}^2(\hat{x}\hat{p})\hat{p}^2 - \hat{p}^3\hat{x}^3 = \hat{x}^2(\hat{p}\hat{x} + i\hbar)\hat{p}^2 - \hat{p}^3\hat{x}^3 = \hat{x}^2\hat{p}\hat{x}\hat{p}^2 - \hat{p}^3\hat{x}^3 + i\hbar\hat{x}^2\hat{p}^2$. Si continua in modo iterativo utilizzando sempre l'uguaglianza $\hat{x}\hat{p} = \hat{p}\hat{x} + i\hbar$, alla fine si avrà: $[\hat{x}^3, \hat{p}^3] = 3i\hbar\hat{x}^2\hat{p}^2 + 3i\hbar\hat{x}\hat{p}^2\hat{x} + 3i\hbar\hat{p}^2\hat{x}^2$. Anche usando quest'ultima espressione è facile verificare che il commutatore è antihermitiano.

- Si considerino due distinte particelle che vivono entrambe nello stesso spazio unidimensionale, e si definiscano l'impulso medio (o del baricentro) e l'impulso relativo come $\hat{p}_g = \frac{\hat{p}_1 + \hat{p}_2}{2}$ e $\hat{p} = \hat{p}_1 - \hat{p}_2$. Questi due operatori commutano perché commutano \hat{p}_1 e \hat{p}_2 , si trovi quindi una base ortonormale comune.

La base comune è composta dagli autostati

$$\psi_{p_g, p}(x_1, x_2) = \psi_{p_g + \frac{p}{2}}(x_1) \psi_{p_g - \frac{p}{2}}(x_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{(p_g + p/2)x_1}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{(p_g - p/2)x_2}{\hbar}}, \quad (59)$$

questi sono infatti contemporaneamente autostati dell'operatore $\hat{p}_g = -\frac{i}{2}(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2})$ e $\hat{p} = -i(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2})$ con rispettivi autovalore p_g e p . Questi autostati sono inoltre ortonormali secondo Dirac, si ha infatti

$$\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \psi_{p'_g, p'}^*(x_1, x_2) \psi_{p_g, p}(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \delta(p_g - p'_g) \delta(p - p'), \quad (60)$$

dove il calcolo dell'integrale si esegue facilmente se si fa il cambio di variabili $y = \frac{x_1 + x_2}{h}$, $z = \frac{x_1 - x_2}{2h}$ e si tiene presente che $\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} du e^{i\alpha u} = \delta(\alpha)$.

2.2 Principio di indeterminazione di Heisenberg

La disuguaglianza

Consideriamo di nuovo un sistema unidimensionale per il quale $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ e dimostriamo la relazione di indeterminazione di Heisenberg $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ dove Δx e Δp sono le indeterminazioni relative alla misura di posizione e impulso (deviazioni standard) definiti come

$$(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \langle [\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle]^2 \rangle \quad (\Delta p)^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \langle [\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle]^2 \rangle. \quad (61)$$

Consideriamo un operatore (non hermitiano)

$$\hat{A} = [\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle] + i\alpha[\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle], \quad (62)$$

dove α è un numero reale qualsiasi. È immediato verificare che $\langle \hat{A}^+ \hat{A} \rangle \geq 0$, infatti

$$\langle \hat{A}^+ \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \hat{A}^+ \hat{A} \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{A} \psi(x, t))^* \hat{A} \psi(x, t) dx \geq 0. \quad (63)$$

Dato che $\hat{A}^+ = [\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle] - i\alpha[\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle]$, la relazione (63) implica immediatamente

$$\langle [\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle]^2 \rangle + i\alpha \langle [\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle, \hat{p} - \langle \hat{p} \rangle] \rangle + \alpha^2 \langle [\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle]^2 \rangle \geq 0. \quad (64)$$

Dato che sia $\langle \hat{x} \rangle$ che $\langle \hat{p} \rangle$ sono dei semplici numeri dipendenti dal tempo che commutano con tutto, si ha $[\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle, \hat{p} - \langle \hat{p} \rangle] = [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ e quindi la disuguaglianza diventa:

$$(\Delta x)^2 - \alpha\hbar + \alpha^2(\Delta p)^2 \geq 0, \quad (65)$$

dove si sono usate le definizioni in (61). La (65) deve essere soddisfatta per qualsiasi valore di α e quindi il discriminante deve essere non positivo, ossia

$$\hbar^2 - 4(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \leq 0, \quad (66)$$

da cui si ricava finalmente l'importantissima relazione di indeterminazione di Heisenberg:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (67)$$

Questa stessa disuguaglianza è soddisfatta da ogni coppia di variabili x_i e p_i per una qualsiasi particella di un sistema, inoltre essa può essere stabilita per ogni coppia di variabili coniugate Q e P i cui operatori soddisfano $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar$.

Abbiamo visto in precedenza che se invece due operatori hermitiani commutano, esiste una base di autostati comune a entrambi, questo significa che le variabili associate possono assumere un valore certo contemporaneamente.

L'interpretazione

La relazione (67), anche nota come principio di indeterminazione di Heisenberg, implica che per una particella non è possibile misurare (e quindi conoscere) il valore della posizione e quello della quantità di moto con precisione assoluta. Tanto più si tenta di ridurre l'incertezza su una variabile, tanto più aumenta l'incertezza sull'altra. Il principio d'indeterminazione è un principio d'assoluta generalità ed è a fondamento della fisica moderna.

Nell'interpretazione standard (interpretazione di Copenaghen) si assume che una particella *non possieda* contemporaneamente una posizione e una velocità certe, in qualche modo si rinuncia a una rappresentazione della realtà in termini di entità provviste di proprietà certe anche se ignote. Tuttavia se misuriamo la posizione di una particella questa assumerà un valore ben definito ma a quel punto l'impulso sarà completamente indeterminato per via del principio di Heisenberg. Analogamente se ne misuriamo l'impulso questo assumerà un valore ben definito ma la posizione risulterà assolutamente indeterminata.

Si tenga inoltre sempre presente che anche per le sole variabili posizione e impulso prese separatamente non senso dire che hanno un valore specifico prima che queste vengano misurate a meno che la funzione d'onda non sia un autostato di \hat{x} e in tal caso la posizione ha un valore oggettivo oppure un autostato di \hat{p} e in tal caso l'impulso ha un valore oggettivo.

In definitiva i valori delle grandezze fisiche che caratterizzano un sistema emergono solo dall'interazione tra l'osservatore (che misura) e il sistema stesso. Siamo quindi di fronte a una rappresentazione di una realtà che non ha proprietà indipendenti da osservatori e interazioni a differenza della realtà classica.

La meccanica quantistica, ha ora un secolo di vita e non è mai stata invalidata sperimentalmente, tuttavia agli inizi fu molto criticata proprio per le implicazioni 'filosofiche'.

Ad esempio, Albert Einstein, pur avendo contribuito alla sua nascita (vinse il Nobel per gli studi sull'effetto fotoelettrico, un importante fenomeno quantistico) non digerì mai questa teoria per la quale esistono solo delle mere probabilità di osservare alcuni eventi e peraltro queste probabilità non sono statistiche ma si ottengono dalla funzione d'onda che descrive completamente lo stato del sistema.

Inoltre Einstein sosteneva che la realtà fosse un elemento oggettivo, che esiste e ha proprietà indipendentemente dalla presenza o meno di un osservatore e indipendentemente dalle interazioni. Questo lo pose in contrasto con il fisico danese Niels Bohr, che era del tutto a suo agio con la meccanica quantistica e ovviamente con l'interpretazione di Copenaghen.

Einstein rivolse proprio a Bohr la domanda seguente: "Veramente è convinto che la luna non esista quando nessuno la osserva?". Non è facile rispondere, ma a pensarci bene è una domanda che per definizione non ha risposta.

Esercizio



Figura 8. Albert Einstein e Niels Bohr. Albert Einstein (Ulma, 14 marzo 1879 - Princeton, 18 aprile 1955) è generalmente considerato il fisico più importante del XX secolo. Nel 1921 gli fu assegnato il Premio Nobel per la Fisica per la scoperta della legge dell'effetto fotoelettrico. Niels Henrik David Bohr (Copenaghen, 7 ottobre 1885 - Copenaghen, 18 novembre 1962) è stato un fisico danese che diede contributi fondamentali alla comprensione della struttura atomica e della meccanica quantistica, per i quali ricevette il Premio Nobel per la fisica nel 1922.

- Si consideri la funzione d'onda

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + i\frac{p_0x}{\hbar}} \quad (68)$$

e si mostri che la densità di probabilità della posizione è una gaussiana $N(x_0, \sigma)$ e quindi che la norma $\|\psi\|$ è unitaria. Si calcolino inoltre i valori attesi di \hat{x} , \hat{p} , \hat{x}^2 e \hat{p}^2 . Si usino i valori attesi calcolati per mostrare che $(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \sigma^2$ e $(\Delta p)^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$ e che quindi questo stato è di minima indeterminazione.

Esercizi svolti

- Si consideri ancora la $\psi(x)$ in (68), abbiamo visto che la varianza della posizione è σ^2 e quella dell'impulso è $\frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$. Questo significa che per piccoli valori di σ la posizione diviene certa mentre per grandi valori di σ è l'impulso a diventare certo.

L'esercizio da svolgere è quindi il seguente: si mostri che nel limite di grandi σ si ottiene l'autostato dell'impulso $\psi_{p_0}(x)$ e nel limite di piccoli σ si ottiene l'autostato della posizione $\psi_{x_0}(x)$.

Prima di eseguire il limite $\sigma \rightarrow 0$ è necessario moltiplicare la $\psi(x)$ per la costante $c_1 = \left(\frac{1}{8\pi\sigma^2}\right)^{1/4} e^{-i\frac{p_0x_0}{\hbar}}$ mentre prima di eseguire il limite $\sigma \rightarrow \infty$ è necessario moltiplicare la $\psi(x)$ per la costante $c_2 = \left(\frac{\sigma^2}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/4}$.

Si ricordi che la moltiplicazione della funzione d'onda per una costante non modifica lo stato fisico del sistema. Le due nuove funzioni saranno ancora di norma finita per ogni σ finito, infatti si avrà $\|c_1\psi\| = |c_1|^2 = \left(\frac{1}{8\pi\sigma^2}\right)^{1/2}$ e $\|c_2\psi\| = |c_2|^2 = \left(\frac{\sigma^2}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/2}$.

Eseguendo il limite $\sigma \rightarrow 0$ si ottiene

$$c_1\psi(x) = \frac{1}{(4\pi\sigma^2)^{1/2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + i\frac{p_0(x-x_0)}{\hbar}} \rightarrow \delta(x-x_0) e^{i\frac{p_0(x-x_0)}{\hbar}} = \delta(x-x_0), \quad (69)$$

dove si è usato il fatto che la gaussiana $N(x_0, 2\sigma^2)$ tende alla $\delta(x-x_0)$ quando σ tende a zero e dove l'ultima uguaglianza è una semplice conseguenza del fatto che la $\delta(x-x_0)$ è non nulla solo quando $x = x_0$. Dato che $\psi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0)$ abbiamo ottenuto il risultato voluto.

Eseguendo invece il limite $\sigma \rightarrow \infty$ si ottiene

$$c_2\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + i\frac{p_0x}{\hbar}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{i\frac{p_0x}{\hbar}}. \quad (70)$$

Dato che $\psi_{p_0}(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{i\frac{p_0x}{\hbar}}$ abbiamo ottenuto anche in questo caso il risultato voluto.

Abbiamo visto che con la moltiplicazione di ψ per c_1 o per c_2 si ottengono ancora funzioni d'onda con norma finita. Tuttavia quando si eseguono i limiti la norma diverge in entrambi i casi, questo perché gli autostati che appartengono ad uno spettro continuo non sono normalizzabili.

Dal punto di vista matematico, in meccanica quantistica si ha a che fare con uno spazio di Hilbert che contiene oltre agli stati normalizzabili anche quelli che si ottengono come limite di una successione di questi. Una discussione esaustiva di questo problema esula però dagli obbiettivi del corso.

Dal punto di vista fisico, gli stati non normalizzabili sono un'idealizzazione, gli stati fisici sono sempre normalizzabili. In altre parole, un sistema fisico con un valore preciso p_0 dell'impulso è descritto meglio da una $\psi(x)$ in (68) con σ molto grande (normalizzabile) piuttosto che dall'autofunzione $\psi_{p_0}(x)$ (non normalizzabile). Analogamente, un sistema fisico con un valore preciso x_0 della posizione è descritto meglio da una $\psi(x)$ in (68) con σ molto piccolo (normalizzabile) piuttosto che dall'autofunzione $\psi_{x_0}(x)$ (non normalizzabile).

- Si consideri la funzione d'onda $\psi(x)$ in (68). Osserviamo subito che la densità di probabilità della posizione è

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad (71)$$

ossia una gaussiana $N(x_0, \sigma)$. Da questa semplice osservazione discende immediatamente che la norma è unitaria, che $\langle \hat{x} \rangle = x_0$ e che $\langle \hat{x}^2 \rangle = x_0^2 + \sigma^2$.

Avendo svolto l'ultimo esercizio nel precedente paragrafo, abbiamo anche calcolato $\langle \hat{p} \rangle = p_0$ e $\langle \hat{p}^2 \rangle = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$.

Si noti che finora conosciamo solo la media p_0 e la varianza $\frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$ dell'impulso, mentre abbiamo una informazione molto più completa sulla posizione. Infatti non solo conosciamo la sua media x_0 e la sua varianza σ^2 ma anche la sua densità di probabilità (71).

L'esercizio da svolgere è quindi il seguente: si mostri che la densità di probabilità dell'impulso $\rho(p)$ è una gaussiana $N\left(p_0, \frac{\hbar}{2\sigma}\right)$.

Il valor medio e la varianza di questa distribuzione coincidono ovviamente quelli calcolati con l'ultimo esercizio nel precedente paragrafo.

Iniziamo calcolando $c(p)$ precedentemente definito in modo generale nella (35):

$$c(p) = \langle \psi_p, |\psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^*(x) \psi(x) dx, \quad (72)$$

si noti che $c(p)$ non dipende dal tempo perché la ψ è funzione della sola x e non di t . Usando la definizione di $\psi_p(x)$ a sinistra in (??) e la definizione di $\psi(x)$ in (68) si ottiene un integrale gaussiano. Per calcolare questo integrale si consiglia di fare il cambiamento di variabile di integrazione $z = \frac{x-x_0}{\sqrt{2}\sigma}$ e di tenere conto che $\int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2/2+i\alpha z} = \sqrt{2\pi} e^{-\alpha^2/2}$ per ogni α reale. Si ottiene

$$c(p) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2} \right)^{1/4} e^{-i\frac{(p-p_0)x_0}{\hbar} - \frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{\hbar^2}}. \quad (73)$$

La densità di probabilità dell'impulso è quindi

$$\rho(p) = |c(p)|^2 = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2} \right)^{1/2} e^{-\frac{2(p-p_0)^2\sigma^2}{\hbar^2}} = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/2}} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\sigma_p^2}}, \quad (74)$$

dove nell'ultima espressione si è usato $\sigma_p = \Delta p = \frac{\hbar}{2\sigma}$. Abbiamo quindi mostrato che $\rho(p)$ è una gaussiana $N(p_0, \frac{\hbar}{2\sigma})$ come ci eravamo proposti.

2.3 La hamiltoniana e l'equazione di Shrödinger

Hamiltoniana quantistica ed equazione di Shrödinger

In meccanica classica lo stato di un sistema fisico è completamente determinato quando sono note le variabili $q = (q_1, q_2, \dots, q_n)$ e $p = (p_1, p_2, \dots, p_n)$. Le derivate temporali \dot{q} e \dot{p} dipendono solo da q e p (ad esempio tramite le equazioni di Hamilton). In meccanica quantistica la funzione d'onda ψ determina in modo completo lo stato di un sistema fisico, di conseguenza la sua derivata temporale deve dipendere esclusivamente dalla funzione stessa. Inoltre, l'equazione differenziale che governa l'evoluzione di ψ deve necessariamente essere lineare per via del principio di sovrapposizione. Questa equazione, come abbiamo già anticipato, è stata proposta da Shrödinger quasi un secolo fa:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(q, t), \quad (75)$$

dove $\hat{H} = H(\hat{q}, \hat{p}, t)$ è la hamiltoniana quantistica. La hamiltoniana \hat{H} è costruita a partire da operatori di posizione e di impulso e deve necessariamente essere un operatore lineare hermitiano.

Si noti che dalla (75) risulta che $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ è associato all'energia come gli operatori $-i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}$ sono associati agli impulsi (si tenga presente che stiamo considerando sistemi non vincolati per i quali ognuna delle $n = 3N$ variabili q_i coincide con una delle tre coordinate di una delle N particelle del sistema).

Si noti inoltre che dalla (75) e dalla hermitianità di \hat{H} deriva immediatamente che la coniugata ψ^* soddisfa l'equazione $-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H} \psi^*$.

In molti casi rilevanti la hamiltoniana quantistica \hat{H} si ottiene dalla corrispondente hamiltoniana classica $H(q, p, t)$ con la semplice sostituzione $q_i \rightarrow \hat{q}_i$, $p_i \rightarrow \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}$ (il principio di corrispondenza formulato da Bohr nel 1920).

Ad esempio un sistema di N punti materiali soggetti soltanto a forze generate da un potenziale $V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ avrà hamiltoniana quantistica

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_i} + V(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2, \dots, \hat{\mathbf{x}}_N). \quad (76)$$

Tenendo presente che $\hat{\mathbf{p}}_i^2 \psi = (\hat{p}_{x_i}^2 + \hat{p}_{y_i}^2 + \hat{p}_{z_i}^2) \psi = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right] \psi = -\hbar^2 \Delta_i \psi$ e che per definizione $V(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2, \dots, \hat{\mathbf{x}}_N)$ è l'operatore che moltiplica la funzione d'onda per $V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$, si avrà che l'equazione di Shrödinger per questo sistema è

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i \psi + V \psi \quad (77)$$

con $\psi = \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, t)$ e $V = V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$. La (77) è un'equazione differenziale alle derivate parziali.

Un sistema di un solo punto materiale in una dimensione, soggetto soltanto alla forza generata da un potenziale $V(x)$, avrà invece equazione

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t). \quad (78)$$

In alcuni casi ci può essere ambiguità per la scelta della \hat{H} corrispondente alla hamiltoniana classica, che però può essere spesso risolta. Ad esempio, restando sempre in una dimensione, in corrispondenza della hamiltoniana classica $H = \frac{p^2}{2m} + xp$ avremo infinite possibili scelte per la hamiltoniana quantistica ossia tutte le $\frac{\hat{p}^2}{2m} + a \hat{x} \hat{p} + b \hat{p} \hat{x}$ con a e b reali che soddisfano $a + b = 1$. Tra queste solo una è corretta, ossia $a = b = \frac{1}{2}$, infatti tutte le altre non sono hermitiane.

Come si è detto, in meccanica quantistica la funzione d'onda ψ determina in modo completo lo stato di un sistema fisico. Questo è coerente con il fatto che l'equazione di Shrödinger è del primo ordine nel tempo e quindi permette di conoscere la funzione d'onda $\psi(q, t)$ a ogni tempo t se questa è nota al tempo t_0 . In altre parole l'evoluzione del sistema è completamente determinata se viene fissata la condizione iniziale $\psi(q, t_0) = \psi(q)$ (d'ora in poi considereremo $t_0 = 0$).

Autostati e autovalori. Stati legati e stati di scattering. Soluzione generale

Consideriamo ora solo hamiltoniane $\hat{H} = H(\hat{q}, \hat{p})$ che non dipendono esplicitamente dal tempo. Lo spettro degli autovalori di \hat{H} può essere discreto o continuo o anche in parte discreto e in parte continuo.

Per iniziare, consideriamo una hamiltoniana con spettro discreto. Gli autostati $\psi_n(q)$ e i corrispondenti autovalori E_n emergono come soluzioni dell'equazione

$$\hat{H} \psi_n(q) = E_n \psi_n(q) \quad (79)$$

a volte chiamata equazione di Shrödinger indipendente dal tempo. L'evoluzione temporale di questi stati è molto semplice:

$$\psi_n(q, t) = e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(q), \quad (80)$$

infatti,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(q, t)}{\partial t} = E_n \psi_n(q, t) = \hat{H} \psi_n(q, t), \quad (81)$$

dove la prima uguaglianza deriva dalla (80) e la seconda dalla (79). L'equazione di Shrödinger (75) è quindi soddisfatta con condizione iniziale $\psi_n(q, 0) = \psi_n(q)$.

In accordo con la (29), una funzione d'onda $\psi(q)$ ammette una decomposizione nella base ortonormale di autostati $\psi_n(q)$ della hamiltoniana:

$$\psi(q) = \sum_n c(n) \psi_n(q). \quad (82)$$

L'evoluzione temporale di questo stato è:

$$\psi(q, t) = \sum_n c(n) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(q), \quad (83)$$

infatti questa funzione d'onda soddisfa l'equazione di Shrödinger (75) perché questa è lineare ed è soddisfatta da ogni elemento della somma.

Abbiamo quindi la soluzione $\psi(q, t)$ corrispondente alla condizione iniziale $\psi(q, 0) = \psi(q)$. O meglio, avremmo la soluzione $\psi(q, t)$ corrispondente alla condizione iniziale $\psi(q, 0) = \psi(q)$ se fossimo capaci di risolvere il problema di trovare tutti gli autostati e tutti gli autovalori che soddisfano la (79).

Nel caso in cui la hamiltoniana ha spettro continuo si procede in modo analogo. Gli autostati $\psi_u(q)$ e i corrispondenti autovalori E_u emergono come soluzioni dell'equazione

$$\hat{H} \psi_u(q) = E_u \psi_u(q). \quad (84)$$

In accordo con la (31), una funzione d'onda $\psi(q)$ ammette una decomposizione nella base di autostati $\psi_u(q)$ della hamiltoniana:

$$\psi(q) = \int c(u) \psi_u(q) du \quad (85)$$

con autostati ortogonali ma che al posto della condizione di normalizzazione soddisfano la relazione $\langle \psi_u | \psi_v \rangle = \delta(u - v)$. L'evoluzione temporale di questo stato è:

$$\psi(q, t) = \int c(u) e^{-i \frac{E_u t}{\hbar}} \psi_u(q) du, \quad (86)$$

infatti questa funzione d'onda soddisfa l'equazione di Shrödinger per gli stessi motivi del caso discreto.

A volte lo spettro della hamiltoniana può essere in parte discreto e in parte continuo, in tal caso si avrà

$$\psi(q, t) = \sum_n c(n) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(q) + \int c(u) e^{-i \frac{E_u t}{\hbar}} \psi_u(q) du, \quad (87)$$

dove gli autostati dello spettro continuo sono ortogonali a quelli dello spettro discreto.

C'è un'importante differenza dal punto di vista fisico tra autovalori di \hat{H} che hanno spettro discreto e quelli che hanno spettro continuo.

I primi corrispondono ad autofunzioni $\psi_n(q)$ normalizzabili, per questi la densità di probabilità $\rho_n(q) = |\psi_n(q)|^2$ deve necessariamente annullarsi quando $|q|$ diverge. Quindi il sistema rimane confinato in una regione finita dello spazio delle configurazioni. Per questo motivo si dice che tali stati sono *legati*.

Al contrario, i secondi corrispondono ad autofunzioni $\psi_u(q)$ non normalizzabili, per questi esiste almeno una q_i tale che la densità di probabilità $\rho_n(q) = |\psi_n(q)|^2$ rimane finita (o si annulla troppo

lentamente perché la norma sia finita) quando $|q_i|$ diverge. Il sistema quindi non rimane confinato in una regione finita dello spazio delle configurazioni. Tali stati si chiamano *di scattering*.

Conservazione della norma ed evoluzione della media di un operatore

Perché la teoria sia coerente è necessario che la norma $\|\psi\|$ di $\psi(q, t)$ rimanga costante nel tempo, altrimenti l'intera interpretazione probabilistica perderebbe di significato. È quindi necessario mostrare che $\frac{d\|\psi\|^2}{dt} = 0$. Osserviamo preliminarmente che

$$\frac{d\|\psi\|^2}{dt} = \frac{d}{dt} \int \psi^* \psi dq = \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dq + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi dq = \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H} \psi dq - \frac{1}{i\hbar} \int \hat{H} \psi^* \psi dq, \quad (88)$$

dove l'ultima uguaglianza è una conseguenza dell'equazione di Schrödinger (e della sua coniugata $-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H} \psi^*$). L'equazione (88) può essere anche scritta nella forma

$$\frac{d\|\psi\|^2}{dt} = \frac{d\langle \psi | \psi \rangle}{dt} = \left\langle \psi \left| \frac{\partial \psi}{\partial t} \right. \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} \left| \psi \right. \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle - \frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H} \psi | \psi \rangle \quad (89)$$

e quindi come banale conseguenza della hermitianità dell'operatore \hat{H} si ha

$$\frac{d\|\psi\|^2}{dt} = 0, \quad (90)$$

La norma quindi rimane costante nel tempo e questo anche se la hamiltoniana \hat{H} dipende esplicitamente dal tempo.

Vediamo ora come evolvono le medie degli operatori rispetto a uno stato che è soluzione della equazione di Schrödinger. Derivando rispetto al tempo otteniamo

$$\frac{d\langle \hat{f} \rangle}{dt} = \frac{d\langle \psi | \hat{f} \psi \rangle}{dt} = \left\langle \psi \left| \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \psi \right. \right\rangle + \left\langle \psi \left| \hat{f} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right. \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} \left| \hat{f} \psi \right. \right\rangle, \quad (91)$$

dove $\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}$ è l'operatore che si ottiene derivando \hat{f} rispetto al parametro temporale esplicito. Ad esempio, se $\hat{f} = (1 + t^2) \hat{p}$ allora $\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = 2t \hat{p}$.

Tenendo conto della equazione di Schrödinger e della hermitianità di \hat{H} si arriva subito alla

$$\frac{d\langle \hat{f} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{f}, \hat{H}] \rangle, \quad (92)$$

dove $[\hat{f}, \hat{H}]$ è il commutatore tra \hat{f} e \hat{H} . Questa equazione è soddisfatta per qualsiasi operatore e per qualsiasi funzione d'onda che sia soluzione dell'equazione di Schrödinger. Si noti la straordinaria analogia con la corrispondente equazione classica $\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}$.

La media $\langle \hat{f} \rangle$ di un operatore \hat{f} che non dipende esplicitamente dal tempo e che commuta con la hamiltoniana si conserva. In questo caso infatti la (92) diventa

$$\frac{d\langle \hat{f} \rangle}{dt} = 0. \quad (93)$$

Dato che ogni operatore commuta con se stesso, se poniamo $\hat{f} = \hat{H}$, abbiamo che la media $\langle \hat{H} \rangle$ dell'energia soddisfa l'equazione

$$\frac{d\langle \hat{H} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right\rangle \quad (94)$$

e quindi la media dell'energia si conserva se la hamiltoniana non dipende esplicitamente dal tempo.

Si consideri ora l'operatore identità $\mathbb{1}$ che trasforma ogni funzione in se stessa ossia tale che $\mathbb{1}\psi = \psi$. Questo operatore non dipende esplicitamente dal tempo e commuta con ogni hamiltoniana, pertanto la sua media $\langle \mathbb{1} \rangle$ si conserva. Dato che per definizione si ha $\langle \mathbb{1} \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = \|\psi\|^2$, possiamo considerare la conservazione della norma (90) come un caso particolare della (92).

Consideriamo ora un sistema di un solo punto soggetto soltanto alla forza generata da un potenziale $V(\mathbf{x})$. Per questo sistema la hamiltoniana è $\hat{H} = -\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}})$. Dalla (92) si ricavano le due coppie di tre equazioni

$$\frac{d\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{m}, \quad \frac{d\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{dt} = \langle \mathbf{F}(\hat{\mathbf{x}}) \rangle, \quad (95)$$

dove $\mathbf{F}(\hat{\mathbf{x}}) = -\nabla V(\hat{\mathbf{x}})$. Queste sono molto simili alle corrispondenti classiche, ma a differenza di queste non sono autonome perché in generale $\langle \mathbf{F}(\hat{\mathbf{x}}) \rangle \neq \mathbf{F}(\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle)$ e quindi non possono essere risolte. Tuttavia per il caso particolare della particella libera ($V(\hat{\mathbf{x}}) = 0$) dell'oscillatore armonico ($V(\hat{\mathbf{x}}) = \frac{m\omega^2}{2} \hat{\mathbf{x}}^2$) la precedente disuguaglianza diventa un'uguaglianza e le equazioni per gli operatori diventano identiche alle omologhe classiche e quindi con stessa soluzione. In particolare, per la particella libera si avrà

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle_t = \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle_0, \quad \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle_t = \frac{\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle_0}{m} t + \langle \hat{\mathbf{x}} \rangle_0, \quad (96)$$

dove le medie $\langle \cdot \rangle_t$ si intendono rispetto alla $\psi(x, t)$ e le medie $\langle \cdot \rangle_0$ si intendono rispetto alla $\psi(x, 0) = \psi(x)$.

