

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 $a = (a_1, a_2, \dots, a_n)$. Sia $\langle \cdot, \cdot \rangle$ il prodotto interno definito da:

$$\langle \alpha, \beta \rangle = \sum_i a_i^* b_i \quad (1)$$

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 $\varphi \in \mathcal{H}$ $f_\varphi : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}$ la funzione tale che

$$f_\varphi(\psi) = \langle \varphi, \psi \rangle \quad (2)$$

È facile verificare che:

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

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

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:

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

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 distinte ¹ ha il vantaggio di facilitare la manipolazione delle espressioni algebriche lineari.

Infatti, è facile verificare che, per linearità:

$$\langle \varphi | (c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle) = c_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle \quad (6)$$

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

$$(c_1 \langle \varphi_1 | + c_2 \langle \varphi_2 |) |\psi\rangle = c_1 \langle \varphi_1 | \psi \rangle + c_2 \langle \varphi_2 | \psi \rangle \quad (7)$$

È altrettanto immediato che:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^* \quad (8)$$

Inoltre, per definizione:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (9)$$

Se $|\psi\rangle$ è un *ket* e $\langle \varphi |$ è un *bra* possiamo definire un prodotto esterno ², che denotiamo con $|\psi\rangle \langle \varphi |$ come l'operatore lineare tale che:

$$(|\psi\rangle \langle \varphi |) (\alpha) = \langle \varphi | \alpha \rangle |\psi\rangle \quad (10)$$

Per la definizione precedente, notiamo che:

$$(|\varphi\rangle \langle \psi |) (|\chi\rangle) = (|\varphi\rangle) (\langle \psi | \chi \rangle) \quad (11)$$

Per cui adotteremo l'abbreviazione sintattica

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

per entrambe. Analogamente, si deve avere

$$(\langle \varphi |) (|\psi\rangle \langle \chi |) = \langle \varphi | \psi \rangle (\langle \chi |) \quad (12)$$

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

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

¹Questa 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:

$$\langle \varphi | (| \psi \rangle \langle \chi | \zeta) \rangle = (\langle \varphi | \psi \rangle \langle \chi |) | \zeta \rangle \quad (13)$$

1.2 Stato generico e sovrapposizione di stati

Consideriamo una grandezza fisica G la cui misurazione fornisce i valori discreti $S = \{g_1, g_2, \dots, g_n\}$. È un postulato della teoria che a G sia associato un operatore \hat{G} sullo spazio \mathcal{H} , lineare ed autoaggiunto. 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, \dots, g_n con $|g_1\rangle, |g_2\rangle, \dots, |g_n\rangle$. Siamo autorizzati a supporre che tali autovettori siano *ket* perché se costituiscono una base ortonormale devono necessariamente avere norma unitaria. Il fatto che $B = (|g_1\rangle, |g_2\rangle, \dots, |g_n\rangle)$ sia ortonormale si può scrivere sinteticamente come:

$$\langle g_i | g_j \rangle = \delta_{ij} \quad (14)$$

Dove:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq j \\ 1 & \text{se } i = j \end{cases} \quad (15)$$

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

$$|\psi\rangle = c_1 |g_1\rangle + c_2 |g_2\rangle + \dots = \sum_i c_i |g_i\rangle \quad (16)$$

Dove i coefficienti (c_1, c_2, \dots, c_n) dipendono dallo stato che stiamo considerando. La (16) 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:

$$\langle g_k | (|\psi\rangle) = \langle g_k | \left(\sum_i c_i |g_i\rangle \right) \quad (17)$$

Per la (6) abbiamo:

$$\langle g_k | \psi \rangle = \sum_i c_i \langle g_k | g_i \rangle \quad (18)$$

Che per la (14) diventa:

$$\langle g_k | \psi \rangle = c_k \quad (19)$$

A questo punto, per ogni k , sostituiamo la (19) nella (16). Abbiamo:

$$|\psi\rangle = |g_1\rangle \langle g_1 | \psi \rangle + |g_2\rangle \langle g_2 | \psi \rangle + \dots = \sum_i |g_i\rangle \langle g_i | \psi \rangle \quad (20)$$

Possiamo ottenere una interessante conclusione applicando $\langle \psi |$ alla (20). Si ha infatti:

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi | g_i \rangle \langle g_i | \psi \rangle \quad (21)$$

