.

I FONDAMENTI DELLA TEORIA QUANTISTICA SECONDO VON NEUMANN

1. INTRODUZIONE

La Teoria Quantistica fu elaborata agli inizi del secolo XX, per spiegare fenomeni fisici, quali lo spettro del corpo nero e dell'atomo di idrogeno, che avevano resisistito ad ogni tentativo di spiegazione da parte della Fisica Classica. La nuova teoria ha sconvolto la fisica sin dalle sue fondamenta, più di quanto non fece la teoria della relatività, elaborata da Albert Einstein negli stessi anni.

Una dettagliata rassegna dei lavori che condussero alla formulazione della meccanica quantistica si può trovare in [1]. Essa è il risultato del lavoro di scienziati come Max Planck, Albert Einstein, Max Born, Ernest Rutherford, Louis De Broglie, Niels Bohr, Wolfang Pauli, Erwin Schroedinger, Werner Heisenberg, Paul Dirac.

La nuova teoria si formò attraverso parecchi stadi evolutivi, ed è in grado oggi di spiegare e descrivere con una straordinaria potenza predittiva i fenomeni fisici che avvengono a livello atomico, sub-atomico, nucleare, sub-nucleare, quanto quelli a livelli macroscopici.

La teoria Quantistica è caratterizzata dalla profonda astrazione della rappresentazione matematica dei suoi concetti, astrazione ancor più evidente se messa a confronto con la fisica classica. Ad esempio, la meccanica classica rappresenta la posizione di una particella mediante un vettore $\mathbf{x} = (x, y, z) \in \mathbf{R}^3$, le cui componenti sono le proiezioni del punto occupato dalla particella sui tre assi del sistema di riferimento. Per descrivere una di queste componenti secondo la meccanica quantistica nella formulazione di Heisenberg, occorre introdurre una matrice a infinite righe e infinite colonne, i cui elementi sono funzioni del tempo che devono rispettare delle precise condizioni prescritte dalla teoria.

Questa astrazione è sempre risultata incomprensibile, non solo allo studente che per la prima volta si cimenta con la disciplina, ma anche agli uomini stessi che l'hanno creata.

R. Feynman scrive [2] “c’era un tempo in cui sui giornali si leggeva che solo dodici persone al mondo comprendevano la teoria della relatività [....]. Invece credo di poter dire con sicurezza che nessuno ancora comprende la meccanica quantistica [....]. Se ci riuscite, cercate di non chiedervi “ma come può essere così?” Perchè entrerete in un vicolo cieco da cui nessuno è ancora uscito”.
Più formulazioni della teoria quantistica si svilupparono durante la sua genesi. Le due principali sono la “meccanica ondulatoria” di Erwin Schroedinger e la “meccanica delle matrici” di Werner Heisenberg. Benchè in apparenza tali formulazioni appaiono nettamente diverse, fu possibile dimostrarne la completa equivalenza.
In ogni caso, la prima formulazione della teoria quantistica, rigorosa dal punto di vista matematico e logicamente consistente è opera di J. Von Neumann (vedi [3]).
In questo capitolo daremo una formulazione della teoria quantistica secondo Von Neumann in una forma più moderna, conveniente per gli scopi del presente lavoro. In particolare studieremo le nozioni di *osservabili* $1-0$, *stati e stati puri,* che saranno utilizzate nel seguito della tesi.

2. TEORIA QUANTISTICA GENERALE

2.1. Base concettuale

I concetti fisici di base della teoria di Von Neuman [3] sono quello di *osservabile* e quello di *valore di aspettazione.*

- Per osservabile si intende una qualunque grandezza fisica misurabile sul sistema fisico, che può assumere, fissata l’unità di misura, valori nel campo dei numeri reali. Per una particella esempi di osservabili sono le coordinate della posizione, la quantità di moto, il momento angolare lungo una direzione, l'energia, etc. L'insieme di tutte le osservabili viene indicato con $\mathcal{O}$.