3. L'equazione di Shrödinger in una dimensione

3.1 Spettro continuo: il caso libero. Il pacchetto d'onda

Autovettori, autovalori e soluzione generale

Nel caso libero la hamiltoniana è

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad (97)$$

per cui gli autostati dell'impulso ψ_p sono anche autostati dell'energia con autovalore $E_p = \frac{p^2}{2m}$. In altre parole tutti gli autostati e autovalori dell'energia sono

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \quad \text{con} \quad E_p = \frac{p^2}{2m}, \quad (98)$$

dove E_p assume tutti i possibili valori reali non negativi dato che p assume tutti i possibili valori reali.

Si noti però che alla stessa energia $E_p = \frac{p^2}{2m}$ corrispondono due autostati ψ_p e ψ_{-p} , quindi ogni livello di energia è doppiamente degenere (si noti tuttavia che per energia nulla esiste il solo autostato $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$). La degenerazione comporta che qualsiasi combinazione lineare di ψ_p e ψ_{-p} è anch'essa un autostato con stessa energia $E_p = \frac{p^2}{2m}$.

Ad esempio potremmo prendere come base di quella che si ottiene sostituendo ogni coppia ψ_p e ψ_{-p} con la coppia $\psi_p^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_p + \psi_{-p}) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} \cos(\frac{px}{\hbar})$ e $\psi_p^- = \frac{-i}{\sqrt{2}}(\psi_p - \psi_{-p}) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} \sin(\frac{px}{\hbar})$.

Questi due autostati sono anch'essi ortogonali tra loro, ma pur essendo autostati dell'energia non sono autostati dell'impulso. Per convenienza e per tradizione, sceglieremo come base quella degli autostati ψ_p .

Nel caso libero unidimensionale l'equazione di Shrödinger assume la forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}, \quad (99)$$

la cui soluzione generale sarà quindi

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{-i\frac{E_p t}{\hbar}} \psi_p(x) dp, \quad (100)$$

corrispondentemente al dato iniziale $\psi(x, 0) = \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \psi_p(x) dp$.

Se si volesse sapere come evolve un pacchetto d'onda di minima indeterminazione, ossia come evolve la funzione d'onda $\psi(x)$ in (68), si potrebbe usare la relativa $c(p)$ che è già stata calcolata (73). Basterebbe infatti inserire questa $c(p)$ nell'integrale (100) e calcolarlo per avere l'evoluta $\psi(x, t)$ della $\psi(x)$ in (68).

Tuttavia questo integrale richiede qualche conoscenza dei metodi di integrazione in campo complesso, seguiremo quindi un'altra strada che utilizza le equazioni di evoluzione delle medie di operatori.

Il pacchetto d'onda

Abbiamo già calcolato il valor medio e impulso per la particella libera (96), che in una dimensione diventano $\langle \hat{p} \rangle_t = \langle \hat{p} \rangle_0$ e $\langle \hat{x} \rangle_t = \langle \hat{p} \rangle_0 t + \langle \hat{x} \rangle_0$, vogliamo ora trovare $\langle \hat{p}^2 \rangle_t$ e $\langle \hat{x}^2 \rangle_t$ per poter stabilire come evolvono le varianze. Sarà anche necessario calcolare $\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle_t$ per poter chiudere le equazioni.

Tenendo presente che $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ si ottengono immediatamente i commutatori $[\hat{p}^2, \hat{H}] = 0$, $[\hat{x}^2, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m} (\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$ e $[\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}, \hat{H}] = \frac{2i\hbar}{m} \hat{p}^2$. Quindi dalle equazioni (92) per la media degli operatori, si ottengono immediatamente le tre equazioni

$$\frac{d\langle \hat{p}^2 \rangle_t}{dt} = 0, \quad \frac{d\langle \hat{x}^2 \rangle_t}{dt} = \frac{\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle_t}{m}, \quad \frac{d\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle_t}{dt} = \frac{2\langle \hat{p}^2 \rangle_t}{m}. \quad (101)$$

Queste equazioni si integrano banalmente, per la prima e la terza le soluzioni sono

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_t = \langle \hat{p}^2 \rangle_0 \quad \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle_t = \frac{2\langle \hat{p}^2 \rangle_0}{m} t + \langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle_0, \quad (102)$$

che permettono di trovare anche la soluzione della seconda equazione

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_t = \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle_0}{m^2} t^2 + \frac{\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle_0}{m} t + \langle \hat{x}^2 \rangle_0. \quad (103)$$

A questo punto è utile introdurre le varianze della posizione e dell'impulso all'istante t , che sono definite da

$$\sigma^2(t) = (\Delta x)_t^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle_t - \langle \hat{x} \rangle_t^2, \quad \sigma_p^2(t) = (\Delta p)_t^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle_t - \langle \hat{p} \rangle_t^2, \quad (104)$$

mettendo insieme tutti i precedenti risultati otteniamo:

$$\sigma^2(t) = \sigma^2(0) + \frac{\sigma_p^2(0)}{m^2} t^2 + \frac{\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle_0 - 2\langle \hat{x} \rangle_0 \langle \hat{p} \rangle_0}{m} t, \quad \sigma_p^2(t) = \sigma_p^2(0). \quad (105)$$

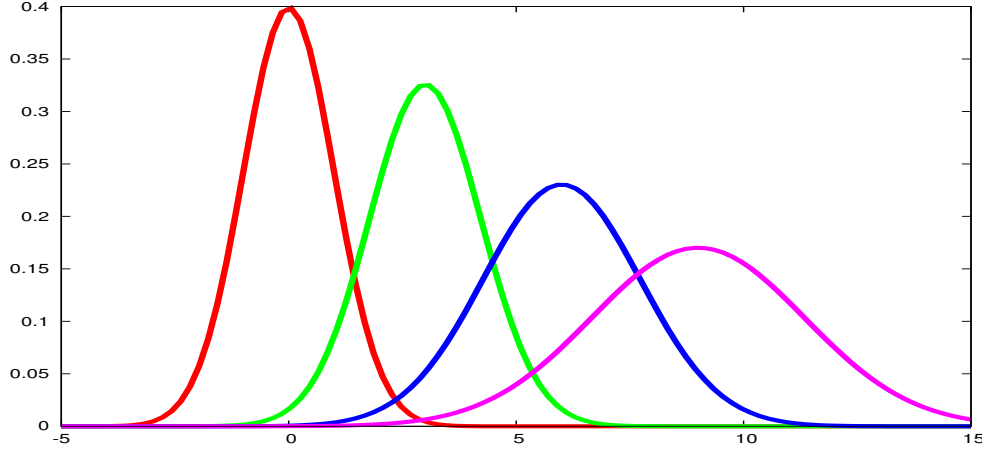


Figura 9. Evoluzione della densità di probabilità $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ associata al pacchetto d'onda gaussiano di una particella di massa m . Le costanti e i parametri scelti sono $x_0 = 0$, $p_0 = 3\hbar/\sqrt{2}$, $\sigma^2 = 1$ e $m = \hbar/\sqrt{2}$. La densità è raffigurata ai tempi $t = 0$, $t = 1$, $t = 2$, $t = 3$. Il picco della gaussiana si sposta a destra in accordo con $1 + 3t$ e la sua varianza cresce in accordo con $1 + t^2/2$.

Si noti che sia queste varianze che le medie di posizione e impulso in (96) dipendono dalla funzione d'onda iniziale $\psi(x, 0) = \psi(x)$ rispetto alla quale sono calcolate le medie iniziali $\langle \cdot \rangle_0$.

A noi interessa capire come evolve il pacchetto d'onda di minima indeterminazione e quindi dobbiamo calcolare queste medie iniziali usando la funzione d'onda $\psi(x)$ in (68). Oltre ai risultati già trovati, ossia $\langle \hat{x} \rangle_0 = x_0$, $\langle \hat{p} \rangle_0 = p_0$, $\sigma_p^2(0) = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$ e $\sigma^2(0) = \sigma^2$, è facile verificare anche che $\langle \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} \rangle_0 = 2x_0p_0$. Usando questi valori iniziali in (96) e in (105) otteniamo

$$\langle \hat{p} \rangle_t = p_0, \quad \langle \hat{x} \rangle_t = \frac{p_0}{m}t + x_0, \quad \sigma_p^2(t) = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}, \quad \sigma^2(t) = \sigma^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2 m^2} t^2. \quad (106)$$

Si noti che mentre la varianza dell'impulso rimane costante, quella della posizione cresce nel tempo, questo significa che anche l'indeterminazione cresce nel tempo, si ha infatti

$$(\Delta x)_t (\Delta p)_t = \sigma(t) \sigma_p(t) = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^4 m^2} t^2}. \quad (107)$$

Questa indeterminazione cresce tanto più rapidamente tanto più piccola era la deviazione standard iniziale σ della posizione. Inoltre questa relazione vale anche per tempi negativi, per cui la minima indeterminazione è uno stato assolutamente transitorio per la particella libera.

Abbiamo calcolato i valori medi e le varianze al tempo t associati alla funzione $\psi(x, t)$ che evolve a partire dalla funzione $\psi(x)$ in (68) ma non la funzione $\psi(x, t)$ e la densità di probabilità associata $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$. Risolvendo esattamente il problema, ossia risolvendo l'integrale (100), si trova che la densità $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ rimane gaussiana, ovviamente con il valor medio $\frac{p_0}{m}t + x_0$ (che coincide col picco della gaussiana) e la varianza $\sigma^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2 m^2} t^2$ calcolati sopra. In figura (9) la densità viene mostrata a tempi differenti per una particolare scelta dei parametri e delle costanti.

Esercizio

- Si consideri la particella libera: calcolare la funzione d'onda $\psi(x, t)$ se al tempo $t = 0$ essa è $\psi(x, 0) = \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{p_0}(x) + \psi_{p_1}(x)) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\hbar}}(e^{i\frac{p_0 x}{\hbar}} + e^{-i\frac{p_1 x}{\hbar}})$. Trovare i valori di t per i quali

la funzione d'onda si annulla nell'origine. Trovare poi le posizioni x per le quali la funzione d'onda si annulla per un tempo t assegnato.

3.2 Proprietà degli stati legati nel caso unidimensionale

Non degenerazione dei livelli discreti

Dimostriamo ora che livelli energetici dello spettro discreto sono non degeneri, ossia che non esistono due autostati distinti $\psi_n(x)$ e $\phi_n(x)$ corrispondenti allo stesso autovalore E_n dello spettro discreto.

Supponiamo che l'equazione di Shrödinger indipendente dal tempo sia soddisfatta da due autostati distinti $\phi_n(x)$ e $\psi_n(x)$ ossia

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} = (E_n - V)\psi_n, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi_n}{dx^2} = (E_n - V)\phi_n, \quad (108)$$

se moltiplichiamo entrambi i membri della prima equazione per $-\frac{2m}{\hbar^2} \phi_n$ ed entrambi i membri della seconda per $-\frac{2m}{\hbar^2} \psi_n$ otteniamo

$$\phi_n \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E_n) \psi_n \phi_n, \quad \psi_n \frac{d^2 \phi_n}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E_n) \phi_n \psi_n \quad (109)$$

e quindi

$$\phi_n \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} - \psi_n \frac{d^2 \phi_n}{dx^2} = 0. \quad (110)$$

Questa espressione può essere integrata ottenendo

$$\phi_n \frac{d\psi_n}{dx} - \psi_n \frac{d\phi_n}{dx} = c, \quad (111)$$

dove c è una costante complessa, tuttavia, dato che entrambe le autofunzioni sono normalizzabili esse si annullano per $x \rightarrow \pm\infty$ e quindi necessariamente $c = 0$. Dividendo quindi entrambi i membri per $\psi_n \phi_n$ si trova

$$\frac{1}{\psi_n} \frac{d\psi_n}{dx} = \frac{1}{\phi_n} \frac{d\phi_n}{dx} \quad \rightarrow \quad \psi_n = a\phi_n, \quad (112)$$

dove il risultato a destra, con a costante complessa, è ottenuto per integrazione delle due espressioni a sinistra.

In definitiva la nostra ipotesi è falsa infatti ψ_n e ϕ_n non sono distinte dato che al più differiscono per una costante moltiplicativa a .

Conseguenze

Un'importante conseguenza è che gli autostati dello spettro discreto unidimensionale sono sempre reali a meno di una costante moltiplicativa complessa inessenziale che può essere omessa. Infatti la parte reale e la parte immaginaria di un autostato complesso soddisfano separatamente l'equazione di Shrödinger indipendente dal tempo e sono quindi uguali a meno di una costante moltiplicativa reale. Gli autostati hanno quindi sempre la forma $b\psi_n$ dove b è una costante complessa e ψ_n è una funzione reale.

Un'ulteriore conseguenza è che gli autostati sono funzioni pari o dispari quando il potenziale è simmetrico. Infatti se $\psi(x)$ è un autostato (che possiamo scegliere reale) di energia E , lo è

anche la funzione reale $\psi(-x)$ perché soddisfa la stessa equazione con stessa energia. Per quello che abbiamo detto prima si deve avere $\psi(-x) = c\psi(x)$ dove c è necessariamente reale perché lo sono sia $\psi(x)$ che $\psi(-x)$. D'altra parte si verifica subito (basta invertire il segno della variabile di integrazione) che $|\psi(-x)| = |\psi(x)|$ mentre dalla relazione $\psi(-x) = c\psi(x)$ deriva l'uguaglianza $|\psi(-x)| = c^2|\psi(x)|$. In conclusione $c = \pm 1$ e quindi gli autostati sono funzioni pari o dispari.

3.3 Spettro discreto: l'oscillatore armonico

Stato fondamentale dell'oscillatore armonico

Ogni sistema che esegue moti attorno a una posizione di equilibrio con valori dell'energia prossimi al minimo del potenziale può essere descritto come una collezione di oscillatori armonici disaccoppiati. Da qui l'importanza dell'oscillatore armonico unidimensionale sia in meccanica classica che in meccanica quantistica.

Vogliamo determinare gli autovalori e gli autostati. Iniziamo qui con lo stato fondamentale, per poi risalire a tutti gli altri autostati utilizzando gli operatori di creazione e distruzione.

La hamiltoniana di un oscillatore armonico è

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \quad (113)$$

dove, al solito, $\omega^2 = k/m$. L'oscillatore armonico ha ovviamente solo stati legati che soddisfano l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi_n = E_n\psi_n, \quad (114)$$

con $\omega^2 = \frac{k}{m}$. È facile verificare che lo stato

$$\psi_0 = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}, \quad (115)$$

con $\sigma^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$ soddisfa l'equazione (114) con autovalore dell'energia $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Vogliamo dimostrare che è lo stato fondamentale, ossia l'autostato di minima energia (si noti che per l'oscillatore armonico indichiamo ψ_0 lo stato fondamentale, mentre per la buca lo avevamo indicato con ψ_1 , è una mera convenzione).

Supponiamo ora di non conoscere lo stato fondamentale ψ_0 , possiamo tuttavia scrivere la seguente uguaglianza,

$$E_0 = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle = \frac{1}{2m} \langle \psi_0 | \hat{p}^2 | \psi_0 \rangle + \frac{m\omega^2}{2} \langle \psi_0 | \hat{x}^2 | \psi_0 \rangle, \quad (116)$$

poi, tenendo presente che

$$\langle \psi_0 | \hat{p}^2 | \psi_0 \rangle \geq \langle \psi_0 | \hat{p}^2 | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | \hat{p} | \psi_0 \rangle^2 = (\Delta p)^2, \quad (117)$$

e che

$$\langle \psi_0 | \hat{x}^2 | \psi_0 \rangle \geq \langle \psi_0 | \hat{x}^2 | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | \hat{x} | \psi_0 \rangle^2 = (\Delta x)^2, \quad (118)$$

possiamo scrivere la prima delle due disuguaglianze qui sotto

$$E_0 \geq \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 + \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2 \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2, \quad (119)$$

mentre la seconda deriva dal principio di indeterminazione di Heisenberg per il quale $(\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$. Non sappiamo quale è il valore di Δx che è calcolato rispetto a ψ_0 , tuttavia qualunque esso sia possiamo affermare

$$E_0 \geq \min_{\Delta x} \left[\frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2 \right] = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (120)$$

Abbiamo quindi dimostrato che (115) è lo stato fondamentale, con energia $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, detta anche energia di punto zero. È infatti l'autostato la cui energia è la più bassa possibile compatibilmente con la disuguaglianza (120). L'autofunzione (115) è inoltre normalizzata, infatti

$$\rho(x) = |\psi_0|^2 = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad (121)$$

è una gaussiana $N(0, \sigma)$ e pertanto $\|\psi_0\|^2 = 1$. Si noti che questa funzione è un caso particolare della (68) con $p_0 = x_0 = 0$ e $\sigma^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$.

Operatori di creazione e distruzione

Definiamo l'operatore di creazione \hat{a}^+ e l'operatore di distruzione \hat{a} come combinazione lineare di posizione e impulso nel modo seguente:

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - i \frac{\hat{p}}{m\omega} \right), \quad \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + i \frac{\hat{p}}{m\omega} \right). \quad (122)$$

Nessuno dei due è hermitiano dato che $i\hat{p}$ non lo è, anzi sono l'uno l'aggiunto dell'altro come si verifica facilmente (basta tenere presente che $(i\hat{p})^+ = -i\hat{p}$). Il commutatore tra i due può essere facilmente calcolato a partire dal commutatore di posizione e impulso ed è

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (123)$$

Anche se i due operatori non sono hermitiani, l'operatore $\hat{a}^+ \hat{a}$ è invece hermitiano ed ha autovalori non negativi. Entrambe queste proprietà possono essere mostrate in modo banale e le abbiamo già discusse in generale quando abbiamo dimostrato la relazione di indeterminazione di Heisenberg.

È facile verificare che la hamiltoniana dell'oscillatore armonico può essere scritta in termini di \hat{a}^+ e \hat{a} come segue:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (124)$$

Infine, è facile anche verificare che

$$\hat{a}\psi_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x\psi_0 + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d\psi_0}{dx} \right) = 0, \quad (125)$$

inoltre, data la linearità dell'equazione differenziale qui sopra tutte le soluzioni di questa differiscono da ψ_0 solo per una costante moltiplicativa, pertanto possiamo dire che lo stato fisico ψ_0 è l'unico a soddisfare la relazione $\hat{a}\psi_0 = 0$.

Autostati e autovalori della hamiltoniana dell'oscillatore armonico

Mostriamo ora che ψ_n definito come

$$\psi_n = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0, \quad (126)$$

è un autostato normalizzato con energia $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$. Si ha infatti

$$\hat{a}^+ \hat{a} \psi_n = \frac{\hat{a}^+ \hat{a} (\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0 = \frac{(\hat{a}^+)^2 \hat{a} (\hat{a}^+)^{n-1}}{\sqrt{n!}} \psi_0 + \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0 = \frac{(\hat{a}^+)^2 \hat{a} (\hat{a}^+)^{n-1}}{\sqrt{n!}} \psi_0 + \psi_n, \quad (127)$$

dove si è usata la (123), ossia si è usato $\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a} + 1$. Ripetendo l'operazione per un totale di n volte, si arriva al risultato

$$\hat{a}^+ \hat{a} \psi_n = \frac{(\hat{a}^+)^{n+1} \hat{a}}{\sqrt{n!}} \psi_0 + n\psi_n = n\psi_n, \quad (128)$$

dove l'ultima uguaglianza deriva da $\hat{a}\psi_0 = 0$. Allora

$$\hat{H}\psi_n = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \psi_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \psi_n. \quad (129)$$

Abbiamo quindi dimostrato che ψ_n è l'autostato dell'hamiltoniana corrispondente all'energia $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$. Il potenziale armonico e i primi cinque autostati sono graficati in figura (10), si noti che le autofunzioni decadono rapidamente al di fuori della regione classicamente consentita, questo comportamento lo abbiamo già incontrato per il potenziale buca finita.

Dalla definizione (126) discende direttamente anche la prima delle due uguaglianze

$$\psi_n = \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n}} \psi_{n-1}, \quad \psi_{n-1} = \frac{\hat{a}}{\sqrt{n}} \psi_n, \quad (130)$$

mentre la seconda si ottiene dalla prima come segue

$$\psi_n = \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n}} \psi_{n-1}, \quad \rightarrow \quad \hat{a}\psi_n = \frac{\hat{a}\hat{a}^+}{\sqrt{n}} \psi_{n-1} = \frac{n}{\sqrt{n}} \psi_{n-1} \quad \rightarrow \quad \psi_{n-1} = \frac{\hat{a}}{\sqrt{n}} \psi_n. \quad (131)$$

dove per l'uguaglianza al centro si è usato $\hat{a}\hat{a}^+ \psi_{n-1} = (\hat{a}^+ \hat{a} + 1)\psi_{n-1} = (n - 1 + 1)\psi_{n-1} = n\psi_{n-1}$.

Le uguaglianze a sinistra e a destra della (130) giustificano il nome degli operatori, infatti \hat{a}^+ crea un quanto di energia $\hbar\omega$ trasformando lo stato ψ_{n-1} che ha energia $\hbar\omega \left(n - 1 + \frac{1}{2}\right)$ nello stato ψ_n che ha energia $\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$, al contrario \hat{a} distrugge un quanto di energia.

Proviamo ora che la normalizzazione degli stati ψ_n è unitaria, abbiamo infatti

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \frac{1}{n} \langle \hat{a}^+ \psi_{n-1} | \hat{a}^+ \psi_{n-1} \rangle = \frac{1}{n} \langle \psi_{n-1} | \hat{a}\hat{a}^+ \psi_{n-1} \rangle = \langle \psi_{n-1} | \psi_{n-1} \rangle \quad (132)$$

e quindi $\|\psi_n\| = \|\psi_{n-1}\|$, Reiterando per n volte si ottiene $\|\psi_n\| = \|\psi_0\| = 1$ che è quello che volevamo dimostrare. In conclusione, gli autostati ψ_n sono tutti a normalizzazione unitaria e sono anche ortogonali tra loro in quanto hanno differente energia e quindi corrispondono ad autovalori diversi di uno stesso operatore hermitiano (si veda il paragrafo 3.2).

Ci resta da far vedere che non esistono altri autostati con energie diverse dalle E_n . Supponiamo per assurdo che esista un autostato ϕ con energia E tale che $E_{n-1} < E < E_n$, allora $\hat{a}\phi$ sarà un autostato con energia $E - \hbar\omega$. Prima di tutto è chiaro che $\hat{a}\phi$ non è nullo altrimenti si dovrebbe avere $\phi = c\psi_0$ in contrasto con l'ipotesi sull'energia $E_{n-1} < E < E_n$ che implica $E \neq E_0$. Poi, dato che $\hat{H}\phi = E\phi$, è facile mostrare che lo stato $\hat{a}\phi$ ha energia $E - \hbar\omega$ ossia che $\hat{H}\hat{a}\phi = (E - \hbar\omega)\hat{a}\phi$. Si osservi che

$$(\hat{a}^+ \hat{a})\hat{a} = \hat{a}(\hat{a}^+ \hat{a}) - \hat{a} \quad \rightarrow \quad \hat{H}\hat{a} = \hat{a}\hat{H} - \hbar\omega\hat{a}, \quad (133)$$

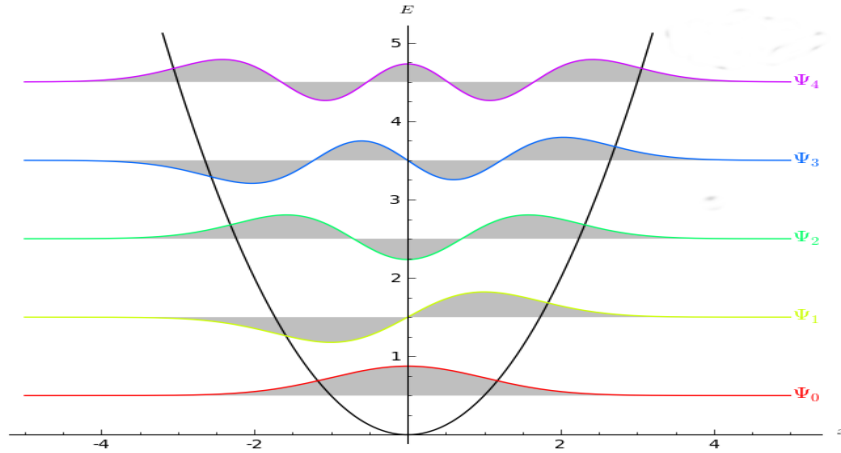


Figura 10. Oscillatore armonico. Le prime cinque autofunzioni corrispondenti alle energie più basse E_0, \dots, E_4 sono graficate in corrispondenza del rispettivo valore dell'energia in modo tale che l'asse delle ascisse risulta traslato verso l'alto di un valore diverso per ognuna. Il potenziale, le energie e le funzioni d'onda qui graficate corrispondono alla scelta dei parametri m e ω tali che $\omega^2 m = 1$ e $\hbar\omega = 1$.

dove la prima uguaglianza è una conseguenza della (123) e la seconda uguaglianza è una conseguenza della prima e della (124). Si ha quindi

$$\hat{H}\hat{a}\phi = (\hat{a}\hat{H} - \hbar\omega\hat{a})\phi = (E - \hbar\omega)\hat{a}\phi, \quad (134)$$

dove per l'uguaglianza finale si è usata l'ipotesi (per assurdo) $\hat{H}\phi = E\phi$.

In conclusione $\hat{a}\phi$ è un autostato con energia $E - \hbar\omega$ tale che $E_{n-2} < E - \hbar\omega < E_{n-1}$. Iterando sia che $(\hat{a})^n\phi$ è un autostato (non nullo) con energia $E - n\hbar\omega < E_0$. Questo naturalmente è impossibile perché abbiamo dimostrato che E_0 è l'energia di punto zero e quindi non può esistere lo stato ϕ con minore energia. In conclusione, gli autostati sono tutti e solo gli ψ_n con energia $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

Per finire confrontiamo i risultati ottenuti con quelli della regola di quantizzazione di Wilson e Sommerfeld. In meccanica classica si ha l'azione $A = \frac{E}{\omega}$ e quindi in in meccanica quantistica $A_n = \frac{E_n}{\omega} = (n + \frac{1}{2})\hbar$. La regola di quantizzazione di Wilson e Sommerfeld prevede invece $A_n = n\hbar$, quindi la differenza con la meccanica quantistica di Schrödinger e Heisenberg è solo per una costante additiva $\frac{\hbar}{2}$.

Esercizi

- Si calcolino i valori attesi di \hat{x}^4 e di $\hat{x}^2\hat{p}^2$ per lo stato fondamentale dell'oscillatore armonico (si ricordi che $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} z^2 \exp(-z^2/2) dz = 1$ e che $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} z^4 \exp(-z^2/2) dz = 3$).
- Si calcolino gli stati ψ_1 e ψ_2 dell'oscillatore armonico.
- Si calcolino i commutatori $[\hat{a}^2, \hat{a}^+]$, $[\hat{a}\hat{a}^+, \hat{a}^+]$ e $[\hat{a}\hat{a}^+, \hat{a}^+\hat{a}]$.
- Si mostri esplicitamente che $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0$ se $n \neq m$. Si tenga presente che sappiamo già che questo è vero in quanto hanno differente energia e quindi corrispondono ad autovalori diversi di uno stesso operatore hermitiano (si veda il paragrafo 3.2).
- Si mostri che $\langle \psi_n | \hat{a}^+ \psi_{n-1} \rangle = \sqrt{n}$ e che $\langle \psi_{n-1} | \hat{a} \psi_n \rangle = \sqrt{n}$. Si mostri inoltre che $\langle \psi_n | \hat{a}^+ \psi_m \rangle = 0$ se $m \neq n - 1$ e che $\langle \psi_n | \hat{a} \psi_m \rangle = 0$ se $n \neq m - 1$.