Ovvero, per la (8):

$$\sum_i |\langle g_i | \psi \rangle|^2 = 1 \quad (22)$$

Vista la relazione di dualità intercorrente tra i *ket* ed i *bra*, possiamo aspettarci di ottenere una relazione simile alla (20) che coinvolga i *bra* invece dei *ket*. Consideriamo un *bra* generico $\langle \varphi |$, ed applichiamo ad entrambi i lati dell'uguaglianza. Si ha:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_i (\langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \psi \rangle) \quad (23)$$

Per linearità possiamo riscrivere la precedente come:

$$\langle \varphi | (|\psi\rangle) = \left(\sum_i \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \right) (|\psi\rangle) \quad (24)$$

Il termine in sommatoria nella (24) è un *bra* moltiplicato per uno scalare, dunque esso stesso un *bra*. Dal momento che la relazione espressa dalla (20) è generale e valida per un qualsiasi scelta di $|\psi\rangle$, anche la (24) deve valere per ogni $|\psi\rangle$. Ma questo significa che i due funzionali lineari

$$\langle \varphi |$$

e

$$\sum_i \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i |$$

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

$$\langle \psi | = \langle \psi | g_1 \rangle \langle g_1 | + \langle \psi | g_2 \rangle \langle g_2 | + \dots = \sum_i \langle \psi | g_i \rangle \langle g_i | \quad (25)$$

Confrontando la (20) e la (25), 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* $|\psi\rangle$ 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 $|\psi\rangle$ è data da:

$$\langle\varphi|\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = |\langle\varphi|\psi\rangle|^2 \quad (26)$$

Notiamo che l'interpretazione data dalla (26) è consistente con la relazione formale espressa dalla (22). Infatti, se una grandezza fisica G può assumere i valori discreti g_1, g_2, \dots, 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 (14). 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.

L'interpretazione probabilistica della (26) ci consente di scrivere il *valore atteso* di una misurazione di G su uno stato $|\psi\rangle$, che indichiamo con $\langle G\rangle$ come:

$$\langle G\rangle = \sum_i g_i |\langle g_i|\psi\rangle|^2 \quad (27)$$

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

$$(\Delta G)^2 = \langle (G - \langle G\rangle)^2 \rangle \quad (28)$$

Ovvero:

$$(\Delta G)^2 = \langle G^2 - 2G \langle G \rangle + \langle G \rangle^2 \rangle \quad (29)$$

Da cui:

$$(\Delta G)^2 = \langle G^2 \rangle - 2 \langle G \rangle \langle G \rangle + \langle G \rangle^2 \quad (30)$$

Infine:

$$(\Delta G) = \sqrt{\langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2} \quad (31)$$

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:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle g_1|\psi\rangle \\ \langle g_2|\psi\rangle \\ \langle g_3|\psi\rangle \\ \dots \\ \langle g_n|\psi\rangle \end{pmatrix} \quad (32)$$

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

$$|g_k\rangle = \begin{pmatrix} \langle g_1|g_k\rangle \\ \langle g_2|g_k\rangle \\ \langle g_3|g_k\rangle \\ \dots \\ \langle g_n|g_k\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{1k} \\ \delta_{2k} \\ \delta_{3k} \\ \dots \\ \delta_{nk} \end{pmatrix} = e_k \quad (33)$$

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 (20), (25) 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:

$$\langle\varphi| = (\langle\varphi|g_1\rangle \quad \langle\varphi|g_2\rangle \quad \langle\varphi|g_3\rangle \quad \dots \quad \langle\varphi|g_n\rangle) \quad (34)$$

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 :

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \left(\begin{array}{cccc} \langle \varphi | g_1 \rangle & \langle \varphi | g_2 \rangle & \langle \varphi | g_3 \rangle & \dots & \langle \varphi | g_n \rangle \end{array} \right)_{B^*} \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \\ \langle g_2 | \psi \rangle \\ \langle g_3 | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \end{pmatrix}_B \quad (35)$$

È facile verificare che il prodotto tra le due matrici nella (35) è uguale per definizione al prodotto interno $\langle \varphi, \psi \rangle$ definito nella (1).