- Un valore di aspettazione (*funzioni R*, nella nomenclatura di Von Neumann) è una funzione

$$v : \mathcal{O}_v \to \mathbf{R}, \quad \text{dove } \mathcal{O}_v \subseteq \mathcal{O}$$

che ad ogni osservabile $\mathcal{A} \in \mathcal{O}$ associa un numero reale $v(\mathcal{A})$ che rappresenta il *valore di aspettazione* della grandezza $\mathcal{A}$. Pertanto esso va riferito ad un ensemble statistico di sistemi fisici. Se $\mathcal{A}$ viene misurata su un numero N di sistemi di un ensemble, si otterranno N risultati $a_1, a_2, a_3, ..., a_N$. Il valore medio

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N} a_i}{N}$$

tende a $v(\mathcal{A})$ se $N \to \infty$.

Il concetto di osservabile induce le seguenti considerazioni.

Osservazione 2.1. Sia $\mathcal{A}$ un'osservabile e $\tilde{\sigma}_A$ l'insieme dei suoi possibili valori (detto spettro fisico) e sia

$$f : \tilde{\sigma}_A \to \mathbf{R}$$

una funzione reale. Misurando $\mathcal{A}$ e applicando f al risultato a di $\mathcal{A}$, si ottiene un'altra osservabile che ha $f(a)$ come risultato (Vedi Fig.1).

Questa nuova osservabile viene indicata con $f(\mathcal{A})$. Essenzialmente, $\mathcal{A}$ e $f(\mathcal{A})$ misurano la stessa grandezza, con una scala diversa, se f è iniettiva.

Osservazione 2.2. Se $\{v_1, v_2, ...\}$ è un insieme numerabile di funzioni R, per ogni sequenza μ_1, μ_2,... di numeri reali non negativi tali che $\sum_k \mu_k = 1$ esisterà un altro valore d'aspettazione v come *combinazione convessa*, definita su $\mathcal{O}_v = \cap_k \mathcal{O}_{v_k}, \quad v = \sum_i \mu_i v_i$. Tale v si riferisce all'ensemble di N sistemi che si ottiene prendendo un numero $N(v_i) = \mu_i N$ di sistemi da ogni ensemble corrispondente a v_i, e mettendo insieme tutte le frazioni. $v = \sum_i \mu_i v_i$ rappresenta quindi una miscela statistica degli ensembles descritti dalle v_i.

2.2. Il sistema di assiomi

Gli assiomi della meccanica quantistica secondo Von Neumann possono essere enunciati come segue:

Assioma I. *Ad ogni sistema fisico può essere associato uno spazio di Hilbert complesso e separabile $\mathcal{H}$. Ad ogni osservabile corrisponde uno ed uno solo operatore autoaggiunto A di $\mathcal{H}$. La corrispondenza è bijettiva.*

Per introdurre l'assioma successivo occorre premettere il teorema della rappresentazione spettrale per operatori autoaggiunti.

Teorema 2.1. *(Rappresentazione spettrale). Per ogni operatore autoaggiunto A con spettro $\sigma(A)$ e dominio di definizione D_A denso in $\mathcal{H}$, esiste un'unica famiglia di proiettori ortogonali $\{E_\lambda^A | \lambda \in \mathbf{R}\}$ (risoluzione dell'identità di A) non decrescente in λ, continua a destra rispetto alla norma dei vettori, con $E^A(-\infty) = 0$ e $E^A(\infty) = I$, tale che $\forall g \in D_A$*

$$\langle Ag|g\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d\langle E_\lambda^A g|g\rangle$$

(l'integrale va inteso come l'integrale di Lebesgue-Stieltjes $\int \lambda d\alpha$ rispetto alla funzione $\alpha(\lambda) = \langle E_\lambda^A g|g\rangle$). Più brevemente scriveremo

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda dE_\lambda^A.$$

In particolare:

- *Se E^A non è crescente nel punto λ_0, cioè se esiste $\delta > 0$ tale che $E^A_\lambda = E^A_{\lambda_0}$, $\quad \forall \lambda \in (\lambda_0 - \delta, \lambda_0 + \delta)$, allora $\lambda_0 \notin \sigma(A)$, ovvero λ_0 appartiene al risolvente $\rho(A)$.*
- *Se E^A è crescente e continua in λ_0, allora λ_0 appartiene allo spettro continuo.*
- *Se E^A è crescente e non continua in λ_0, allora λ_0 appartiene allo spettro puntuale $\sigma_P(A)$, cioè è un autovalore.*

Per una trattazione matematica si veda, ad esempio, [4], [5]. Possiamo ora formulare gli altri assiomi.