- Si consideri ancora l'oscillatore armonico. Si mostri che lo stato $\phi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n$ con $c_n = \sqrt{(1-b)b^n}$ e $0 < b < 1$ ha norma unitaria. Si calcoli esplicitamente il valore medio dell'energia per questo stato.
- Si consideri il sistema di hamiltoniana $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \alpha \hat{x}^4$ con α positivo. Si utilizzi il principio di indeterminazione di Heisenberg per dare una stima dal basso dell'energia dello stato fondamentale (suggerimento: si tenga presente che $\langle \hat{x}^4 \rangle \geq \langle \hat{x}^2 \rangle^2$).
- Si consideri il sistema di hamiltoniana $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \alpha \hat{x}^4$ con α positivo. Si dia una stima dall'alto dell'energia dello stato fondamentale (suggerimento: si tenga presente che per qualunque ψ con norma unitaria si ha $\langle \psi | \hat{H} \psi \rangle \geq E_0$, come mostrato nel primo esercizio svolto che segue).
- Si consideri la hamiltoniana $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$ dell'oscillatore armonico. Si assuma di aver stabilito che lo stato fondamentale ha la forma $\psi_0 = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}$ dove però il valore di σ è incognito. Lo si determini tenendo presente che tra tutti gli ψ_0 lo stato fondamentale sarà quello di minore energia media.
- Si consideri la Hamiltoniana $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 + \epsilon \hat{x}^4$. Si assuma che $\epsilon > 0$ sia piccolo e si sperimentino tecniche per determinare l'energia dello stato fondamentale in modo approssimato.

Esercizi svolti

- Si consideri un sistema unidimensionale con spettro discreto (tutti gli stati sono legati), si mostri che l'energia media per un qualsiasi stato normalizzato è sempre maggiore o uguale all'energia E_0 dello stato fondamentale ψ_0 .

Sia ϕ uno stato per il quale si ha $\langle \phi | \phi \rangle = 1$, tenendo presente $\phi = \sum_{n=0}^{\infty} c(n) \psi_n$ è facile verificare che $\sum_{n=0}^{\infty} |c(n)|^2 = 1$ ed è altrettanto facile verificare che il valore medio dell'energia $\langle \phi | \hat{H} \phi \rangle$ è uguale a $\sum_{n=0}^{\infty} |c(n)|^2 E_n$. Possiamo quindi scrivere $\langle \phi | \hat{H} \phi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c(n)|^2 E_n \geq \sum_{n=0}^{\infty} |c(n)|^2 E_0 = E_0$ dove si è tenuto conto della normalizzazione e del fatto che $E_n \geq E_0$ qualsiasi sia n .

- Si consideri il sistema di hamiltoniana $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + m\omega^2(\cosh(\hat{x}) - 1)$. Si utilizzi il principio di indeterminazione di Heisenberg per dare una stima dal basso dell'energia dello stato fondamentale (suggerimento: si tenga presente che $\cosh(x) - 1 \geq \frac{x^2}{2}$).

Non conosciamo lo stato fondamentale ψ_0 , possiamo tuttavia scrivere la seguente uguaglianza,

$$E_0 = \langle \psi_0 | \hat{H} \psi_0 \rangle = \frac{1}{2m} \langle \psi_0 | \hat{p}^2 \psi_0 \rangle + m\omega^2 \langle \psi_0 | (\cosh(\hat{x}) - 1) \psi_0 \rangle \quad (135)$$

Dato che $\cosh(x) - 1 \geq \frac{x^2}{2}$ si ha anche $\langle \psi_0 | (\cosh(\hat{x}) - 1) \psi_0 \rangle \geq \langle \psi_0 | \frac{\hat{x}^2}{2} \psi_0 \rangle$ e quindi

$$E_0 \geq \frac{1}{2m} \langle \psi_0 | \hat{p}^2 \psi_0 \rangle + \frac{m\omega^2}{2} \langle \psi_0 | \hat{x}^2 \psi_0 \rangle. \quad (136)$$

Si procede poi come per l'oscillatore armonico e si arriva alla conclusione che $E_0 \geq \frac{\hbar\omega}{2}$.

- Si consideri il sistema di hamiltoniana $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + m\omega^2(\cosh(\hat{x}) - 1)$. Si dia una stima dall'alto dell'energia E_0 dello stato fondamentale (suggerimento: si tenga presente che per qualunque ψ con norma unitaria si ha $\langle \psi | \hat{H} \psi \rangle \geq E_0$).

Usiamo la solita funzione di prova $\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}$. Si avrà

$$E_0 \leq \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle = \frac{1}{2m} \langle \psi | \hat{p}^2 \psi \rangle + m\omega^2 \langle \psi | (\cosh(\hat{x}) - 1) \psi \rangle. \quad (137)$$

Sappiamo già (altrimenti lo ricalcoliamo) che $\langle \psi | \hat{p}^2 \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$ e che per ipotesi $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, inoltre

$$\langle \psi | \cosh(\hat{x}) \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \cosh(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2} + x} dx = e^{\frac{\sigma^2}{2}} \quad (138)$$

dove per la seconda uguaglianza abbiamo usato $e^x = \cosh(x) + \sinh(x)$ e abbiamo tenuto presente il fatto che la gaussiana è qui una funzione pari come anche $\cosh(x)$, mentre $\sinh(x)$ è una funzione dispari. La terza uguaglianza coincide invece con un ben noto integrale gaussiano. La disuguaglianza diventa quindi $E_0 \leq \frac{\hbar^2}{8m\sigma^2} + m\omega^2(e^{\frac{\sigma^2}{2}} - 1)$. Questa disuguaglianza è valida per ogni σ per cui

$$E_0 \leq \min_{\sigma^2} \left[\frac{\hbar^2}{8m\sigma^2} + m\omega^2(e^{\frac{\sigma^2}{2}} - 1) \right], \quad (139)$$

la cui espressione esplicita non siamo in grado di derivare, tuttavia l'espressione da minimizzare è sempre strettamente maggiore di $\frac{\hbar^2}{8m\sigma^2} + m\omega^2 \frac{\sigma^2}{2}$, che è quella del precedente esercizio con minimo $\frac{\hbar\omega}{2}$. Il minimo qui sopra sarà quindi sempre strettamente maggiore di $\frac{\hbar\omega}{2}$.

3.4 Spettro sia continuo che discreto: la buca di potenziale

La buca di potenziale di altezza finita

L'equazione di Shrödinger indipendente da tempo è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V)\psi, \quad (140)$$

dove si avranno autovalori E_n e autostati ψ_n per lo spettro discreto e autovalori E_u e autostati ψ_u per lo spettro continuo. Si ricordi che solo le ψ_n sono normalizzabili.

La soluzione ψ di questa equazione, sia nel caso di spettro discreto che di spettro continuo, deve essere di classe C^{l+2} se il potenziale è di classe C^l . Questo perché la derivata seconda della funzione d'onda deve essere di classe C^l in accordo con la (140). Inoltre, se il potenziale ha una discontinuità di prima specie (salto), allora la derivata seconda della ψ avrà lo stesso tipo di discontinuità. Quindi in corrispondenza del salto di potenziale sia la ψ che la sua derivata rispetto a x saranno continue.

Consideriamo i tre intervalli $A = (-\infty, 0]$, $B = (0, L)$ e $C = [L, \infty)$ e definiamo il potenziale $V(x)$ come

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & \text{se } x \in B \\ V(x) &= V_0 > 0 & \text{se } x \in A \text{ oppure } x \in C. \end{aligned} \quad (141)$$

Questo potenziale (buca di altezza finita, a destra in figura (11)) ha una discontinuità di prima specie, pertanto le autofunzioni sono di classe C^1 .

Consideriamo per ora gli stati legati ψ_n con energia $E_n < V_0$. Nelle regioni A e C l'equazione di Shrödinger assume la forma $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n}{dx^2} = (E_n - V_0)\psi_n$ mentre nella regione B assume la forma $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n}{dx^2} = E_n\psi_n$. La soluzione in A è quindi

$$\psi_n(x) = a_n e^{\frac{\gamma_n}{\hbar} x}, \quad (142)$$

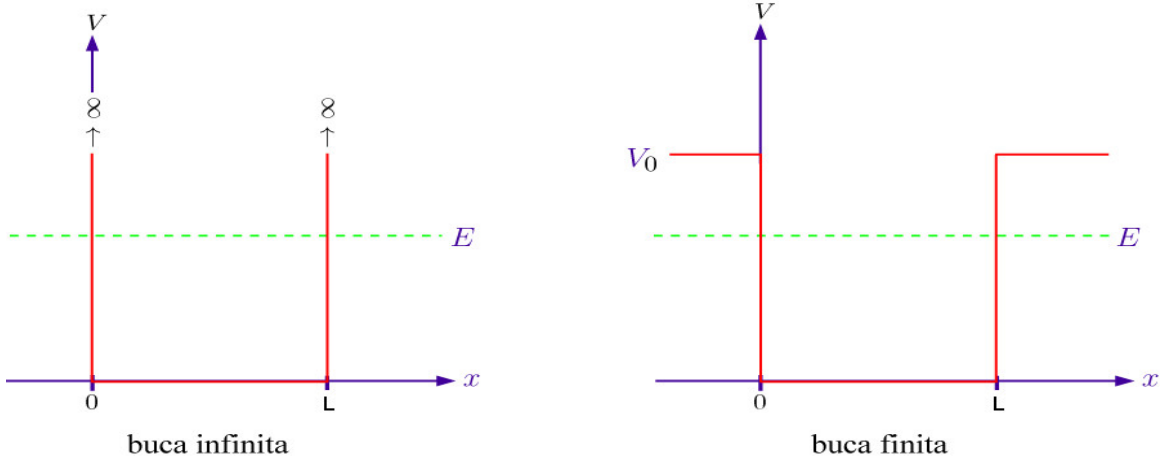


Figura 11. Potenziale buca infinita (a sinistra) e potenziale buca finita (a destra). Il secondo è nullo per $x \in (0, L)$ e vale $V_0 > 0$ altrove, il primo si ottiene dal secondo nel limite $V_0 \rightarrow \infty$.

con $\gamma_n = \sqrt{2m(V_0 - E_n)}$ e con costante a_n reale. Si noti che γ_n ha le dimensioni di un impulso ed è positiva ma non è un impulso, l'impulso come usualmente definito sarebbe $\sqrt{2m(E_n - V_0)}$ che però è una quantità immaginaria. Infatti, sia la regione A che la regione C sono classicamente inaccessibili per i valori dell'energia che stiamo considerando.

Si noti inoltre che anche $e^{-\frac{\gamma_n}{\hbar}x}$ è soluzione dell'equazione di Shrödinger in questa regione, tuttavia questa soluzione va scartata perché diverge quando $x \rightarrow -\infty$ e pertanto renderebbe la ψ_n , che descrive uno stato legato, non normalizzabile.

La soluzione in C è invece

$$\psi_n(x) = c_n e^{-\frac{\gamma_n}{\hbar}(x-L)}, \quad (143)$$

con costante c_n reale. Si noti che anche $e^{\frac{\gamma_n}{\hbar}(x-L)}$ è soluzione dell'equazione di Shrödinger in questa regione, tuttavia anche questa soluzione va scartata perché diverge quando $x \rightarrow +\infty$.

Infine, la soluzione in B è

$$\psi_n(x) = b_n \sin\left(\frac{p_n}{\hbar}x + \delta_n\right), \quad (144)$$

con impulso $p_n = \sqrt{2mE_n}$ e costanti b_n e δ_n reali e con $\delta_n \in [0, \pi]$.

Si noti che per definizione

$$\gamma_n = \sqrt{2m(V_0 - E_n)} = \sqrt{2mV_0 - p_n^2} \quad (145)$$

dato che $p_n^2 = 2mE_n$.

Abbiamo quindi la soluzione completa, in tutte tre le regioni A , B e C e quindi per tutti gli $x \in \mathbb{R}$, tuttavia dobbiamo ancora imporre le condizioni di continuità che abbiamo discusso all'inizio di questo paragrafo. Dobbiamo quindi scegliere le energie E_n (equivalentemente gli impulsi p_n) e le costanti a_n , b_n , c_n e δ_n in modo tale che la funzione sia continua e con derivata continua sia in $x = 0$ che in $x = L$. Imponendo tali condizioni in $x = 0$ otteniamo

$$a_n = b_n \sin(\delta_n), \quad a_n \gamma_n = b_n p_n \cos(\delta_n), \quad (146)$$

imponendole in $x = L$ otteniamo invece

$$c_n = b_n \sin\left(\frac{p_n}{\hbar}L + \delta_n\right), \quad c_n \gamma_n = -b_n p_n \cos\left(\frac{p_n}{\hbar}L + \delta_n\right). \quad (147)$$

Come vedremo costanti ed energie saranno tutte completamente determinate se aggiungiamo anche la condizione di normalizzazione (cinque equazioni per altrettante incognite). Questo problema sarà illustrato in dettaglio nel prossimo paragrafo.

I risultati finora ottenuti si riferiscono stati legati ψ_n con energia $E_n < V_0$. È facile tuttavia verificare che non esiste lo stato di energia nulla (che possiamo chiamare ψ_0). Infatti $E_0 = 0$ implica $p_0 = 0$ e $\gamma_0 = \sqrt{2mV_0} > 0$ per cui il complesso delle relazioni (146) e (147) porta all'unica soluzione $a_0 = c_0 = b_0 \sin(\delta_0) = 0$ che a sua volta implica che ψ_0 è nullo ovunque e quindi non ha significato fisico.

Inoltre, nel caso in cui ci fosse un autostato ψ_n con energia $E_n = V_0$ avremmo $\gamma_n = 0$ che implicherebbe soluzioni (142) e (143) costanti e quindi la funzione d'onda non sarebbe normalizzabile a meno che $a_n = c_n = 0$ (ma in tal caso l'unica soluzione sarebbe di nuovo un'autofunzione nulla ovunque che non ha significato fisico). Una soluzione non normalizzabile con energia $E_n = V_0$, se esiste, è uno stato di scattering e non uno stato legato.

Riassumendo possiamo affermare che gli stati legati sono limitati alla regione di energia strettamente maggiore di 0 e strettamente minore di V_0 . Come vedremo la regione di energie maggiori o uguali a V_0 corrisponde invece agli stati di scattering. Tuttavia, l'autostato di energia uguale a V_0 esiste solo per specifici valori dei parametri (tratteremo questo problema come un esercizio).

Compresenza di spettro continuo e discreto

Dalle equazioni (146) e (147) si ricavano subito le due equazioni

$$\tan(\delta_n) = -\tan\left(\frac{p_n}{\hbar}L + \delta_n\right) = \frac{p_n}{\gamma_n}, \quad (148)$$

che possono essere considerate insieme alla prima della (146), alla prima della (147) e alla condizione di normalizzazione per risolvere il problema. Dalle uguaglianze tra il primo e il terzo termine in (148) ricaviamo

$$\delta_n = \arctan\left(\frac{p_n}{\gamma_n}\right) = \arcsin\left(\frac{p_n}{\sqrt{2mV_0}}\right), \quad (149)$$

dove la seconda uguaglianza si ottiene tenendo conto che $\gamma_n = \sqrt{2mV_0 - p_n^2}$ e dove $\delta_n \in [0, \frac{\pi}{2}]$. Dalla uguaglianza tra il primo e il secondo termine in (148) ricaviamo inoltre

$$\frac{p_n}{\hbar}L + \delta_n = -\delta_n + n\pi \quad (150)$$

e quindi confrontando la seconda uguaglianza in (149) e la (150) si ha subito

$$\frac{p_n}{\hbar}L + 2 \arcsin\left(\frac{p_n}{\sqrt{2mV_0}}\right) = n\pi, \quad (151)$$

dove l'intero n assume solo valori strettamente positivi. Si noti infatti che l'espressione a sinistra in (151) è strettamente positiva dato che p_n non può essere uguale a zero (abbiamo già visto che non ci sono stati di energia nulla).

L'equazione (151) permette di ricavare gli impulsi p_n (o equivalentemente le energie E_n), tuttavia soltanto valori di n minori o uguali a un certo n_{\max} danno origine a soluzioni. Per verificare questa affermazione e determinare n_{\max} ricordiamo che $E_n = V_0$ è da escludere perché l'eventuale corrispondente stato sarebbe di scattering e anche che non esistono stati di energia nulla. In altre parole, per avere lo stato legato ψ_n è necessario che $0 < E_n < V_0$ che a sua volta implica $0 < p_n < \sqrt{2mV_0}$. Da quest'ultima disuguaglianza, tenendo conto che l'espressione a

sinistra nella (151) è una funzione crescente di p_n e che nell'intervallo $0 < p_n < \sqrt{2mV_0}$ si ha $0 < \arcsin\left(\frac{p_n}{\sqrt{2mV_0}}\right) < \frac{\pi}{2}$, si ricava immediatamente

$$0 < \frac{p_n}{\hbar} L + 2 \arcsin\left(\frac{p_n}{\sqrt{2mV_0}}\right) < \frac{\sqrt{2mV_0} L^2}{\hbar} + \pi. \quad (152)$$

Dalla (152), tenendo presente la (151), si ricava infine che tutti gli n per i quali vale la disuguaglianza

$$0 < n < \frac{\sqrt{2mV_0} L^2}{\hbar\pi} + 1 \quad (153)$$

sono associati ad autostati legati ψ_n con energia E_n . Dato che la disuguaglianza è sempre soddisfatta per $n = 1$ esiste sempre almeno un autostato legato. Inoltre, dato che n_{\max} è il numero d'ordine più alto dello spettro discreto, si ha

$$\frac{\sqrt{2mV_0} L^2}{\hbar\pi} \leq n_{\max} < \frac{\sqrt{2mV_0} L^2}{\hbar\pi} + 1. \quad (154)$$

L'autofunzione corrispondente a un valore permesso n è ψ_n , che nelle tre regioni A , B e C è data rispettivamente dalle espressioni (142), (144) e (143), restano da determinare soltanto i parametri. Dalla uguaglianza tra il primo e terzo termine nella (149) ricaviamo $\sin(\delta_n) = \frac{p_n}{\sqrt{2mV_0}}$ e quindi dalla prima delle equazioni in (146), dalla prima delle equazioni in (147) e dalla (150)

$$a_n = b_n \frac{p_n}{\sqrt{2mV_0}}, \quad c_n = \pm b_n \frac{p_n}{\sqrt{2mV_0}}, \quad (155)$$

dove il segno positivo nel secondo termine della seconda equazione vale per n dispari e il segno negativo per n pari. Resta soltanto da determinare b_n , questo può essere fatto imponendo la normalizzazione $\|\psi_n\| = 1$. Lasciamo questo punto come esercizio.

In definitiva abbiamo trovato n_{\max} autostati $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{n_{\max}}$. Lo stato ψ_1 è quello di minima energia (si chiama stato fondamentale), questo stato esiste sempre dato che la condizione (153) è sempre soddisfatta per $n = 1$.

Le soluzioni sono di tipo sinusoidale all'interno della buca e decadono esponenzialmente al di fuori di essa come mostrato in figura (12). Si noti che la particella può essere trovata con probabilità positiva al di fuori della regione classicamente accessibile.

Consideriamo per ora gli stati di scattering ψ_p con valori dell'energia $E_p > V_0$ corrispondenti allo spettro continuo. Non solo la regione B , ma anche le regioni A e C sono classicamente accessibili per i valori dell'energia che stiamo considerando. Nelle regioni A e C l'equazione di Schrödinger assume la forma $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_p}{dx^2} = (E_p - V_0)\psi_p$ mentre nella regione B assume la forma $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_p}{dx^2} = E_p\psi_p$ (non si confonda questa ψ_p con l'autostato dell'impulso).

La soluzione in A è

$$\psi_p(x) = a_p^{(1)} e^{i\frac{\gamma_p}{\hbar}x} + a_p^{(2)} e^{-i\frac{\gamma_p}{\hbar}x}, \quad (156)$$

con $\gamma_p = \sqrt{2m(E_p - V_0)}$ che è un vero impulso (si noti la differenza con l'omonima quantità degli stati legati che è invece uno pseudoimpulso, nella radice compare qui la differenza tra energia e potenziale e non viceversa). Dato che lo stato è di scattering, non c'è un teorema che ci assicuri che la funzione d'onda sia reale, quindi le costanti $a_p^{(1)}$ e $a_p^{(2)}$ sono in generale complesse.

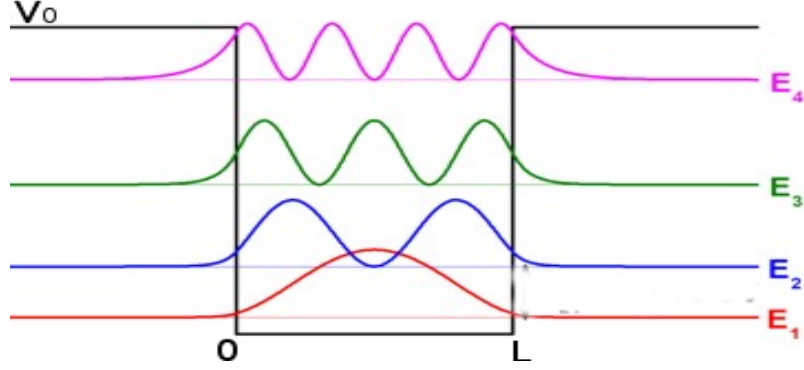


Figura 12. Buca di altezza finita. Le quattro densità di probabilità $|\psi_1|^2$, $|\psi_2|^2$, $|\psi_3|^2$ e $|\psi_4|^2$ corrispondenti agli autostati con le energie più basse E_1 , E_2 , E_3 e E_4 . Ogni densità di probabilità è graficata in corrispondenza del rispettivo valore dell'energia in modo tale che l'asse delle ascisse risulta traslato verso l'alto di un valore diverso per ognuna. Si noti il comportamento sinusoidale all'interno della buca e il decadimento esponenziale al di fuori di essa.

La soluzione in C è invece

$$\psi_p(x) = c_p^{(1)} e^{i\frac{\gamma_p}{\hbar}(x-L)} + c_p^{(2)} e^{-i\frac{\gamma_p}{\hbar}(x-L)}, \quad (157)$$

con $c_p^{(1)}$ e $c_p^{(2)}$ costanti complesse.

Infine, la soluzione in B è

$$\psi_p(x) = b_p^{(1)} e^{i\frac{p}{\hbar}x} + b_p^{(2)} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}, \quad (158)$$

con impulso $p = \sqrt{2mE_p}$ e con $b_p^{(1)}$ e $b_p^{(2)}$ costanti complesse.

Ogni valore dell'energia è ammissibile in questa regione $E_p > V_0$. La soluzione completa si ottiene quindi semplicemente imponendo le condizioni di continuità sulla funzione d'onda e sulla sua derivata in $x = 0$ e in $x = L$. Si può anche mostrare che a ogni livello di energia corrispondono due autostati indipendenti e quindi ogni livello è doppiamente degenere come nel caso libero.

Abbiamo già discusso il fatto che quando $E_p = V_0$ siamo ancora nello spettro continuo. Tuttavia si può mostrare che il corrispondente autostato esiste solo quando $\sqrt{2mV_0}L^2/\hbar^2\pi^2$ è un numero intero e in tal caso il livello non è degenere. Lasciamo questo punto come esercizio.

Soltanto spettro discreto: buca di potenziale di altezza infinita

Consideriamo ora il problema della buca di altezza infinita, ossia il caso in cui $V_0 \rightarrow \infty$ (a sinistra in figura 11).

Per la buca infinita tutti gli stati sono legati dato che l'energia non può essere maggiore o uguale a V_0 . Se $V_0 \rightarrow \infty$ allora anche $\gamma_n = \sqrt{2m(V_0 - E_n)} \rightarrow \infty$ per ogni E_n finita, invece $p_n = \sqrt{2mE_n}$ rimane finita. Dalla (149) si ottiene quindi

$$\delta_n = 0, \quad (159)$$

mentre dalle (155) si ricava immediatamente che $a_n = c_n = 0$, ossia che la funzione è nulla in A e in C (fuori dalla buca). Infine, dalla (151) si ricava

$$\frac{p_n}{\hbar}L = n\pi \quad \rightarrow \quad p_n = \frac{n\pi\hbar}{L} \quad \rightarrow \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}. \quad (160)$$

In definitiva gli autostati che sono nulli in A e C ed uguali a

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{p_n}{\hbar} x\right) \quad (161)$$

in B . La scelta $b_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$ fa sì che $\|\psi_n\| = \int_0^L |\psi|^2 dx = 1$. Tutti i valori di strettamente positivi $n = 1, 2, \dots$ sono ammissibili. Il valore $n = 0$, che corrisponde a $p_0 = 0$, rende nulla la corrispondente autofunzione per tutti i reali e quindi va scartato (abbiamo già visto in generale che non esistono autostati di energia nulla). Lo stato fondamentale resta quindi ψ_1 .

Lo studente attento, si sarà reso conto, che il modello di buca infinita non è altro che il corrispondente quantistico del gas unidimensionale classico. Per quest'ultimo l'azione è $A = \frac{pL}{\pi}$, sostituendo a p il corrispondente valore quantistico p_n in (160) si ottiene l'azione quantizzata

$$A_n = \frac{p_n L}{\pi} = n\hbar. \quad (162)$$

Sorprendentemente, per questo modello la regola di quantizzazione di Wilson e Sommerfeld funziona perfettamente.

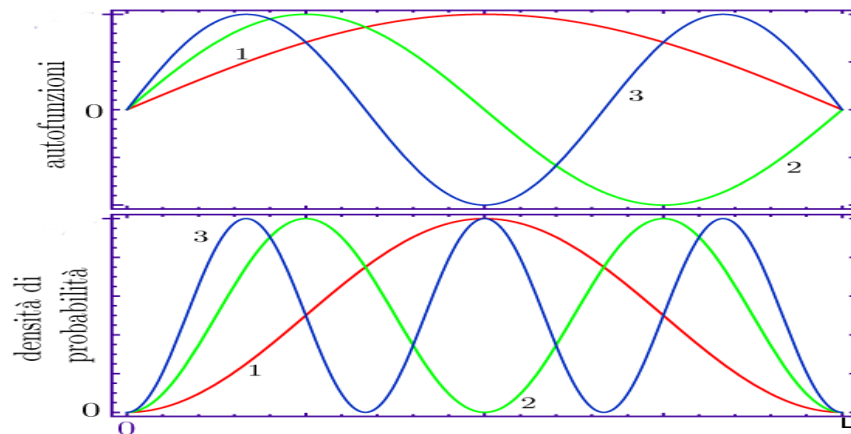


Figura 13. Buca infinitamente alta. Le tre autofunzioni ψ_1 , ψ_2 e ψ_3 (in alto) con le energie più basse E_1 , E_2 e E_3 e le relative densità di probabilità $|\psi_1|^2$, $|\psi_2|^2$ e $|\psi_3|^2$ (in basso). Le autofunzioni sono di tipo sinusoidale all'interno della buca e si annullano al di fuori di essa.

Esercizi

- Si consideri una buca di altezza finita. Quando $E_p = V_0$ siamo ancora nello spettro continuo: si mostri che il corrispondente autostato esiste solo quando $\sqrt{2mV_0} L^2/\hbar^2\pi^2$ è un numero intero e in tal caso il livello non è degenere.
- Si consideri una barriera di potenziale, ossia un sistema con potenziale che vale $V_0 > 0$ per $x \in [0, L]$ e vale 0 altrove. Tutti gli stati sono di scattering con energie $E_p > 0$: calcolare le autofunzioni con $0 < E_p < V_0$ e con $\psi_p(x) = e^{i\frac{px}{\hbar}}$ per $x \in [-\infty, 0]$ (per semplicità di calcolo si assuma $p > 0$).

Esercizio svolto

- Si consideri il potenziale gradino, ossia il potenziale che vale $V_0 > 0$ per $x \in (-\infty, 0]$ e vale 0 per $x \in (0, \infty]$. Tutti gli stati sono di scattering. Calcolare le autofunzioni con $0 < E_p < V_0$ e mostrare che per i tali valori dell'energia non c'è degenerazione dei livelli. Si studi infine il problema nel limite $V_0 \rightarrow \infty$.

