

## **Matematica quantistica**

## **Quantum mathematics**

**Luca Granieri**

### **Abstract**

Si fornisce un compendio introduttivo sulla matematica della meccanica quantistica a partire dalla formulazione Lagrangiana-Hamiltoniana della meccanica classica.

La rivoluzione quantistica novecentesca costituisce una grande conquista del pensiero scientifico sul terreno di un ripensamento fondamentale dell'indagine scientifica della realtà. Se ci venisse chiesto di identificare i caratteri più rivoluzionari in rottura con la fisica classica in genere si penserebbe all'indeterminazione e alla probabilità coinvolta strutturalmente nei meandri più intimi della materia. Certamente, ma incertezza e probabilità sono contemplate anche nella meccanica classica. Che cosa allora distingue nettamente la meccanica quantistica da quella classica? E perché la formulazione matematica della meccanica quantistica, come si sa, coinvolge spazi a infinite dimensioni e i numeri complessi? Forse è proprio su questo versante che si può individuare più efficacemente una demarcazione significativa. Il modo più conveniente, seguendo la trattazione delineata in [1] al quale rimandiamo per un quadro più completo ed esaustivo, ci sembra quello di inquadrare la meccanica quantistica alla luce di quella classica.

## **Formulazione Lagrangiana-Hamiltoniana della meccanica**

La dinamica classica è retta dall'equazione di Newton  $F = ma$  per un punto materiale di massa  $m$ . Per semplicità ci limitiamo per ora a considerare una sola dimensione spaziale  $x$ . Per una forza conservativa  $F$  possiamo introdurre l'energia potenziale

$$U(x) - U(x_0) = - \int_{x_0}^x F(u) \, du.$$

Per il teorema fondamentale del calcolo integrale risulta  $F(x) = -\frac{dU}{dx}$ . La funzione Lagrangiana del sistema è introdotta considerando appunto l'energia potenziale e quella cinetica collegata alla velocità  $v$  della massa  $m$ . Precisamente

$$L(x, v) = \frac{1}{2}mv^2 - U(x).$$

L'equazione di Newton si può reinterpretare, piuttosto che mediante funzioni diverse, tramite la sola funzione Lagrangiana. Infatti, introducendo i simboli di derivate parziali per funzioni di più variabili, possiamo riscrivere

$$F(x) = -\frac{dU}{dx} = \frac{\partial L}{\partial x}.$$

D'altra parte, derivando rispetto a  $v$

$$\frac{\partial L}{\partial v} = mv \Rightarrow m \frac{dv}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial v} \right).$$

Siamo pronti per riformulare l'equazione di Newton in termini lagrangiani

$$F = ma \Leftrightarrow F = m \frac{dv}{dt} \Leftrightarrow \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial v} \right) = 0.$$

Pertanto, l'equazione della dinamica è equivalente a un'equazione che coinvolge la sola funzione Lagrangiana, detta equazione di Eulero-Lagrange. Lo sforzo reinterpretativo è giustificato dalle notevoli proprietà matematiche connesse con le strutture collegate alla lagrangiana. Intanto, un fatto di fondamentale importanza, che l'equazione di Eulero-Lagrange corrisponde alle configurazioni stazionarie *dell'azione*

$$\mathcal{A} := \int_{t_0}^t L(x, v) dt.$$

Sovente, questa proprietà è condensata nel cosiddetto *Principio di minima azione* per cui l'evoluzione dinamica di un sistema è orientata dalla necessità di rendere minima (o massima) una azione (si veda [2] per un'introduzione a questi temi), cosa che suggerisce la possibilità di studiare la dinamica nel cosiddetto *spazio delle fasi* di coordinate  $(x, v)$ , studiando problemi di ottimizzazione (come il principio di Maupertis-Fermat nell'ottica). La corrispondente formulazione *duale* è dovuta ad Hamilton. L'hamiltoniana del sistema rappresenta l'energia totale data dall'energia cinetica più quella potenziale:  $H = \frac{1}{2}mv^2 + U(x)$  (si tratta della cosiddetta trasformata di Fenchel-Legendre della lagrangiana). Se si introducono le cosiddette *coordinate generalizzate* tramite posizione e quantità di moto, ovvero  $q = x$  e  $p = mv$ , le equazioni di Hamilton

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}; \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (1)$$

caratterizzano completamente il sistema dinamico e la sua evoluzione nel tempo.

La generalità di questo approccio ne costituisce anche la forza. Gli enti rilevanti per la descrizione fisica diventano funzioni delle coordinate generalizzate. Diremo che *gli osservabili* della meccanica classica sono proprio le funzioni  $f(q, p)$  sullo spazio delle fasi delle coordinate generalizzate. L'algebra delle funzioni fornisce automaticamente una struttura molto versatile e potente per l'analisi della dinamica. Una peculiarità decisiva è l'individuazione d un'algebra di Lie per gli osservabili. Si tratta di una relazione binaria, denotata usualmente con il simbolo  $\{f, g\}$ , che soddisfa le proprietà

1. (Linearità)  $\{f, g + \alpha h\} = \{f, g\} + \alpha\{f, h\}$ ;
2. (Antisimmetria)  $\{f, g\} = -\{g, f\}$ ;
3. (Identità di Jacobi)  $\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0$ ;
4. (Prodotto)  $\{f, gh\} = g\{f, h\} + h\{f, g\}$ .

L'ultima proprietà dovrebbe risultare familiare ricordando la formula di *derivazione del prodotto*. In effetti, nella meccanica classica una struttura di Algebra di Lie si realizza tramite le cosiddette *parentesi di Poisson*:

$$\{f, g\} := \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p}. \quad (2)$$

