Tesina

Edoardo Annunziata – Scuola Superiore

42 ottobre 2015

1 Notazione bra-ket

1.1 Definizioni e proprietà

In un sistema meccanico classico, la determinazione di tutti i gradi di libertà fornisce una conoscenza completa del sistema stesso, ovvero la possibilità di calcolare lo stato del sistema in ogni istante di tempo, presente, passato o futuro. In meccanica quantistica, generalmente, ciò non è possibile: eseguendo più volte la misurazione della medesima grandezza fisica non è impossibile rilevare valori diversi. La descrizione più accurata che possiamo dare di un sistema è dunque di tipo probabilistico.

Sia \mathbb{C}^n lo spazio vettoriale dei vettori di numeri complessi $a=(a_1,a_2,...,a_n)$. Sia $\langle\cdot,\cdot\rangle$ il prodotto interno definito da:

$$\langle \alpha, \beta \rangle = \sum_{i} a_i^* b_i \tag{1}$$

Notiamo che $\mathcal{H} = (\mathbb{C}^n, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ è uno *spazio di Hilbert*. Sia $\psi \in \mathcal{H}$ un vettore. Se ψ ha norma unitaria, ovvero se

$$\langle \psi, \psi \rangle = 1$$

allora ψ rappresenta uno *stato* del sistema fisico, e lo indichiamo $|\psi\rangle$. La richiesta che ciascuno dei vettori che consideriamo abbia norma 1 sarà, come vedremo, fondamentale per l'interpretazione probabilistica degli stati quantici. Chiamiamo un vettore di questo tipo ket. Sia ora per ogni $\varphi \in \mathcal{H}$ $f_{\varphi} : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}$ la funzione tale che

$$f_{\varphi}(\psi) = \langle \varphi, \psi \rangle \tag{2}$$

È facile verificare che:

$$\forall \alpha, \beta \in \mathcal{H} \quad f_{\omega}(\alpha + \beta) = f_{\omega}(\alpha) + f_{\omega}(\beta) \tag{3}$$

$$\forall \alpha \in \mathcal{H}, \forall \lambda \in \mathbb{C} \quad f_{\varphi}(\lambda \alpha) = \lambda f_{\varphi}(\alpha) \tag{4}$$

Questo significa che per ogni scelta di φ , f_{φ} è un funzionale lineare da \mathcal{H} a \mathbb{C} ; indicheremo un funzionale lineare così costruito con la notazione $\langle \varphi |$ e lo

chiameremo bra. L'insieme di tutti i bra costituisce lo spazio duale \mathcal{H}^* di \mathcal{H} . Adottiamo le seguenti abbreviazioni sintattiche:

$$\langle \varphi | (|\psi\rangle) = (\langle \varphi |) |\psi\rangle \stackrel{def}{=} \langle \varphi | \psi\rangle$$
 (5)

La precedente notazione è, per definizione, il prodotto interno dei vettori φ e ψ , che equivale ovviamente ad un numero complesso. Considerare i bra ed i ket come entità distinte¹ ha il vantaggio di facilitare la manipolazione delle espressioni algebriche lineari.

Infatti, è facile verificare che, per linearità:

$$\langle \varphi | (c_1 | \psi_1 \rangle + c_2 | \psi_2 \rangle) = c_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle \tag{6}$$

Analogamente, secondo le usuali definizioni di somma e moltiplicazione per scalare dei funzionali lineari nello spazio duale, si ha che:

$$(c_1 \langle \varphi_1 | + c_2 \langle \varphi_2 |) | \psi \rangle = c_1 \langle \phi_1 | \psi \rangle + c_2 \langle \phi_2 | \psi \rangle \tag{7}$$

È altrettanto immediato che:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^* \tag{8}$$

Inoltre, per definizione:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \tag{9}$$

Se $|\psi\rangle$ è un ket e $\langle \varphi|$ è un bra possiamo definire un prodotto esterno², che denotiamo con $|\psi\rangle\langle\varphi|$ come l'operatore lineare tale che:

$$(|\psi\rangle\langle\varphi|)(\alpha) = \langle\varphi|\alpha\rangle|\psi\rangle \tag{10}$$

Per la definizione precedente, notiamo che:

$$(|\varphi\rangle\langle\psi|)(|\chi\rangle) = (|\varphi\rangle)(\langle\psi|\chi\rangle) \tag{11}$$

Per cui adotteremo l'abbreviazione sintattica

$$|\varphi\rangle\langle\psi|\chi\rangle$$

per entrambe. Analogamente, si deve avere

$$(\langle \varphi |) (|\psi\rangle \langle \chi |) = \langle \varphi | \psi\rangle (\langle \chi |) \tag{12}$$

perché se applicate al vettore $\langle \zeta |$ entrambe restituiscono il numero:

$$\langle \varphi | \psi \rangle \langle \chi | \zeta \rangle$$

 $^{^1\}mathrm{Questa}$ notazione è stata introdotta dal fisico teorico inglese Paul Dirac nel 1939, e viene pertanto talvolta chiamata notazione di Dirac.