La soluzione dell'equazione di Shrödinger indipendente dal tempo è $\psi_p(x) = a_p e^{\frac{\gamma p x}{\hbar}}$ per $x \in (-\infty, 0]$ e $\psi_p(x) = b_p^{(1)} e^{i\frac{p}{\hbar}x} + b_p^{(2)} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}$ per $x \in (0, \infty]$, dove $\gamma_p = \sqrt{2m(V_0 - E_p)}$ e $p = \sqrt{2mE_p}$. La continuità di $\psi_p(x)$ e quella della sua derivata implicano le due seguenti relazioni tra i parametri:

$$a_p = b_p^{(1)} + b_p^{(2)}, \quad \gamma_p a_p = ip(b_p^{(1)} - b_p^{(2)}). \quad (163)$$

Questo sistema può essere risolto esprimendo $b_p^{(1)}$ e $b_p^{(2)}$ in funzione di a_p (lasciamo questo semplice esercizio allo studente). La soluzione è unica (assenza di degenerazione), inoltre senza perdere di generalità possiamo assumere che a_p sia reale e possiamo fissarne il valore in modo che le autofunzioni siano ortonormali secondo Dirac.

Il limite $V_0 \rightarrow \infty$, implica $\gamma_p \rightarrow \infty$ per tutti gli p . In tal caso la soluzione delle equazioni (163) è $a_p = 0$, $b_p^{(1)} = -b_p^{(2)} = b_p$ e pertanto $\psi_p(x) = 0$ per $x \in (-\infty, 0]$ e $\psi_p(x) = 2ib_p \sin(\frac{px}{\hbar})$ per $x \in (0, \infty]$. Il parametro $2ib_p$ può essere scelto reale e il valore fissato per ortonormalizzazione secondo Dirac. Allo stesso risultato si arriva considerando che nel limite $V_0 \rightarrow \infty$ la soluzione dell'equazione di Shrödinger indipendente dal tempo è $\psi_p(x) = 0$ per $x \in (-\infty, 0]$ e $\psi_p(x) = b_p^{(1)} e^{i\frac{p}{\hbar}x} + b_p^{(2)} e^{-i\frac{p}{\hbar}x}$ per $x \in (0, \infty]$ e imponendo soltanto la continuità di questa autofunzione nell'origine.

3.5 Stati legati dei sistemi con potenziali delta

Buca stretta e profonda

Consideriamo ancora la buca di altezza finita e consideriamo il limite in cui essa sia molto stretta e molto profonda, ossia il limite $L \rightarrow 0$, $V_0 \rightarrow \infty$ con il prodotto $LV_0 = \alpha$ fisso. Dato che $LV_0 = \alpha$ possiamo riscrivere la (153) come

$$0 < n < \frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar\pi} \sqrt{L} + 1, \quad (164)$$

per piccoli L solo $n = 1$ soddisfa la disuguaglianza e quindi abbiamo provato che esiste un solo stato legato con energia E che viene determinata dalla (151). Ponendo $n = 1$, $p_n = p$ e $\gamma_n = \gamma$, si ha

$$\frac{p}{\hbar} L + 2 \arctan\left(\frac{p}{\gamma}\right) = \pi, \quad (165)$$

dove $\gamma = \sqrt{2m(V_0 - E)}$ e $p = \sqrt{2mE}$. Questa equazione può essere riscritta come

$$\frac{p}{\gamma} = \tan\left(\frac{\pi}{2} - \frac{pL}{2\hbar}\right) = \cot\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) \rightarrow \frac{\gamma}{p} = \tan\left(\frac{pL}{2\hbar}\right). \quad (166)$$

Assumiamo che nel limite di buca profonda e stretta si abbia $E \rightarrow -\infty$ e che $\Delta = V_0 - E$ rimanga finito. In tal caso $\gamma = \sqrt{2m\Delta}$ e $p = \sqrt{2m(V_0 - \Delta)}$. Senza trascurare contributi che sono rilevanti nel limite, possiamo scrivere $\frac{\gamma}{p} = \sqrt{\frac{\Delta}{V_0 - \Delta}} \simeq \sqrt{\frac{\Delta}{V_0}} = \sqrt{\frac{\Delta L}{\alpha}}$ e anche $pL = \sqrt{2m(V_0 - \Delta)L^2} \simeq$

$\sqrt{2mV_0L^2} = \sqrt{2m\alpha L}$. Dalla seconda uguaglianza nella (166) otteniamo

$$\sqrt{\frac{\Delta L}{\alpha}} \simeq \tan\left(\frac{\sqrt{2m\alpha L}}{2\hbar}\right) \simeq \frac{\sqrt{2m\alpha L}}{2\hbar}, \quad (167)$$

dalla quale si ricava immediatamente

$$\sqrt{\frac{\Delta}{\alpha}} = \frac{\sqrt{2m\alpha}}{2\hbar} \rightarrow E - V_0 = -\Delta = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (168)$$

In definitiva nel limite di buca stretta e profonda si ha un unico stato legato con un'energia che tende all'infinito, tuttavia se sottraiamo al potenziale $V(x)$ la costante V_0 (questo non cambia la fisica) si ottiene un potenziale che è uguale a zero ovunque eccetto che nell'intervallo $[0, L]$ dove vale $-V_0$. L'energia dello stato legato risulta allora negativa ma finita ($-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$).

Potenziale delta singolo

Calcoliamo l'energia dell'autostato legato del sistema con $V(x) = -\alpha\delta(x)$. Il modello è lo stesso del precedente paragrafo quando la costante V_0 è sottratta al potenziale. Dovremmo quindi trovare un solo stato legato con energia E uguale a $-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$.

Stavolta però la tecnica sarà differente. Infatti non solo il potenziale ha una discontinuità nell'origine ($x = 0$), ma anche il suo integrale ne ha una di prima specie (al contrario, l'integrale del potenziale non ha discontinuità per la buca di altezza finita). Pertanto potremo imporre solo la continuità della funzione d'onda ma non della sua derivata.

L'equazione di Shrödinger indipendente da tempo è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi, \quad (169)$$

dove E deve essere negativa per avere uno stato legato.

Al di fuori dell'origine il potenziale è nullo per cui, tenendo conto del fatto che l'autostato ψ deve essere normalizzabile, si avrà $\psi = ae^{\frac{\gamma x}{\hbar}}$ a sinistra dell'origine e $\psi = ce^{-\frac{\gamma x}{\hbar}}$ a destra, con $\gamma = \sqrt{-2mE}$ strettamente positivo. La continuità di ψ nell'origine impone inoltre $a = c$ e quindi per ogni x reale possiamo scrivere $\psi = ae^{-\frac{\gamma|x|}{\hbar}}$

Se sostituiamo in (169) e integriamo a sinistra e a destra tra $-\epsilon$ e $\epsilon > 0$ e infine facciamo il limite $\epsilon \rightarrow 0$, otteniamo

$$\frac{\hbar\gamma}{m}a - \alpha a = 0 \rightarrow \gamma = \frac{m\alpha}{\hbar} \rightarrow E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}, \quad (170)$$

che per l'energia è il risultato del precedente paragrafo. Inoltre trovato per ogni valore di x abbiamo trovato $\psi = ae^{-\frac{\gamma|x|}{\hbar}}$ con a facilmente determinabile imponendo la normalizzazione.

Potenziale doppia delta

Troviamo ora gli stati legati e le corrispondenti energie del sistema con potenziale doppia delta: $V(x) = -\alpha\delta(x-L) - \alpha\delta(x+L)$.

La soluzione dell'equazione di Schrödinger per gli stati legati è $\psi = ae^{\frac{\gamma(x+L)}{\hbar}}$ per $x \in [-\infty, -L]$, $\psi = b_1e^{\frac{\gamma x}{\hbar}} + b_2e^{-\frac{\gamma x}{\hbar}}$ per $x \in [-L, L]$ e $\psi = ce^{-\frac{\gamma(x-L)}{\hbar}}$ per $x \in [L, \infty]$. Per gli stati legati l'energia è strettamente negativa e per definizione $\gamma = \sqrt{-2mE}$.

Se si segue il metodo del precedente paragrafo si trovano quattro equazioni per γ e per i quattro parametri reali a , b_1 , b_2 e c . Dalla continuità dell'autostato si ha:

$$a = b_1e^{-\frac{\gamma L}{\hbar}} + b_2e^{\frac{\gamma L}{\hbar}}, \quad c = b_1e^{\frac{\gamma L}{\hbar}} + b_2e^{-\frac{\gamma L}{\hbar}}, \quad (171)$$

mentre integrando l'equazione negli intorno di $x = -L$ e di $x = L$ si ha:

$$\alpha a = -\frac{\hbar\gamma}{2m} \left[b_1 e^{-\frac{\gamma L}{\hbar}} - b_2 e^{\frac{\gamma L}{\hbar}} - a \right], \quad \alpha c = -\frac{\hbar\gamma}{2m} \left[b_2 e^{-\frac{\gamma L}{\hbar}} - b_1 e^{\frac{\gamma L}{\hbar}} - c \right]. \quad (172)$$

Per gli autostati simmetrici si ha necessariamente $a = c$ e $b_1 = b_2$ (che è compatibile con le quattro equazioni (171) e (172)). Dalle prima delle equazioni (171) e dalle prima delle equazioni (172) si ricava :

$$\alpha \left(e^{\frac{\gamma L}{\hbar}} + e^{-\frac{\gamma L}{\hbar}} \right) = \frac{\hbar\gamma}{m} e^{\frac{\gamma L}{\hbar}} \quad \rightarrow \quad \gamma = \frac{m\alpha}{\hbar} \left(1 + e^{-\frac{2\gamma L}{\hbar}} \right). \quad (173)$$

La soluzione strettamente positiva γ_1 dell'equazione a destra qui sopra (che è unica, lo si verifichi graficamente) permette di ricavare l'energia dello stato fondamentale $E_1 = -\frac{\gamma_1^2}{2m}$.

Per gli autostati antisimmetrici si ha necessariamente $a = -c$ e $-b_1 = b_2$. Dalle prima delle equazioni (171) e dalle prima delle equazioni (172) si ricava :

$$\alpha \left(e^{\frac{\gamma L}{\hbar}} - e^{-\frac{\gamma L}{\hbar}} \right) = \frac{\hbar\gamma}{m} e^{\frac{\gamma L}{\hbar}} \quad \rightarrow \quad \gamma = \frac{m\alpha}{\hbar} \left(1 - e^{-\frac{2\gamma L}{\hbar}} \right). \quad (174)$$

L'unica soluzione strettamente positiva γ_2 dell'equazione a destra qui sopra esiste solo se la derivata nell'origine del secondo membro è maggiore di 1 (lo si verifichi graficamente), quindi solo se $\frac{2m\alpha L}{\hbar^2} > 1$.

L'energia $E_2 = -\frac{\gamma_2^2}{2m}$ è quella del primo stato eccitato, si può infatti verificare sempre graficamente che $\gamma_2 < \gamma_1$ e quindi che $E_2 > E_1$.



4. L'equazione di Schrödinger in tre dimensioni

4.1 Il momento angolare

4.2 Il caso libero e l'oscillatore armonico

4.3 Forze centrali: l'atomo di idrogeno

5. Entanglement, collasso e spin degli elettroni

5.1 La notazione di Dirac e l'entanglement quantistico

La notazione di Dirac

La notazione bra-ket fu proposta da Paul Dirac nella sua pubblicazione *A New Notation for Quantum Mechanics* del 1939. Fu progettata specificamente per facilitare la notazione degli stati quantistici e il suo utilizzo è attualmente ubiquo in meccanica quantistica. Tenete presente che è solo una notazione della quale faremo uso nel seguito dell'articolo, ma non aggiunge niente a quel che già sappiamo dal punto di vista fisico.

Abbiamo già visto che lo stato di un sistema, in ogni istante t , è descritto dalla funzione d'onda a valori complessi $\psi(q, t)$ definita in ogni punto dello spazio delle configurazioni $q = (q_1, q_2, \dots, q_n) \in \mathbb{R}^n$. Per un sistema di N particelle, ciascuna delle variabili q_i può coincidere con una delle coordinate di posizione per cui $n = 3N$.

Nella notazione di Dirac questo stato è rappresentato dal ket $|\psi(t)\rangle$ (che può essere pensato come un "vettore colonna") che ha come lhermitiano coniugato il bra $\langle\psi(t)|$ (un "vettore riga"). Quando non necessario, ometteremo l'argomento t e scriveremo semplicemente $|\psi\rangle$ al posto di $|\psi(t)\rangle$.

I ket (e i bra) sono i vettori di stato dello spazio di Hilbert dove il prodotto scalare $\langle\phi|\psi\rangle$ è definito come

$$\langle\phi|\psi\rangle := \int_{\mathbb{R}^n} \phi^*(q, t)\psi(q, t)dq, \quad (175)$$

dove $dq = \prod_{i=1}^n dq_i$ (la notazione $\langle\phi|\psi\rangle$ per il prodotto è esattamente la stessa di quella usata in precedenza in queste note). Da questa definizione segue immediatamente che $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$ e che la condizione di normalizzazione può essere scritta come $\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} = 1$, dove

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^n} |\psi(q, t)|^2 dq. \quad (176)$$

Abbiamo già visto che due vettori di stato che differiscono per una qualsiasi costante complessa moltiplicativa a rappresentano lo stesso stato fisico. Tradotto nella nuova notazione questo significa che $|\psi\rangle$ e $|\psi'\rangle = a|\psi\rangle = |a\psi\rangle$, rappresentano anch'essi lo stesso stato fisico, per cui la condizione di normalizzazione può essere alleggerita assumendo $\|\psi\| = |a|$. Tuttavia nel seguito assumeremo sempre normalizzazione unitaria, nel caso contrario sarà specificato esplicitamente.

La notazione di Dirac per la derivata parziale rispetto al tempo è $\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = |\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)\rangle$, inoltre, dato l'operatore hermitiano \hat{f} , la notazione di Dirac per $\hat{f}\psi(q, t)$ è $\hat{f}|\psi\rangle = |\hat{f}\psi\rangle$. Ne consegue che "l'elemento di matrice" di \hat{f} , denotato da $\langle\phi|\hat{f}|\psi\rangle$, è definito come

$$\langle\phi|\hat{f}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{f}\psi\rangle = \langle\hat{f}\phi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \phi^*(q, t)\hat{f}\psi(q, t)dq. \quad (177)$$



Figura 14. Paul Adrien Maurice Dirac (Bristol, 8 agosto 1902 - Tallahassee, 20 ottobre 1984) è stato un fisico matematico e teorico britannico che ha dato contributi fondamentali alla meccanica quantistica e all'elettrodinamica quantistica. Vinse il Premio Nobel per la fisica nel 1933 insieme a Erwin Schrödinger.

La notazione della seconda e della terza espressione è quella già usata nei precedenti capitoli, inoltre ricordiamo che le due espressioni sono uguali perché \hat{f} è hermitiano. Dalla definizione precedente segue immediatamente che la media di f è

$$\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \langle \hat{f} \rangle = \langle \psi | \hat{f} \psi \rangle = \langle \hat{f} \psi | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \psi^*(q, t) \hat{f} \psi(q, t) dq, \quad (178)$$

dove, di nuovo, la notazione della seconda espressione e quella della terza e della quarta sono state già utilizzate nei precedenti capitoli.

Infine, il principio di sovrapposizione degli stati che è uno dei postulati fondamentali della meccanica quantistica può essere enunciato come segue: se $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ sono due stati possibili allora lo stato

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle \quad (179)$$

è anch'esso possibile per ogni scelta delle costanti complesse c_1 e c_2 .

Abbiamo visto nel capitolo 2 che un assioma fondamentale della meccanica quantistica afferma che a ogni osservabile fisica f è associata ad un operatore hermitiano lineare \hat{f} e che i possibili valori risultanti da una misura di f sono solo gli autovalori di \hat{f} . In particolare, se lo spettro di \hat{f} è discreto, la variabile assume solo valori discreti (quantizzati), invece, se lo spettro è continuo, la variabile assume valori con continuità.

Gli autostati degli operatori sono indicati con $|\psi_n\rangle$ se gli autovalori associati f_n assumono valori discreti come, ad esempio, quelli dell'energia di un oscillatore armonico, inoltre, vengono indicati con $|\psi_u\rangle$ se gli autovalori associati f_u assumono valori con continuità come, ad esempio, quelli della quantità di moto di una particella libera in una dimensione.

Un operatore può avere uno spettro discreto oppure continuo o anche uno spettro in parte discreto e in parte continuo. In generale si può trovare una base ortonormale, ed è possibile scrivere

la decomposizione spettrale in notazione bra-ket come

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c(n, t) |\psi_n\rangle + \int du c(u, t) |\psi_u\rangle, \quad (180)$$

dove gli autostati dello spettro continuo sono ortogonali a quelli dello spettro discreto, ossia $\langle \psi_n | \psi_u \rangle = 0$ e dove $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{n,m}$ e $\langle \psi_u | \psi_v \rangle = \delta(u - v)$.

Gli autostati $|\psi_n\rangle$ e $|\psi_u\rangle$ sono spesso indicati semplicemente con $|n\rangle$ e $|u\rangle$. In particolare, l'autostato della quantità di moto di una singola particella in una dimensione $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$, corrispondente all'autovalore p , è indicato con $|p\rangle$ e l'autostato $\psi_x(x') = \delta(x' - x)$ della posizione, corrispondente all'autovalore x , è indicato con $|x\rangle$ (abbiamo rinominato x' la variabile argomento della funzione d'onda per evitare un intreccio di simboli).

Dato lo stato $|\psi(t)\rangle$, i coefficienti $c(n, t)$ e $c(u, t)$ possono essere calcolati per integrazione nello stesso modo:

$$c(n, t) = \langle n | \psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi_n(x) \psi(x, t) dx, \quad c(u, t) = \langle u | \psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi_u(x) \psi(x, t) dx. \quad (181)$$

In particolare, per una singola particella in uno spazio unidimensionale si ha $c(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle = \psi(x, t)$, infatti

$$c(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi_x(x') \psi(x', t) dx' = \int_{\mathbb{R}} \delta(x - x') \psi(x', t) dx' = \psi(x, t). \quad (182)$$

La normalizzazione $\|\psi\| = 1$, la definizione (178) della media di un osservabile e l'ortonormalità degli autostati hanno importanti conseguenze (i passaggi intermedi sono lasciati come esercizio):

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c(n, t)|^2 + \int |c(u, t)|^2 du, \quad \langle \hat{f} \rangle = \sum_n |c(n, t)|^2 f_n + \int |c(u, t)|^2 f_u du \quad (183)$$

che ci permettono di interpretare $|c(n, t)|^2$ come una probabilità e $|c(u, t)|^2$ come una densità di probabilità. Dovreste ormai essere ben consapevoli del loro significato fisico: $|c(n, t)|^2$ and $|c(u, t)|^2$ sono rispettivamente la probabilità e la densità di probabilità relativa al risultato di una misura su un sistema descritto da $|\psi(q, t)\rangle$. Più precisamente, $|c(n, t)|^2$ è la probabilità che il sistema sia trovato nello stato $|n\rangle$ al tempo t e $|c(u, t)|^2$ è la densità di probabilità con significato analogo relativamente allo stato $|u\rangle$.

Questa è nota come "regola di Born generalizzata" che estende a qualsiasi osservabile la "regola di Born" che invece si applica solo alle misure di posizione (come abbiamo già visto, la probabilità che un sistema si trovi in una regione A dello spazio delle configurazioni è $\int_A |\psi(q, t)|^2 dq$ e quindi $|\psi(q, t)|^2$ è la densità di probabilità relativa).

Va notato, tuttavia, che gli autovalori di diversi autostati possono essere uguali, quindi la probabilità di un dato risultato di una misura della variabile f deve tenere conto di questa possibile degenerazione. Per essere più chiari, se lo stato ψ_n non è degenere, la probabilità di avere f_n come risultato è semplicemente $|c(n, t)|^2$, ma se gli stati $\psi_{n_1}, \psi_{n_2}, \dots, \psi_{n_k}$ corrispondono tutti allo stesso autovalore f_n , questa probabilità è $|c(n_1, t)|^2 + |c(n_2, t)|^2 + \dots + |c(n_k, t)|^2$. Lo stesso vale per una variabile continua, l'unica differenza è che la densità di probabilità sostituisce la probabilità.

Concludiamo con un'ultima informazione sulla notazione di Dirac. Supponiamo che una funzione d'onda possa essere scritta nella forma fattorizzata $\psi(q, t) = \psi_a(q_1, q_2, \dots, q_l) \psi_b(q_{l+1}, q_{l+2}, \dots, q_n)$, allora il vettore ket potrà essere scritto come il prodotto tensoriale $|\psi\rangle = |\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle$. Le variabili q_1, q_2, \dots, q_l e le variabili $q_{l+1}, q_{l+2}, \dots, q_n$ possono riferirsi anche a componenti diverse delle

coordinate delle stesse particelle, tuttavia la notazione prodotto tensoriale si usa per lo più quando le prime variabili si riferiscono a un sottosistema e le seconde variabili a un altro. Sia $\phi(q, t) = \phi_a(q_1, q_2, \dots, q_l)\phi_b(q_{l+1}, q_{l+2}, \dots, q_n)$ un secondo stato con stessa fattorizzazione, è facile verificare che il prodotto scalare si può esprimere come $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi_a | \psi_a \rangle \langle \phi_b | \psi_b \rangle$.

Sistemi composti ed entanglement

La notazione di Dirac è molto conveniente per designare stati composti. Si consideri ad esempio un sistema composto da due sottosistemi A and B , il primo nello stato $|\alpha\rangle_A$ e il secondo nello stato $|\beta\rangle_B$. Per fissare le idee supponete che i due sottosistemi non abbiano mai interagito per cui il vettore di stato del sistema composto può essere scritto nella forma

$$|\psi\rangle = |\alpha\rangle_A \otimes |\beta\rangle_B \quad (184)$$

dove \otimes indica prodotto tensoriale. Si dice in questo caso che gli stati sono separabili. Questa notazione può essere estesa al caso di molti sottosistemi, ad esempio lo stato di N particelle libere, ognuna di esse con un preciso valore dell'impulso. Se non hanno mai interagito il vettore di stato del sistema composto può essere scritto come $|\mathbf{p}_1\rangle \otimes |\mathbf{p}_2\rangle \otimes \dots \otimes |\mathbf{p}_N\rangle$.

Il ket $|\psi\rangle$ in (184) rappresenta uno stato fattorizzato e implica una completa indipendenza reciproca dei due sottosistemi A e B che sono autonomamente descritti dagli stati $|\alpha\rangle_A$ e $|\beta\rangle_B$. In assenza di interazione tra loro, essi continueranno ad essere separati e, di conseguenza, il loro stato continuerà ad essere fattorizzato.

Tuttavia, in molti casi dopo un'interazione, o direttamente quando il sistema è generato (tipicamente una coppia di particelle), lo stato in uscita è qualcosa del tipo

$$|\psi'\rangle = \sum_m c(m) |m\rangle_A \otimes |\beta_m\rangle_B, \quad (185)$$

dove gli stati $|m\rangle_A$ sono una base di stati ortonormali relativi al sistema A mentre gli stati $|\beta_m\rangle_B$, che si riferiscono al sistema B , sono normalizzati ma non necessariamente ortogonali tra loro. Naturalmente, in questa decomposizione il ruolo dei sistemi A e B può essere invertito. Se questo stato non può essere ricondotto alla forma fattorizzata questo è uno stato entangled.

In assenza di interazioni successive e anche quando i due sottosistemi dovessero essere separati da una grande distanza fisica lo stato del sistema composto rimarrà entangled, ossia non riconducibile a una forma fattorizzata. Questo comporta che dopo la prima interazione lo stato di ciascun sottosistema non potrà essere più essere descritto indipendentemente dallo stato dell'altro.

Ma come riconoscere uno stato entangled da uno fattorizzato? O meglio come capire che lo stato (185) non può essere scritto nella forma (184)?

Per rispondere a questa domanda facciamo un passo indietro. Torniamo allo stato fattorizzato e consideriamo una qualsiasi decomposizione spettrale per ognuno dei suoi stati rispetto a due rispettive basi, ossia scriviamo

$$|\alpha\rangle_A = \sum_m a(m) |m\rangle_A, \quad |\beta\rangle_B = \sum_n b(n) |n\rangle_B, \quad (186)$$

dove gli stati $|m\rangle_A$ sono ortonormali tra loro come anche lo sono tra loro gli stati $|n\rangle_B$. Avremo quindi dalla (184)

$$|\psi\rangle = |\alpha\rangle_A \otimes |\beta\rangle_B = \left(\sum_m a(m) |m\rangle_A \right) \otimes \left(\sum_n b(n) |n\rangle_B \right) = \sum_{m,n} a(m)b(n) |m\rangle_A \otimes |n\rangle_B. \quad (187)$$

Uno stato generico ha invece la forma,

$$|\psi'\rangle = \sum_{m,n} c(m,n) |m\rangle_A \otimes |n\rangle_B. \quad (188)$$

Quindi è tutto qui, se non è possibile scrivere $c(m,n) = a(m)b(n)$, lo stato $|\psi'\rangle$ non può essere fattorizzato e quindi gli stati non sono separabili. È chiaro quindi che lo stato (187) è molto speciale e coincide con lo stato generico (188) solo quando una condizione molto stringente sulla forma dei coefficienti $c(m,n)$ è soddisfatta.

Per capire da dove viene la decomposizione (185) e poterla confrontare con la (184) è però necessario guardare più in dettaglio. Iniziamo col riscrivere lo stato $|\psi\rangle$ della (184) utilizzando la sola decomposizione di $|\alpha\rangle_A$, si ottiene

$$|\psi\rangle = \sum_m a(m) |m\rangle_A \otimes |\beta\rangle_B \quad (189)$$

Per lo stato generico $|\psi'\rangle$ della (188) possiamo invece scrivere.

$$|\psi'\rangle = \sum_m |m\rangle_A \otimes \left(\sum_n c(m,n) |n\rangle_B \right) = \sum_m c(m) |m\rangle_A \otimes |\beta_m\rangle_B, \quad (190)$$

dove abbiamo utilizzato la definizione

$$|\beta_m\rangle_B = \frac{1}{c(m)} \sum_n c(m,n) |n\rangle_B \quad (191)$$

con le $c(m)$ scelte in modo che gli stati $|\beta_m\rangle_B$ definiti qui sopra siano normalizzati. Si noti che lo stato (190) è uguale allo stato (185), in altre parole ogni stato generico (188) può essere sempre scritto nella forma (185). Si noti anche che gli stati $|m\rangle_A$ costituiscono una base ortonormale relativa al sistema A mentre gli stati $|\beta_m\rangle_B$ sono normalizzati ma non necessariamente ortogonali tra loro. Diciamo 'non necessariamente' perché in seguito incontreremo quasi sempre stati $|\beta_m\rangle_B$ che saranno non solo normalizzati ma anche ortogonali tra loro. Ad esempio, la condizione per la quale $|\beta_m\rangle_B = |m\rangle_B$ si esprime tramite l'uguaglianza $c(m,n) = \delta_{m,n}$ (che implica $c(m) = 1$) come si verifica facilmente sostituendo nella (191). Naturalmente, non necessariamente gli stati $|\beta_m\rangle_B$ quando sono ortonormali devono coincidere con gli stati $|m\rangle_B$, ma possono essere elementi di una base diversa. Come esercizio si può trovare la condizione generale che deve essere soddisfatta dai coefficienti $c(m,n)$ perché gli stati $|\beta_m\rangle_B$ siano ortonormali tra loro.

Si vede bene ora la differenza tra stati entangled e stati separabili confrontando la (189) con la (190): uno stato generico è fattorizzabile solo quando $|\psi'\rangle$ coincide con $|\psi\rangle$ e quindi solo quando tutti gli stati $|\beta_m\rangle_B$ sono uguali tra loro (e quindi, diciamo, tutti uguali a $|\beta\rangle_B$), se invece ce ne sono di diversi lo stato generico è entangled. Vedremo che l'esistenza di stati entangled ha enormi conseguenze dal paradosso EPR fino al teletrasporto quantistico.

L'entanglement è una delle proprietà della meccanica quantistica che portò Albert Einstein e altri a metterne in discussione i principi. Nel 1935 Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen formularono il famoso "paradosso EPR" che metteva in luce le conseguenze paradossali dell'entanglement. Come vedremo in dettaglio in seguito, la loro conclusione fu che la meccanica quantistica fosse una teoria incompleta e che si sarebbe dovuto cercare una teoria più fondamentale. La nuova teoria avrebbe dovuto contenere variabili aggiuntive che sarebbero rimaste nascoste per quanto riguarda la meccanica quantistica. Inoltre, tutte le variabili, quelle quantistiche e quelle nascoste, avrebbero dovuto avere valori oggettivi, indipendentemente da osservatori e strumenti di misura.

In realtà c'era un difetto fondamentale in questa interpretazione dell'EPR, evidenziato nel 1964 da John Bell con la dimostrazione che nessuna teoria delle variabili nascoste, che presuppone i principi di località e realtà, può riprodurre le previsioni della meccanica quantistica (disuguaglianza di Bell).