## Stati e osservabili

Anche la meccanica classica deve tener conto dell'incertezza e della probabilità. Una presenza sistematica di questi componenti si ha nella meccanica statistica. Il fatto è che non sempre il risultato di una misura sperimentale è individuato con esattezza. Se  $f(q, p)$  è un osservabile relativo ad un certo esperimento, allora se una misurazione delle variabili  $(q_0, p_0)$  produce un risultato identificabile con certezza avremo un risultato  $f(q_0, p_0)$  e diremo che lo stato è puro. Ma questa non è certamente la norma. Se indichiamo con  $w$  uno stato, ovvero l'insieme di tutte le condizioni che caratterizzano un certo set sperimentale, e con  $f$  gli osservabili relativi a quello stato, ovvero i risultati sperimentali determinabili nello stato  $w$ , più che valori univocamente determinati ci aspettiamo una certa distribuzione di probabilità. In altre parole, ad ogni osservabile  $f$  dello stato  $w$  è associata una  $w_f \in \mathcal{P}(\mathbb{R})$  che descrive la distribuzione di probabilità relativa alle misure sperimentali. Gli stati allora possono essere *misti*, costituiti da una qualunque combinazione convessa di stati, vale a dire del tipo

$$w = \alpha w_1 + (1 - \alpha) w_2 \in \mathcal{P}(\mathbb{R})$$

per  $w_1, w_2 \in \mathcal{P}(\mathbb{R})$  e  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Diremo allora che uno stato è puro se non si può decomporre tramite combinazioni convesse, ovvero se  $w = w_1 = w_2$ . Se il risultato di una misura sperimentale è una probabilità, allora il suo valore rappresentativo è costituito dal *valor medio* (baricentro della misura di probabilità) definito da

$$(f|w) := \int_{\mathbb{R}} u dw_f(u). \quad (3)$$

Per gli stati puri risulta  $w_f = \delta_{u_0}$  con  $\delta$  la misura concentrata *delta di Dirac*; per ogni insieme misurabile  $A \subset \mathbb{R}$  la delta di Dirac è definita da

$$\delta_u(A) = \begin{cases} 1 & u \in A \\ 0 & u \notin A \end{cases}.$$

Il baricentro della delta di Dirac è esattamente il centro della misura e  $(f|w) = u_0$ , per cui l'osservabile produce con certezza il valore  $f(p_0, q_0) = u_0$ .

La teoria richiede che gli stati soddisfino le basilari proprietà:

1. (Valor medio della costante)  $(C|w) = C$ ;
2. (Linearità)  $(f + \alpha g|w) = (f|w) + \alpha(g|h)$ ;
3. (Positività)  $(f^2|w) \geq 0$ .

Queste proprietà mettono in moto la *teoria della misura e dell'integrazione* (Teoremi di rappresentazione di Riesz) e la forma più generale per il valor medio di un osservabile può essere rappresentato direttamente sullo spazio delle fasi  $\mathcal{M}$  tramite una misura  $\mu_w \in \mathcal{P}(\mathcal{M})$  associata allo stato  $w$  tramite la seguente

$$(f|w) = \int_{\mathcal{M}} f(q, p) d\mu_w(q, p).$$

Gli stati puri sono esattamente quelli per cui la misura di rappresentazione è una delta di Dirac, ovvero  $\mu_w = \delta_{(q_0, p_0)}$ .

## Una formulazione matematica della meccanica quantistica

Qualunque teoria fisica deve trattare di stati e osservabili. Che cosa allora distingue la meccanica classica da quella quantistica? Se indichiamo con lettere minuscole  $a, b, c, \dots$  gli osservabili, il fatto di poter considerare strutture algebriche articolate richiede in realtà la calcolabilità di funzioni  $f(a, b)$ , per esempio per poter definire somme e prodotti di osservabili. L'osservazione cruciale è che la calcolabilità di una funzione di due variabili  $f(a, b)$  richiede che gli osservabili  $a, b$  siano simultaneamente misurabili. Mentre nella meccanica classica questa questione non pone restrizione alcuna, nei fenomeni quantistici emergono osservabili intrinsecamente *non simultaneamente misurabili*, come le coordinate generalizzate posizione e momento, in accordo con le relazioni di indeterminazione di Heisenberg  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{4\pi}$ . La necessità di tener conto di questa simultaneità conduce direttamente al nocciolo del problema: chi sono allora gli osservabili della meccanica quantistica? Occorre pensare a qualcosa di nuovo giacché, qualunque cosa siano, gli osservabili non possono essere funzioni sullo spazio delle fasi. Inoltre, ammessa una nozione adeguata di osservabili, diciamo  $A, B, C, \dots$  dovremo essere in grado di costruire un'algebra adeguata che al pari di quella classica consenta uno studio appropriato compatibile con le relazioni di indeterminazione. Una maniera naturale per passare dalla formulazione classica a

quella quantistica consiste nel passare dalle funzioni ai *funzionali*. Molto genericamente, un funzionale è una funzione  $\mathcal{F} : X \rightarrow Y$  dove  $X, Y$  sono degli spazi vettoriali piuttosto generali (Spazi di Banach, di Hilbert, ecc.) anche di *dimensione infinita*. Esempi tipici provengono proprio dalla meccanica classica e dal *Calcolo delle Variazioni* (si veda anche [2]). Il principio di Fermat, per esempio, conduce a chiedersi quale sia il cammino più corto che connette due punti assegnati, producendo il cosiddetto *problema delle geodetiche*. Rispondere a questa domanda significa trovare configurazioni di minimo di un funzionale, quello che ad ogni curva dello spazio associa la sua lunghezza. In tal caso lo spazio  $X$  è costituito dallo spazio delle curve (di dimensione infinita) mentre  $Y = \mathbb{R}$ . Il funzionale in oggetto è in qualche modo una funzione su uno spazio di funzioni, una funzione di funzioni insomma, da cui il nome *funzionale*. Talvolta, specialmente nel caso lineare, i funzionali sono detti anche *operatori*. Lo studio sistematico di questi oggetti costituisce una branca molto vasta della matematica: l'Analisi Funzionale.

## Matrici quantistiche

Per farsi un'idea di come l'Analisi Funzionale costituisca la struttura naturale per la meccanica quantistica, possiamo partire dal considerare la struttura più familiare delle matrici  $A, B, C$  quadrate di ordine  $n \times n$ , che rappresentano degli operatori lineari  $v \in \mathbb{R}^n \mapsto Av \in \mathbb{R}^n$ . Naturalmente, se le nostre matrici rappresentano gli osservabili della teoria, il problema è definire in maniera sensata delle funzioni  $f(A)$  sulle matrici. A tal fine, si può procedere considerando le *matrici autoaggiunte* e il cosiddetto *Teorema Spettrale*. Per capire di cosa si tratta, ricordiamo dapprima la nozione di prodotto scalare in  $\mathbb{R}^n$ . In coordinate cartesiane: se  $u = (u_1, u_2, \dots, u_n)$  e  $v = (v_1, v_2, \dots, v_n)$  sono due vettori di  $\mathbb{R}^n$ , allora il prodotto scalare è definito da

$$\langle u, v \rangle = \sum_{i=1}^n u_i v_i.$$

Ricordiamo inoltre che una matrice quadrata  $A$  di ordine  $n$  è legata alla sua trasposta  $A^t$  (che si ottiene scambiando tra loro righe e colonne) dalla fondamentale relazione

$$\forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n, \langle A\mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{u}, A^t \mathbf{v} \rangle. \quad (4)$$