Assioma II. *Siano $\mathcal{A}$ ed f un'osservabile e una funzione reale (di variabile reale) misurabile; se ad $\mathcal{A}$ corrisponde l'operatore A, allora ad $f(\mathcal{A})$ corrisponde l'operatore $f(A) = \int f(\lambda) dE^A_\lambda$, dove E^A_λ rappresenta la risoluzione dell'identità di A.*

Assioma III. *Siano $\mathcal{A}, \mathcal{S}, ...$ osservabili a cui corrispondono gli operatori $A, S, ...$ Allora esiste un'altra osservabile $\mathcal{A} + \mathcal{S} + ...$ a cui corrisponde l'operatore A+S+......*

Assioma IV. *Se $\mathcal{A}$ è non negativa, nel senso che i suoi possibili valori sono non negativi, allora $v(A) \geq 0$, per ogni valore d'aspettazione v tale che $\mathcal{A} \in \mathcal{O}_v$.*

Assioma V. *Per ogni valore d'aspettazione v, se $a, b, ...$ sono numeri reali e $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}, ... \in \mathcal{O}_v$, allora $v(a\mathcal{A} + b\mathcal{B} + ...) = av(\mathcal{A}) + bv(\mathcal{B}) + ...$*

Gli assiomi della teoria di Von Neumann (in particolare l'assioma I) dimostrano la profonda astrazione della rappresentazione matematica dei concetti fisici nella teoria quantistica, a cui abbiamo accennato. Gli assiomi II-V affermano essenzialmente che la struttura algebrica dell'insieme degli operatori di $\mathcal{H}$ riflette la struttura algebrica naturale delle grandezze che esse rappresentano.

Esempio 2.1. L'osservabile $\mathcal{Z}$ che ha sempre risultato 0 deve corrispondere all'operatore $Z = \mathbf{0}$. Infatti, se $\mathcal{A}$ è una qualunque osservabile rappresentata dall'operatore A, abbiamo $\mathcal{Z} = f(\mathcal{A})$ prendendo $f(\lambda) = 0$ per ogni λ. Dall'assioma II segue allora

$$Z = f(A) = \int f(\lambda) dE_\lambda = \int 0 dE_\lambda = \mathbf{0}.$$

In maniera analoga, si ottiene che l'osservabile $\mathcal{I}$ che ha sempre risultato 1 deve corrispondere all'operatore $I = \mathbf{1}$. Ovviamente $\mathcal{Z}, \mathcal{I} \in \mathcal{O}_v$, per ogni valore d'aspettazione v.

3. COMPATIBILITÀ TRA OSSERVABILI

Nella Fisica Quantistica non sempre è possibile misurare insieme, cioè sullo stesso campione individuale del sistema fisico, due osservabili $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$. Nella Fisica Classica limitazioni di questo tipo. Per esempio in meccanica classica è possibile misurare contemporaneamente la posizione e la quantità di moto di una particella, mentre secondo la teoria quantistica non può esistere un apparato di misura che permette di misurarle entrambe sullo stesso esemplare del sistema fisico. In teoria quntistica si introduce allora il concetto di *compatibilità.*

Definizione 3.1. *Due osservabili $\mathcal{A}$ ed $\mathcal{B}$ sono compatibili se sono simultaneamente misurabili.*

Per mostrare l'esistenza di coppie di osservabili quantistiche incompatibili, osserviamo che affinchè due osservabili siano contemporaneamente misurabili deve esistere una procedura sperimentale che permette di ottenere i valori di entrambe: ad ogni risultato di questo esperimento, rappresentato dal numero reale λ, deve corrispondere una ben precisa coppia $(f(\lambda), g(\lambda))$ di risultati di $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$. Allora, in accordo con l'osservazione 2.1, questo esperimento definisce una osservabile $\mathcal{T}$ con risultati λ, tali che $\mathcal{A} = f(\mathcal{T})$ e $\mathcal{B} = g(\mathcal{T})$. Queste considerazioni permettono di caratterizzare la compatibilità: due osservabili $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ sono compatibili se e soltanto se sono funzioni di una terza osservabile $\mathcal{T}$.

Dall'assioma II e dalla definizione 3.1 segue che due osservabili sono simultaneamente misurabili se i corrispondenti operatori A e B sono funzioni di uno stesso operatore T. La teoria degli operatori lineari in spazi di Hilbert (v. ad esempio [5]) afferma che due operatori autoaggiunti sono funzioni di uno stesso operatore se e solo se commutano. Si ottiene quindi il seguente risultato:

Teorema 3.1. *Due osservabili $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ sono compatibili se e solo se i corrispondenti operatori commutano:* $[A, B] = \mathbf{0}$.