Negli anni '70 John Clauser e collaboratori e all'inizio degli anni '80 Alain Aspect e collaboratori effettuarono una serie di esperimenti sulla disuguaglianza di Bell i cui risultati erano totalmente coerenti con la meccanica quantistica. Successivamente, Anton Zeilinger e il suo team migliorarono questi esperimenti confermando l'accordo con le previsioni della meccanica quantistica e realizzando il primo teletrasporto quantistico. Per questi lavori John Clauser, Alain Aspect e Anton Zeilinger hanno condiviso il Premio Nobel per la Fisica nel 2022.

Vale anche la pena menzionare, ma non verrà discusso in queste note, che l'entanglement quantistico è alla base delle tecnologie emergenti come l'informatica quantistica e la crittografia quantistica. In definitiva, il paradosso EPR fallì nel suo intento di mostrare l'incompletezza della meccanica quantistica, ma aprì la strada a nuove teorie e tecnologie rivoluzionarie.

Esercizi

- Si verifichi che il prodotto scalare tra i due stati $|\phi\rangle = |\phi_a\rangle \otimes |\phi_b\rangle$ e $|\psi\rangle = |\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle$ segue la regola, $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi_a|\psi_a\rangle\langle\phi_b|\psi_b\rangle$.
- Si trovino le condizioni sui coefficienti $a(m)$ e $b(n)$ che devono essere soddisfatte perché lo stato ψ , come espresso nella (187), abbia normalizzazione unitaria. Promemoria matematico: il ket $|\phi\rangle = \sum_n \gamma(n)|\phi_n\rangle$ implica il bra $\langle\phi| = \sum_n \gamma^*(n)\langle\phi_n|$.
- Si trovino le condizioni sui coefficienti $c(m, n)$ che devono essere soddisfatte perché lo stato $|\psi'\rangle$, come espresso nella (188), abbia normalizzazione unitaria. Si mostri che il risultato coincide con quello del precedente esercizio quando $c(m, n) = a(m)b(n)$.
- Si consideri la definizione (191) e si mostri che gli stati $|\beta_m\rangle_B$ sono tutti uguali tra loro e uguali a $|\beta\rangle_B$ se e solo se $c(m, n) = a(m)b(n)$.
- Si consideri la definizione (191) e si determinino i coefficienti $c(m)$ in funzione dei coefficienti $c(m, n)$ in modo che tutti gli stati $|\beta_m\rangle_B$ abbiano normalizzazione unitaria. Si calcoli poi il prodotto scalare ${}_B\langle\beta_{m'}|\beta_m\rangle_B$ e si trovi la condizione sui coefficienti $c(m, n)$ per la quale è nullo per ogni coppia $m' \neq m$. Si noti che questa è la condizione necessaria e sufficiente affinché gli stati $|\beta_m\rangle_B$ nelle (185) e (190) siano ortonormali e quindi elementi di una qualche base per lo stato del sistema B .

5.2 Il collasso del vettore di stato, il gatto di Schrödinger e la doppia fenditura

Misure quantistiche e riduzione del pacchetto d'onda

Prima della rivoluzione concettuale introdotta dalla meccanica quantistica, la realtà fisica era concepita come un insieme di oggetti, ciascuno dotato di proprietà che, nel loro insieme, determinavano lo stato fisico del sistema. Inoltre, lo stato fisico era interamente definito dai valori di tutte le variabili indipendenti richieste dai suoi gradi di libertà, che, in linea di principio, potevano essere conosciute con assoluta precisione.

L'evoluzione temporale dello stato era determinata in tutto e per tutto con assoluta precisione dalle leggi universali del moto, date le condizioni iniziali. Solo una conoscenza imperfetta di quest'ultime avrebbe potuto portare a incertezze sull'evoluzione futura (o passata) di un dato sistema. Pertanto l'introduzione di una descrizione probabilistica di questa evoluzione fu inventata

per ottenere la massima informazione su un dato sistema compatibile con una conoscenza incompleta di tutte le condizioni che specificano il suo stato. In altre parole, la meccanica statistica non nega che una data particella di un gas abbia effettivamente in ogni istante una posizione e una velocità ben determinate, ma semplicemente lavora con quantità che non dipendono dai valori dettagliati delle variabili di ciascuna particella.

La meccanica quantistica dovette però confrontarsi con due fatti nuovi: il verificarsi di eventi diversi nonostante condizioni iniziali ed esterne apparentemente identiche, e l'impossibilità di assegnare simultaneamente valori precisi a tutte le variabili di un dato sistema. La soluzione è stata trovata allentando il collegamento tra lo stato di un sistema e le sue variabili. Il primo era ancora considerato completamente determinato dalle condizioni iniziali e dalle leggi del moto, ma alle seconde era consentito acquisire, con probabilità diverse, a seconda dello stato, qualsiasi valore tra quelli ammissibili per le variabili in questione.

Tutto ciò ha portato all'interpretazione standard della meccanica quantistica che non solo nega che una particella possa avere un valore preciso, anche se sconosciuto, sia di posizione che di quantità di moto, ma afferma che in generale non può essere assegnato alcun significato fisico all'affermazione che una particella ha un valore preciso della posizione (o della quantità di moto o di qualsiasi altra variabile) prima di aver interagito con un idoneo strumento di misura. L'unica eccezione è il caso in cui lo stato misurato si trova già in un autostato della variabile da misurare, nel qual caso si può tranquillamente assumere che la variabile abbia un valore obiettivo indipendente dall'osservatore.

Più precisamente, un assioma fondamentale della meccanica quantistica è che se lo stato di una particella è la sovrapposizione di due o più stati corrispondenti a valori diversi di una data variabile, è solo nell'atto della misura che la variabile acquisisce, a caso, uno di questi valori.

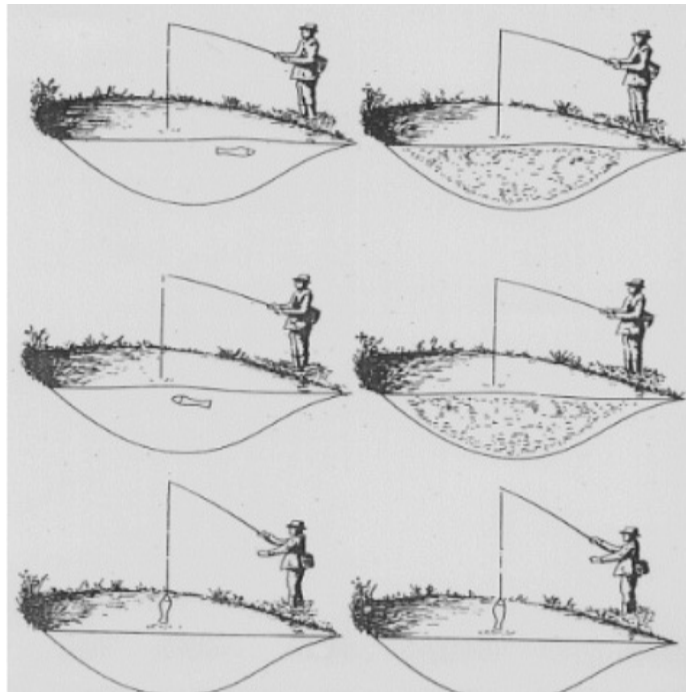


Figura 15. Nella meccanica classica un sistema ha proprietà ben definite indipendentemente dagli osservatori e dalle interazioni (a sinistra). Nella meccanica quantistica le proprietà di un sistema emergono solo dall'interazione tra l'osservatore (che misura) e il sistema stesso. Le proprietà di quest'ultimo sono indeterminate prima dell'operazione di misura (a destra).

Queste premesse concettuali della meccanica quantistica fanno parte del bagaglio culturale

della grande maggioranza dei fisici, che viene trasmesso dai libri di testo a ogni nuova generazione. Tuttavia non sono solo una credenza comune perché possono essere fornite prove sperimentali dirette, come ad esempio nei test del paradosso EPR.

Pertanto, la grande maggioranza dei fisici accetta come postulato l'ipotesi che due diverse leggi governino l'evoluzione temporale di un sistema quantistico: l'evoluzione di Schrödinger continua, deterministica e reversibile del vettore di stato che avviene mentre il sistema non viene osservato

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (192)$$

e il suo mutamento discontinuo, casuale e irreversibile (chiamato riduzione del pacchetto d'onda o collasso del vettore di stato) che si verifica quando una misura (un'osservazione) viene effettuata.

Per descrivere l'evoluzione di un sistema oggetto di misura è utile fare alcune considerazioni preliminari. Innanzitutto, per semplificare, assumiamo l'assenza di degenerazione, il che significa che l'esito f_l di un esperimento corrisponde quindi ad un unico autostato $|l\rangle$. Ricordiamo poi l'ovvio fatto sperimentale che se si misura una variabile (ad esempio l'energia di una particella) e si ripete la misura una seconda volta subito dopo, si ottiene lo stesso risultato (quanto sarebbe strano se ciò non fosse vero, la stessa parola "misura" sarebbe del tutto inappropriata).

È ovvio, a questo punto, che l'applicabilità coerente della regola di Born a due misure successive implica che nel momento in cui avviene la seconda misura il sistema deve trovarsi nell'autostato corrispondente al risultato della prima misura. Solo questo (secondo la regola di Born) farà sì che la probabilità di ritrovare lo stesso risultato sia pari a 100%.

Questo è il postulato del collasso: quando si effettua una misura e si ha come risultato f_l , lo stato quantistico del sistema cessa di essere qualsiasi sovrapposizione fosse in precedenza, e "collassa" nell'autostato $|l\rangle$. (o, se preferite, si riduce all'autostato $|l\rangle$). Formalmente, per una misura effettuata all'istante t_1 (per semplicità assumiamo che l'esperimento sia istantaneo, poco cambia se ha una durata finita), si ha

$$|\psi(t_1)\rangle = \sum_m c(m) |m\rangle \rightarrow |\psi(t_1)\rangle = |l\rangle, \quad (193)$$

dove lo stato $|l\rangle$ viene scelto in modo casuale con probabilità $|c(l)|^2$ (per le variabili a spettro continuo la probabilità è sostituita dalla densità di probabilità).

Il punto cruciale, e il motivo per cui il "postulato del collasso" è un postulato, è che si tratta di un tipo di evoluzione temporale completamente diversa rispetto all'evoluzione "ordinaria" governata dall'equazione di Schrödinger e in nessun modo è possibile matematicamente ricondurla a questa.

In caso di stato entangled relativo ai due sottosistemi A e B , il postulato del collasso implica risultati anche più bizzarri. Infatti una misura fatta su uno dei due stati (diciamo A) decide anche il destino dell'altro (B). Supponiamo, infatti, che il sistema A venga trovato in seguito a una misura nello stato $|l\rangle$, il postulato del collasso impone la riduzione del pacchetto d'onda

$$|\psi(t_1)\rangle = \sum_m c(m) |m\rangle_A \otimes |\beta_m\rangle_B \rightarrow |\psi(t_1)\rangle = |l\rangle_A \otimes |\beta_l\rangle_B, \quad (194)$$

dove lo stato finale viene scelto in modo casuale con probabilità $|c(l)|^2$ e quindi indipendentemente dallo stato del sistema B . Tuttavia, qualunque fosse lo stato del sistema B in precedenza, questo viene ridotto allo stato $|\beta_l\rangle_B$. La cosa strana è che questo avviene anche se i due sistemi sono a una grande distanza l'uno dall'altro e non interagiscono fisicamente tra loro. È come se il sistema A esercitasse un'azione istantanea a distanza di natura sconosciuta sull'eventualmente lontanissimo sistema B .

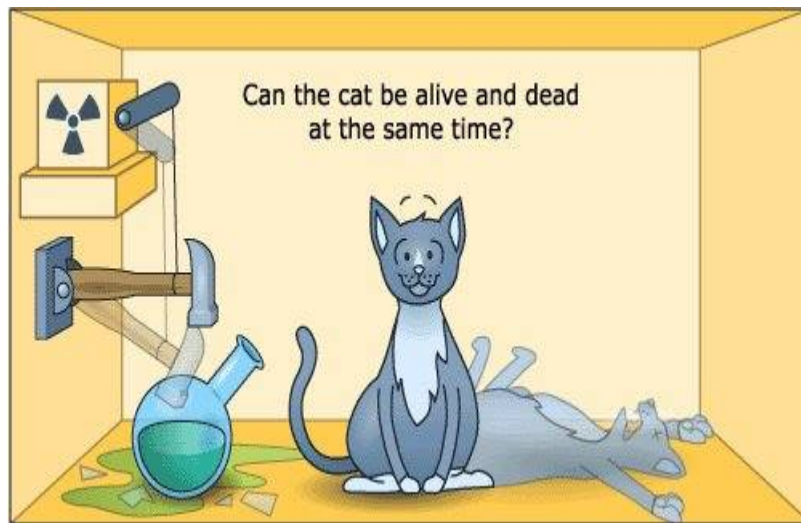


Figura 16. Il dispositivo del gatto di Schrödinger. Lo stato entangled di questo sistema composto atomi+gatto è una sovrapposizione di ugual peso di due stati: $|\text{nessun atomo decaduto}\rangle \otimes |\text{gatto vivo}\rangle$ e $|\text{almeno un atomo è decaduto}\rangle \otimes |\text{gatto morto}\rangle$. L'osservazione decide il destino del gatto.

Si noti che se però lo stato di partenza è separabile, con il sistema B nello stato $|\beta\rangle_B$, allora tutti gli stati $|\beta_m\rangle_B$ sono uguali tra di loro e uguali a $|\beta\rangle_B$. Quindi lo stato dello sistema B continuerà ad essere dopo la misura sempre $|\beta\rangle_B$, nessuna azione a distanza viene esercitata.

Ci sono tuttora molti studi che cercano di conciliare l'evoluzione ordinaria di Schrödinger con la riduzione del pacchetto d'onda. Dirò solo che un ruolo importante può essere giocato dall'interazione con l'ambiente esterno che è un sistema decisamente macroscopico e può anche essere giocato dall'interazione con lo stesso strumento di misura che è formato da molte particelle (dell'ordine del numero di Avogadro). Ciò che la maggior parte di questi studi ha in comune è l'idea che la macroscopicità implichi decoerenza, cosicché una sovrapposizione di stati sia praticamente indistinguibile da una miscela statistica.

Cercherò di mostrare il punto debole di questa idea tornando a una nostra vecchia conoscenza: l'esperimento della doppia fenditura. Prima di far questo però, illustrerò ancora gli aspetti paradossali delle sovrapposizioni e delle misure descrivendo il famosissimo esperimento mentale noto come "il gatto di Schrödinger."

Vita e morte del gatto di Schrödinger

Il paradosso del gatto di Schrödinger è un esperimento mentale concepito nel 1935 da Erwin Schrödinger con lo scopo di illustrare come la meccanica quantistica abbia aspetti paradossali, sia per la sovrapposizione di stati che per l'effetto di un'osservazione (una misura), quando si ha a che fare con un sistema macroscopico.

Usiamo le parole dello stesso Schrödinger per descrivere questo ipotetico esperimento:

One can even set up quite ridiculous cases. A cat is penned up in a steel chamber, along with the following diabolical device (which must be secured against direct interference by the cat): in a Geiger counter there is a tiny bit of radioactive substance, so small, that perhaps in the course of one hour one of the atoms decays, but also, with equal probability, perhaps none; if it happens, the counter tube discharges and through a relay releases a hammer which shatters a small flask of hydrocyanic acid. If one has left this entire system to itself for an hour, one would say that the cat still lives if meanwhile no atom has decayed. The first atomic decay would have poisoned it. The ψ -function of the entire system would express this by having in it the living and the dead cat

(*pardon the expression*) mixed or smeared out in equal parts.

Secondo la narrazione di Schrödinger, al tempo 0 il sistema composto è nello stato fattorizzato |nessun atomo decaduto>⊗|gatto vivo>. Il paradosso nasce dal fatto nel tempo che va da 0 al tempo T (quello indicato da Schrödinger, un'ora), lo stato di questo sistema atomi+gatto, diventa una sovrapposizione (entangled) di peso uguale di due stati: |nessun atomo decaduto>⊗|gatto vivo> e |almeno un atomo è decaduto>⊗|gatto morto>. In formule:

$$|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle\otimes|\smile\rangle \quad \rightarrow \quad |\psi(T)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\rangle\otimes|\smile\rangle + |\downarrow\rangle\otimes|\frown\rangle\right], \quad (195)$$

dove l'uso dei simboli dovrebbe essere ovvio. Saremmo tentati di dire che a appena prima dell'osservazione il gatto è vivo oppure morto, con probabilità che valutiamo essere del 50% per ciascuna delle due opzioni, poi dopo l'osservazione (la verifica dello stato di salute del gatto) sapremo esattamente se è vivo o morto. Questo è quello che diremmo per una moneta già lanciata che prima è coperta dalla mano e poi la mano viene tolta. Ma questo è sbagliato, lo stato quantistico è una proprietà intrinseca di un singolo sistema e non una misura del nostro grado di informazione su di esso. Il singolo gatto, finché nessuno va a controllare è effettivamente in uno stato di sovrapposizione vivo/morto.

L'idea che un gatto possa essere allo stesso tempo vivo e morto è già paradossale, ma Schrödinger, che condivideva lo scetticismo di Einstein verso l'interpretazione di Copenhagen, fece notare un altro aspetto problematico: se un'osservazione del sistema viene effettuata al tempo T , eventualmente guardando dentro il contenitore d'acciaio, il sistema viene indotto ad assumere uno stato specifico. Al tempo T si avrà infatti il collasso

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\rangle\otimes|\smile\rangle + |\downarrow\rangle\otimes|\frown\rangle\right] \quad \rightarrow \quad |\uparrow\rangle\otimes|\smile\rangle \text{ oppure } |\downarrow\rangle\otimes|\frown\rangle \quad (196)$$

con uguale probabilità. Questo è forse ancora più bizzarro, basta una sbirciatina perché il destino del gatto si compia!

Ancora sull'esperimento della doppia fenditura

Come già detto varie volte, in meccanica quantistica non ha senso supporre che una certa variabile di un sistema abbia un valore oggettivo prima che questo abbia interagito con un appropriato strumento di misura (a meno che il sistema non si trovi in un autostato di quella variabile). D'altro lato, nel mondo classico, dove viviamo quotidianamente, gli oggetti hanno proprietà oggettive, indipendentemente dal fatto che vengano osservati (letteralmente o attraverso uno strumento di misura) oppure no. Credo infatti che quasi tutti i gatti che vi è capitato di incontrare nella vostra vita fossero vivi, qualcuno magari morto, ma nessuno in una sovrapposizione.

Ci si può chiedere, allora, come è possibile che, nel limite in cui la meccanica quantistica tende alla meccanica classica, una variabile assuma un valore oggettivo. O almeno ci si può chiedere come il processo di misura, che in linea di principio dovrebbe essere esso stesso descritto dalla meccanica quantistica, renda oggettivo il valore di una variabile.

Queste domande non hanno ancora una risposta definitiva, la difficoltà risiede nel fatto che non esiste una netta separazione tra il mondo microscopico e quello macroscopico. Per comprendere meglio questo punto è utile riferirsi a un esempio concreto: l'esperimento della doppia fenditura già descritto nel primo capitolo di queste note fa al caso nostro.

Come già discusso, gli elettroni passano uno ad uno, senza interagire, attraverso una doppia fenditura e colpiscono una lastra imprimendola e generando una figura di interferenza. Nella Figura 2, tratta dall'articolo di Tonomura e collaboratori del 1989, si vedono chiaramente le bande chiare e scure formate sulla lastra dal contatto dagli elettroni.

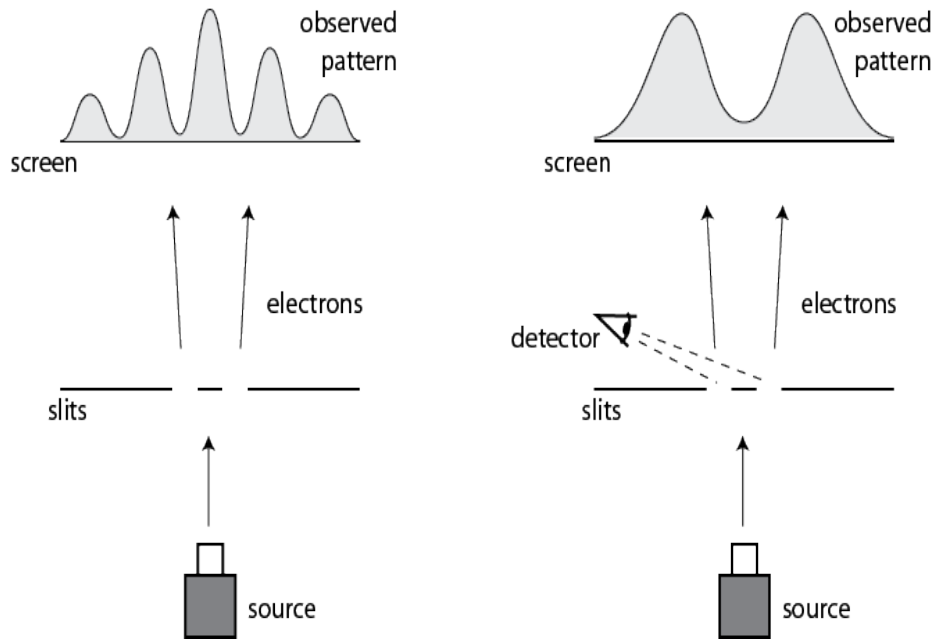


Figura 17. L'esperimento della doppia fenditura. A sinistra entrambe le fenditure sono aperte e nessun dispositivo di misura identifica la fenditura dove passa l'elettrone. La densità di probabilità mostra le bande di interferenza. A destra un dispositivo di misura identifica la fenditura dove passa l'elettrone. Le bande di interferenza scompaiono.

Questo esperimento è illustrato a sinistra nella figura 17. Una sorgente genera gli elettroni uno per uno, nelle identiche condizioni, in modo che siano tutti descritti dallo stesso stato, poi gli elettroni attraversano la barriera con due fenditure (slits) e colpiscono la lastra (screen). L'andamento osservato (observed pattern) raffigurato in alto a sinistra non è altro che la densità di probabilità, al variare dell'ascissa del punto di impatto sulla lastra. I suoi picchi (alta densità di impatti) corrispondono alle bande luminose formate dagli elettroni nella Figura 2 e le sue valli (bassa densità di impatti) alle bande scure.

Si tenga presente che ogni elettrone è descritto al di sopra della barriera dallo stesso stato di sovrapposizione

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle, \quad (197)$$

dove $|\psi_1\rangle$ corrisponde alla propagazione della funzione d'onda attraverso la prima fenditura (diciamo quella a sinistra) e $|\psi_2\rangle$ alla propagazione attraverso la seconda (quella a destra). La funzione d'onda in un punto x sulla lastra subito prima dell'impatto è quindi

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x), \quad (198)$$

dove possiamo assumere, senza perdere di generalità che ψ_1 e ψ_2 abbiano normalizzazione unitaria. Questa funzione d'onda genera la densità di probabilità

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{|c|^2} |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 = \frac{1}{|c|^2} \left(|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + 2\text{Re}[\psi_1(x)\psi_2(x)] \right), \quad (199)$$

dove la normalizzazione si ottiene imponendo

$$|c|^2 = \int |\psi(x)|^2 dx = 2 + 2 \int \text{Re}[\psi_1(x)\psi_2(x)] dx. \quad (200)$$

Questa densità è proprio quella che vediamo in alto a sinistra (observed pattern). I picchi e le valli sono la conseguenza rispettivamente dell'interferenza costruttiva e distruttiva tra $\psi_1(x, t)$ e $\psi_2(x, t)$. Il meccanismo è spiegato nel primo capitolo di queste note e come già detto i picchi corrispondono alle bande chiare con molti impatti in figura 2, mentre le valli corrispondono alle bande scure con pochi impatti.

Se l'esperimento della doppia fenditura viene ripetuto aggiungendo un dispositivo di misura che rileva la fenditura attraversata da ciascuno degli elettroni (rappresentato in figura da un occhio che guarda), lo "observed pattern" diventa quello in alto a destra. Al posto dei due picchi se ne può eventualmente avere uno solo al centro, se la distanza tra le fenditure viene ridotta. In ogni caso l'interferenza scompare e questo è un fatto che può essere riprodotto sperimentalmente.

Nel caso sia presente un dispositivo di misura, da un punto di vista teorico, bisogna tenere conto della regola di Born, la quale afferma che la semplice osservazione induce il seguente collasso:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle \text{ oppure } |\psi_2\rangle, \quad (201)$$

dove le due alternative sono ugualmente probabili per cui metà degli elettroni attraversa la fenditura di destra e l'altra metà quella di sinistra.

Si noti che lo stesso risultato si può ottenere se l'esperimento viene condotto senza strumento di misura ma lasciando aperta solo la prima fenditura per metà degli elettroni e solo la seconda per l'altra metà.

In conseguenza del collasso ogni elettrone potrà essere con uguale probabilità in uno dei due stati, il primo con funzione d'onda $\psi_1(x)$ e densità di probabilità $|\psi_1(x)|^2$, il secondo con funzione d'onda $\psi_2(x)$ e densità di probabilità $|\psi_2(x)|^2$. Quindi circa metà degli elettroni colpirà la lastra in un punto x con densità di probabilità $|\psi_1(x)|^2$ e l'altra metà con densità di probabilità $|\psi_2(x)|^2$. Pertanto lo "observed pattern" previsto è dato dalla media delle due densità, ossia la densità degli impatti sulla lastra dovuta alla totalità degli elettroni sarà

$$\tilde{\rho}(x) = \frac{1}{2}(|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2) \neq \rho(x), \quad (202)$$

il che spiega la scomparsa dell'interferenza. Si tenga ben presente che la scomparsa dell'interferenza dovuta alla semplice osservazione è un fenomeno che può essere (e lo è stato) riprodotto sperimentalmente.

Le due densità di probabilità (con o senza rilevazione della fenditura di attraversamento) sono diverse per via del termine $2Re[\psi_1(x)\psi_2(x)]$ che compare al denominatore ma soprattutto al numeratore dell'ultima espressione della (199). La prima densità di probabilità è associata ad un unico stato che è la sovrapposizione di due stati diversi, il secondo ad una miscela statistica delle densità di probabilità associati a ciascuno dei due stati.

Come ho già accennato, la maggior parte degli approcci per la soluzione della dicotomia equazione di Schrödinger/collasso utilizzano, in forme diverse e in contesti diversi, l'argomento secondo cui una sovrapposizione di stati è virtualmente indistinguibile da una miscela statistica quando variabili macroscopiche sono coinvolte. Nel nostro caso significa semplicemente che la macroscopicità rende il termine di interferenza $2Re[\psi_1(x)\psi_2(x)]$ in qualche modo trascurabile (decoerenza).

Non possiamo cambiare la massa degli elettroni per renderli macroscopici, ma possiamo cambiare le caratteristiche dell'apparato sperimentale. Il modo più semplice è modificare la distanza tra le due fenditure. Si consideri che, data la simmetria del sistema elettrone + dispositivo, le due funzioni $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$ differiscono solo perché sono traslate della distanza d tra le fenditure, cioè si deve avere $\psi_1(x) = \phi(x+d/2)$ e $\psi_2(x) = \phi(x-d/2)$. Pertanto, il termine di interferenza può essere scritto come

$$2Re[\psi_1(x)\psi_2(x)] = 2Re[\phi(x+d/2)\phi(x-d/2)]. \quad (203)$$

Poiché $\phi(x)$ deve annullarsi all'infinito, si può tranquillamente assumere che la funzione $\phi(x)$ abbia una scala tipica ℓ , tale che è praticamente nulla quando $|x| \gg \ell$, allora è sufficiente che $d \gg \ell$ per rendere trascurabile l'interferenza perché per nessun valore di x le funzioni $\psi_1(x) = \phi(x+d/2)$ e $\psi_2(x) = \phi(x-d/2)$ potranno essere entrambe molto diverse da zero. Quando il termine di interferenza si annulla le due densità $\rho(x)$ e $\tilde{\rho}(x)$ sono uguali, se è trascurabile la differenza tra le due densità sarà trascurabile.