²I prodotti interno ed esterno sono talvolta chiamati in letteratura con i nomi *prodotto* bra-ket e prodotto ket-bra per via dei bra e ket giustapposti utilizzati per denotarli.

Per cui ometteremo le parentesi scrivendo:

$$\langle \varphi | \psi \rangle \langle \chi |$$

Dalla (11) e dalla (12) deriva che il prodotto interno ed il prodotto esterno hanno associatività mista, ovvero:

$$\langle \varphi | (|\psi\rangle \langle \chi | \zeta\rangle) = (\langle \varphi | \psi\rangle \langle \chi |) | \zeta\rangle \tag{13}$$

1.2 Stato generico e sovrapposizione di stati

Consideriamo una grandezza fisica G la cui misurazione fornisce i valori discreti $S = \{g_1, g_2, ..., g_n\}$. È un postulato della teoria che a G sia associato un operatore \hat{G} sullo spazio \mathcal{H} , lineare ed autoaggiunto, ovvero tale che

$$\left(\left\langle \varphi\right|\hat{G}\right)\left|\psi\right\rangle = \left\langle \varphi\right|\left(\hat{G}\left|\psi\right\rangle\right) \stackrel{def}{=} \left\langle \varphi|\hat{G}|\psi\right\rangle \tag{14}$$

Notiamo che per qualsiasi operatore autoaggiunto \hat{S} deve valere:

$$\hat{S} |\psi\rangle = |\varphi\rangle \iff \langle \psi | \hat{S} = \langle \varphi | \tag{15}$$

Infatti:

$$\langle \psi | \hat{S} = \langle \varphi | \iff \langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle \iff \langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \varphi \rangle$$
 (16)

Ma interpretando $\langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle$ come $(\langle \psi | \hat{S}) | \psi \rangle$:

$$\langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle = \langle \hat{S} \psi, \psi \rangle = \langle \psi, \hat{S} \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle^*$$
 (17)

A questo punto, sostituiamo la (17) nella (16):

$$\langle \psi | \hat{S} = \langle \varphi | \iff \langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle \iff \hat{S} | \psi \rangle = | \varphi \rangle$$
 (18)

che è quello che volevamo dimostrare. Inoltre, analizzando la (17), scopriamo un altro fatto interessante, ovvero che se \hat{S} è un operatore autoaggiunto, allora $\langle \psi | S | \psi \rangle$ è un numero reale, nessun numero complesso non reale può essere infatti uguale al suo coniugato.

Con un argomento analogo possiamo dimostrare in generale che se \hat{S} è un operatore, non necessariamente autoaggiunto, allora se \hat{S}^{\dagger} è il suo aggiunto, ovvero il vettore tale che:

$$\left(\left\langle \varphi\right|\hat{S}\right)\left|\psi\right\rangle = \left\langle \varphi\right|\left(\hat{S}^{\dagger}\left|\psi\right\rangle\right) \tag{19}$$

allora:

$$\hat{S} |\psi\rangle = |\varphi\rangle \iff \langle \psi | \, \hat{S}^\dagger = \langle \varphi | \,$$
 (20)

Per il teorema spettrale, deve esistere una base B di \mathcal{H} che sia ortonormale e composta da autovettori di G. Si può supporre che G sia stato scelto

in maniera tale che gli autovalori associati agli autovettori in B siano gli elementi di S. In tal caso, indichiamo gli autovettori corrispondenti a $g_1, g_2, ..., g_n$ con $|g_1\rangle, |g_2\rangle, ..., |g_n\rangle$. Siamo autorizzati a supporre che tali autovettori siano ket perché se costituiscono una base ortonormale devono necessariamente avere norma unitaria.

Consistentemente con la loro natura di grandezze fisiche, i g_i devono essere tutti reali. Per dimostrarlo, scriviamo l'equazione agli autovalori:

$$\hat{G}|g_i\rangle = g_i|g_i\rangle \tag{21}$$

e consideriamola applicata a $\langle g_i|$. Otteniamo:

$$\langle g_i | \hat{G} | g_i \rangle = \langle g_i | g_i \rangle g_i \tag{22}$$

Ma per quanto detto prima $\langle q_i | \hat{G} | q_i \rangle \in \mathbb{R}$, quindi, siccome

$$\langle g_i|g_i\rangle=1$$

anche $g_1 \in \mathbb{R}$, come volevamo dimostrare.