Esempio 3.1. (i) Lo spazio di Hilbert per descrivere una particella puntiforme è lo spazio $L_2(\mathbf{R}^3)$ delle funzioni di $\mathbf{R}^3$ integrabili in modulo al quadrato (nelle formulazioni correnti viene sottinteso che lo spazio di Hilbert è formato in realtà dalle classi di equivalenza di funzioni uguali quasi ovunque, integrabili al quadrato). La coordinata x_i, i=1,2,3, della posizione è rappresentata dall'operatore

$$Q_i : D_{Q_i} \to L_2(\mathbf{R}^3)$$
$$\psi \to Q_i\psi, (Q_i\psi)(\mathbf{x}) = x_i\psi(\mathbf{x})$$

dove il dominio di definizione D_{Q_i} che rende Q_i autoaggiunto è

$$D_{Q_i} = \{\psi \in L_2(\mathbf{R}^3) : x_i\psi \in L_2(\mathbf{R}^3)\}.$$

Poichè $[Q_i, Q_j] = \mathbf{0} \quad \forall i, j,$ dal teorema 3.2 deducianmo che due diverse coordinate della posizione della particella sono sempre misurabili insieme.

(ii) La quantità di moto lungo la direzione x_i è invece rappresentata dall'operatore

$$P_i : D_{P_i} \to L_2(\mathbf{R}^3)$$

$$(P_i, \psi)(x) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_i}$$

dove $\hbar$ è la costante di Planck diviso 2π. Poichè $[Q_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$ dal teorema 3.2 otteniamo che una componente della quantità di moto non può essere misurata insieme alla stessa componente della posizione. Può essere invece misurata insieme ad una diversa componente della posizione.

4. STATI QUANTISTICI E OPERATORI DENSITÀ

L'assioma I stabilisce che le osservabili di un sistema fisico sono rappresentate nel formalismo matetico della teria da operatori autoaggiunti. La rappresentazione matematica dei *valori di aspettazione* avviene attraverso i cosiddetti *operatori densità*, che sono operatori lineari

$$\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H},$$

positivi, cioè $\langle \psi | \rho \psi \rangle \geq \mathbf{0} \quad \forall \psi \in \mathcal{H}$, tali che $Tr(\rho) = 1$.

Von Neumann, infatti, ha dimostrato il seguente teorema [3]:

Teorema 4.1. *Per ogni valore di aspettazione v, esiste un operatore ρ, autoaggiunto e positivo, con $Tr(\rho) = 1$, tale che per ogni osservabile $\mathcal{A} \in \mathcal{O}_v$ si ha:*

$$v(\mathcal{A}) = Tr(\rho A) \tag{4.1}$$

(A é l'operatore corrispondente ad $\mathcal{A}$).

Dimostrazione. Utilizzeremo la notazione di Dirac, dove $|l\rangle$ indica un vettore di norma 1 e $|l\rangle\langle l|$ il proiettore sul sottospazio unidimensionale generato da $|l\rangle$. Dato un sistema ortonormale completo (sonc)

$$(|1>, |2>, ..., |n>, ..) \subseteq D_A$$

possiamo scrivere; nella notazione di Dirac,

$$A = \sum_{n,m} |n > a_{n,m} < m|, \quad \text{con } a_{nm} = \langle n|A|m\rangle. \tag{4.2}$$

L'operatore A, essendo l'operatore corrispondente all'osservabile $\mathcal{A}$, è autoaggiunto, e quindi:

$$Re(a_{nm}) = Re(a_{mn}), \qquad Im(a_{nm}) = -Im(a_{mn}), \tag{4.3}$$

dove Re indica la parte reale e Im quella immaginaria. Dalle (4.2) e (4.3) segue:

$$\begin{aligned}
A &= \sum_{n,m} |n > a_{nm} < m| = \qquad (4.4)\\
&= \sum_{n} |n >< n| a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n \neq m}} |n >< m| a_{nm} = \\
&= \sum_{n} |n >< n| a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n > m}} |n >< m| a_{nm} + \sum_{\substack{n,m \\ n < m}} |n >< m| a_{nm} = \\
&= \sum_{n} |n >< n| a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n > m}} |n >< m| a_{nm} + \sum_{\substack{n,m \\ n > m}} |m >< n| a_{mn} = \\
&= \sum_{n} |n >< n| a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n > m}} |n >< m| (Re(a_{nm}) + iIm(a_{nm})) + \\
&+ \sum_{\substack{n,m \\ n > m}} |m >< n| (Re(a_{mn}) + iIm(a_{mn})) = \\
&= \sum_{n} |n >< n| a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n > m}} |n >< m| (Re(a_{nm}) + iIm(a_{nm})) + \\
&+ \sum_{\substack{n,m \\ n > m}} |m >< n| (Re(a_{nm}) - iIm(a_{nm})) =
\end{aligned}$$

$$= \sum_n |n >< n| a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} (|n >< m| + |m >< n|) Re(a_{nm}) +$$
$$+ \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} i(|m >< n| - |m >< n|) Im(a_{nm}).$$

Gli operatori:

$$D^{(n,n)} = |n >< n|$$

$$B^{(n,m)} = |n >< m| + |m >< n|$$

$$C^{(n,m)} = i(|n >< m| - |m >< n|)$$

sono autoaggiunti; se indichiamo le osservabili corrispondenti rispettivamente, secondo l'Assioma I, con: $\mathcal{D}^{(n,n)}, \mathcal{B}^{(n,m)}$ e $\mathcal{C}^{(n,m)}$, possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} \mathcal{A} = & \sum_n \mathcal{D}^{(n,n)} a_{nn} + \\ & + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} \mathcal{B}^{(n,m)} Re(a_{nm}) + \\ & + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} \mathcal{C}^{(n,m)} Im(a_{nm}), \end{aligned}$$

da cui segue, per l'Assioma V,

$$\begin{aligned} v(\mathcal{A}) = & \sum_n v(\mathcal{D}^{(n,n)}) a_{nn} + \\ & + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} v(\mathcal{B}^{(n,m)}) Re(a_{nm}) + \\ & + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} v(\mathcal{C}^{(n,m)}) Im(a_{(nm)}). \end{aligned}$$

Se poniamo:

$$\begin{aligned}
\rho_{nn} &= v(\mathcal{D}^{(n,n)}) \\
\rho_{nm} &= \frac{1}{2}v(\mathcal{B}^{(n,m)}) + \frac{1}{2}iv(\mathcal{C}^{(n,m)}) \quad n > m \\
\rho_{mn} &= \frac{1}{2}v(\mathcal{B}^{(n,m)}) - \frac{1}{2}iv(\mathcal{C}^{(n,m)}) \quad n > m
\end{aligned} \tag{4.5}$$

sommando e sottraendo le ultime due otteniamo:

$$\begin{aligned}
v(\mathcal{B}^{(n,m)}) &= \rho_{nm} + \rho_{mn} \\
v(\mathcal{C}^{(n,m)}) &= i(\rho_{mn} - \rho_{nm})
\end{aligned}$$

per cui:

$$\begin{aligned}
v(\mathcal{A}) = & \sum_n \rho_{nn}a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} (\rho_{nm} + \rho_{mn})Re(a_{nm}) + \\
& + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} i(\rho_{mn} - \rho_{nm})Im(a_{nm}) = \\
= & \sum_n \rho_{nn}a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} \rho_{nm}(Re(a_{nm}) - iIm(a_{nm})) + \\
& + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} \rho_{mn}(Re(a_{nm}) + iIm(a_{nm})) = \\
= & \sum_n \rho_{nn}a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} \rho_{nm}(Re(a_{mn}) + iIm(a_{mn})) + \\
& + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} \rho_{mn}(Re(a_{nm}) + iIm(a_{nm})) = \\
= & \sum_n \rho_{nn}a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} \rho_{nm}a_{mn} + \\
& + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} \rho_{mn}a_{nm} =
\end{aligned}$$

$$= \sum_{n} \rho_{nn} a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n>m}} \rho_{nm} a_{mn} +$$
$$+ \sum_{\substack{n,m \\ n<m}} \rho_{nm} a_{mn} =$$
$$= \sum_{n} \rho_{nn} a_{nn} + \sum_{\substack{n,m \\ n\neq m}} \rho_{nm} a_{mn} = \sum_{n,m} \rho_{nm} a_{mn}.$$