Si potrebbe obiettare che dopo un tempo sufficientemente ampio ℓ diventa maggiore di d , ma questo non è molto rilevante poiché l'esperimento ha una durata finita. In ogni caso, i modelli di decoerenza quantistica possono ben spiegare la quasi assenza di interferenza anche su scale temporali molto grandi. Questi modelli si basano sull'idea che gli effetti quantistici non possono sempre essere osservati perché qualsiasi sistema, anche microscopico, può essere accoppiato in qualche modo con i numerosissimi gradi di libertà dell'ambiente esterno o dello strumento di misura.

Tuttavia, la meccanica quantistica non può essere soltanto una teoria statistica, al contrario, è inevitabile ammettere che lo stato appartiene alla singola particella e non solo a un insieme statistico, altrimenti lo stesso esperimento della doppia fenditura, non avrebbe una spiegazione. È vero che in caso di fenditure molto distanti il termine di interferenza quasi scompare, ma è proprio nella parola "quasi" tutto il problema, non c'è un punto di taglio dove la densità associata alla funzione d'onda diventa esattamente una miscela statistica.

Come conseguenza di questo fatto, la maggior parte dei fisici preferisce mantenere l'evoluzione di Schrödinger e il collasso come principi distinti. Questo atteggiamento è noto come interpretazione di Copenhagen (interpretazione standard). In generale, i sostenitori dell'interpretazione di Copenhagen tendono ad essere intolleranti ai tentativi di spiegare il collasso in termini di evoluzione quantistica ordinaria. Questo atteggiamento un tempo veniva riassunto nel mantra "Stai zitto e calcola!"

5.3 Lo spin delle particelle elementari

Lo spin di un elettrone

Nel dicembre 1924 Wolfgang Pauli (probabilmente il fisico più influente nella teoria dello spin), propose l'idea di un grado di libertà interno dell'elettrone che avrebbe dovuto essere considerato di natura genuinamente quantomeccanica e che chiamò "grado di libertà quantico a due valori".

Poco dopo, dato che questo grado di libertà, come vedremo, ha le dimensioni e quasi le stesse proprietà matematiche del momento angolare (è detto anche momento angolare intrinseco), fu proposto che esso corrispondesse in qualche modo ad un moto rotatorio interno dell'elettrone (per questo in seguito fu chiamato spin e i due gradi di libertà quantica divennero le sue due possibili proiezioni su un dato asse). Tuttavia, questa rappresentazione fu abbandonata poiché calcoli preliminari mostrarono che la velocità di rotazione richiesta avrebbe portato la superficie dell'elettrone a superare la velocità della luce. Così il punto di vista di Pauli di un grado di libertà intrinseco prese definitivamente il sopravvento.

Lo spin non è una proprietà del solo elettrone ma ogni tipo di particella elementare ha un valore di spin fisso s che non può essere alterato in alcun modo. Le particelle con spin intero o nullo sono bosoni (come i fotoni, i gluoni, i bosoni W e i Z che hanno spin 1 o come i bosoni di Higgs che hanno spin 0), mentre le particelle con spin semintero sono fermioni (come gli elettroni, i neutrini e i quark, tutti con spin 1/2).

Dato lo spin s , la componente m dello spin lungo un dato asse (proiezione) può assumere i $2s + 1$ valori $-s, -s + 1, \dots, s$. Per l'elettrone (spin 1/2) questo implica $2s + 1 = 2$ e quindi, per usare le parole di Pauli, questo implica che abbia un "grado di libertà quantico a due valori": $m = -1/2$ e $m = +1/2$.

Una particella di spin 1 è invece dotata di $2s + 1 = 3$ possibili valori della proiezione dello spin: $-1, 0, +1$. Tuttavia il fotone, ha solo due proiezioni di spin, poiché la proiezione con $m = 0$ richiede che la particella abbia massa.

Infine il bosone di Higgs che ha spin nullo (e quindi $2s + 1 = 1$) può avere solo proiezione dello spin con valore nullo ($m = 0$), o più semplicemente si dice che non ha spin e per questo motivo è detto bosone scalare.

Si ricordi che lo spin e le sue proiezioni sono quantità fisiche che hanno la dimensione di un momento angolare, quindi resta inteso che si debba moltiplicare tutti questi valori s e m (interi o seminteri) per \hbar .

L'operatore hermitiano vettoriale associato allo spin è $\hat{\mathbf{S}}$, le sue tre componenti soddisfano le relazioni di commutazione

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar S_z, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar S_y, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar S_x. \quad (204)$$

Le tre componenti non commutano e quindi non hanno una base comune, tuttavia $[\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{S}}^2] = 0$ cosicché possiamo prendere una base comune per $\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ e per \hat{S}_z (o per la proiezione $\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}$ in qualsiasi altra direzione \mathbf{n}).

Le tre componenti del momento angolare ordinario soddisfano le stesse regole di commutazione dello spin per cui possiamo (se vogliamo) prendere in prestito i risultati già noti per il momento angolare e usarli per lo spin. Si avrà quindi la base comune è $|s, m\rangle$ di autovettori tale che

$$\hat{\mathbf{S}}^2 |s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m\rangle, \quad \hat{S}_z |s, m\rangle = m\hbar |s, m\rangle, \quad (205)$$

dove m può prendere i $2s + 1$ valori $-s, -s + 1, \dots, +s$.

Ci sono due differenze con il momento angolare, la prima è che s non assume solo valori interi ma anche seminteri, la seconda è che s è fissato dalla natura della particella, cioè non è una variabile, per cui si può omettere di menzionare s nel ket e scrivere semplicemente $|m\rangle$. In seguito parleremo solo di elettroni con spin $1/2$, ma tutti i risultati si adattano anche ai fotoni che hanno anch'essi solo due valori per la proiezione dello spin.

Per gli elettroni non è necessario mutuare i risultati del momento angolare ordinario perché è possibile derivare il tutto in modo più semplice con un procedimento *ad hoc* direttamente qui.

La funzione d'onda completa per un elettrone è $\phi(\mathbf{x}, m)$ dove $m = \pm 1/2$ e $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, quindi $|\phi(\mathbf{x}, m)|^2$ è la densità di probabilità che l'elettrone venga trovato in seguito a una misura in \mathbf{x} con proiezione dello spin m . La normalizzazione impone

$$\sum_{m=\pm 1/2} \int_{\mathbb{R}^3} |\phi(\mathbf{x}, m)|^2 dx dy dz = 1 \quad (206)$$

Trascuriamo per il momento lo spazio, o meglio supponiamo che lo stato quantistico $|\phi\rangle$ abbia componenti di spin e di posizione disaccoppiate. Più precisamente assumiamo $\phi(\mathbf{x}, m) = \chi(\mathbf{x})\psi(m)$ con $\int_{\mathbb{R}^3} |\chi(\mathbf{x})|^2 dx dy dz = 1$ e consideriamo solo la funzione d'onda dello spin $\psi(m)$ la cui condizione di normalizzazione, data la (206), deve essere $\sum_{m=\pm 1/2} |\psi(m)|^2 = 1$. Il ket è allora il vettore colonna

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \psi(+1/2) \\ \psi(-1/2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (207)$$

con $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Dato che $|\psi\rangle$ è un vettore a due componenti, gli operatori $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ devono essere matrici 2×2 che soddisfano le relazioni di commutazione (204). Possono quindi essere



Figura 18. Wolfgang Ernst Pauli (Vienna, 25 aprile 1900 - Zurigo, 15 dicembre 1958) è stato un fisico teorico austriaco e uno dei pionieri della fisica quantistica. Nel 1945 ricevette il Premio Nobel per la fisica per la scoperta del principio di esclusione o principio di Pauli, che implicava la teoria dello spin.

rappresentate per mezzo delle matrici di Pauli come

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (208)$$

Inoltre, dato che $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \mathbb{1}$, dove $\mathbb{1}$ è la matrice identità 2×2 , si ha che $\hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbb{1}$. Questo significa che per ogni $|\psi\rangle$ si ha $\hat{\mathbf{S}}^2|\psi\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\psi\rangle = s(s+1) \hbar^2 |\psi\rangle$ dove l'ultima uguaglianza vale per $s = 1/2$ e serve solo a mostrare che coerentemente tutti gli stati hanno spin $s = 1/2$. Inoltre gli autostati di \hat{S}_z , che sono gli stessi di $\hat{\sigma}_z$, sono

$$|\uparrow_z\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad |\downarrow_z\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (209)$$

dove il primo (spin up) corrisponde all'autovalore $\frac{\hbar}{2}$ di \hat{S}_z e il secondo (spin down) all'autovalore $-\frac{\hbar}{2}$. I simboli usati per indicare gli autostati hanno una giustificazione evidente, entrambi gli autostati si riferiscono alla componente dello spin nella direzione verticale z il primo con valore positivo dell'orientazione (spin up) e il secondo negativo (spin down). Quando sarà evidente dal contesto che ci si riferisce agli autovettori della componente verticale dello spin scriveremo semplicemente $|\uparrow\rangle$ and $|\downarrow\rangle$ invece di $|\uparrow_z\rangle$ e $|\downarrow_z\rangle$.

Uno stato generico può essere espresso nella base verticale come

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a|\uparrow_z\rangle + b|\downarrow_z\rangle \quad (210)$$

con $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

Gli autovettori di \hat{S}_x con autovalori $+\frac{\hbar}{2}$ e $-\frac{\hbar}{2}$ sono rispettivamente

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle) \quad \text{e} \quad |\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle), \quad (211)$$

mentre gli autovettori di \hat{S}_y con autovalori $+\frac{\hbar}{2}$ e $-\frac{\hbar}{2}$ sono rispettivamente

$$|\uparrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_z\rangle + i|\downarrow_z\rangle) \quad \text{e} \quad |\downarrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} i \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (i|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle). \quad (212)$$

Si tenga presente che gli autostati ortonormali sono sempre definiti a meno di una costante c con $|c| = 1$, quindi non spaventatevi se nei testi trovate autostati che differiscono da quelli sopra indicati per un fattore i o per un fattore -1 . Lasciamo infine come esercizio la verifica che ciascuna delle tre coppie di autovettori (209), (211) e (212) è una base ortonormale.

Esercizi

- Si mostri che se le regole di commutazione (204) sono soddisfatte allora $\hat{\mathbf{S}}^2$ commuta con ognuna delle tre componenti dell spin, ossia $[\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{S}}^2] = 0$ (nel caso degli elettroni è banale perché $\hat{\mathbf{S}}^2$ è proporzionale alla matrice identità).
- Si mostri esplicitamente che gli stati in (209), (211) e (212) sono effettivamente gli autovettori cercati, ossia si mostri che $\hat{S}_x|\uparrow_x\rangle = |\uparrow_x\rangle$, $\hat{S}_x|\downarrow_x\rangle = -|\downarrow_x\rangle$, che $\hat{S}_y|\uparrow_y\rangle = |\uparrow_y\rangle$, $\hat{S}_y|\downarrow_y\rangle = -|\downarrow_y\rangle$ e che $\hat{S}_z|\uparrow_z\rangle = |\uparrow_z\rangle$, $\hat{S}_z|\downarrow_z\rangle = -|\downarrow_z\rangle$. Si calcolino inoltre $\hat{S}_x|\uparrow_y\rangle$ e $\hat{S}_y|\downarrow_x\rangle$.
- Si mostri che ognuna delle tre coppie di autostati in (209), (211) e (212) è composta di due vettori con normalizzazione unitaria e ortogonali tra loro. Si calcolino poi i prodotti $\langle\uparrow_x|\uparrow_y\rangle$, $\langle\uparrow_x|\downarrow_y\rangle$, e $\langle\uparrow_x|\uparrow_z\rangle$.
- Si mostri che qualsiasi funzione sufficientemente regolare $g(\hat{S}_z)$ può essere espressa come $\alpha\mathbb{1} + \beta\hat{S}_z$ dove $\mathbb{1}$ è la matrice identità 2×2 e si determinino i coefficienti α e β . Suggerimento: si provi prima con un polinomio e si ricordi che il quadrato di una matrice di Pauli è la matrice identità 2×2 .

Lo spin di una coppia di elettroni

Consideriamo un sistema composto di due elettroni che chiameremo A e B . L'operatore vettoriale di spin per questa coppia è

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{(A)} + \hat{\mathbf{S}}^{(B)}, \quad (213)$$

dove $\hat{\mathbf{S}}^{(A)}$ and $\hat{\mathbf{S}}^{(B)}$ sono gli operatori di spin degli elettroni A e B . Se utilizziamo per ognuno dei due elettroni la sua base ortonormale di autovettori relativa alla proiezione dello spin lungo l'asse z possiamo costruire quattro stati separabili di questo sistema composto:

$$|\uparrow_z\rangle_A \otimes |\uparrow_z\rangle_B, \quad |\downarrow_z\rangle_A \otimes |\downarrow_z\rangle_B, \quad |\uparrow_z\rangle_A \otimes |\downarrow_z\rangle_B, \quad |\downarrow_z\rangle_A \otimes |\uparrow_z\rangle_B. \quad (214)$$

Si può verificare come esercizio che tutti e quattro sono autostati di \hat{S}_z con autovalori $m\hbar$, dove per il primo $m = +1$, per il secondo $m = -1$ e per il terzo e il quarto $m = 0$. Inoltre i primi due sono autostati di $\hat{\mathbf{S}}^2$ con autovalore $s(s+1)\hbar^2$ dove $s = 1$, mentre il terzo e il quarto non ne sono autostati. Tuttavia, lo stato che si ottiene sommando il terzo e del quarto è ancora autostato di \hat{S}_z con $m = 0$, ma è anche autostato di $\hat{\mathbf{S}}^2$ con $s = 1$, analogamente lo stato che si ottiene facendo la differenza tra il terzo e il quarto è ancora autostato di \hat{S}_z con $m = 0$, ma è anche autostato di $\hat{\mathbf{S}}^2$

con $s = 0$. In definitiva, possiamo scrivere

$$\begin{aligned}
 |1,+1\rangle &= |\uparrow_z\rangle_A \otimes |\uparrow_z\rangle_B, \\
 |1,-1\rangle &= |\downarrow_z\rangle_A \otimes |\downarrow_z\rangle_B, \\
 |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_x\rangle_A \otimes |\downarrow_x\rangle_B + |\downarrow_x\rangle_A \otimes |\uparrow_x\rangle_B), \\
 |0,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_x\rangle_A \otimes |\downarrow_x\rangle_B - |\downarrow_x\rangle_A \otimes |\uparrow_x\rangle_B),
 \end{aligned} \tag{215}$$

dove per il terzo e quarto autostato abbiamo preposto il fattore $\frac{1}{\sqrt{2}}$ per salvaguardare la normalizzazione unitaria. I primi tre stati vengono detti di tripletto, per tutti e tre si ha spin $s = 1$ con proiezione sull'asse z che prende i tre valori $m = -1, 0, 1$ ($m = -1$ per il secondo, $m = 0$ per il terzo e $m = +1$ per il primo). L'ultimo stato nella lista con $s = 0$ e $m = 0$ viene detto di singoletto. I primi due stati sono separabili, mentre il terzo e quarto sono entangled.

Esercizi

- Si mostri che tutti e quattro gli stati in (214) sono autostati di \hat{S}_z con autovalori $m\hbar$, dove per il primo $m = +1$, per il secondo $m = -1$ e per il terzo e il quarto $m = 0$. Si mostri inoltre che i primi due sono autostati di $\hat{\mathbf{S}}^2$ con autovalore $s(s+1)\hbar^2$ dove $s = 1$, mentre il terzo e il quarto non ne sono autostati.
- Si mostri che tutti e quattro gli stati in (215) soddisfano $\hat{S}_z|s,m\rangle = m\hbar|s,m\rangle$ e $\hat{\mathbf{S}}^2|s,m\rangle = s(s+1)\hbar^2|s,m\rangle$. Si tenga presente che buona parte di questo esercizio è contenuta nel precedente. Tutto è già stato svolto per quel che riguarda i primi due stati, inoltre il terzo e quarto stato sono combinazioni lineari di autostati di \hat{S}_z con stesso $m = 0$, quindi sono anch'essi autostati di \hat{S}_z con $m = 0$. Resta solo da far vedere che $\hat{\mathbf{S}}^2|1,0\rangle = 2\hbar^2|1,0\rangle$ e che $\hat{\mathbf{S}}^2|0,0\rangle = 0$.
- Si mostri che tutti e quattro gli stati in (214) sono unitari e che sono tutti ortogonali tra loro.

6. Dal paradosso EPR al teletrasporto quantistico

6.1 Il paradosso EPR

Il dibattito Bohr-Einstein

Come abbiamo già detto più volte, secondo l'interpretazione di Copenhagen il vettore di stato quantistico costituisce la descrizione più completa possibile ed immaginabile di un sistema individuale. Specifica le distribuzioni di probabilità per il risultato della misura di qualsiasi osservabile fisica. Tuttavia, a differenza della meccanica statistica classica, l'uso della probabilità non è dovuto conoscenza incompleta dello stato del sistema, ma è intrinseco e relativo ad ogni singolo sistema. Questa fu la ferma opinione di Bohr che espose per la prima volta al convegno in onore di Volta tenutosi sul lago di Como nel settembre 1927.

A volte si dimentica che Einstein svolse un ruolo importante nello sviluppo iniziale della fisica quantistica. Fu il primo a comprendere appieno le conseguenze della quantizzazione dell'energia degli oscillatori armonici e propose, già nel 1909, che la luce avesse una natura duale onda-particella.

Nonostante il suo contributo visionario era insoddisfatto dell'interpretazione di Copenaghen sviluppata da Niels Bohr e nonostante avesse contribuito a costruire la meccanica quantistica, l'idea che i sistemi fossero privi di proprietà oggettive prima di essere misurati lo metteva molto a disagio.

In una prima fase rifiutò il principio di indeterminazione, sia nei suoi aspetti formali che concettuali e tentò di dimostrarne la fallacia ideando un gedankenexperiment che permettesse la misura di variabili complementari come posizione e quantità di moto simultaneamente e con infinita precisione. In una seconda fase ammise invece l'impossibilità di falsificare questo principio, ma rimase comunque profondamente insoddisfatto dell'origine non epistemica attribuita da Bohr e Heisenberg alla probabilità quantistica.

È allora che Einstein concepì, insieme a Boris Podolsky e Nathan Rosen, il famoso argomento del 1935 con il quale intendevano negare la completezza della meccanica quantistica, oggi universalmente noto come paradosso EPR. Rifiutando l'idea che una misura su una particella in una coppia entangled potesse influenzare lo stato dell'altra particella distante, conclusero che era necessario completare il formalismo quantistico per ottenere una descrizione "realista e locale" del mondo. Secondo questa visione, una particella porta con sé, localmente, tutte le proprietà che determinano i risultati di qualsiasi misura eseguita su di essa.

Il gedankenexperiment di Einstein, Podolsky e Rosen mostrava che posizione e impulso, nonostante il principio di Heisenberg, dovessero necessariamente avere un valore oggettivo e indipendente dall'osservazione. Nel paragrafo seguente, tuttavia, non illustreremo l'EPR nella sua formulazione originale del 1935, ma nella versione più intuitiva di David Bohm, pubblicata nel suo libro di testo del 1951. In questa formulazione impulso e posizione sono rimpiazzate da due proiezioni diverse dello spin dell'elettrone (che non commutano).

La formulazione di Bohm del paradosso EPR

Si supponga che Nicole, una studentessa di fisica, abbia preparato una coppia di elettroni (A e B) in uno stato di singoletto

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle_A \otimes |\downarrow_z\rangle_B - |\downarrow_z\rangle_A \otimes |\uparrow_z\rangle_B). \quad (216)$$

Gli elettroni A e B viaggiano in direzioni opposte e a un dato istante raggiungono le diverse e distanti località dove si trovano rispettivamente Viola e Olivia, anch'esse studentesse di fisica. Viola, che si trova nella posizione dell'elettrone A , misura la sua componente di spin nella direzione z e trova $-1/2$ oppure $+1/2$ con uguale probabilità. Di conseguenza, il principio del collasso restituisce la seguente riduzione del pacchetto d'onda:

$$|0,0\rangle \rightarrow |\uparrow_z\rangle_A \otimes |\downarrow_z\rangle_B \quad \text{oppure} \quad |\downarrow_z\rangle_A \otimes |\uparrow_z\rangle_B \quad (217)$$

con uguale probabilità. Ciò significa, che il distante elettrone B , dopo la misura effettuata da Viola sull'elettrone A , si trova in un autostato di $\hat{S}_z^{(B)}$ che equivale a dire che la componente dello spin nella direzione z ha un valore oggettivo ($-1/2$ oppure $+1/2$) indipendente dagli osservatori e che sarà confermato da qualsiasi eventuale misura successiva.

Tuttavia, la misura di Viola è stata effettuata sull'elettrone A , quindi né l'elettrone A , né lo strumento di misura di Viola anch'esso situato nella posizione dell'elettrone A , possono aver influenzato le proprietà fisiche dell'elettrone B situato in una posizione distante. Questo come conseguenza del presupposto di località, che significa che nessuna interazione istantanea a distanza è possibile.

L'inevitabile conclusione preliminare è che il valore della componente dello spin dell'elettrone B preesistesse all'esperimento di Viola e questo nonostante che l'elettrone B fosse in uno stato di sovrapposizione.

Olivia può non conoscere il risultato della misura effettuata da Viola e conseguentemente non sapere se l'elettrone B ha componente di spin $-1/2$ oppure $+1/2$, ma ciò è dovuto alla sua mancanza di informazione in senso classico. Viola potrà eventualmente comunicare l'esito della sua misura a Olivia tramite whatsapp, che le arriverà in un breve tempo compatibile con la velocità della luce e con la compagnia di telefonia mobile scelta. Questa comunicazione non è istantanea e se Olivia esegue una misura della componente di spin nella direzione z dell'elettrone B contemporaneamente alla misura di Viola, le è inutile. Possono comunque confrontare i risultati, se Viola ha trovato $+1/2$ per l'elettrone A , Olivia ha sicuramente trovato $-1/2$ per l'elettrone B e viceversa.

Riassumendo, ci sono solo due possibilità, la prima è che l'elettrone B avesse un valore della componente di spin ben preciso anche prima dell'esperimento di Viola, la seconda è che un qualche tipo di interazione istantanea a distanza sia intercorsa durante questo esperimento tra l'elettrone B e l'elettrone A o tra l'elettrone B e l'apparato sperimentale di Viola. Il principio di località ci impone di scartare la seconda.

Ma il meglio arriva adesso. Cominciamo col ricordare che i due operatori \hat{S}_z e S_x non commutano, il che implica che non esiste uno stato per il quale entrambe le variabili relative siano entrambe certe. Infatti, come si può dedurre da (211), nota la componente dello spin nella direzione z (quando il sistema è in un autostato di \hat{S}_z) la componente dello spin in x è totalmente sconosciuta (gli autostati di \hat{S}_z sono entrambi combinazioni lineari equamente pesate degli autostati di \hat{S}_x e viceversa).

Lo stato di singoletto $|0,0\rangle$, come proverete voi come esercizio, può anche essere scritto nella forma

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_x\rangle_A \otimes |\downarrow_x\rangle_B - |\downarrow_x\rangle_A \otimes |\uparrow_x\rangle_B), \quad (218)$$

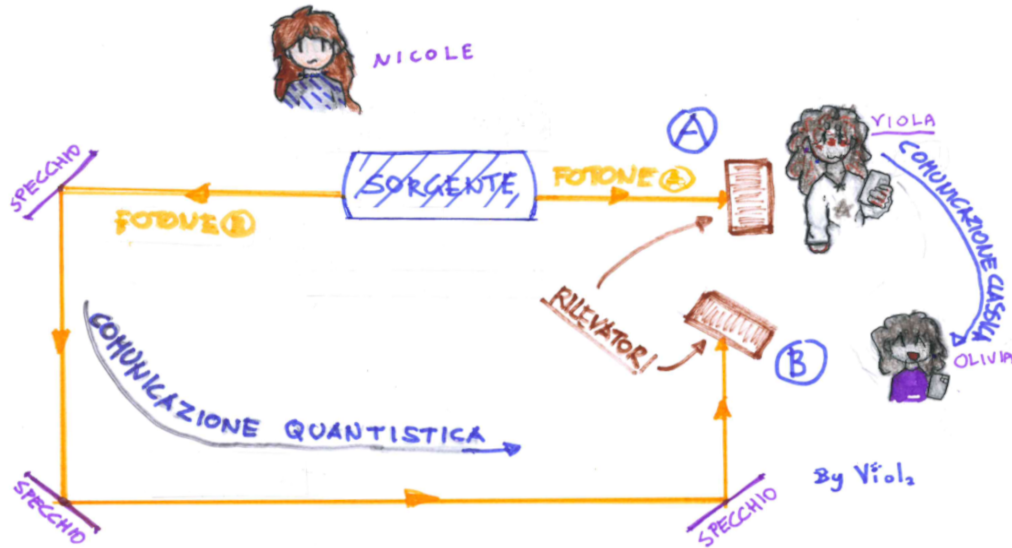
che, notate bene, ha esattamente la stessa struttura dell'espressione (217), ma l'asse di proiezione dei singoli spin è ora x .

Pertanto, seguendo esattamente lo stesso ragionamento di prima, arriviamo alla conclusione che non solo la componente z dello spin preesisteva alla misura effettuata da Viola, ma anche la componente x . Naturalmente sempre presupponendo la località e quindi escludendo interazioni istantanee a distanza. Viene così violato uno dei presupposti più fondativi della meccanica quantistica: le variabili associate a operatori che non commutano non possono avere un valore oggettivo preciso e contemporaneo.

La conclusione dei tre autori fu che la meccanica quantistica fosse una teoria incompleta, una sorta di rappresentazione statistica parziale delle proprietà degli oggetti fisici, che in realtà avrebbero potuto essere completamente spiegate da una teoria sottostante più dettagliata. La nuova teoria avrebbe dovuto contenere le variabili quanto-meccaniche, ma anche altre (ecco perché è chiamata "teoria delle variabili nascoste"). I valori di tutte le variabili avrebbero dovuto essere tutti oggettivi e indipendenti dagli osservatori (principio di realismo). Inoltre, essi avrebbero dovuto dipendere separatamente dalle variabili nascoste, per poter escludere ogni interazione istantanea tra particelle (principio di località).

Vedremo che ciò non è possibile, 30 anni dopo l'articolo EPR, Bell dimostrò infatti che la meccanica quantistica è incompatibile con qualsiasi teoria locale di variabili nascoste.

L'opinione oggi prevalente dopo tutto questo dibattito è che l'interpretazione standard della meccanica quantistica sia corretta, vale a dire che un sistema individuale è completamente descritto dal suo stato quantistico. La ricerca è proseguita coerentemente con questo presupposto in direzioni inaspettate portando a nuovi risultati, tra i quali i più intriganti e rilevanti sono forse il teletrasporto quantistico (che presentiamo alla fine di questo capitolo) e il calcolo quantistico (del quale non discuteremo).



Infine vorrei ricordare che l'esperimento EPR non può essere utilizzato per inviare informazioni a distanza che viaggiano più veloci della luce, infatti, se Viola non invia un whatsapp, Olivia ha informazione nulla. In altre parole sia che Viola misuri la proiezione dello spin dell'elettrone A nella direzione z o nella direzione x , Olivia osserva con la stessa probabilità i due possibili valori della proiezione dello spin dell'elettrone B nella direzione z (o qualsiasi altra). Lasciamo la dimostrazione come esercizio. Ovviamente Viola può mandare un whatsapp, e tutto cambia. ma il whatsapp non raggiungerà Olivia più velocemente della luce. In conclusione, non esiste una strada asfaltata per una comunicazione superluminale.

Esercizi

- Si mostri che (216) e (218) sono identici (suggerimento: si usi la (211)). Si mostri anche che è uguale a $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_y\rangle_A \otimes |\downarrow_y\rangle_B - |\downarrow_y\rangle_A \otimes |\uparrow_y\rangle_B)$ (suggerimento: si usi la (212)). In generale si può far vedere che comunque si scelga l'asse della proiezione dello spin la struttura di singoletto rimane invariata (ma non è richiesto qui). Diremo quindi che lo stato di singoletto gode di una proprietà di invarianza per rotazioni.
- Si mostri che lo stato $m = 0$ del tripletto non ha le stesse proprietà di invarianza per rotazioni dello stato di singoletto. Per la verifica ci si limiti a esprimere esplicitamente $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_x\rangle_A \otimes |\downarrow_x\rangle_B + |\downarrow_x\rangle_A \otimes |\uparrow_x\rangle_B)$ in termini di autostati delle proiezioni dello spin sull'asse z di entrambi gli elettroni, sempre utilizzando la (211). Si mostri quindi che il risultato non coincide con $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle_A \otimes |\downarrow_z\rangle_B + |\downarrow_z\rangle_A \otimes |\uparrow_z\rangle_B)$.
- Si considerino i due restanti stati del tripletto e si mostri che neanche questi hanno le proprietà di invarianza dello stato di singoletto. Per la prova si usi la stessa strategia proposta nel precedente esercizio.
- Olivia non può usare l'esperimento per ricevere informazione istantanea (a una velocità superiore a quella della luce) da Viola. Per dimostrarlo si assuma che Viola misuri la proiezione dello spin A nella direzione z oppure nella direzione x . Si supponga poi che Olivia non abbia ricevuto informazioni tramite un canale classico (whatsapp) sul risultato ottenuto. Si provi che in entrambi i casi Olivia non può far altro che assegnare la stessa probabilità del 50% ai due possibili valori della proiezione dello spin dell'elettrone B nella direzione z .