Il fatto che $B=(|g_1\rangle\,,|g_2\rangle\,,...,|g_n\rangle)$ sia ortonormale si può scrivere sinteticamente come:

$$\langle g_i | g_i \rangle = \delta_{ij} \tag{23}$$

Dove:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{se} \quad i \neq j \\ 1 & \text{se} \quad i = j \end{cases}$$
 (24)

Uno stato quantico generico, espresso sotto forma di un $ket \mid \psi \rangle$, può dunque essere scritto nella forma:

$$|\psi\rangle = c_1 |g_1\rangle + c_2 |g_2\rangle + \dots = \sum_i c_i |g_i\rangle$$
 (25)

Dove i coefficienti $(c_1, c_2, ..., c_n)$ dipendono dallo stato che stiamo considerando. La (25) può essere riscritta in una maniera più suggestiva che, come vedremo, consente una singolare interpretazione dal punto di vista fisico. Prendiamo uno dei $ket |g_k\rangle$ e consideriamo il suo duale $\langle g_k|$. Applicando $\langle g_k|$ ad entrambi i termini otteniamo:

$$\langle g_k | (|\psi\rangle) = \langle g_k | (\sum_i c_i | g_i \rangle)$$
 (26)

Per la (6) abbiamo:

$$\langle g_k | \psi \rangle = \sum_i c_i \langle g_k | g_i \rangle \tag{27}$$

Che per la (23) diventa:

$$\langle g_k | \psi \rangle = c_k \tag{28}$$

A questo punto, per ogni k, sostituiamo la (28) nella (25). Abbiamo:

$$|\psi\rangle = |g_1\rangle \langle g_1|\psi\rangle + |g_2\rangle \langle g_2|\psi\rangle + \dots = \sum_i |g_i\rangle \langle g_i|\psi\rangle$$
 (29)

Possiamo ottenere una interessante conclusione applicando $\langle \psi |$ alla (29). Si ha infatti:

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{i} \langle \psi | g_i \rangle \langle g_i | \psi \rangle \tag{30}$$

Ovvero, per la (8):

$$\sum_{i} \left| \langle g_i | \psi \rangle \right|^2 = 1 \tag{31}$$

Vista la relazione di dualità intercorrente tra i ket ed i bra, possiamo aspettarci di ottenere una relazione simile alla (29) che coinvolga i bra invece dei ket. Consideriamo un bra generico $\langle \varphi |$, ed applichiamolo ad entrambi i lati dell'uguaglianza. Si ha:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_{i} \left(\langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \psi \rangle \right) \tag{32}$$

Per linearità possiamo riscrivere la precedente come:

$$\langle \varphi | (|\psi \rangle) = \left(\sum_{i} \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \right) (|\psi \rangle)$$
 (33)

Il termine in sommatoria nella (33) è un bra moltiplicato per uno scalare, dunque esso stesso un bra. Dal momento che la relazione espressa dalla (29) è generale e valida per un qualsiasi scelta di $|\psi\rangle$, anche la (33) deve valere per ogni $|\psi\rangle$. Ma questo significa che i due funzionali lineari

 $\langle \varphi |$

е

$$\sum_{i} \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i |$$

assumono il medesimo valore se applicati sullo stesso vettore, e devono pertanto essere uguali. Possiamo quindi scrivere:

$$\langle \psi | = \langle \psi | g_1 \rangle \langle g_1 | + \langle \psi | g_2 \rangle \langle g_2 | + \dots = \sum_i \langle \psi | g_i \rangle \langle g_i |$$
 (34)

Confrontando la (29) e la (34), possiamo verificare che i coefficienti di $|\psi\rangle$ nella base $B = (|g_1\rangle, |g_2\rangle, \dots |g_n\rangle)$ sono i complessi coniugati dei corrispondenti coefficienti di $\langle\psi|$ nella base duale B^* .

1.3 Interpretazione fisica del formalismo

La notazione bra-ket, oltre ad essere un utile strumento matematico, rappresenta una chiave di interpretazione del significato fisico delle predizioni della meccanica quantistica. Come già detto, un vettore rappresentato da un $ket \mid \psi \rangle$ contiene il massimo dell'informazione che possiamo conoscere riguardo ad un determinato stato.

Il numero complesso

$$\langle \varphi | \psi \rangle$$

viene interpretato come l' ampiezza di probabilità per una particella nello stato $|\psi\rangle$ di trovarsi nello stato $|\varphi\rangle$. L'ampiezza di probabilità è collegata alla probabilità in modo analogo a come sono collegate l'ampiezza e l'intensità di un'onda: la grandezza fisica immediatamente percepibile è l'intensità, ma le interazioni sono descritte in termini di ampiezza.

La probabilità di trovare una particella nello stato $\langle \varphi |$ quando viene effettuata una misurazione su una particella nello stato $\langle \psi |$ è data da:

$$\langle \varphi | \psi \rangle \langle \psi | \varphi \rangle = |\langle g_i | \psi \rangle|^2 \tag{35}$$

Notiamo che l'interpretazione data dalla (35) è consistente con la relazione formale espressa dalla (31). Infatti, se una grandezza fisica G può assumere i valori discreti $g_1, g_2, ..., g_n$, effettuando una misurazione di G su una particella nello stato $|\psi\rangle$ possiamo non essere certi del risultato che otterremo, ma di certo dovremmo misurare uno dei g_i . In altre parole, detta p_i la probabilità di ottenere il valore g_i da tale misurazione, la somma di tutti i p_i non potrà che essere 1

Un'ulteriore coincidenza con la realtà fisica si ottiene dall'analisi della (23). Difatti, una particella si trova nello stato $|g_k\rangle$ se il suo valore della grandezza G è conosciuto essere g_k . Ci aspettiamo dunque che se $i \neq j$ la probabilità di ottenere il valore g_i per G su una particella nello stato $|g_j\rangle$ sia zero, e conseguentemente sia zero la relativa ampiezza di probabilità $\langle g_i|g_j\rangle$.