La (32) e la (34) ci consentono di scrivere anche il prodotto esterno definito nella (10) in maniera analoga come:

$$|\psi\rangle \langle \varphi| = \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \\ \langle g_2 | \psi \rangle \\ \langle g_3 | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \end{pmatrix}_B \left(\begin{array}{cccc} \langle \varphi | g_1 \rangle & \langle \varphi | g_2 \rangle & \langle \varphi | g_3 \rangle & \dots & \langle \varphi | g_n \rangle \end{array} \right)_{B^*} \quad (36)$$

Svolgendo il prodotto ad RHS nella (36) otteniamo, come lecito aspettarsi da un operatore lineare, una matrice $M \in \mathbb{C}^{n \times n}$:

$$M_{ij} = \langle g_i | \psi \rangle \langle \varphi | g_j \rangle \quad (37)$$

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

$$M |\zeta\rangle = \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \sum_i \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \alpha \rangle \\ \dots \\ \langle g_k | \psi \rangle \sum_i \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \alpha \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \sum_i \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \alpha \rangle \end{pmatrix} \quad (38)$$

La somma

$$\sum_i \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \alpha \rangle \quad (39)$$

si riscrive per linearità come

$$\langle \varphi | \sum_i |g_i\rangle \langle g_i| \alpha \rangle \quad (40)$$

Ma per la (20) si deve avere

$$\sum_i |g_i\rangle \langle g_i| \alpha\rangle = |\alpha\rangle \quad (41)$$

Quindi la (40) diventa

$$\sum_i \langle \varphi | g_i \rangle \langle g_i | \alpha \rangle = \langle \varphi | \alpha \rangle \quad (42)$$

Sostituendo la (42) nella (38):

$$M |\zeta\rangle = \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \langle \varphi | \alpha \rangle \\ \dots \\ \langle g_k | \psi \rangle \langle \varphi | \alpha \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \langle \varphi | \alpha \rangle \end{pmatrix} = \langle \varphi | \alpha \rangle \begin{pmatrix} \langle g_1 | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle g_k | \psi \rangle \\ \dots \\ \langle g_n | \psi \rangle \end{pmatrix} \quad (43)$$

Quest'ultima si riscrive come:

$$M |\zeta\rangle = \langle \varphi | \alpha \rangle |\psi\rangle \quad (44)$$

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

2.2 Operatori identità e proiezione

Sia $|\psi\rangle$ scritto nella base $B = (g_1, g_2, \dots, g_n)$. 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:

$$\hat{P}_k |\psi\rangle = |g_k\rangle \langle g_k | \sum_i |g_i\rangle \langle g_i | \psi \rangle \quad (45)$$

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

$$\hat{P}_k |\psi\rangle = \sum_i |g_k\rangle \langle g_k | g_i \rangle \langle g_i | \psi \rangle \quad (46)$$

Ovvero:

$$\hat{P}_k |\psi\rangle = \sum_i \delta_{ki} |g_k\rangle \langle g_i | \psi \rangle = |g_k\rangle \langle g_k | \psi \rangle \quad (47)$$

In maniera completamente analoga possiamo calcolare:

$$\langle \psi | \hat{P}_k = \langle \psi | g_k \rangle \langle g_k | \quad (48)$$

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

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

e sommiamola su k . Otteniamo:

$$\sum_i \hat{P}_k = \sum_i |g_k\rangle \langle g_k| \quad (49)$$

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

$$\left(\sum_i \hat{P}_k \right) |\psi\rangle = \sum_i |g_k\rangle \langle g_k|\psi\rangle \quad (50)$$

RHS della (50) è, per la (20), il vettore $|\psi\rangle$:

$$\left(\sum_i \hat{P}_k \right) |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (51)$$

Dalla (51) 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:

$$\langle\psi| \left(\sum_i \hat{P}_k \right) = \langle\psi| \quad (52)$$

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 indichiamo 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 (36) con $|\psi\rangle = |g_k\rangle$, $\langle\varphi| = \langle g_k|$ abbiamo:

$$|g_k\rangle \langle g_k| = \begin{pmatrix} \langle g_1|g_k\rangle \langle g_k|g_1\rangle & \langle g_1|g_k\rangle \langle g_k|g_2\rangle & \dots & \langle g_1|g_k\rangle \langle g_k|g_n\rangle \\ \langle g_2|g_k\rangle \langle g_k|g_1\rangle & & \ddots & \\ \vdots & & & \\ \langle g_n|g_k\rangle \langle g_k|g_1\rangle & & & \langle g_n|g_k\rangle \langle g_k|g_n\rangle \end{pmatrix} \quad (53)$$

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

$$\hat{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad \hat{P}_n = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \quad (54)$$

L'operatore identità può allora essere scritto semplicemente come:

$$\hat{1} = \sum_k \hat{P}_k = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix} = I_n \quad (55)$$