Se definiamo l'operatore $\hat{\rho}$ con

$$\langle n|\hat{\rho}|m\rangle = \rho_{nm}$$

allora

$$v(\mathcal{A}) = Tr(\hat{\rho}A), \tag{4.6}$$

con $\hat{\rho}$ operatore autoaggiunto indipendente da $\mathcal{A}$.
Ma $v(\mathcal{I}) = 1 = Tr(\hat{\rho} \cdot \mathbf{1})$, quindi $\hat{\rho}$ deve avere traccia unitaria. Ora proviamo che $\hat{\rho}$ deve essere definito positivo, ossia

$$\langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle \geq 0 \quad \forall|\phi\rangle.$$

Sia dunque $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ con norma unitaria e sia $\mathcal{A}_{|\phi\rangle}$ l'osservabile corrispondente a $\hat{P}_{|\phi\rangle} = |\phi><\phi|$, allora, $\mathcal{A}^2_{|\phi\rangle}$ è l'osservabile corrispondente a $\hat{P}^2_{|\phi\rangle}$. $\mathcal{A}^2_{|\phi\rangle}$ è quindi una quantità non negativa, pertanto anche il suo valore d'aspettazione deve essere non negativo:

$$v(\mathcal{A}^2_{|\phi\rangle}) = Tr(\hat{\rho}\hat{P}^2_{|\phi\rangle}) \geq \mathbf{0}, \tag{4.7}$$

e poichè $\hat{P}^2_{|\phi\rangle} = \hat{P}_{|\phi\rangle}$ si ha

$$Tr(\hat{\rho}\hat{P}_{|\phi\rangle}) \geq \mathbf{0};$$

ne segue che:

$$\begin{aligned} 0 \le Tr(\hat{\rho}\hat{P}_{|\phi\rangle}) =& \sum_n \langle n|\hat{\rho}\hat{P}_{|\phi\rangle}|n\rangle \\ =& \sum_n \langle n|\hat{\rho}(\langle\phi|n\rangle)|\phi\rangle \\ =& \sum_n \langle\phi|n\rangle\langle n|\hat{\rho}|\phi\rangle \\ =& \langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle. \end{aligned}$$

Infine proviamo che $\hat{\rho}$ dipende solo dal valore di aspettazione cui si riferisce, e non dalla base utilizzata per determinarlo.
Se $\hat{\rho}$ ed $\hat{\rho}'$ sono due operatori statistici corrispondenti allo stesso valore di aspettazione v, e siano, rispettivamente $\{|n\rangle\}$ e $\{|\mu\rangle\}$ i sonc utilizzati per determinarli. Allora qualunque sia A autoaggiunto, si ha

$$Tr(\hat{\rho}A) = Tr(\hat{\rho}'A).$$

Per A $= \hat{P}_{|\phi\rangle}, \langle\phi|\phi\rangle = 1$, abbiamo:

$$\begin{aligned} Tr(\hat{\rho}\hat{P}_{|\phi\rangle}) =& \sum_n \langle n|\hat{\rho}\hat{P}_{|\phi\rangle}|n\rangle \\ =& \sum_n \langle n|\hat{\rho}(\langle\phi|n\rangle)|\phi\rangle \\ =& \sum_n \langle\phi|n\rangle\langle n|\hat{\rho}|\phi\rangle \\ =& \langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Tr(\hat{\rho'}\hat{P}_{|\phi\rangle}) =& \sum_n \langle\mu|\hat{\rho'}\hat{P}_{|\phi\rangle}|\mu\rangle \\ =& \sum_n \langle\mu|\hat{\rho'}(\langle\phi|\mu\rangle)|\phi\rangle \\ =& \sum_n \langle\phi|\mu\rangle\langle\mu|\hat{\rho'}|\phi\rangle \\ =& \langle\phi|\hat{\rho'}|\phi\rangle. \end{aligned}$$

Quindi:

$$\langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{\rho'}|\phi\rangle$$

e questo per ogni $|\phi\rangle$ con $\langle\phi|\phi\rangle = 1$, allora:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho'},$$

cosicchè $\hat{\rho}$ non può dipendere dalla base scelta.

Questo permette di rappresentare nel formalismo matematico il concetto fisico di valore d'aspettazione. L'operatore densità ρ che rappresenta un valoe d'aspettazione v viene identificato come lo *stato quantistico* del sistema.