Analogamente, è lecito aspettarsi che l'ampiezza di probabilità di ottenere il valore g_i per G su una particella nello stato $|g_i\rangle$ sia non-nulla. La scelta (convenzionale) di avere $\langle g_i|g_j\rangle=1$ è data dalla maggiore semplicità nel lavorare con una base ortonormale.

La visione probabilistica espressa dalla (35) suggerisce una ulteriore riflessione sul formalismo matematico che stiamo impiegando. Siano $|\psi\rangle$ e $|\psi'\rangle$ due ket che differiscono soltanto per un fattore di fase globale, in altre parole tali che:

$$|\psi'\rangle = e^{i\zeta} |\psi\rangle \tag{36}$$

Valutiamo la probabilità per una particella nello stato $|\psi\rangle$ di trovarsi nello stato $\langle\varphi|$ come:

$$\langle \varphi | \psi \rangle \langle \psi | \varphi \rangle = c^* c = |c|^2$$
 (37)

per qualche $c \in \mathbb{C}$. Sostituendo $|\psi\rangle$ con $|\psi'\rangle$ si ottiene:

$$\langle \varphi | \psi' \rangle \langle \psi' | \varphi \rangle = c^* e^{-i\zeta} c e^{i\zeta} = |c|^2 \tag{38}$$

Ovvero il medesimo valore ottenuto per $|\psi\rangle$. Dal momento che il nostro argomento non dipende dalla scelta di $\langle \varphi|$, deduciamo che due stati che differiscano soltanto per un fattore di fase globale hanno la stessa probabilità di trovarsi in qualsiasi stato: sono pertanto fisicamente indistinguibili.

La rappresentazione degli stati fisici come *ket* sarà dunque unica a meno di un fattore di fase globale.

L'interpretazione probabilistica della (35) ci consente di scrivere il valore atteso di una misurazione di G su uno stato $|\psi\rangle$, che indichiamo con $\langle G\rangle$ come:

$$\langle G \rangle = \sum_{i} g_{i} \left| \langle g_{i} | \psi \rangle \right|^{2} \tag{39}$$

Possiamo anche vedere che se G è una grandezza osservabile ed \hat{G} è l'operatore associato a quella osservabile, allora il valore atteso $\langle G \rangle$ si può scrivere come

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

Infatti, possiamo scrivere:

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \left(\sum_{i} c_{i}^{*} \langle g_{i} | \right) \hat{A} \left(\sum_{i} c_{i} | g_{i} \rangle \right)$$

$$(40)$$

Da cui, dal momento che i vari g_i sono autovettori di G:

$$\left(\sum c_i^* \langle a_1|\right) \left(\sum c_i g_i |g_i\rangle\right) \tag{41}$$

che è uguale a:

$$\sum |c_i|^2 = \langle G \rangle \tag{42}$$

Ovvero esattamente quello che volevamo determinare.

Scriveremo inoltre l'*incertezza* di G, che indichiamo con ΔG , come la deviazione standard delle misurazioni. Dunque abbiamo:

$$(\Delta G)^2 = \langle (G - \langle G \rangle)^2 \rangle \tag{43}$$

Ovvero:

$$(\Delta G)^{2} = \left\langle G^{2} - 2G \left\langle G \right\rangle + \left\langle G \right\rangle^{2} \right\rangle \tag{44}$$

Da cui:

$$(\Delta G)^{2} = \langle G^{2} \rangle - 2 \langle G \rangle \langle G \rangle + \langle G^{2} \rangle^{2}$$

$$(45)$$

Infine:

$$(\Delta G) = \sqrt{\langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2} \tag{46}$$

2 Forme matriciali e operatori

2.1 Rappresentazione vettoriale degli stati

Come abbiamo visto precedentemente, uno stato arbitrario $|\psi\rangle$ può essere scritto nella forma:

$$|\psi\rangle = |g_1\rangle \langle g_1|\psi\rangle + |g_2\rangle \langle g_2|\psi\rangle + \dots = \sum_i |g_i\rangle \langle g_i|\psi\rangle$$

Analogamente a come i vettori di un qualsiasi spazio vettoriale possono essere scritti, una volta scelta una base, esclusivamente in funzione dei loro coefficienti, possiamo fissare la base $B=(|g_1\rangle\,,|g_2\rangle\,,\dots\,|g_n\rangle)$ e rappresentare un ket $|\psi\rangle$ con una matrice colonna:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \\ \langle g_2 | \psi \rangle \\ \langle g_3 | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \end{pmatrix}$$

$$(47)$$

Essendo B una base ortonormale, evidentemente si avrà che per ciascuno dei componenti della base $|g_k\rangle$:

$$|g_{k}\rangle = \begin{pmatrix} \langle g_{1}|g_{k}\rangle \\ \langle g_{2}|g_{k}\rangle \\ \langle g_{3}|g_{k}\rangle \\ \dots \\ \langle g_{n}|g_{k}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{1k} \\ \delta_{2k} \\ \delta_{3k} \\ \dots \\ \delta_{nk} \end{pmatrix} = e_{k}$$

$$(48)$$

È possibile rappresentare in maniera analoga un bra? Una scelta naturale della base è la base duale di B, B^* . Infatti, come abbiamo determinato dal raffronto delle (29), (34) i coefficienti di $\langle \psi |$ in B^* saranno i complessi coniugati dei coefficienti di $|\psi\rangle$ in B. È però più conveniente rappresentare i bra come matrici riga. Scrivendo:

$$\langle \varphi | = (\langle \varphi | g_1 \rangle \langle \varphi | g_2 \rangle \langle \varphi | g_3 \rangle \dots \langle \varphi | g_n \rangle)$$
 (49)