- Si consideri ancora il caso in cui Viola misura la proiezione dello spin A nella direzione z oppure nella direzione x . Si supponga poi che Olivia abbia ricevuto informazioni complete tramite un canale classico (whatsapp) sul risultato ottenuto. Si provi che Olivia può assegnare con certezza il valore della proiezione dello spin dell'elettrone B nella direzione z quando Viola ha misurato nella direzione z , mentre non può far altro che assegnare la stessa probabilità del 50% quando Viola ha misurato nella direzione x . Anche se le particelle fossero fotoni, la comunicazione classica potrebbe comunque arrivare prima di quella quantistica, si veda la figura.

6.2 Il teorema di Bell e la disuguaglianza CHSH

Preambolo

Il paradosso EPR fu concepito con lo scopo di comprendere meglio i fondamenti della meccanica quantistica ed esplorare tutte le implicazioni di questa teoria per quel che riguarda la nostra percezione e rappresentazione della realtà. Come abbiamo già detto, la conclusione dei tre autori fu che la meccanica quantistica fosse una teoria incompleta e che avrebbe dovuto essere spiegata in termini di una teoria delle variabili nascoste più dettagliata.

Con l'eccezione di Erwin Schrödinger, la maggior parte dei fisici non prestò attenzione al dibattito tra Bohr ed Einstein poiché le opinioni contrastanti riguardavano solo l'interpretazione del formalismo quantistico e non la sua capacità di prevedere correttamente i risultati delle misure, cosa che Einstein non mise in dubbio. La situazione cambiò nel 1964, quando Bell fece la scoperta rivoluzionaria che alcune previsioni della fisica quantistica sono in conflitto con la visione del mondo realista locale di Einstein.

Il teorema di Bell afferma che la meccanica quantistica è incompatibile con le teorie locali delle variabili nascoste, dove "locale" significa che una particella può essere influenzata solo dall'ambiente circostante e quindi non sono possibili azioni istantanee a distanza (la velocità della luce è il limite). Trovò una disuguaglianza riguardante le correlazioni tra le proprietà di due variabili che è soddisfatta dalla teoria locale delle variabili nascoste ed è violata dalla meccanica quantistica, così da rendere possibile la discriminazione sperimentale tra le due teorie.

Il teorema fu presentato da Bell in un articolo del 1964 intitolato "On the Einstein Podolsky Rosen paradox" come risposta al gedankenexperiment EPR. Successivamente furono concepite altre formulazioni più generali con l'obiettivo principale di impostare il teorema in una forma che consentisse prove sperimentali più facilmente realizzabili.

Le ipotesi di Bell erano che le misure fossero eseguite indipendentemente sulle due particelle di una coppia entangled separate nello spazio e che i risultati dipendessero separatamente (localmente) dalle variabili nascoste. Provò quindi che queste ipotesi implicano un vincolo matematico, noto come disuguaglianza di Bell, su come sono correlati i risultati delle due misure. Infine, Bell dimostrò che la meccanica quantistica prevede correlazioni che violano questa disuguaglianza. Quindi l'unico modo in cui le variabili nascoste possono spiegare le previsioni della meccanica quantistica è che siano "non locali", nel senso che in qualche modo le due particelle, o gli strumenti di misura, devono essere in grado di interagire istantaneamente, non importa quanto siano distanti.

Di seguito si riporta la prima formulazione di Bell utilizzando, ove possibile, le sue stesse parole (il che significa che i successivi tre paragrafi sono copiati dal suo articolo con alcune semplificazioni, abbreviazioni e brevi spiegazioni dove necessario, inoltre il testo è tradotto e la notazione è adattata per renderla compatibile con quella già adottata in queste note).

Formulazione

Consideriamo due particelle (A e B) con spin $1/2$ create in qualche modo nello stato di spin di singoletto e che si muovono liberamente in direzioni opposte. Si possono effettuare delle misure, ad esempio mediante magneti Stern-Gerlach, su componenti selezionate degli spin $\hat{\sigma}^{(A)}$ e $\hat{\sigma}^{(B)}$ (eliminiamo il prefattore $\frac{\hbar}{2}$ poiché non ha alcun ruolo in questo contesto). Se la misura della componente $\hat{\sigma}^{(A)} \cdot \mathbf{n}$, dove \mathbf{n} è un vettore unitario, restituisce il valore $+1$, allora secondo la meccanica quantistica, la misura di $\hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{n}$ deve restituire il valore -1 e viceversa.

Ora, se le due misure vengono effettuate in luoghi distanti tra loro, l'orientamento di un magnete non influenza il risultato ottenuto con l'altro per l'ipotesi di località. Però possiamo prevedere in anticipo il risultato della misura di $\hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{n}$ misurando precedentemente $\hat{\sigma}^{(A)} \cdot \mathbf{n}$ che tuttavia, per l'ipotesi di località, non può influenzare il risultato della misura di $\hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{n}$. Ne consegue che il valore della misura di $\hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{n}$ deve effettivamente preesistere alla misura sulla particella A . Poiché lo stato quantistico iniziale non determina a priori il risultato di una misura della componente di spin di singola particella (la probabilità per ciascuno dei due valori ± 1 è $1/2$), questa "preesistenza" implica la possibilità di una specifica più completa dello stato della particella B (e quindi, scambiando i ruoli, anche della particella A).

Questa specifica più completa venga effettuata mediante il parametro λ (la variabile nascosta). È indifferente se λ denoti una singola variabile o un insieme variabili o anche un insieme di funzioni e se le variabili siano discrete o continue. Scriviamo però come se λ fosse un unico parametro scalare continuo.

Dati due vettori unitari \mathbf{a} e \mathbf{b} , sia $s^{(A)}$ la componente di spin della particella A nella direzione \mathbf{a} e $s^{(B)}$ la componente di spin della particella B nella direzione \mathbf{b} . Il risultato di una misura di $s^{(A)}$ è quindi determinato da \mathbf{a} e λ e quello di $s^{(B)}$ da \mathbf{b} e λ , inoltre le due variabili possono prendere solo i valori seguenti:

$$s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda) = \pm 1, \quad s^{(B)}(\mathbf{b}, \lambda) = \pm 1. \quad (219)$$

L'ipotesi fondamentale è che il risultato $s^{(B)}$ per la particella B non dipenda dal direzionamento \mathbf{a} del magnete per la particella A , né $s^{(B)}$ da \mathbf{b} , il che è molto ragionevole se le particelle sono lontane ed è esclusa la non-località.

Se $\rho(\lambda)$ è la densità di probabilità di λ , allora il valore atteso del prodotto delle due componenti $s^{(A)}$ and $s^{(B)}$ è

$$C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = E[s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda) s^{(B)}(\mathbf{b}, \lambda)] = \int d\lambda \rho(\lambda) s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda) s^{(B)}(\mathbf{b}, \lambda), \quad (220)$$

che dovrebbe essere uguale al valore atteso quantistico nello stato di singoletto

$$\langle 0,0 | (\hat{\sigma}^{(A)} \cdot \mathbf{a}) \otimes (\hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{b}) | 0,0 \rangle = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = -\cos(\theta), \quad (221)$$

dove θ è l'angolo formato dai due versori (la prova della uguaglianza qui sopra è lasciata come esercizio). Affinché la teoria delle variabili nascoste possa riprodurre i valori attesi della meccanica quantistica dovrebbe quindi valere

$$C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = -\cos(\theta), \quad (222)$$

il che non è possibile come vedremo tra poco. Proprio in questo consiste la dimostrazione del teorema di Bell.

Descrizione

La dimostrazione del risultato principale è abbastanza semplice. Prima di affrontarla è forse utile fare un esempio per metterla nella giusta prospettiva.

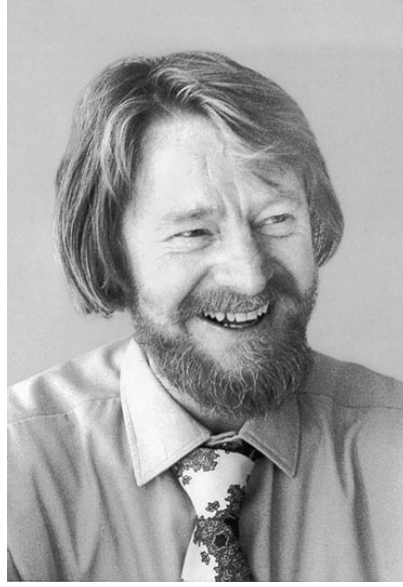


Figura 19. John Stewart Bell (Belfast, giugno 1928 - Ginevra, 1° ottobre 1990) è stato un fisico britannico, noto soprattutto per il teorema che prende il suo nome. Morì improvvisamente nel 1990, dopo essere stato nominato per il Premio Nobel quell'anno. Nel 2022 il Premio Nobel per la fisica è stato assegnato ad Alain Aspect, John Clauser e Anton Zeilinger per la validazione sperimentale del teorema di Bell.

Non è difficile riprodurre l'uguaglianza (222) nei casi ai quali comunemente si limitano le discussioni verbali di questo problema, ossia

$$\begin{aligned} C(\mathbf{a}, \mathbf{a}) &= -C(\mathbf{a}, -\mathbf{a}) = -1, \\ C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) &= 0 \quad \text{if } \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0. \end{aligned} \quad (223)$$

Per esempio, sia ora λ (che come abbiamo detto non è necessariamente uno scalare) un vettore unitario $\boldsymbol{\lambda}$, con distribuzione uniforme in tutte le direzioni e si assuma

$$\begin{aligned} s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda) &= \text{sign}\{\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\lambda}\}, \\ s^{(B)}(\mathbf{b}, \lambda) &= -\text{sign}\{\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\lambda}\}, \end{aligned} \quad (224)$$

si può facilmente mostrare (come esercizio) che con questa scelta si ha

$$C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \frac{2}{\pi} \theta - 1, \quad (225)$$

dove θ è l'angolo tra \mathbf{a} e \mathbf{b} . È facile verificare che l'espressione qui sopra ha le proprietà (223), ma non soddisfa l'uguaglianza (222) in tutti gli altri casi.

Contraddizione

Proviamo ora il risultato principale. Se $\mathbf{a} = \mathbf{b}$, data la definizione (220), l'uguaglianza (222) diventa

$$C(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = \int d\lambda \rho(\lambda) s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda) s^{(B)}(\mathbf{a}, \lambda) = -1, \quad (226)$$

che riguarda due particelle in un singoletto e che afferma semplicemente che la teoria delle variabili nascoste dovrebbe concordare con la meccanica quantistica nel prevedere valori opposti della loro componente di spin nella stessa direzione.

Dato che ρ è una densità di probabilità normalizzata, ossia $\int d\lambda \rho(\lambda) = 1$ e dato che $s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda)$ e $s^{(B)}(\mathbf{a}, \lambda)$ possono prendere solo i valori ± 1 , si deve necessariamente avere $s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda) s^{(B)}(\mathbf{a}, \lambda) = -1$, per tutti i λ con la possibile eccezione di un insieme di valori di misura nulla. Scriveremo quindi

$$-s^{(B)}(\mathbf{a}, \lambda) = s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda) = s(\mathbf{a}, \lambda) \quad (227)$$

dove la seconda uguaglianza è una definizione. Quindi, l'aver imposto l'uguaglianza tra il valore atteso quantistico $-\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ e quello delle variabili nascoste $C(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ nel solo caso $\mathbf{a} = \mathbf{b}$ ci permette di riscrivere la (220) come

$$C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = - \int d\lambda \rho(\lambda) s(\mathbf{a}, \lambda) s(\mathbf{b}, \lambda). \quad (228)$$

Ne consegue che se \mathbf{c} è un altro vettore unitario

$$\begin{aligned} C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - C(\mathbf{a}, \mathbf{c}) &= - \int d\lambda \rho(\lambda) [s(\mathbf{a}, \lambda) s(\mathbf{b}, \lambda) - s(\mathbf{a}, \lambda) s(\mathbf{c}, \lambda)] = \\ &= - \int d\lambda \rho(\lambda) s(\mathbf{a}, \lambda) s(\mathbf{b}, \lambda) [1 - s(\mathbf{b}, \lambda) s(\mathbf{c}, \lambda)], \end{aligned} \quad (229)$$

dove per la seconda uguaglianza si è usato $s^2(\mathbf{b}, \lambda) = 1$. Inoltre, dato che $[1 - s(\mathbf{b}, \lambda) s(\mathbf{c}, \lambda)] \geq 0$ e $|-s(\mathbf{a}, \lambda) s(\mathbf{b}, \lambda)| = 1$, la seguente disuguaglianza risulta verificata

$$|C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - C(\mathbf{a}, \mathbf{c})| \leq \int d\lambda \rho(\lambda) [1 - s(\mathbf{b}, \lambda) s(\mathbf{c}, \lambda)]. \quad (230)$$

Il primo termine a destra, dato che la densità di probabilità è normalizzata, è uguale a 1 e il secondo termine a destra è $C(\mathbf{b}, \mathbf{c})$, da cui

$$|C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - C(\mathbf{a}, \mathbf{c})| \leq 1 + C(\mathbf{b}, \mathbf{c}). \quad (231)$$

Questa è in realtà la disuguaglianza originale di Bell. È facile vedere (come esercizio) che non è compatibile con $C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$, il che significa che non esiste alcuna teoria delle variabili nascoste che possa riprodurre le correlazioni quantomeccaniche,

La disuguaglianza CHSH

Partendo stavolta dalla somma $C(\mathbf{d}, \mathbf{b}) + C(\mathbf{d}, \mathbf{c})$ dove \mathbf{d} è un quarto vettore e poi seguendo esattamente gli stessi passi fatti in precedenza, ossia quelli in (229), dove stavolta si deve tenere conto che $[1 + s(\mathbf{b}, \lambda) s(\mathbf{c}, \lambda)] \geq 0$, e quelli in (230) e (231), si ottiene

$$|C(\mathbf{d}, \mathbf{b}) + C(\mathbf{d}, \mathbf{c})| \leq 1 - C(\mathbf{b}, \mathbf{c}), \quad (232)$$

che è un'altra disuguaglianza di tipo Bell, che può eventualmente essere sommata alla disuguaglianza (231) in modo da ottenere

$$|C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - C(\mathbf{a}, \mathbf{c})| + |C(\mathbf{d}, \mathbf{b}) + C(\mathbf{d}, \mathbf{c})| \leq 2, \quad (233)$$

che è una disuguaglianza di tipo Bell particolarmente importante chiamata disuguaglianza CHSH (dai nomi di Clauser, Horne, Shimony e Holt che per primi la derivarono nel 1969). Il vettore unitario \mathbf{d} può essere uguale a \mathbf{a} , ma in questo caso la disuguaglianza diventa un'uguaglianza banale.

Come esercizio, si può verificare che anche la disuguaglianza CHSH può essere violata dalla correlazione quantistica per due elettroni in uno stato di singoletto.

Come vedremo più in dettaglio, i test empirici, negli anni successivi, hanno dimostrato che i sistemi reali concordano con la meccanica quantistica e sistematicamente sono in disaccordo con le disuguaglianze di Bell e CHSH. Questi risultati hanno confermato che uno stato quantistico è una proprietà individuale di un sistema, il quale è completamente descritta da esso e hanno aperto la porta a una nuova generazione di esperimenti che includono quelli sul teletrasporto quantistico.

Rimane la possibilità di teorie realistiche con variabili nascoste non locali. Teorie di questo tipo possono essere concepite e sono state concepite, ma il loro potere predittivo non eccede quello della meccanica quantistica. Pertanto, non c'è modo di sceglierle o rifiutarle sulla base dei risultati sperimentali. Senza contare che l'interazione non locale tra sistemi con proprietà oggettive è un concetto abbastanza difficile da digerire, almeno quanto ammettere che le variabili del sistema non hanno un significato oggettivo in assenza di un osservatore. In questa situazione, la grande maggioranza dei fisici preferisce ancora mantenere la visione quantomeccanica standard del mondo fisico e probabilmente ciò non cambierà nel prossimo futuro.

Esercizi

- Si provi che $\langle 0,0 | (\hat{\sigma}^{(A)} \cdot \mathbf{a}) \otimes (\hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{b}) | 0,0 \rangle = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$. Suggerimento: si scriva $|0,0\rangle$ come

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_A \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_B - \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_A \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_B \right) \quad (234)$$

e $(\hat{\sigma}^{(A)} \cdot \mathbf{a}) \otimes (\hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{b})$ come

$$(\hat{\sigma}^{(A)} \cdot \mathbf{a}) \otimes (\hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{b}) = \begin{bmatrix} a_z & a_x - ia_y \\ a_x + ia_y & -a_z \end{bmatrix}_A \otimes \begin{bmatrix} b_z & b_x - ib_y \\ b_x + ib_y & -b_z \end{bmatrix}_B \quad (235)$$

Si tenga presente che gli operatori A agiscono solo sugli stati A e gli operatori B solo sugli stati B .

- Si mostri che $\langle 0,0 | (\hat{\sigma}^{(A)} \cdot \mathbf{a}) \otimes (\hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{b}) | 0,0 \rangle$ è una correlazione. Suggerimento: si mostri preliminarmente che $\langle 0,0 | \hat{\sigma}^{(A)} \cdot \mathbf{a} | 0,0 \rangle = \langle 0,0 | \hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{b} | 0,0 \rangle = 0$ e si tenga presente che $[\hat{\sigma}^{(A)} \cdot \mathbf{a}]^2 = [\hat{\sigma}^{(B)} \cdot \mathbf{b}]^2 = \mathbb{1}$ (la matrice identità 2×2).
- Si mostri che anche $C(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ è una correlazione se $E[s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda)] = E[s^{(B)}(\mathbf{b}, \lambda)] = 0$ (si noti che queste condizioni sono necessarie per riprodurre i risultati della meccanica quantistica per i valori attesi della componente di spin di singola particella, ma non sono necessarie per la dimostrazione del teorema di Bell). Suggerimento: si tenga presente che $[s^{(A,B)}(\mathbf{b}, \lambda)]^2 = [s^{(A,B)}(\mathbf{b}, \lambda)]^2 = 1$.
- Sia $\boldsymbol{\lambda}$ un versore con densità di probabilità uniforme in tutte le direzioni (quindi in questo esercizio non uno scalare come per la dimostrazione del teorema) e sia $s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda) = \text{sign}\{\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\lambda}\}$, $s^{(B)}(\mathbf{b}, \lambda) = -\text{sign}\{\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\lambda}\}$. Si mostri che $C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = E[s^{(A)}(\mathbf{a}, \lambda) s^{(B)}(\mathbf{b}, \lambda)] = \frac{2}{\pi} \theta - 1$, dove θ è l'angolo tra \mathbf{a} e \mathbf{b} . Si mostri anche che $C(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ è differente dal valore atteso della meccanica quantistica $-\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = -\cos(\theta)$ eccetto che per i casi elencati in (223).
- Si provi che la meccanica quantistica è in disaccordo con la disuguaglianza di Bell. Si assuma $C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ e si mostri che la disuguaglianza (231) può essere violata ossia che ci sono \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} tali che $|\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} - \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}| \leq 1 - \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}$ non è soddisfatta.. Suggerimento: si cerchino tre versori sullo stesso piano con \mathbf{b} nel mezzo e gli altri due che formano lo stesso angolo θ con \mathbf{b} . Questa scelta implica che la disuguaglianza diventi $|\cos(\theta) - \cos(2\theta)| \leq 1 - \cos(\theta)$ with $\theta \in [0, \pi]$ e in conseguenza tutto quello che resta è trovare un angolo θ per il quale è violata.

- Si provi che la meccanica quantistica è in disaccordo con la disuguaglianza CASH. Si assuma $C(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ e si mostri che la disuguaglianza (233) può essere violata, ossia che ci sono \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} e \mathbf{d} tali che $|\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} - \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}| + |\mathbf{d} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{d} \cdot \mathbf{c}| \leq 2$ non è verificata.

6.3 Test sperimentali delle disuguaglianze di tipo Bell

Descrizione schematica di un tipico esperimento

La scoperta di Bell spostò il dibattito di Einstein e Bohr dall'epistemologia al regno della fisica sperimentale con la realizzazione di test sulle disuguaglianze di Bell o CHSH. Fin dai primi esperimenti, risalenti ai primi anni '70, si è largamente privilegiato l'utilizzo dei fotoni al posto degli elettroni. Poiché le proprietà matematiche dello spin del fotone sono le stesse di quelle dell'elettrone (salvo che le proiezioni hanno valore ± 1 invece di $\pm 1/2$) la realizzazione tipica di un esperimento riproduce fedelmente lo schema teorico di Bell.

Nella figura 20, tratta dall'articolo di Alain Aspect del 2015 "Closing the door on Einstein and Bohr's quantum debate", viene riprodotto l'apparato standard per l'esecuzione di un test di Bell.

Una sorgente (palla blu, dove si trova Nicole) emette una coppia di fotoni entangled ν_1 e ν_2 in uno stato di singoletto che viaggiano in direzioni opposte. Le loro componenti di spin vengono analizzate dai rilevatori (polarizzatori) A e B (blocchi grigi, dove stanno Viola e Olivia) che sono allineati, rispettivamente, lungo le direzioni \mathbf{a} e \mathbf{b} (i vettori \mathbf{a} e \mathbf{b} possono essere diretti lungo x o y o qualsiasi direzione sul piano xy , nella figura 20 sono entrambi lungo x).

Ogni rilevatore ha due canali di uscita, etichettati $+1$ e -1 . Un fotone ν_1 con componente di spin up (down) nella direzione \mathbf{a} emergerà in $+1$ (-1) da A . Allo stesso modo si comporta il secondo fotone ν_2 che emergerà in $+1$ (-1) da B a seconda della componente di spin nella direzione \mathbf{b} .

In generale, per la meccanica quantistica i fotoni non sono in uno stato di proiezione di spin corrispondente ad uno specifico canale di uscita, ma la teoria fornisce le probabilità di ottenere i risultati $+1$ o -1 per ciascuno dei due fotoni in seguito all'interazione col rilevatore (che misura). Nel linguaggio delle variabili nascoste, diremo che ogni fotone ha una probabilità a priori di essere in uno dei due stati di spin che vengono diretti sui due diversi canali di uscita.

La correlazione totale viene infine determinata misurando di casi di ognuna delle quattro possibili combinazioni $(\pm 1, \pm 1)$ con il quadruplice circuito di conteggio delle coincidenze (blocco verde). Se $n(\pm 1, \pm 1)$ è il numero totale trovato rispettivamente per $(\pm 1, \pm 1)$, la correlazione sperimentale sarà

$$C_{exp}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \frac{n(1, 1) + n(-1, -1) - n(1, -1) - n(-1, 1)}{n(1, 1) + n(-1, -1) + n(1, -1) + n(-1, 1)} \quad (236)$$

che va confrontata con quella quantistica $-\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ e usata per verificare le disuguaglianze di Bell.

Se \mathbf{a} è uguale a \mathbf{b} , come in figura, i due fotoni sono completamente anticorrelati sia per la meccanica quantistica (si veda 217) che per le teorie delle variabili nascoste (si veda 226), pertanto, sono consentite solo le combinazioni $(1, -1)$ e $(-1, 1)$ con uguale frequenza statistica. Questa configurazione non può essere quindi utilizzata per discriminare tra le due teorie che correttamente prevedono entrambe correlazione -1 . Tuttavia abbiamo anche visto che le due teorie necessariamente prevedono correlazioni diverse per opportuni angoli tra i due vettori. La teoria "corretta" può essere determinata misurando sperimentalmente le tre correlazioni per le tre coppie che si possono formare utilizzando opportuni vettori \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} . Se le tre correlazioni non soddisfano la disuguaglianza di Bell, allora le teorie locali a variabili nascoste sono da escludere. Se oltre a questo, le correlazioni sperimentali sono uguali (entro l'errore statistico) a quelle quantistiche sappiamo quale teoria scegliere.

I primi test e l'esperimento di Aspect

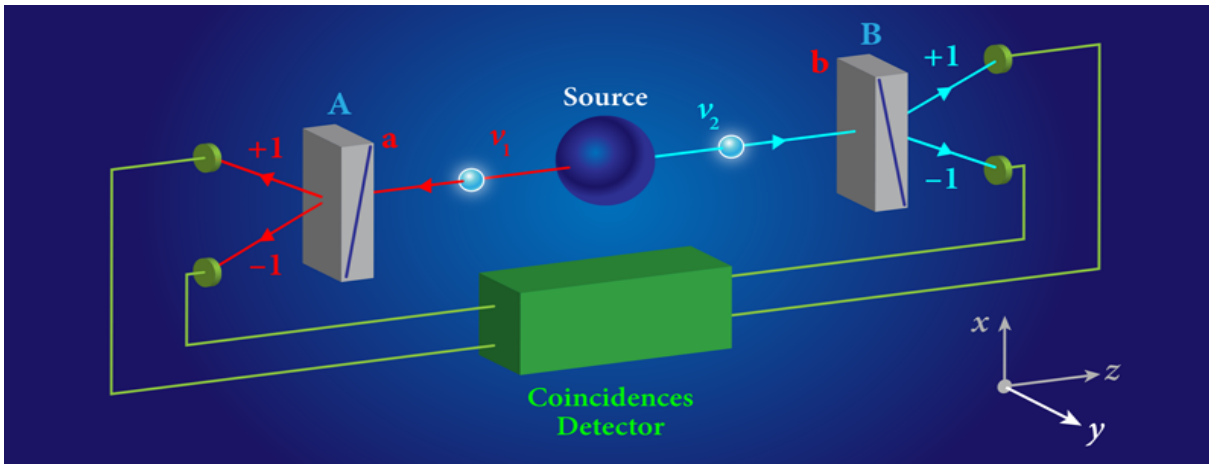


Figura 20. Un tipico apparato sperimentale per l'esecuzione di un test di Bell. Una sorgente emette una coppia di fotoni entangled ν_1 e ν_2 . Le loro proiezioni di spin vengono analizzate dai rilevatori A e B (blocchi grigi), allineati rispettivamente lungo le direzioni \mathbf{a} e \mathbf{b} . I rilevatori inviano i fotoni su canali diversi, a seconda della loro proiezione di spin e la correlazione totale viene quindi determinata misurando le percentuali delle quattro possibili combinazioni ($\pm 1, \pm 1$) con un quadruplice circuito di conteggio delle coincidenze (verde).

Tutti gli esperimenti sufficientemente precisi per testare la disuguaglianza di Bell hanno registrato una violazione della stessa e non solo, hanno anche mostrato correlazioni in perfetto accordo con le previsioni della meccanica quantistica (correlazione $-\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$).

Tuttavia già ai primi esperimenti vennero mosse alcune critiche riguardanti i cosiddetti "loopholes" (scappatoie) che avrebbero potuto mettere in dubbio la significatività dei risultati.

Nei primi tentativi, risalenti ai primi anni '70 i rilevatori erano posizionati in \mathbf{a} e \mathbf{b} prima dell'inizio dell'esperimento. La critica che venne fatta è che i dispositivi avrebbero potuto così condividere in anticipo informazioni sulla loro configurazione (anche se sembra molto improbabile), invalidando l'ipotesi di Bell dell'indipendenza dei due processi di misura. L'oggetto di questa critica è conosciuto come "locality loophole".

Questo è ad esempio il caso di uno dei primissimi test della disuguaglianza di Bell, effettuato da John Clauser e Stuart Freedman utilizzando coppie di fotoni nello spettro della luce visibile emessi in cascata atomica radiativa di calcio. Gli autori descrivono l'esperimento nel loro articolo del 1972 "Experimental test of local hidden-variable theories*", il cui abstract recita:

We have measured the linear polarization correlation of the photons emitted in an atomic cascade of calcium. It has been shown by a generalization of Bell's inequality that the existence of local hidden variables imposes restrictions on this correlation in conflict with the predictions of quantum mechanics. Our data, in agreement with quantum mechanics, violate these restrictions to high statistical accuracy, thus providing strong evidence against local hidden-variable theories.

il che significa che raggiunsero l'obiettivo prefissato, tuttavia, l'esperimento fu eseguito con configurazioni statiche, in cui i rilevatori vengono regolati prima di un processo di misura e per l'intera durata dello stesso non garantendo così l'assenza di un qualche scambio di informazioni.