5. OSSERVABILI 1-0 E PROIETTORI ORTOGONALI

Sia $\mathcal{T}$ una osservabile che può assumere solo due valori: 0 oppure 1. Le osservabili che hanno questa caratteristica vengono chiamate osservabili $1-0$. Mostreremo adesso che tali osservabili sono caratterizzate dall'essere rappresentate da proiettori ortogonali.

Infatti, per tali osservabili è possibile identificare il valore d'aspettazione con la probabilità di accadimento del valore 1:
se indichiamo con $p(1)$ e $p(0)$ le probabilità dei risultati 1 e 0, rispettivamente, dovremmo avere:

$$v(\mathcal{T}) = 0 \cdot p(0) + 1 \cdot p(1) = p(1). \tag{5.8}$$

Allora dal teorema 4.1 otteniamo:

$$p(1) = v(\mathcal{T}) = Tr(\rho \cdot T). \tag{5.9}$$

Data una qualunque osservabile $\mathcal{A}$, fissiamo un intervallo $\Delta = (a, b] \in \mathcal{B}(\mathbf{R})$, e consideriamo il funzionale caratteristico di Δ,

$$\chi_\Delta : \mathbf{R} \to \mathbf{R}, \quad \chi_\Delta(x) = \begin{cases} 1, \text{ se } x \in \Delta \\ 0, \text{ se } x \notin \Delta\,. \end{cases}.$$

Allora $\chi_\Delta(\mathcal{A})$ è un'osservabile $1-0$ che assume il valore 1 se $a \in \Delta$, e il valore 0 se $a \notin \Delta$.
Determiniamo l'operatore autoaggiunto T_Δ corrispondente all'osservabile $1-0 \quad \mathcal{T}_\Delta = \chi_\Delta(\mathcal{A})$; usando l'Assioma I e il Teorema 2.1,

$$T_\Delta = \int \chi_\Delta(\lambda) dE_\lambda^A = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \int_{a+\varepsilon}^{b+\varepsilon} dE_\lambda = E_b^A - E_a^A.$$

T_Δ è un proiettore. Infatti, siccome E_λ^A è non decrescente in λ

$$\mu \leq \lambda \quad \text{implica} \quad E_\mu^A E_\lambda^A = E_\lambda^A E_\mu^A = E_\mu,$$

allora

$$\begin{aligned} T_\Delta^2 =&(E_b^A - E_a^A)(E_b^A - E_a^A) \\ =&E_b^{A^2} - E_b^A E_a^A - E_a^A E_b^A + E_a^{A^2} \\ =&E_b^A - 2E_a^A + E_a^A = E_b^A - E_a^A = T_\Delta. \end{aligned}$$

Allora, per la (5.8), la probabilità $P(\mathcal{A}, \Delta)$ che una misurazione di $\mathcal{A}$ produca un risultato $a \in \Delta$ è

$$P(A, \Delta) = Tr(\rho[E_b^A - E_a^A]). \tag{5.10}$$

Un numero reale a è un risultato possibile per l'osservabile $\mathcal{A}$ se e soltanto se per ogni $\delta > 0$ la probablità $P(\mathcal{A}, (a-\delta, a+\delta])$ che una misurazione di $\mathcal{A}$ produca un risultato nell'intorno $(a-\delta, a+\delta]$ di a è diversa da zero.
Chiameremo spettro fisico di $\mathcal{A}$ l'insieme chiuso $\hat{\sigma}(\mathcal{A})$ dei suoi risultati possibili (il suo complementare è aperto).
Allora dal Teorema (2.1) e dalla (5.10) concludiamo che

Teorema 5.1. *Un numero reale a è un risultato possibile di A se e soltanto se $a \in \sigma(A)$.*

In altre parole lo spettro fisico di $\mathcal{A}$ coincide con lo spettro matematico dell'operatore A.