Infatti, se  $A = (a_{ij})$ , per definizione di prodotto *righe per colonne* abbiamo che

$$\begin{aligned} \langle A\mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle &= \sum_{j=1}^n \left( \sum_{i=1}^n a_{ji} u_i \right) v_j = \sum_{j=1}^n \left( \sum_{i=1}^n a_{ji} u_i v_j \right) = \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^n a_{ji} u_i v_j \right) = \\ &= \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^n a_{ji} v_j \right) u_i = \sum_{i=1}^n (A^t \mathbf{v})_i u_i = \langle \mathbf{u}, A^t \mathbf{v} \rangle. \end{aligned}$$

La matrice aggiunta  $A^*$  di  $A$  è definita proprio tramite la matrice trasposta, ovvero  $A^* := A^t$ . Diremo che una matrice è autoaggiunta se essa coincide con la propria aggiunta, vale a dire se  $A = A^*$ . Il menzionato Teorema Spettrale garantisce che ogni matrice autoaggiunta possiede  $n$  autovalori  $\lambda_i \in \mathbb{R}$  e  $n$  autovettori  $v_i \in \mathbb{R}^n$  che soddisfano la relazione

$$Av_i = \lambda_i v_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (5)$$

L'insieme degli autovalori costituisce lo *spettro* della matrice  $A$ . Inoltre, gli autovettori  $v_i$  corrispondenti ad autovalori distinti sono ortogonali e costituiscono quindi una base dello spazio. Questi risultati forniscono un modo del tutto naturale per definire delle funzioni sulle matrici, giacché le matrici autoaggiunte restano univocamente determinate dal loro spettro. Se  $f$  è una funzione reale, basterà definire  $f(A)$  come la matrice autoaggiunta avente per spettro le immagini  $f(\lambda_i)$ . Il ricorso alle matrici autoaggiunte richiede però qualche sforzo per determinare la struttura algebrica idonea. Intanto valutiamo per esercizio che

$$(\alpha A)^* = \alpha A^*; \quad (AB)^* = B^* A^*.$$

Infatti, utilizzando la relazione tra matrici e prodotto scalare abbiamo

$$\langle \alpha A \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \alpha \langle \mathbf{u}, A^* \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{u}, \alpha A^* \mathbf{v} \rangle \Rightarrow (\alpha A)^* = \alpha A^*.$$

Lasciamo al lettore il compito di verificare che inoltre  $(A + B)^* = A^* + B^*$ .

$$\langle AB \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \langle B \mathbf{u}, A^* \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{u}, B^* A^* \mathbf{v} \rangle \Rightarrow (AB)^* = B^* A^*.$$

L'ultima relazione trovata ci dice che il prodotto righe per colonne tra le matrici non è la nozione giusta di prodotto, giacché il prodotto  $AB$  di due matrici autoaggiunte non è autoaggiunto. Si definisce allora il prodotto simmetrico

$$A \circ B := \frac{AB + BA}{2}.$$

Si verifica facilmente che il prodotto simmetrico è autoaggiunto:

$$(A \circ B)^* = \frac{1}{2} ((AB)^* + (BA)^*) = \frac{1}{2} (B^* A^* + A^* B^*) = \frac{1}{2} (BA + AB) = A \circ B.$$

Per le matrici, un operatore fondamentale è la *traccia*, denotata con  $Tr(A)$ , definita dalla somma degli autovalori:

$$Tr(A) := \sum_{i=1}^n a_{ii} = \sum_{i=1}^n \langle Ae_i, e_i \rangle = \sum_{i=1}^n \lambda_i \quad (6)$$

dove  $e_1 = (1, 0, \dots, 0)$ ,  $e_2 = (0, 1, \dots, 0)$  etc rappresentano i vettori della base canonica di  $\mathbb{R}^n$ . Si può verificare (il lettore può svolgerlo quale utile esercizio) che la traccia non dipende dalla scelta della base e inoltre che  $Tr(AB) = Tr(BA)$  quali che siano le matrici  $A, B$ .

I teoremi di rappresentazione per stati e osservabili nel caso delle matrici suggeriscono di assegnare una matrice autoaggiunta  $M$  tale che  $\langle Mu, u \rangle \geq 0$  (definita positiva) con  $Tr(M) = 1$ , detta matrice densità. Il valor medio assume allora la seguente forma

$$(A|w) := Tr(MA) = \sum_{i=1}^n \mu_i \langle A\varphi_i, \varphi_i \rangle,$$

dove  $\mu_i$  sono gli autovalori di  $M$  e  $\varphi_i$  i corrispondenti autovettori. Per ottenere la seconda uguaglianza si può assumere che la base di autovettori sia quella canonica dello spazio (altrimenti basta operare un cambio di base) per cui

$$Tr(MA) = \sum_{i=1}^n \langle MA\varphi_i, \varphi_i \rangle = \sum_{i=1}^n \langle A\varphi_i, M\varphi_i \rangle = \sum_{i=1}^n \mu_i \langle A\varphi_i, \varphi_i \rangle. \quad (7)$$

Pertanto, analogamente al caso classico, si può interpretare lo stato misto come la sovrapposizione di stati puri  $P_{\varphi_i}$  ciascuno con probabilità  $\mu_i$ , dove lo stato puro è determinato dalla proiezione (prodotto scalare) lungo l'autovettore. Precisamente, se  $\psi$  è un autovettore, lo stato puro corrispondente è definito dall'operatore  $P_{\psi}(\eta) = \langle \psi, \eta \rangle \eta$ . Per uno stato puro il valor medio di un'osservabile assume la forma

$$(A|w) = \langle A\psi, \psi \rangle. \quad (8)$$

Una interpretazione analoga può essere data per gli autovalori e gli autovettori dell'osservabile  $A$  (si veda [1, cap. 8]): gli autovalori  $\lambda_i$  rappresentano i possibili risultati delle misurazioni sull'osservabile  $A$  nello stato  $w$  con probabilità  $\langle Mv_i, v_i \rangle$ , dove  $v_i$  sono i corrispondenti autovettori. Se il sistema si trova in uno stato puro corrispondente a un autovettore  $v_i$  di  $A$ , allora la misura  $\lambda_i$  è ottenuta con certezza.