Possiamo rappresentare il prodotto interno $\langle \varphi | \psi \rangle$ come prodotto della matrice riga che rappresenta $\langle \varphi |$ e della matrice colonna che rappresenta $| \psi \rangle$, richiedendo ovviamente che la prima sia espressa in base B^* e la seconda in base B:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \langle \varphi | g_1 \rangle & \langle \varphi | g_2 \rangle & \langle \varphi | g_3 \rangle & \dots & \langle \varphi | g_n \rangle \end{pmatrix}_{B^*} \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \\ \langle g_2 | \psi \rangle \\ \langle g_3 | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \end{pmatrix}_B$$
(50)

È facile verificare che il prodotto tra le due matrici nella (50) è uguale per definizione al prodotto interno $\langle \varphi, \psi \rangle$ definito nella (1).

La (47) e la (49) ci consentono di scrivere anche il prodotto esterno definito nella (10) in maniera analoga come:

$$|\psi\rangle\langle\varphi| = \begin{pmatrix} \langle g_1|\psi\rangle \\ \langle g_2|\psi\rangle \\ \langle g_3|\psi\rangle \\ \dots \\ \langle g_n|\psi\rangle \end{pmatrix}_B \left(\langle \varphi|g_1\rangle \langle \varphi|g_2\rangle \langle \varphi|g_3\rangle \dots \langle \varphi|g_n\rangle\right)_{B^*}$$
(51)

Svolgendo il prodotto ad RHS nella (51) otteniamo, come lecito aspettarsi da un operatore lineare, una matrice $M \in \mathbb{C}^{n \times n}$:

$$M_{ij} = \langle g_i | \psi \rangle \langle \varphi | g_j \rangle \tag{52}$$

Per verificare la consistenza di questa notazione, consideriamo un vettore $|\zeta\rangle$ e calcoliamo $M\,|\zeta\rangle$:

$$M |\zeta\rangle = \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \sum_i \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \alpha \rangle \\ \dots \\ \langle g_k | \psi \rangle \sum_i \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \alpha \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \sum_i \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \alpha \rangle \end{pmatrix}$$

$$(53)$$

La somma

$$\sum_{i} \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \alpha \rangle \tag{54}$$

si riscrive per linearità come

$$\langle \varphi | \sum_{i} |g_{i}\rangle \langle g_{i} | \alpha \rangle$$
 (55)

Ma per la (29) si deve avere

$$\sum_{i} |g_{i}\rangle \langle g_{i}|\alpha\rangle = |\alpha\rangle \tag{56}$$

Quindi la (55) diventa

$$\sum_{i} \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \alpha \rangle = \langle \varphi | \alpha \rangle \tag{57}$$

Sostituendo la (57) nella (53):

$$M |\zeta\rangle = \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \langle \varphi | \alpha \rangle \\ \dots \\ \langle g_k | \psi \rangle \langle \varphi | \alpha \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \langle \varphi | \alpha \rangle \end{pmatrix} = \langle \varphi | \alpha \rangle \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle g_k | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \end{pmatrix}$$
(58)

Quest'ultima si riscrive come:

$$M \left| \zeta \right\rangle = \left\langle \varphi \middle| \alpha \right\rangle \left| \psi \right\rangle \tag{59}$$

la quale conferma che M si comporta effettivamente come l'operatore prodotto esterno definito nella (10).

Più in generale, consideriamo il problema della rappresentazione in forma matriciale di un operatore lineare autoaggiunto \hat{A} . Scriviamo l'equazione generica:

$$\hat{A} |\psi\rangle = |\phi\rangle \tag{60}$$

Come già ampiamente giustificato, data una base $B=(g_1,g_2,...,g_n)$ possiamo scrivere:

$$|\psi\rangle = \sum_{i} |g_{i}\rangle \langle g_{i}|\psi\rangle \tag{61}$$

Sostituendo la precedente nella (60):

$$\hat{A}\left(\sum_{i}|g_{i}\rangle\langle g_{i}|\psi\rangle\right) = |\varphi\rangle\tag{62}$$

Applicando un $\langle g_k|$:

$$\left(\sum_{i} \langle g_k | \hat{A} | g_i \rangle \langle g_i | \psi \rangle\right) = \langle g_k | \varphi \rangle \tag{63}$$