Sia $\mathcal{T}$ un'osservabile $1-0$, e T l'operatore autoaggiunto che la rappresenta. Dal Teorema (5.1) si ha che $\sigma(T) = \{0, 1\}$.
Un operatore autoaggiunto ha lo spettro costituito dai soli autovalori 0 e 1 se e soltanto se $P^2 = P$, cioè se e soltanto se è un proiettore ortogonale. Pertanto

Teorema 5.2. *I proiettori ortogonali corrispondono biunivocamente alle osservabili 1-0.*

6. STATI PURI

In questo paragrafo studieremo l'importante classe degli "stati puri".
Un operatore densità ρ è detto *puro* se

$$\rho = \lambda\rho_1 + (1-\lambda)\rho_2 \quad \text{con} \quad \lambda^2 < \lambda \quad \text{implica} \quad \rho_1 = \rho_2 = \rho.$$

Dal punto di vista fisico, la purezza di ρ significa che l'ensemble statistico che esso descrive non può essere ottenuto come miscela statistica di ensembles descritti da differenti funzioni R (Osserv. 2.2).

Un operatore densità ha sempre spettro puntuale puro $\sigma(\rho) = (\lambda_1, \lambda_2 ....)$, con $\lambda_i geq 0$ (V. [6]). Siano $M_1, M_2, ..., M_n$, gli autospazi corrispondenti agli autovalori λ_1, $\lambda_2, ..., \lambda_n, ...$ Indichiamo con $P_1, P_2, ..., P_n, ...$ i proiettori che proiettano su tali autospazi.
Allora

$$\rho = \sum_i \lambda_i P_i.$$

Proposizione 6.1. Se $\lambda_i > 0$, allora

$$\dim M_i < +\infty.$$

Dimostrazione. Se $\dim M_{i_0} = +\infty$ e $\lambda_{i_0} > 0$, poichè $\dim M_i = Tr(P_i)$ si avrebbe:

$$Tr(\rho) = \sum_i \lambda_i Tr(P_i) \geq \lambda_{i_0} Tr(P_{i_0}) = \infty$$

mentre $Tr(\rho) = 1$.

Se ρ è un operatore densità puro, allora ovviamente, $P_i = P_j \quad \forall i, j$ tali che $\lambda_i \neq 0, \lambda_j \neq 0$.
Pertanto, se ρ è puro,

$$\rho = kP$$

dove P è un proiettore di rango finito, per la Proposizione 6.1, e

$$k = \frac{1}{Tr(P)}$$

dove $Tr(P)$ è la dimensione dell'immagine M di P e pertanto è un numero naturale:

$$Tr(P) = n.$$

Ora sia $u_1, u_2, ..., u_n$ una base ortonormale di M. Allora

$$P = \sum_{i=1}^{n} |u_i >< u_i|$$

e di conseguenza

$$\rho = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n} |u_i >< u_i|.$$

Pertanto, se ρ è puro, $|u_1 >< u_1| = |u_2 >< u_2| = ... = |u_n >< u_n|$.
Allora ogni operatore d ensità puro è un proiettore di rango 1, quindi esiste un vettore $\psi \in \mathcal{H}, \quad \|\psi\| = 1$ tale che

$$\rho = |\psi >< \psi|.$$

Per gli stati puri $\rho = |\psi >< \psi|$ il valore di aspettazione di un'osservabile $\mathcal{A}$ rappresentata dall'operatore A si può esprimere nel seguente modo:

$$v(A) = \langle\psi|A\psi\rangle. \tag{6.1}$$

Infatti, sia $\{u_n\}$ una base ortonormale di $\mathcal{H}$ tale che $u_1 = \psi$. Allora, dal teorema 4.1 si ha:

$$\begin{aligned} v(\mathcal{A}) =& Tr(\rho A) = \sum_k \langle u_k|\rho A u_k\rangle \\ =& \langle u_1|\rho A u_1\rangle + \sum_{k>1} \langle u_k|\rho A u_k\rangle \\ =& \langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|A\psi\rangle + \sum_{k>1} \langle u_k|u_1\rangle\langle u_1|A u_k\rangle = \langle\psi|A\psi\rangle. \end{aligned}$$

[1] B. Van der Waerden, *Sources of quantum mechanics*, North-Holland Publishing co., Amsterdam, 1967

[2] R. Feynman, *La legge fisica,* Universale scientifica Boringhieri, Torino, 1971

[3] J. von Neumann, *Mathematical foundations of quantum mechanics*, Princeton University Press, Princeton 1955

[4] E. Kreyszig, *Introductory functional analysis with applications*, John Wiley e Sons, New York 1978

[5] F. Riesz, B. Sz. Nagy, *Lecons D'analyse fonctionnelle*, Gauthier-Villars, Paris 1972.