Per chiudere il cerchio è desiderabile costruire un'algebra di Lie analoga a quanto accade per la meccanica classica. Il candidato naturale è il cosiddetto *commutatore*

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

Andiamo a valutare la sussistenza delle quattro proprietà di Lie:

1. Linearità:  $[A, B + \alpha C] = A(B + \alpha C) - (B + \alpha C)A = AB + \alpha AC - BA - \alpha CA = [A, B] + \alpha[A, C]$ ;
2. Antisimmetria:  $[A, B] = AB - BA = -(BA - AB) = -[B, A]$ ;
3. Prodotto:  $[A, B \circ C] = [A, \frac{BC+CB}{2}] = \frac{1}{2}(ABC + ACB - BCA - CBA) = \frac{1}{2}B(AC - CA) - \frac{1}{2}BAC + \frac{1}{2}(AC - CA)B + \frac{1}{2}CAB + \frac{1}{2}ABC - \frac{1}{2}CBA = B \circ [A, C] + \frac{1}{2}C(AB - BA) + \frac{1}{2}(AB - BA)C = B \circ [A, C] + C \circ [A, B]$ ;
4. Jacobi:  $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = [A, BC - CB] + [B, (CA - AC)] + [C, (AB - BA)] = ABC - ACB - BCA + CBA + BCA - BAC - CAB + ACB + CAB - CBA - ABC + BAC = 0$ ;

Sembra funzionare tutto a dovere ma tutti sanno che nella meccanica quantistica sono coinvolti i numeri complessi. Come mai? Il commutatore ha tutte le proprietà desiderate ma abbiamo trascurato di controllare se esso produce un operatore autoaggiunto. In effetti

$$[A, B]^* = (AB - BA)^* = B^*A^* - A^*B^* = BA - AB = -[A, B].$$

Un segno meno guastafeste ci separa da un'algebra efficiente per la meccanica quantistica. Ma la matematica ci soccorre facilmente a patto di passare dal campo reale  $\mathbb{R}$  al campo complesso  $\mathbb{C}$ . Pochi accorgimenti permettono di dipanare la situazione. Ricordando l'operazione di *coniugazione*  $z = \alpha + i\beta \mapsto \bar{z} = \alpha - i\beta$ , il prodotto scalare tra vettori nel campo complesso si definisce tramite la seguente formula:

$$\langle x, y \rangle := \sum_{i=1}^n x_i \bar{y}_i,$$

da cui segue che  $\langle x, x \rangle = |x|^2$  è un numero reale positivo. Per la nozione di operatori aggiunti, si definisce invece  $A^* := \bar{A}^t$  da cui segue che  $(\alpha A)^* = \bar{\alpha} A^*$ . Il Teorema Spettrale continua a valere e lo spettro resta composto da autovalori tutti reali, salvando l'esigenza di misurazioni sperimentali costituite da numeri reali. Per ottenere l'algebra di Lie basta porre  $[A, B] = ki(AB - BA)$ . La verifica che si tratti di un operatore autoaggiunto è quasi superflua:

$$[A, B]^* = -ki(AB - BA)^* = -ki(BA - AB) = ki(AB - BA) = [A, B].$$

La costante  $k$  va determinata in modo che la teoria si adatti ai dati sperimentali. Essi mostrano che  $k = \frac{1}{\hbar}$ , dove  $\hbar$  è la costante di Planck (ridotta). Possiamo ora definire le parentesi di Poisson quantistiche

$$\{A, B\}_h := \frac{i}{\hbar} (AB - BA).$$

Pertanto, la necessità di lavorare in campo complesso serve a garantire l'applicazione in tutte le circostanze della teoria degli operatori autoaggiunti. Per quanto bizzarra possa risultare la meccanica quantistica, i risultati delle misurazioni devono comunque essere numeri reali. Verifichiamo, come già accennato, che gli autovalori di un operatore autoaggiunto sono reali:

$$\lambda = \lambda \langle v, v \rangle = \langle Av, v \rangle = \langle v, Av \rangle = \bar{\lambda} \langle v, v \rangle = \bar{\lambda} \Leftrightarrow \lambda \in \mathbb{R} \quad (9)$$

essendo l'autovettore  $v$  relativo all'autovalore  $\lambda$  di modulo unitario. Come osservato, il prodotto di autoaggiunti non è necessariamente autoaggiunto. Tuttavia, l'operatore traccia restituisce naturalmente un numero reale. Questa circostanza ci assicura che il valor medio di un operatore autoaggiunto è ancora un numero reale. A tal fine basta richiamare le proprietà di base del coniugio complesso:

$$\overline{\langle x, y \rangle} = \overline{\sum_{i=1}^n x_i \bar{y}_i} = \sum_{i=1}^n \bar{x}_i y_i = \sum_{i=1}^n \bar{x}_i y_i = \langle y, x \rangle.$$



Pertanto, per una matrice autoaggiunta, quale che sia il vettore  $u$  abbiamo

$$\overline{\langle Au, u \rangle} = \langle u, Au \rangle = \langle Au, u \rangle \Leftrightarrow \langle Au, u \rangle \in \mathbb{R}.$$

Anche in campo complesso ha senso considerare matrici definite positive e la relativa nozione di matrice densità. Ricordando l'espressione del valor medio

$$(A|w) = \text{Tr}(MA) = \sum_{i=1}^n \mu_i \langle A\varphi_i, \varphi_i \rangle \in \mathbb{R}. \quad (10)$$

Visto che siamo in tema, verifichiamo le altre proprietà del valor medio per osservabili quantistici. Per la proprietà di positività basta osservare che gli autovalori  $\mu_i = \langle M\varphi_i, \varphi_i \rangle \geq 0$ . Allora il valor medio è un funzionale positivo:

$$(A^2|w) = \text{Tr}(A^2M) = \sum_{i=1}^n \mu_i \langle A^2\varphi_i, \varphi_i \rangle = \sum_{i=1}^n \mu_i \langle A\varphi_i, A\varphi_i \rangle = \sum_{i=1}^n \mu_i |A\varphi_i|^2 \geq 0.$$

La linearità è una diretta conseguenza della linearità del prodotto scalare

$$\begin{aligned} (A + \alpha B|w) &= \text{Tr}(M(A + \alpha B)) = \sum_{i=1}^n \mu_i \langle (A + \alpha B)\varphi_i, \varphi_i \rangle = \\ &= \sum_{i=1}^n \mu_i \langle A\varphi_i, \varphi_i \rangle + \alpha \sum_{i=1}^n \mu_i \langle B\varphi_i, \varphi_i \rangle = (A|w) + \alpha(B|w). \end{aligned}$$