La (63) si può riscrivere come:

$$M \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \\ \langle g_2 | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle g_1 | \varphi \rangle \\ \langle g_2 | \varphi \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \varphi \rangle \end{pmatrix}$$
(64)

Dove

$$M_{ij} = \langle g_i | \hat{A} | g_j \rangle \tag{65}$$

Ma

$$\begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \\ \langle g_2 | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \end{pmatrix} = | \psi \rangle \tag{66}$$

 \mathbf{e}

$$\begin{pmatrix} \langle g_1 | \varphi \rangle \\ \langle g_2 | \varphi \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \varphi \rangle \end{pmatrix} = | \varphi \rangle \tag{67}$$

Abbiamo dunque dedotto che un generico operatore autoaggiunto \hat{A} può essere scritto come una matrice

$$M_{ij} = \langle g_i | \hat{A} | g_j \rangle \tag{68}$$

Possiamo trovare anche un altro interessante risultato. Infatti, per quanto stabilito nella (15), se \hat{A} è autoaggiunto e soddisfa:

$$\hat{A} | \psi \rangle = | \varphi \rangle$$

deve necessariamente valere anche:

$$\langle \psi | \hat{A} = \langle \varphi |$$

Prendiamo ora il prodotto della prima con $\langle \chi |$:

$$\langle \chi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle \tag{69}$$

E il prodotto della seconda con $|\chi\rangle$:

$$\langle \psi | \hat{A} | \chi \rangle \tag{70}$$

Ora siccome $\langle \chi | \varphi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle^*$ abbiamo

$$\langle \psi | \hat{A} | \chi \rangle = \langle \chi | \hat{A} | \psi \rangle^*$$
 (71)

Dal momento che la (71) vale per ogni scelta di $(\langle \chi |, \langle \psi |)$, vale in particolare per due generici stati (g_i, g_j) , abbiamo dunque:

$$\langle g_i | \hat{A} | g_j \rangle = \langle g_j | \hat{A} | g_i \rangle^*$$
 (72)

Essendo i due termini esattamente gli elementi delle matrici associate, deduciamo che la rappresentazione matriciale di un operatore autoaggiunto è uguale alla sua coniugata trasposta, consistentemente con la nomenclatura impiegata dall'algebra lineare.

2.2 Operatori identità e proiezione

Sia $|\psi\rangle$ scritto nella base $B=(g_1,g_2,...,g_n)$. Assumiamo il corrispondente $\langle\psi|$ scritto nella base B^* . Per ogni k consideriamo l'operatore

$$\hat{P}_k = |g_k\rangle \langle g_k|$$

È facile calcolare:

$$\hat{P}_k |\psi\rangle = |g_k\rangle \langle g_k| \sum_i |g_i\rangle \langle g_i|\psi\rangle$$
 (73)

Infatti, portando $|g_k\rangle\langle g_k|$ nella sommatoria si ha:

$$\hat{P}_k |\psi\rangle = \sum_i |g_k\rangle \langle g_k | g_i\rangle \langle g_i | \psi\rangle \tag{74}$$

Ovvero:

$$\hat{P}_k |\psi\rangle = \sum_i \delta_{ki} |g_k\rangle \langle g_i | \psi\rangle = |g_k\rangle \langle g_k | \psi\rangle \tag{75}$$

In maniera completamente analoga possiamo calcolare:

$$\langle \psi | \hat{P}_k = \langle \psi | g_k \rangle \langle g_k |$$
 (76)

Abbiamo mostrato che \hat{P}_k estrae la componente di $|\psi\rangle$ lungo $|g_k\rangle$ (o la componente di $\langle\psi|$ lungo $\langle g_k|$ nel caso duale): lo chiameremo quindi operatore proiezione. Consideriamo ora la definizione di \hat{P}_k

$$\hat{P}_k = |q_k\rangle \langle q_k|$$

e sommiamola su k. Otteniamo:

$$\sum_{i} \hat{P}_{k} = \sum_{i} |g_{k}\rangle \langle g_{k}| \tag{77}$$

Applichiamo ora ad entrambe le parti dell'uguaglianza un vettore $|\psi\rangle$:

$$\left(\sum_{i} \hat{P}_{k}\right) |\psi\rangle = \sum_{i} |g_{k}\rangle \langle g_{k}|\psi\rangle \tag{78}$$

RHS della (78) è, per la (29), il vettore $|\psi\rangle$:

$$\left(\sum_{i} \hat{P}_{k}\right) |\psi\rangle = |\psi\rangle \tag{79}$$

Dalla (79) deduciamo che l'operatore $\left(\sum_{i} \hat{P}_{k}\right)$ lascia immutato il ket a cui viene applicato. Analoghi calcoli ci portano a scrivere:

$$\langle \psi | \left(\sum_{i} \hat{P}_{k} \right) = \langle \psi | \tag{80}$$

da cui si osserva che la medesima relazione vale per i bra. $\left(\sum_{i} \hat{P}_{k}\right)$ è pertanto l'operatore identità, che indichamo con $\hat{1}$:

$$\hat{1} = \left(\sum_{i} \hat{P}_{k}\right) = \sum_{i} |g_{k}\rangle \langle g_{k}|$$