Secondo Bell, il locality loophole è il più fondamentale e quindi propose un modo per gestirlo: l'orientamento di ciascun rilevatore avrebbe dovuto essere scelto mentre i fotoni erano in volo, impedendo così lo scambio di informazioni tra i due rilevatori, dato che non è possibile alcuna comunicazione a una velocità maggiore di quella della luce.

Il fisico francese Alain Aspect pubblicò un articolo nel 1976 intitolato "Proposed experiment to test the nonseparability of quantum mechanics" dove veniva proposto un esperimento realizzabile

progettato espressamente per evitare il locality loophole. L'esperimento fu successivamente realizzato dallo stesso Aspect in collaborazione con Jean Dalibard e Gérard Roger, come descritto nel loro articolo del 1982 "Experimental test of Bell's inequalities using time-varying analyzers". I due sperimentatori incrementarono inoltre la produzione di fotoni di diversi ordini di grandezza rispetto ai tentativi precedenti rendendo così la statistica molto più precisa. Nel loro esperimento l'atomo di calcio veniva eccitato con un laser al kripton e nel ritornare allo stato fondamentale emetteva la coppia di fotoni entangled che si propagavano in direzioni opposte. Si legge nell'abstract del loro articolo:

Correlations of linear polarizations of pairs of photons have been measured with time-varying analyzers. The analyzer in each leg of the apparatus is an acousto-optical switch followed by two linear polarizers. The switches operate at incommensurate frequencies near 50 MHz. Each analyzer amounts to a polarizer which jumps between two orientations in a time short compared with the photon transit time. The results are in good agreement with quantum mechanical predictions but violate Bell's inequalities by 5 standard deviations.

il che non solo significa che raggiunsero l'obiettivo prefissato, ma che l'esperimento fu eseguito con configurazioni a commutazione casuale, in grado di cambiare posizione in un tempo incredibilmente breve, inferiore al tempo impiegato dalla luce (un fotone) per percorrere sei metri (la dimensione dell'apparato sperimentale). Con le loro stesse parole:

In this experiment, switching between the two channels occurs about each 10 ns. Since this delay, as well as the lifetime of the intermediate level of the cascade (5 ns), is small compared to L/c (40 ns), a detection event on one side and the corresponding change of orientation on the other side are separated by a space-like interval.

Aspect e collaboratori misero quindi in pratica la proposta di Bell secondo la quale le due orientazioni dei rilevatori dovessero essere scelte immediatamente prima del rilevamento dei fotoni, in modo da impedire qualsiasi forma di comunicazione tra i due dispositivi di misura. In breve, Aspect e collaboratori si assicurarono che la correlazione tra le due misure sui fotoni fosse dovuto agli effetti quantistici e non a un qualche tipo di comunicazione classica con velocità subluminali.

D'altra parte, l'atteggiamento critico di Aspect e dei suoi collaboratori verso i precedenti esperimenti, inclusi quelli da loro stessi realizzati, era molto evidente:

Experiments using pairs of visible photons emitted in atomic radiative cascades seem to achieve a good realization of the ideal Gedankenexperiment. However, all these experiments have been performed with static setups, in which polarizers are held fixed for the whole duration of a run. Then, one might question Bell's locality assumption, that states that the results of the measurement by polarizer B does not depend on the orientation \mathbf{a} of polarizer A (and vice versa), nor does the way in which pairs are emitted depend on \mathbf{a} or \mathbf{b} . Although highly reasonable, such a locality condition is not prescribed by any fundamental physical law. As pointed out by Bell, it is possible, in such experiments, to reconcile supplementary-parameter theories and the experimentally verified predictions of quantum mechanics: The settings of the instruments are made sufficiently in advance to allow them to reach some mutual rapport by exchange of signals with velocity less than or equal to that of light. If such interactions existed, Bell's locality condition would no longer hold for static experiments, nor would Bell's inequalities.

I risultati trovati da Aspect e collaboratori in quest'ultimo esperimento erano in accordo con le previsioni quantistiche e violavano la disuguaglianza di Bell di ben cinque deviazioni standard.

Test di Bell più recenti

Nella lista di sperimentatori del precedente paragrafo ci sono già due dei tre premi Nobel per la fisica del 2022: John Clauser e Alain Aspect. Il terzo, Anton Zeilinger, il cui nome è legato soprattutto

al teletrasporto quantistico, fu in grado di aggiungere il tassello definitivo per il completamento dei test di Bell.

A causa di limitazioni tecniche, la scelta dell'orientamento dei rilevatori nell'ultimo esperimento di Aspect non era del tutto casuale. Il problema fu risolto nel 1998 da ricercatori dell'Università di Innsbruck, come descritto in G. Weihs, T. Jennewein, C. Simon, H. Weinfurter e A. Zeilinger, "Violation of Bell's inequality under strict Einstein locality condition", (1998). Questa squadra, guidata da Anton Zeilinger, trovò un ingegnoso espediente in grado di colmare definitivamente la lacuna sperimentale dovuta al loophole: la scelta delle posizioni dei rilevatori fu effettuata infatti utilizzando un processo quantistico per garantirne l'assoluta casualità. Inoltre i risultati del loro esperimento violavano la disuguaglianza CHSH di oltre 30 deviazioni standard e le curve di coincidenza concordavano pienamente con quelle previste dalla teoria quantistica.

Nello stesso anno, come descritto in W. Tittel, J. Brendel, H. Zbinden e N. Gisin, "Violation of Bell inequalities by photons more than 10 km apart", (1998), fu effettuato un esperimento in cui la luce veniva inviata tramite cavi in fibra ottica su distanze di diversi chilometri prima di essere analizzata per il test di Bell. L'obiettivo dell'esperimento, perfettamente centrato, era mostrare che la distanza non distrugge l'entanglement.

Da allora, molti test più avanzati furono eseguiti con successo, anche come risposta agli studiosi ancora poco convinti dell'assenza di loopholes. In effetti, c'erano ancora alcuni dubbi sull'effettiva casualità dell'orientamento dei rilevatori perché l'uso di dispositivi fisici per scegliere casualmente le impostazioni in un test di Bell implica fare ipotesi sulla fisica che si intende testare.

Lo stesso Bell sottolineò questa debolezza nella realizzazione degli esperimenti dovuta al fatto che le sequenze random usate per scegliere l'orientazione dei rilevatori venivano generate da dispositivi fisici. Propose allora che il "libero arbitrio" umano avrebbe potuto essere usato rigorosamente per garantire l'imprevedibilità nei test di Bell. Per questo motivo, la foltissima squadra di collaboratori del Big Bell Test e molti altri contribuirono nel 2016 a realizzare l'esperimento descritto in "Challenging local realism with human choices", (2018), dove fu utilizzata la libera scelta umana per generare sequenze random. A tale scopo furono reclutati circa 100.000 partecipanti per fornire input sufficiente per assicurare l'effettiva casualità delle sequenze come ben descritto nell'abstract dell'articolo:

We recruited about 100,000 human participants to play an online video game that incentivizes fast, sustained input of unpredictable selections and illustrates Bell-test methodology. The participants generated 97,347,490 binary choices, which were directed via a scalable web platform to 12 laboratories on five continents, where 13 experiments tested local realism using photons, single atoms, atomic ensembles and superconducting devices. Over a 12-hour period on 30 November 2016, participants worldwide provided a sustained data flow of over 1,000 bits per second to the experiments, which used different human-generated data to choose each measurement setting.

Più o meno contemporaneamente, come descritto in D. Rauch *et al.*, "Cosmic Bell test using random measurement settings from high-redshift quasars", (2018), fu realizzato un test di Bell in cui le impostazioni di misurazione vennero determinate sulla base di misurazioni in tempo reale della lunghezza d'onda dei fotoni provenienti da high-redshift quasars, la cui luce era stata emessa miliardi di anni prima. Questo esperimento spinse indietro di almeno $\sim 7,8$ miliardi di anni il tempo più recente in cui qualsiasi interazione realista-locale avrebbe potuto influenzare i risultati del test di Bell. Un argomento abbastanza convincente.

Ci sono state altri loopholes che sono stati risolti e forse emergeranno nuovi loopholes dal momento che nessun esperimento, per quanto ideale sia, può esserne totalmente privo. Tuttavia, questa serie di test di Bell sempre più sofisticati ha ridotto il numero dei critici che mettono in discussione i risultati degli esperimenti indicando difetti nella loro realizzazione (alcuni ipotetici,

altri riconosciuti) che potenzialmente potrebbero distorcere i risultati sperimentali a favore della meccanica quantistica. A nostro avviso la precisione dei test è arrivata addirittura troppo lontano, forse il test di Alain Aspect e collaboratori del 1982 era già sufficientemente convincente.

In conclusione lo stato dell'arte è che gli esperimenti (*esperienza, senza la quale nulla dà di sé certezza*) sembrano aver definitivamente escluso le teorie locali con variabili nascoste, il che significa in definitiva che dobbiamo rinunciare definitivamente a una rappresentazione realista e locale della realtà fisica.

6.4 Il teletrasporto quantistico

Il teletrasporto dalla finzione alla realtà

Il teletrasporto, ossia la trasmissione e la ricostruzione di oggetti o persone a distanza, è un processo che è stato immaginato dalla fantascienza da almeno un secolo.

Nel 1928, Sir Arthur Conan Doyle, che fu uno dei primi scrittori di fantascienza nella sua forma attuale, scrisse il racconto "The disintegration machine", in cui un uomo chiamato Nemor inventa una macchina che può disintegrare e rimontare una persona utilizzando una "struttura invisibile" per registrarne la configurazione esatta.

Nel 1958 fu realizzato il film di fantascienza/horror "The fly", dove uno scienziato realizza una macchina di "teletrasporto" che dissolve gli atomi in un posto per ricrearli in un altro. Quando lo scienziato condivide involontariamente la macchina con una comune mosca domestica, questi si trasformano in un orribile ibrido tra uomo e insetto.

Quando "The fly" fu portato all'attenzione di Gene Roddenberry, il creatore della serie di fantascienza "Star Trek", decise di introdurre questo tipo di trasporto nella sua bozza del pilot "The cage" del 1964 con il semplice scopo di ridurre i costi di produzione. L'iconico teletrasporto di Star Trek nacque quindi solo perché l'astronave della squadra di sbarco non doveva essere mostrata mentre arriva o parte da un pianeta da visitare con notevole risparmio di danari.

La fantascienza quindi immagina il teletrasporto come una tecnica per trasferire informazioni a un luogo A a un luogo B situato a una certa distanza. A loro volta queste informazioni permettono di ricostruire un oggetto disintegrato in A nel luogo B . Quindi, anche se il teletrasporto è a volte erroneamente immaginato come un mezzo per trasferire oggetti fisici da un luogo a un altro, nel teletrasporto concepito dalla buona fantascienza è il trasferimento di informazioni a permettere la ricostruzione degli originali (un quesito "filosofico" ricorrente nella serie Star Trek è se dopo il teletrasporto la persona sia effettivamente la stessa).

Per quanto incredibile possa sembrare, nell'articolo del 1993 *Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels* Charles Bennett e collaboratori proposero il trasferimento di informazioni quantistiche per realizzare il teletrasporto nella realtà. Il loro schema sfrutta una delle caratteristiche più essenziali e affascinanti della teoria quantistica: l'esistenza di stati quantistici entangled. E pensare che Einstein prendeva in giro il concetto di comunicazione istantanea tra particelle entangled lontane tra loro chiamandolo "spooky action at distance"!

Solo quattro anni dopo il teletrasporto quantistico fu realizzato per la prima volta sperimentalmente da Anton Zeilinger e collaboratori, che riuscirono a teletrasportare lo stato quantistico di un fotone. I loro risultati sono descritti nell'articolo del 1997 'Experimental quantum teleportation' il cui abstract è il seguente

Quantum teleportation, the transmission and reconstruction over arbitrary distances of the state of a quantum system, is demonstrated experimentally. During teleportation, an initial photon which carries the polarization that is to be transferred and one of a pair of entangled photons are subjected to a measurement such that the second photon of the entangled pair acquires the polarization of

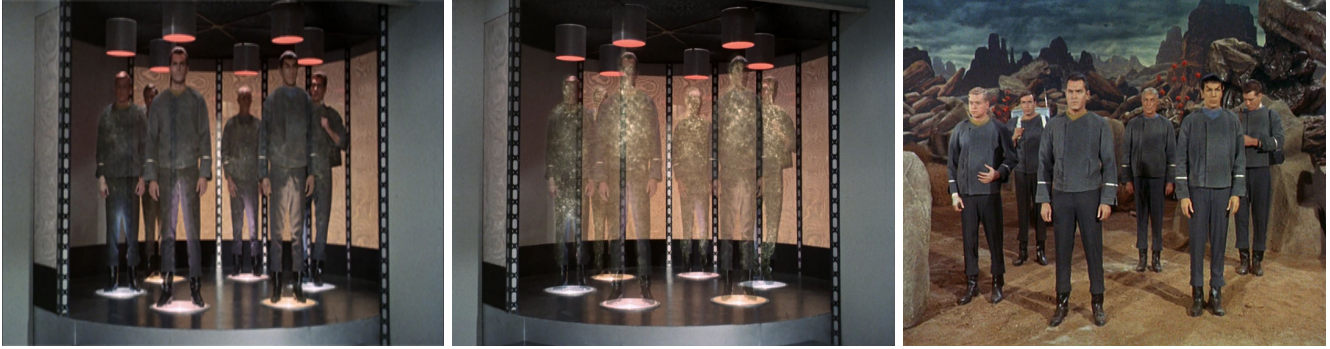


Figura 21. Una squadra di sbarco guidata dal capitano Christopher Pike viene teletrasportata dall’astronave Enterprise sulla superficie del pianeta Talos IV nell’episodio pilota di Star Trek *The cage* (*Lo zoo di Talos* in italiano). Questo episodio fu completato il 22 gennaio 1965 con copyright datato 1964, lo stesso anno della pubblicazione dell’articolo di Bell e di almeno tre decenni precedente ai primi esperimenti di teletrasporto nel mondo reale.

the initial photon. This latter photon can be arbitrarily far away from the initial one. Quantum teleportation will be a critical ingredient for quantum computation networks

In queste note lo schema di teletrasporto è quello sviluppato da Bennett e collaboratori nel 1993 che sarà descritto nel prossimo paragrafo.

Il quadro teorico

Uno stato quantico sconosciuto $|\phi\rangle$ può essere disassemblato nel luogo A da Viola e successivamente ricostruito da Olivia in un altro luogo B a partire da informazioni puramente classiche inviatele da Viola e correlazioni EPR puramente quantistiche.

Per fare ciò, il mittente Viola, e il destinatario Olivia, devono ”avere in mano” ciascuno una particella di una coppia entangled preparata in precedenza in uno stato di singoletto. Viola effettua una misura congiunta sulla sua particella e sul sistema quantistico sconosciuto che sono entrambi fisicamente nel luogo A e questo provoca una comunicazione quantistica istantanea dovuta a l’entanglement, ossia induce un mutamento nello stato della particella in mano a Olivia. Contemporaneamente, o poco dopo, Viola invia a Olivia anche il risultato della sua misura attraverso un canale classico (whatsapp).

Sulla base delle due comunicazioni, quella classica per whatsapp e quella quantistica dovuta alla misura effettuata da Viola, Olivia può convertire lo stato della sua particella in una replica esatta dello stato sconosciuto $|\phi\rangle$ che Alice ha distrutto nel momento in cui ha effettuato la sua misura. Prima di spiegare in dettaglio lo schema teorico è utile fare tre premesse:

- non è necessario che Viola conosca il particolare stato quantistico $|\phi\rangle$ da trasferire, né è necessario che lo conosca Olivia una volta trasferito;
- la necessità di fornire informazioni classiche implica che il teletrasporto non può avvenire a una velocità superiore a quella della luce (il che spiega anche perché nella serie Star Trek non viene usato per distanze troppo grandi);
- non è fortuito che lo stato originale $|\phi\rangle$ di Viola venga distrutto nel processo, questo è necessario affinché il teorema di non-clonazione quantistica non venga violato.

Lo stato di singoletto delle due particelle è

$$|0,0\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B) \quad (237)$$

dove la lettera A si riferisce alla particella di Viola che è nel luogo A e la lettera B alla particella di Olivia che si trova nel luogo B . Non è necessario specificare l'asse della proiezione dello spin, perché questo non è rilevante nell'esperimento.

Come abbiamo già detto, il sistema sconosciuto, che è un'ulteriore particella che indicheremo con la lettera C , si trova anch'esso fisicamente nel luogo A ed è descritto da uno stato sconosciuto $|\phi\rangle_C$.

Sebbene lo stato di singoletto implichi la possibilità di comunicazioni quantistiche tra Viola e Olivia, questo non contiene in questa fase alcuna informazione su $|\phi\rangle_C$. In effetti l'intero sistema particella sconosciuta + particelle nello stato di singoletto è in uno stato $|\psi\rangle$ fattorizzato.

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle_C \otimes |0,0\rangle_{AB}, \quad (238)$$

pertanto nessuna misura su una delle due particelle A e B o su entrambe contemporaneamente può fornire informazioni su $|\phi\rangle$. Lo stato sconosciuto della particella C può essere scritto come

$$|\phi\rangle_C = a|\uparrow\rangle_C + b|\downarrow\rangle_C \quad (239)$$

con $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Lo stato totale è quindi

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a|\uparrow\rangle_C + b|\downarrow\rangle_C) \otimes (|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B). \quad (240)$$

Questo stato, sebbene fattorizzato, è entangled, infatti uno stato totalmente separabile per tre particelle deve essere il prodotto tensoriale di tre rispettive stati, cosa che $|\psi\rangle$ non è. Vediamo ora come l'entanglement possa venire sfruttato per il teletrasporto.

Per prima cosa definiamo i quattro autostati di Bell per la coppia di particelle A e C , che sono entrambe nelle mani di Viola come segue

$$\begin{aligned} |\alpha^{(\pm)}\rangle_{AC} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_C \pm |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_C), \\ |\beta^{(\pm)}\rangle_{AC} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_C \pm |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_C). \end{aligned} \quad (241)$$

Se confrontiamo con (215) ci rendiamo subito conto che gli stati $|\alpha^{(\pm)}\rangle_{AC}$ sono combinazioni lineari degli stati di tripletto $|1, +1\rangle_{AC}$ e $|1, -1\rangle_{AC}$, lo stato $|\beta^{(+)}\rangle_{AC}$ è lo stato di tripletto $|1, 0\rangle_{AC}$ e infine lo stato $|\beta^{(-)}\rangle_{AC}$ è lo stato di singoletto $|0, 0\rangle_{AC}$. Questi stati formano una base ortonormale come si può facilmente verificare e sono gli stati di massimo entanglement tra gli spin delle particelle A e C .

Possiamo facilmente invertire queste uguaglianze ed esprimere la base $|\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_C$, $|\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_C$, $|\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_C$, $|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_C$ come combinazione lineare delle $|\alpha^{(\pm)}\rangle_{AC}$, $|\beta^{(\pm)}\rangle_{AC}$ e sostituire nella (240), ottenendo

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{2} \left[|\alpha^{(+)}\rangle_{AC} (-b|\uparrow\rangle_B + a|\downarrow\rangle_B) + |\alpha^{(-)}\rangle_{AC} (b|\uparrow\rangle_B + a|\downarrow\rangle_B) + \right. \\ &\quad \left. + |\beta^{(+)}\rangle_{AC} (-a|\uparrow\rangle_B + b|\downarrow\rangle_B) + |\beta^{(-)}\rangle_{AC} (a|\uparrow\rangle_B + b|\downarrow\rangle_B) \right]. \end{aligned} \quad (242)$$

Se Viola esegue una misura per stabilire in quale dei quattro di Bell si trova la coppia di particelle A e C che sono nelle sue mani, il risultato è indipendente dallo stato sconosciuto $|\phi\rangle_C$ e ciascuno dei quattro risultati possibili della misura si verifica con probabilità $1/4$. Quindi, in seguito alla misura di Viola, la particella B di Olivia viene proiettata con uguale probabilità $1/4$ in uno dei

quattro stati puri sovrapposti della (242), che sono rispettivamente

$$\begin{aligned}
 & -b|\uparrow\rangle_B + a|\downarrow\rangle_B, \\
 & b|\uparrow\rangle_B + a|\downarrow\rangle_B, \\
 & -a|\uparrow\rangle_B + b|\downarrow\rangle_B, \\
 & a|\uparrow\rangle_B + b|\downarrow\rangle_B = |\phi\rangle_B.
 \end{aligned} \tag{243}$$

Facciamo una prima considerazione, finché Viola non manda una comunicazione classica a Olivia, quest'ultima non sa in quale di questi quattro stati è stata proiettata la sua particella. Se valuta qual è la probabilità che essa sia con spin up deve tener conto che ognuno dei quattro stati qui sopra ha probabilità $1/4$ e poi che per il primo e secondo stato la probabilità di spin up è $|b|^2$ e per il terzo e quarto è $|a|^2$. Quindi $|b|^2/4 + |b|^2/4 + |a|^2/4 + |a|^2/4 = (|a|^2 + |b|^2)/2 = 1/2$, in altre parole si ritrova con la stessa informazione che aveva prima della misura effettuata da Viola. Questo a ulteriore conferma che non ci può essere trasferimento istantaneo di informazioni.

Viola manda un whatsapp a Olivia informandola del risultato della sua misura e almeno in un caso, quello in cui Viola ha trovato la sua coppia di particelle nello stato $|\beta^{(-)}\rangle_{AC}$, Olivia sa che lo stato della sua particella è $|\phi\rangle_B$ che è uno stato che era ed è sconosciuto ma che è stato trasferito dalla particella C che si trovava nel luogo A alla particella B che si trova nel luogo B :. Il teletrasporto funziona almeno in un quarto dei casi.

Ma in realtà il teletrasporto è avvenuto con successo anche nei tre casi restanti, nell'articolo del 1993 Bennet e collaboratori fanno notare che se scriviamo $|\phi\rangle_B$ nella forma

$$|\phi\rangle_B = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}_B \tag{244}$$

possiamo scrivere i primi tre stati della (243) rispettivamente come

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} |\phi\rangle_B, \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} |\phi\rangle_B, \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} |\phi\rangle_B. \tag{245}$$

Essendo in possesso dell'informazione classica fornita da Viola, Olivia può effettuare la corretta rotazione di 180° attorno rispettivamente agli assi y , x e z e convertire lo stato della particella B nell'esatta replica dello stato originale della particella C (a meno di una fase irrilevante). Nell'articolo del 1993, Bennet e collaboratori hanno anche indicato il dispositivo tecnico per poter effettuare le rotazioni nel caso di fotoni. Si noti che per effettuare la corretta rotazione Olivia ha solo bisogno di sapere qual è il risultato della misura di Viola. Lo stato $|\phi\rangle_B$ che era sconosciuto può rimanere sconosciuto.

In definitiva, il teletrasporto, almeno sulla carta, ha avuto pieno successo. Per la realizzazione sperimentale si è dovuto attendere solo quattro anni.

Gli esperimenti

Nel 1997 Bouwmeester, Pan, Mattle, Eible, Weinfurter e Zeilinger realizzano il primo esperimento di teletrasporto utilizzando lo schema proposto da Bennett *et al.* nel 1993. I ricercatori riuscirono a trasmettere lo stato di un fotone alla distanza di un metro. I risultati sono descritti nell'articolo "Experimental quantum teleportation" pubblicato nello stesso anno.

Sette anni dopo, nel 2004, Zeilinger e collaboratori pubblicano l'articolo "Quantum teleportation across the Danube" dove descrivono il loro esperimento che utilizza una fibra ottica lunga 800 metri installata in un sistema fognario pubblico situato in un tunnel sotto il fiume Danubio. Con le loro parole:

Here we describe the high-fidelity teleportation of photons over a distance of 600 meters across the River Danube in Vienna, with the optimal efficiency that can be achieved using linear optics. Our result is a step towards the implementation of a quantum repeater, which will enable pure entanglement to be shared between distant parties in a public environment and eventually on a world-wide scale.

A questo punto si innesca una competizione/collaborazione tra due gruppi, quello di Zeilinger in Austria e quello basato in Cina di Jian-Wei Pan, che era stato uno dei collaboratori di Zeilinger nel primo esperimento del 1997. La distanza del teletrasporto aumenta in maniera vertiginosa passando dai metri ai chilometri.

Nel 2012 il nutrito gruppo di scienziati cinesi della University of Science and Technology of China di Shanghai diretto da Pan posta su arXiv un articolo in cui annunciano di aver completato con successo un esperimento di teletrasporto di uno stato quantistico di fotoni a una distanza di circa 97 chilometri, superando di due ordini di grandezza il precedente primato. Pochi giorni dopo, tuttavia, il gruppo dell'Università di Vienna guidato da Anton Zeilinger replica, sempre su arXiv, con la distanza di 143 chilometri tra due picchi montuosi delle isole Canarie, superando così i colleghi di Shanghai.

Ma la corsa non si ferma qui, nel 2017 il gruppo di ricercatori diretto da Pan arriva ancora più lontano coprendo circa 500 km in verticale, da un laboratorio sulla Terra (a Ngari, in Tibet, a 5.100 metri d'altezza) al satellite Micius, lanciato nell'agosto del 2016 e posizionato in orbita eliosincrona. L'esperimento è descritto in un articolo dal titolo "Ground-to-satellite quantum teleportation" del 2017. In teoria non c'è una distanza limite: un metro oppure un milione di anni luce, non fa differenza, le difficoltà legate alla distanza sono di natura tecnica, non teorica.

Oggi si ritiene che gli esperimenti sul teletrasporto e in generale sull'entangling di particelle siano una tappa fondamentale per arrivare ai computer quantistici e alle comunicazioni quantistiche criptate. Tuttavia questo è solo l'inizio: chissà che prima o poi non si arrivi anche all'*altro teletrasporto*, quello di Star Trek per intenderci. Purtroppo l'opinione a questo proposito di Anton Zeilinger, premio Nobel per la fisica nel 2022 è chiara, con le sue parole: "an emphatic no!". L'autore di queste note preferisce tuttavia mantenere una posizione più cauta: mai dire mai.

Bibliografia

- [1] P. A. M. Dirac, *I principi della Meccanica Quantistica*, Bollati Boringhieri, 1990.
- [2] R. Feynman, R. Leighton, M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics, Volume III: Quantum Mechanics*. Basic Books, 2010.
- [3] L. D. Landau e E. M. Lifšits, *Fisica Teorica 3 - Meccanica quantistica. Teoria non relativistica*, Editori Riuniti, University Press, 2010.
- [4] T. Norsen, *Foundations of Quantum Mechanics - An Exploration of the Physical Meaning of Quantum Theory*. Springer, 2017.
- [5] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, *Can quantum mechanical description of reality be considered complete?* Physical Review **47**, 777-780, 1935.
- [6] J. S. Bell, *On the Einstein Podolsky Rosen Paradox*. Physics Vol. 1, No. 3, pp. 195-290, 1964.
- [7] J. F. Clauser, M. A. Horne. A. Shimony and R. A. Holt, *Proposed experiment to test local hidden-variable theories*. Phys. Rev. Lett. **23**, 880-884, 1969.
- [8] S. J. Freedman and F. Clauser, *Experimental test of local hidden-variable theories*. Phys. Rev. Lett. **28**, 938-941, 1972.

- [9] A. Aspect, *Proposed experiment to test the nonseparability of quantum mechanics*. Phys. Rev. D. **14**(8), 1944-1951, 1976.
- [10] A. Aspect, J. Dalibard, and G. Roger, *Experimental test of Bell's inequalities using time-varying analyzers*. Phys. Rev. Lett., **49**(25), 1804-1807, 1982.
- [11] C. H. Bennet, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, and W. K. Wootters, *Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels*. Phys. Rev. Lett. **70**, 1895, 1993.
- [12] D. Bouwmeester, J.-W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter, and A. Zeilinger. *Experimental quantum teleportation*. Nature. **390**, 575-579, 1997.
- [13] A. Zeilinger, *Dance of the Photons: Einstein, Entanglement and Quantum Teleportation* Penguin, 2023.