Infine, per quanto riguarda il valor medio delle costanti, data la linearità, è sufficiente controllare il comportamento del valor medio rispetto alla matrice identità  $I$ :

$$(I|w) = \text{Tr}(MI) = \text{Tr}(M) = 1.$$

## Il Teorema spettrale

Per garantire un minimo di completezza, diamo qualche dettaglio su questo fondamentale risultato. Abbiamo già appurato che gli autovalori associati ad una matrice (operatore) autoaggiunta sono tutti reali. Ma chi ci garantisce che esistano sempre? Dire che  $v$  è un autovettore significa cercare una soluzione, diversa dal vettore nullo, dell'equazione  $Av = \lambda v$ . Dividendo per il modulo  $|v|$  potremo considerare vettori unitari. Equivalentemente, detta  $I$  la matrice identità, possiamo considerare l'equazione

$$(A - \lambda I)v = 0$$

che corrisponde a un sistema lineare di  $n$  equazioni. L'algebra lineare permette di studiare agevolmente l'esistenza di soluzioni. Se  $\det(A - \lambda I) \neq 0$  allora il sistema ammette una ed una sola soluzione, che pertanto non può che essere il vettore nullo  $v = 0$ . Ma noi siamo interessati a soluzioni diverse da zero. Perveniamo così alla cosiddetta *equazione caratteristica*:

$$\det(A - \lambda I) = 0. \quad (11)$$

Dunque,  $\lambda$  è un autovalore di  $A$  se e soltanto se  $\lambda$  è una radice di (11). Inoltre, la risoluzione del sistema lineare fornisce il corrispondente autovettore. Ora, la (11) è un'equazione, nel campo complesso, di grado  $n$  nella variabile  $\lambda$ . Il teorema fondamentale dell'algebra (si veda anche [3] assicura l'esistenza di esattamente  $n$  radici complesse (contate con la rispettiva molteplicità). Resta da verificare il fatto che gli autovettori formano una base. Verifichiamo che ad autovalori distinti  $\lambda_i \neq \lambda_j$  corrispondono autovettori  $v_i, v_j$  ortogonali tra loro:

$$\lambda_i \langle v_i, v_j \rangle = \langle Av_i, v_j \rangle = \langle v_i, Av_j \rangle = \lambda_j \langle v_i, v_j \rangle \Leftrightarrow (\lambda_i - \lambda_j) \langle v_i, v_j \rangle = 0 \Leftrightarrow \langle v_i, v_j \rangle = 0.$$

## Indeterminazione di Heisenberg

Lo sforzo per sviluppare una matematica capace di descrivere i fenomeni quantistici non si deve naturalmente infrangere sulle relazioni di indeterminazioni di Heisenberg che hanno motivato la scelta degli operatori autoaggiunti come osservabili della meccanica quantistica. In effetti, le relazioni di indeterminazione trovano in questa formulazione uno sviluppo naturale. L'incertezza su un osservabile è statisticamente espressa dalla varianza. Fissato lo stato  $w$  di interesse, indicato con  $A_m := (A|w)$  il valore medio, la varianza, che indichiamo col simbolo  $\Delta_w A$ , è legata al valor medio del quadrato della differenza tra l'osservabile e il suo valor medio. Precisamente la varianza è definita da

$$\Delta_w^2 A := ((A - A_m)^2 | w). \quad (12)$$

Consideriamo per semplicità uno stato puro (con qualche accorgimento in più si possono ugualmente trattare gli stati sovrapposti) di autovettore di modulo unitario  $\psi$ . Per un arbitrario  $\alpha \in \mathbb{R}$ , partiamo dalla positività del prodotto scalare

$$\langle (A + i\alpha B)\psi, (A + i\alpha B)\psi \rangle \geq 0. \quad (13)$$

Sviluppando il prodotto scalare, ricordando che  $A, B$  sono autoaggiunti, si ottiene

$$\begin{aligned} \langle A\psi, A\psi \rangle + \langle A\psi, i\alpha B\psi \rangle + \langle i\alpha B\psi, A\psi \rangle + \langle i\alpha B\psi, i\alpha B\psi \rangle = \\ \langle A^2\psi, \psi \rangle - i\alpha \langle BA\psi, \psi \rangle + i\alpha \langle AB\psi, \psi \rangle + \alpha^2 \langle B^2\psi, \psi \rangle = \\ \langle A^2\psi, \psi \rangle + i\alpha \langle (AB - BA)\psi, \psi \rangle + \alpha^2 \langle B^2\psi, \psi \rangle. \end{aligned}$$

Trattandosi di uno stato puro, ricordando la (8), dalla (13) si ottiene

$$(A^2|w) + \alpha^2(B^2|w) + \alpha\hbar(\{A, B\}_h|w) \geq 0.$$

La disuguaglianza appena ottenuta è valida quale che sia  $\alpha \in \mathbb{R}$ . Il valor medio è un numero reale e in particolare  $(B^2|w) \geq 0$ . Il trinomio di secondo grado nella variabile  $\alpha$  deve pertanto avere un discriminante negativo:

$$\hbar^2 (\{A, B\}_h|w)^2 - 4(A^2|w)(B^2|w) \leq 0 \Leftrightarrow (A^2|w)(B^2|w) \geq \frac{\hbar^2}{4} (\{A, B\}_h|w)^2. \quad (14)$$

Per ottenere la varianza occorre sostituire nella formula precedente  $A \mapsto A - A_M$ ,  $B \mapsto B - B_M$ , dove  $A_M = (A|w)$ ,  $B_M = (B|w)$ . Valutiamo preliminarmente che le parentesi di Poisson restano invariate

$$\begin{aligned} \{A - A_M, B - B_M\}_h &= \frac{i}{\hbar} ((A - A_M)(B - B_M) - (B - B_M)(A - A_M)) = \\ &= \frac{i}{\hbar} (AB - B_M A - A_M B + A_M B_M - BA + A_M B + B_M A - A_M B_M) = \\ &= \frac{i}{\hbar} (AB - BA) = \{A, B\}_h. \end{aligned}$$

Pertanto, dalla (14) otteniamo la relazione di indeterminazione di Heisenberg

$$\Delta_w A \Delta_w B \geq \frac{\hbar}{2} |(\{A, B\}_h|w)|. \quad (15)$$

In generale, la varianza di due osservabili non è simultaneamente nulla e i due osservabili non sono pertanto simultaneamente misurabili. Questo fenomeno, come si vede dalla (15), è strettamente collegato alla commutatività degli operatori. Il fatto che in meccanica quantistica le cose si complichino alquanto discende proprio dal fatto di lavorare su un'algebra non commutativa. Questa circostanza costituisce una netta differenza con la meccanica classica. Mentre in quest'ultima possiamo immaginare di raffinare sempre più la precisione dello stato  $w$  in modo da rendere le incertezze sugli osservabili  $f, g$ , almeno in linea di principio, arbitrariamente piccole, in meccanica quantistica, se gli osservabili  $A, B$  non commutano allora non c'è niente da fare: la (15) pone una limitazione ineludibile sulle incertezze.