Le rappresentazioni matriciali dei ket e dei bra che abbiamo dato precedentemente, ci consentono di scrivere facilmente anche gli operatori proiezione ed identità sotto forma di matrice. Scrivendo infatti la (51) con $|\psi\rangle = |g_k\rangle$, $\langle \varphi| = \langle g_k|$ abbiamo:

$$|g_{k}\rangle\langle g_{k}| = \begin{pmatrix} \langle g_{1}|g_{k}\rangle\langle g_{k}|g_{1}\rangle & \langle g_{1}|g_{k}\rangle\langle g_{k}|g_{2}\rangle & \dots & \langle g_{1}|g_{k}\rangle\langle g_{k}|g_{n}\rangle \\ \langle g_{2}|g_{k}\rangle\langle g_{k}|g_{1}\rangle & \ddots & & & \\ \vdots & & & & & \\ \langle g_{n}|g_{k}\rangle\langle g_{k}|g_{1}\rangle & & & \langle g_{n}|g_{k}\rangle\langle g_{k}|g_{n}\rangle \end{pmatrix}$$
(81)

ovvero la matrice che vale 0 ovunque, 1 sul k-esimo elemento della diagonale principale. Quindi,

$$\hat{P}_{1} = \begin{pmatrix}
1 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0
\end{pmatrix}, \quad \dots, \quad \hat{P}_{n} = \begin{pmatrix}
0 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1
\end{pmatrix}$$
(82)

L'operatore identità può allora essere scritto semplicemente come:

$$\hat{1} = \sum_{k} \hat{P}_{k} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix} = I_{n}$$
 (83)

3 Particelle di spin $\frac{1}{2}$

3.1 Esperimenti di Stern-Gerlach

Avendo stabilito un formalismo matematico che ci consenta di operare sui fenomeni fisici, passiamo a considerare alcuni casi semplici. Nel 1922, Otto Stern e Walther Gerlach effettuarono un esperimento che fornì evidenza diretta di uno degli strani fenomeni osservabili nel mondo microscopico. L'apparato sperimentale era costituito da un forno in cui veniva fatto evaporare argento,

facendo uscire un fascio di particelle da un foro praticato sulla superficie. Il fascio veniva fatto passare attraverso un magnete con il campo orientato lungo l'asse z, e veniva poi analizzata la distribuzione del momento angolare di spin lungo l'asse z, S_z . Secondo le predizioni della fisica classica, dovremmo osservare una distribuzione continua di valori per S_z , ma le misurazioni rilevarono invece che i valori assunti erano soltanto due, $+\hbar/2$ e $-\hbar/2$. Essendo S_z una grandezza fisica che assume valori discreti, possiamo modellare una particella di spin $\frac{1}{2}$ secondo il formalismo descritto fino a questo punto. Indicheremo gli stati

$$|S_z = +\hbar/2\rangle$$
 $|S_z = -\hbar/2\rangle$

con, rispettivamente:

 (\ldots)

$$|+z\rangle$$
 $|-z\rangle$

Possiamo quindi, ad esempio, scrivere uno stato generico $|\psi\rangle$ di una particella come:

$$|\psi\rangle = |+z\rangle \langle +z|\psi\rangle + |-z\rangle \langle -z|\psi\rangle$$
 (84)

3.2 Operatori di rotazione

Supponiamo di considerare una particella che possieda spin $S_z = +\hbar/2$. Possiamo ruotarla sul piano xz in maniera tale che al termine dell'operazione lo spin sia orientato sull'asse x, ovvero la particella sia diventata tale da avere $S_x = +\hbar/2$. Consideriamo dunque un operatore di rotazione $\hat{R}(\frac{\pi}{2}j)$, che agisce sul $ket \mid +z \rangle$ in maniera tale che:

$$|+x\rangle = \hat{R}(\frac{\pi}{2}j)|+z\rangle$$
 (85)

Per la (20) abbiamo anche:

$$\langle +x| = \langle +z| \, \hat{R}^{\dagger}(\frac{\pi}{2}j) \tag{86}$$

Notiamo che $\hat{R}(\frac{\pi}{2}j)$ non è autoaggiunto, infatti se fosse $\hat{R}(\frac{\pi}{2}j)=\hat{R}^{\dagger}(\frac{\pi}{2}j)$ dovremmo avere:

$$1 = \langle +x|+x \rangle = \left(\langle +z|\,\hat{R}(\frac{\pi}{2}j)\right)\left(\hat{R}(\frac{\pi}{2}j)\right) = \langle +z|\hat{R}(\frac{\pi}{2}j)\hat{R}(\frac{\pi}{2}j)|+z\rangle \tag{87}$$

Ma se $\hat{R}(\frac{\pi}{2}j)$ effettua una rotazione di 90 gradi attorno all'asse y, allora applicato due volte effettuerà una rotazione di 180 gradi. Allora:

$$1 = \langle +z | \hat{R}(\pi j) | +z \rangle \tag{88}$$

Dal momento che stiamo parlando di rotazioni sul piano xy,

$$\hat{R}(\pi j) |+z\rangle = |-z\rangle \tag{89}$$

che, sostituita nella (88) ci porta a:

$$1 = \langle +z|-z\rangle = 0 \tag{90}$$

che è assurdo.