## Posizione e quantità di moto

Quanto detto fino ad ora può risultare piuttosto astratto, in fin dei conti è la rispondenza ai dati sperimentali a costituire il principio decisivo per qualunque teoria. Naturalmente, quale che sia la formulazione per la meccanica quantistica, è desiderabile che essa risulti *compatibile* con quella classica. Vorremmo cioè una corrispondenza tra un osservabile classico  $f$  e un corrispettivo osservabile quantistico  $A_f$ , in modo per esempio che le predizioni della meccanica quantistica su una situazione macroscopica sia confrontabile con la descrizione classica. La corrispondenza  $f \mapsto A_f$  non sarà biunivoca, giacché vogliamo contemplare situazioni quantistiche che non abbiano un corrispettivo classico. Ma certamente la corrispondenza  $f \mapsto A_f$  renderà la teoria confrontabile con i dati sperimentali. La meccanica quantistica da questo punto di vista è ineguagliabile fornendo una corrispondenza con le misurazioni sperimentali di altissima precisione. Inoltre, la corrispondenza  $f \mapsto A_f$  consente di riguardare la meccanica classica come limite per  $\hbar \rightarrow 0$  di quella quantistica (si veda [1, cap. 14]).

Per farci un'idea di come questa corrispondenza possa avvenire consideriamo le coordinate generalizzate  $(q, p)$ , posizione e quantità di moto. Vogliamo trovare i corrispondenti osservabili quantistici  $q \mapsto Q, p \mapsto P$ . Per identificare questi corrispondenti osservabili quantistici, che chiameremo ancora posizione e quantità di

moto, calcoliamo le parentesi di Poisson classiche. Nelle tre coordinate spaziali, per la posizione dobbiamo calcolare  $\{q_i, q_j\}$  per gli osservabili  $f(q, p) = q_i$ ,  $g(q, p) = q_j$ , con  $i, j = 1, 2, 3$ . Calcolando le derivate si ottiene

$$\{q_i, q_j\} = \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} = 0.$$

Similmente, valutiamo

$$\{p_i, p_j\} = 0; \quad \{p_i, q_j\} = \delta_{i,j}$$

dove la delta di Kronecker produce  $\delta_{i,j} = 1$  per indici uguali  $i = j$ . Mentre  $\delta_{i,j} = 0$  per  $i \neq j$ . L'idea è quella di determinare degli osservabili quantistici che producano lo stesso comportamento per le parentesi di Poisson, ovvero che soddisfano le cosiddette *relazioni di quantizzazione-commutazione di Heisenberg*

$$\{Q_i, Q_j\}_h = 0; \quad \{P_i, P_j\}_h = 0; \quad \{P_i, Q_j\}_h = \delta_{ij}. \quad (16)$$

Per i corrispondenti quantistici di posizione e quantità di moto, la relazione di indeterminazione di Heisenberg, per lo stato relativo al moto di una singola particella, assume l'usuale forma

$$\Delta_w P \Delta_w Q \geq \frac{\hbar}{2} |(\{P, Q\}_h|w)| = \frac{\hbar}{2} |(I|w)| = \frac{\hbar}{2}.$$

## Le dimensioni contano

Il modello che abbiamo sviluppato utilizzando le matrici si rivela troppo riduttivo per gli scopi minimi richiesti dalla fisica. Sia per motivi applicativi che teorici. Dal punto di vista degli esperimenti, l'algebra delle matrici ha il difetto che ogni osservabile può essere collegato con al più  $n$  possibili risultati reali corrispondenti agli autovalori. Cosa che nel misurare una grandezza fisica sarebbe una restrizione troppo severa. Nella maggior parte dei casi vorremmo addirittura un intervallo continuo di valori possibili per una certa misurazione. Dal punto di vista teorico, per esempio, chi garantisce che esistano gli osservabili quantistici che soddisfano le relazioni di Heisenberg (16)? In effetti, non è difficile mostrare che in dimensione finita tali osservabili non si possono trovare. In effetti, ci aspettiamo che posizione e quantità di moto debbano corrispondere ad operatori non limitati, cosa che le matrici non possono produrre. Come accennato in precedenza, gli strumenti dell'analisi funzionale permettono di trattare il caso di dimensioni infinite con molta efficacia. Gli spazi dotati di prodotto scalare di dimensione infinita conducono a considerare la nozione di spazio di Hilbert. Lo spettro degli operatori negli spazi di Hilbert è ancora composto da numeri reali e può essere costituito da infiniti elementi o anche da intervalli. Il Teorema di von Neumann-Stone assicura inoltre l'esistenza degli osservabili quantistici (operatori autoaggiunti in uno spazio di Hilbert) che soddisfano relazioni come quelle di Heisenberg (16).

Anche l'operatore traccia si definisce in dimensione infinita come una serie

$$Tr(A) := \sum_{i=1}^{+\infty} \langle Av_i, v_i \rangle = \sum_{i=1}^{+\infty} \lambda_i$$

dando luogo a possibili valori non limitati. Resta valido anche in dimensione infinita il fatto che la traccia non dipende dalla scelta della base e che, sebbene due operatori possano anche non commutare,  $Tr(AB) = Tr(BA)$ .

I teoremi di rappresentazione dell'analisi funzionale consentono di formulare questi concetti tramite integrazione in opportuni spazi di funzioni. Si tratta degli spazi di Lebesgue  $L^2(\mathbb{R}^3)$  costituiti dalle funzioni su  $\mathbb{R}^3$ , a valori nel campo complesso, per cui il quadrato del modulo ammette integrale di Lebesgue finito. Il prodotto scalare in questo spazio è definito da

$$\langle f, g \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} f(x) \overline{g(x)} dx.$$

Questa veste più *esplicita* consente di dare una apparenza più *concreta* alla formulazione quantistica. Per esempio, gli operatori quantistici per posizione e quantità di moto possono essere definiti da

$$\forall \varphi \in L^2(\mathbb{R}^3) : Q_j \varphi(x) = x_j \varphi(x); \quad P_j \varphi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j}(x).$$

Il lettore attento noterà che questi osservabili non sono limitati e che la loro definizione richiede una restrizione sul dominio, chi assicura infatti che la derivata di una funzione in  $L^2$  sia ancora in  $L^2$ ? Queste considerazioni conducono allo studio di spazi di funzioni particolari come quelli di Sobolev, spazi a momento finito ecc.

Verifichiamo le relazioni di commutazione di Heisenberg. Non è restrittivo, per approssimazione delle funzioni integrabili con funzioni regolari, considerare una funzione test  $\varphi \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^3)$  infinite volte derivabile e nulla al di fuori di un insieme compatto (supporto compatto).

$$\{Q_i, Q_j\}_h \varphi = \frac{i}{\hbar} (Q_i(Q_j \varphi) - Q_j(Q_i \varphi)) = \frac{i}{\hbar} (x_i x_j \varphi(x) - x_j x_i \varphi(x)) = 0$$

visto la commutatività del prodotto tra numeri reali. Similmente per i momenti

$$\{P_i, P_j\}_h \varphi = \frac{i}{\hbar} (P_i(P_j \varphi) - P_j(P_i \varphi)) = \left( \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j}(x) - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_i}(x) \right) = 0.$$

Questa volta i due contributi si elidono a vicenda perché, per funzioni regolari, l'ordine di derivazione non conta (Teorema di Schwarz). Infine

$$\begin{aligned} \{P_i, Q_j\}_h \varphi &= \frac{i}{\hbar} (P_i(Q_j \varphi) - Q_j(P_i \varphi)) = \left( \frac{\partial}{\partial x_i} (x_j \varphi(x)) - x_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(x) \right) = \\ &= x_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(x) - x_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(x) = 0. \end{aligned}$$

## L'equazione di Schrodinger

Quanto espresso sino ad ora è in un certo senso una forma di cinematica. Per la dinamica occorre prescrivere l'evoluzione nel tempo. Limitandoci ad una particella in

una sola dimensione spaziale per semplicità, il suo stato è individuato dagli autovettori, individuati da una funzione  $f \in L^2(\mathbb{R})$ . Se, conformemente al dualismo onda-particella, interpretiamo l'evoluzione in termini di un'onda progressiva, allora gli stati puri sono individuati da una *funzione d'onda*

$$\psi(x, t) = f(kx - wt)$$

dove  $k$  è il numero d'onda e  $w$  la frequenza angolare. Nel caso di un'onda armonica semplice (non è restrittivo sviluppando in serie di Fourier), utilizzando le formule di Eulero si può considerare

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - wt)}.$$

Derivando si ottiene

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -wi\psi; \quad \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) = ki\psi.$$

D'altra parte, ricordando che per le onde  $w = 2\pi\nu$  e  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , tenuto conto delle condizioni di quantizzazione di Planck  $E = h\nu$  e  $p = \frac{h}{\lambda}$ , possiamo riscrivere le derivate della funzione d'onda come

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = E\psi; \quad -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) = p\psi. \quad (17)$$

Le relazioni (17) suggeriscono di identificare gli operatori  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  e  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  rispettivamente con gli operatori lineari energia  $E$  e quantità di moto  $p$ . D'altra parte, l'energia classica è fornita da

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + U(x) = \frac{1}{2m}p^2 + U(x).$$

Dalle (17) otteniamo

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = E\psi = \frac{1}{2m}(i\hbar)^2 \left( \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) \right)^2 + U(x)\psi.$$

Ponendo l'hamiltoniano  $H := -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + U$ , si ottiene l'equazione di Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = H\psi.$$

Nell'ambito degli spazi di Hilbert occorrerà stabilire a seconda del contesto il significato di soluzione dell'equazione di Schrodinger: soluzioni deboli, distribuzioni, ecc. (si veda anche [4]).

## Dalla dinamica classica a quella quantistica

Anche la dinamica quantistica discende naturalmente dal formalismo lagrangiano-hamiltoniano. Supponendo che l'hamiltoniana  $H$  del sistema soddisfi le condizioni

di regolarità per produrre esistenza e unicità delle soluzioni delle equazioni (1), resta definito il *flusso hamiltoniano*

$$G_t : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}, \quad G_t(q_0, p_0) = (q(q_0, p_0, t), p(q_0, p_0, t))$$

che ad ogni condizione iniziale  $(q_0, p_0)$  associa l'unica soluzione delle equazioni di Hamilton. Esistenza e unicità delle soluzioni si traducono nel fatto che il flusso hamiltoniano soddisfa le relazioni

$$G_t \circ G_s = G_{t+s}; \quad G_t^{-1} = G_{-t}. \quad (18)$$

La descrizione hamiltoniana della dinamica consiste nel seguire l'evoluzione di un osservabile  $f(q, p)$  lungo il flusso hamiltoniano, vale a dire considerando un osservabile in funzione del tempo definito da

$$f_t(q, p) = f(G_t(q, p)) = f(q(q, p, t), p(q, p, t)). \quad (19)$$

L'equazione della dinamica si ottiene considerando  $\varphi(s) := f_t(G_s(q, p))$  e calcolando  $\varphi'(0)$ . Dalla derivazione della funzione composta abbiamo

$$\varphi'(s) = \langle \nabla f_t(G_s(q, p)), \frac{d}{ds} G_s(q, p) \rangle. \quad (20)$$

Ora, per definizione di flusso hamiltoniano abbiamo che  $G_0(q, p) = (q, p)$  mentre

$$\frac{d}{ds} G_s(q, p) = \left( \frac{\partial H}{\partial p}(q, p), -\frac{\partial H}{\partial q}(q, p) \right).$$

Dalla (20), ricordando l'espressione delle parentesi di Poisson (2), si ottiene

$$\varphi'(0) = \frac{\partial f_t}{\partial q}(q, p) \frac{\partial H}{\partial p}(q, p) - \frac{\partial f_t}{\partial p}(q, p) \frac{\partial H}{\partial q}(q, p) = \{H, f_t\}. \quad (21)$$

D'altra parte, utilizzando le proprietà del flusso (18)

$$\varphi(s) = f_t(G_s(q, p)) = f(G_t(G_s(q, p))) = f(G_{t+s}(q, p)) = f(q(q, p, t+s), p(q, p, t+s)) \Rightarrow$$

$$\varphi'(0) = \frac{\partial f_t}{\partial t}(q, p).$$

La (21) produce allora l'equazione di evoluzione di Hamilton

$$\frac{\partial f_t}{\partial t} = \{H, f_t\}. \quad (22)$$

Il punto di vista hamiltoniano contempla pertanto uno stato fisso  $w$  in cui evolvono gli osservabili  $f_t$ . Con una metafora teatrale, potremmo dire che gli attori (osservabili) si muovono su un palcoscenico fisso. Ma, in modo forse meno intuitivo, si potrebbero anche tener fissi gli attori e far muovere il palcoscenico.