Applicando la (85) e la (86), possiamo scrivere:

$$1 = \langle +x|+x\rangle = \left(\langle +z|\,\hat{R}^{\dagger}(\frac{\pi}{2}j)\right)\left(\hat{R}(\frac{\pi}{2}j)\,|+z\rangle\right) = \langle +z|+z\rangle = 1 \tag{91}$$

Da cui deduciamo che l'operatore di rotazione è l'inverso del suo aggiunto. In altre parole, se $\hat{R}(\frac{\pi}{2}j)$ esegue una rotazione intorno all'asse y di 90 gradi in senso orario, $\hat{R}^{\dagger}(\frac{\pi}{2}j)$ compie la medesima rotazione in senso antiorario.

3.3 Generatore di rotazioni

Consideriamo ora rotazioni attorno all'asse z. Supponiamo inoltre di effettuare una rotazione di un angolo infinitesimo $d\vartheta$. Una maniera più utile di esprimere l'operatore di rotazione infinitesimale è la seguente:

$$\hat{R}(d\vartheta k) = 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_z d\vartheta \tag{92}$$

Dove abbiamo introdotto un nuovo operatore \hat{J}_z a cui richiediamo ovviamente di essere tale da rendere RHS nella (93) tendente a 1 per $d\vartheta$ che tende a 0. Dimostreremo ora che l'operatore \hat{J}_z è autoaggiunto. Prendendo la forma aggiunta della precedente, possiamo scrivere:

$$\hat{R}^{\dagger}(d\vartheta k) = 1 + \frac{i}{\hbar}\hat{J}_{z}^{\dagger}d\vartheta \tag{93}$$

dove, secondo la usuale convenzione, denotiamo \hat{J}_z^{\dagger} l'operatore aggiunto di \hat{J}_z . L'operatore di rotazione deve necessariamente soddisfare:

$$1 = \hat{R}^{\dagger}(d\vartheta k)\hat{R}(d\vartheta k) = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{J}_{z}^{\dagger}d\vartheta\right)\left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{J}_{z}d\vartheta\right)$$
(94)

Svolgendo:

$$1 + \frac{i}{\hbar} \left(\hat{J}_z^{\dagger} - \hat{J}_z \right) d\vartheta + O(d\vartheta^2) = 1 \tag{95}$$

Dal momento che $d\vartheta$ è infinitesimo, possiamo ignorare termini di ordine superiore al primo, la (95) è dunque soddisfatta solo per $\hat{J}_z = \hat{J}_z^{\dagger}$. Avendo descritto una rotazione di un angolo infinitesimo $d\vartheta$, possiamo scrivere rotazioni per ogni angolo finito ϑ come somma di un numero infinito di rotazioni infinitesime usando:

$$d\vartheta = \lim_{N \to +\infty} \frac{\vartheta}{N}$$

Possiamo quindi riscrivere l'operatore di rotazione $\hat{R}(\vartheta k)$ come:

$$\hat{R}(\vartheta k) = \lim_{N \to +\infty} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\vartheta}{N} \right) \right]^N \tag{96}$$

Espandendo RHS in serie di Taylor, possiamo stabilire infine:

$$\hat{R}(\vartheta k) = e^{-i\hat{J}_z\vartheta/\hbar} \tag{97}$$

Potremmo chiederci ora quale sia l'effetto di una rotazione intorno all'asse z del $ket \mid +z \rangle$. Fisicamente, l'effetto di una tale rotazione è evidente: esattamente come un vettore fatto ruotare attorno ad uno stato parallelo a quest'ultimo, lo stato deve rimanere invariato. Come abbiamo discusso precedentemente, due stati che differiscano solamente per un fattore di fase sono considerati identici, dunque ci aspettiamo che valga la seguente relazione:

$$\hat{R}(\vartheta k) |+z\rangle = e^{i\zeta} |+z\rangle \tag{98}$$

Mostreremo che la precedente è valida solo se

$$\hat{J}_z |+z\rangle = c |+z\rangle \tag{99}$$

dove c è una costante, ovvero se $|+z\rangle$ è un autovettore di \hat{J}_z . Espandendo l'esponenziale nella (97) in serie di Taylor si ha:

$$\hat{R}(\vartheta k) |+z\rangle = \left(1 - \frac{i\vartheta \hat{J}_z}{\hbar} + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i\vartheta \hat{J}_z}{\hbar}\right)^2 + \dots\right) |+z\rangle \tag{100}$$

Supponiamo per assurdo che la (99) sia falsa. Dunque, \hat{J}_z deve essere diverso da $c \mid +z \rangle$, ovvero deve contenere un termine diverso da $\mid +z \rangle$, ad esempio $\mid +x \rangle$. Ma allora i primi due termini della successione risulterebbero valere $\mid +z \rangle$ più un termine in $\mid +x \rangle$, che non può essere eliminato perchè termini che contengono potenze diverse di ϑ sono linearmente indipendenti tra loro.