Questo secondo contesto corrisponde alla cosiddetta *formulazione di Liouville* della meccanica, che corrisponde esattamente all'equazione di Schrodinger nella quale a evolvere sono proprio gli stati. La formulazione classica di Hamilton corrisponde invece alla formulazione della dinamica quantistica di Heisenberg. Le due formulazioni sono equivalenti. Nel caso classico, consideriamo la misura di rappresentazione sullo spazio delle fasi che per semplicità consideriamo essere assolutamente continua con densità  $\rho$ . In altre parole, consideriamo un valor medio della forma

$$(f_t|w) = \int_{\mathcal{M}} f_t(u)\rho(u) du = \int_{\mathcal{M}} f(G_t(u))\rho(u) du.$$

Effettuando il cambio di variabili  $v = G_t(u)$  otteniamo

$$(f_t|w) = \int_{\mathcal{M}} f(G_t(u))\rho(u) du = \int_{\mathcal{M}} f(v)\rho(G_t^{-1}(v))J(v) dv$$

dove  $J(v)$  è lo Jacobiano del cambio di variabili (in questo caso specifico, in conseguenza del Teorema di Liouville  $J(v) = 1$ , si veda [1, cap. 3]). Considerando ora l'osservabile  $f$  fisso e la misura variabile di densità  $\rho_t(v) = \rho(G_t^{-1}(v))J(v)$ , abbiamo uno stato variabile  $w_t$  per cui le due descrizioni della dinamica coincidono

$$(f_t|w) = (f|w_t).$$

Ripercorrendo quanto presentato per la (22), si può verificare che l'equazione di evoluzione di Liouville assuma la forma

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = -\{H, \rho_t\}.$$

L'equazione di Heisenberg è la riformulazione quantistica della (22) in termini di operatori. Se  $M$  è l'operatore densità associato allo stato  $w$ , la descrizione di Heisenberg assume la forma

$$\frac{dM}{dt} = 0; \quad \frac{dA(t)}{dt} = \{H, A(t)\}_h. \quad (23)$$

L'equazione (23) di Heisenberg si può risolvere esplicitamente introducendo l'operatore esponenziale

$$e^A := \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{A^n}{n!}$$

che formalmente corrisponde all'espansione in serie dell'usuale funzione esponenziale. Se  $A = A(0)$  è il dato iniziale, la soluzione di (23) assume la forma

$$A(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}. \quad (24)$$

In generale, gli esponenziali nella (24) non si semplificano giacché gli operatori possono non commutare tra loro. Se  $A$  e  $H$  commutano si ottengono invece soluzioni stazionarie. Effettuando la derivata della (24) si ottiene infatti

$$A'(t) = \frac{i}{\hbar} H e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} - \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} H = \frac{i}{\hbar} (HA(t) - A(t)H) = \{H, A(t)\}_h.$$



Introducendo l'operatore  $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$  detto anche *operatore di evoluzione*, osservato che

$$U^* = \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\right)^* = e^{\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)^*} = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$$

la soluzione (24) si riscrive nella forma

$$A(t) = U^*AU.$$

Per risalire alla formulazione di Liouville della meccanica valutiamo

$$\begin{aligned}(A(t)|w) &= Tr(MA(t)) = Tr(MU^*AU) = Tr(U^*AUM) = \\ &= Tr(AUMU^*) = Tr(AM(t)) = (A|M(t))\end{aligned}$$

dove abbiamo definito l'operatore densità variabile

$$M(t) := UMU^*.$$

L'equazione di evoluzione corrispondente assume la forma

$$\begin{aligned}M'(t) &= U'MU^* + UM(U^*)' = -\frac{i}{\hbar}HUMU^* + \frac{i}{\hbar}UMU^*H = \\ &= -\frac{i}{\hbar}(HM - MH) = -\{H, M\}_h.\end{aligned}\tag{25}$$

Nel caso di uno stato puro  $A = P_\psi$  la soluzione (24) assume la forma

$$P_\psi(t) = UP_\psi U^*.$$

In meccanica quantistica si è soliti ricercare la dipendenza rispetto al tempo nella sola evoluzione dello stato, ovvero facendo in modo che sia  $P_\psi(t) = P_{\psi(t)}$ . Una scelta comune per ottenere ciò è considerare l'evoluzione lineare  $\psi(t) = U\psi$ . Infatti, con tale scelta, per il generico vettore  $\varphi$  risulta

$$P_{\psi(t)}\varphi = \langle\psi(t), \varphi\rangle\psi(t) = \langle U\psi, \varphi\rangle U\psi = U(\langle\psi, U^*\varphi\rangle\psi) = U(P_\psi(U^*\varphi)) = P_\psi(t)\varphi.$$

Con queste scelte perveniamo all'usuale espressione dell'equazione di Schrodinger

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = U'\psi = -\frac{i}{\hbar}HU\psi = -\frac{i}{\hbar}H\psi(t) \Rightarrow i\hbar\frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi.$$

## Bibliografia

- [1] L. D. Faddeev, O. A. Yakubovskii, *Lectures on Quantum Mechanics for Mathematics Students*, AMS, 2009.
- [2] L. Granieri, *Ottimo in Matematica*, La Dotta, 2016.
- [3] L. Granieri, *Sul Teorema Fondamentale dell'Algebra*, Periodico di Matematiche, Mathesis, N.1 2019.
- [4] L. Granieri, *Sostituisci e parti*, Archimede N. 4, 2018.
- [5] J. C. Polkinghorne, *Il Mondo dei Quanti*, Garzanti, 1986.