

Meccanica Quantistica

Roberto Gargiulo

31 dicembre 2020

Indice

1	Scattering	8
1.1	Lezione 1	8
1.1.1	Introduzione	8
1.1.2	Scattering Classico	8
1.1.3	Orbita di scattering	8
1.1.4	Tipi di orbite	9
1.1.5	Traiettoria Radiale	9
1.1.6	Tipi di Orbite e Potenziali	10
1.1.7	Potenziale Puramente Repulsivo	11
1.1.8	Potenziale non puramente Repulsivo	12
1.2	Lezione 2	13
1.2.1	Condizione di moto libero asintotico	13
1.2.2	Sezione d'Urto	14
1.2.3	Sezione d'urto di Rutherford	16
1.2.4	Potenziale Repulsivo finito a range finito	16
1.3	Lezione 3	17
1.3.1	Operatore Unitario	17
1.3.2	Operatore Isometrico	18
1.3.3	Convergenza di Vettori e Operatori	18
1.3.4	Limiti di Vettori	19
1.3.5	Limiti di Operatori	20
1.3.6	Integrale Gaussiano	21
1.3.7	Evoluzione Libera di un Paccetto Gaussiano	22
1.4	Lezione 4	23
1.4.1	Scattering Quantistico	23
1.4.2	Condizioni per la Completezza Asintotica	24
1.4.3	Dimostrazione della Condizione Asintotica	25
1.4.4	Operatori di Moeller e Ortogonalità di Stati Legati/Scattering	26
1.4.5	Completezza Asintotica	27
1.5	Lezione 5	27
1.5.1	Operatore di Scattering	27
1.5.2	Ampiezza di Scattering	30
1.6	Lezione 6	31
1.6.1	Equazione Angolare	32
1.6.2	Equazione Radiale	34
1.6.3	Particella Libera	36
1.7	Lezione 7	38
1.8	Lezione 8	41
1.8.1	Caso del Forward Scattering	41
1.8.2	Teorema Ottico	42
1.8.3	Calcolo della Matrice di Scattering per un dato potenziale	43
1.8.4	Autofunzioni Improprie	43
1.9	Lezione 9	45
1.9.1	Ortonormalizzazione delle Funzioni Improprie	46
1.9.2	Particella Libera	48
1.9.3	Decomposizione delle autofunzioni di scattering nella base delle autofunzioni improprie	48
1.9.4	Cambiamento di Base	50
1.9.5	Ampiezza di Scattering e Autofunzioni Improprie di Scattering	50

1.10	Lezione 10	52
1.10.1	Buca Quadrata Sferica	52
1.10.2	Effetto Ramsauer-Townsend	56
1.11	Lezione 11	56
1.11.1	Formula di Breit-Wigner	57
1.11.2	Risonanze, Pura Crescita dello Sfasamento, Stati Legati e Metastabili	60
1.12	Lezione 12	62
1.12.1	Spin in Campo Magnetico Costante	62
1.12.2	Sistema a Due Livelli	63
1.12.3	Molecola di Ammoniaca	63
1.12.4	MASER	64
1.12.5	Risonanza Magnetica Nucleare	65
1.13	Lezione 13	66
1.13.1	Stati Metastabili	66
1.13.2	Legge di Decadimento degli stati Metastabili	71
1.13.3	Stato Metastabile a breve distanze dal centro	72
1.14	Lezione 14	72
1.14.1	Approssimazione di Born	73
1.14.2	Funzione di Green per l'equazione di Helmholtz	74
1.14.3	Correzione all'Ampiezza di Scattering in Approssimazione di Born	75
1.14.4	Approssimazione di Born per un Potenziale Centrale	76
1.14.5	Validità dell'Approssimazione di Born	76
1.14.6	Approssimazione di Born per il Potenziale di Yukawa	76
1.14.7	Accenni ai Processi Anelastici	77
1.15	Lezione 15	77
1.15.1	Ricapitolazione della Teoria delle Perturbazioni Dipendente del Tempo	77
1.15.2	Caso Elastico	79
1.15.3	Urto di un Elettrone su un Atomo di Idrogeno	81
2	Entanglement	83
2.1	Lezione 16	83
2.1.1	Sistemi di N Particelle	83
2.1.2	Prodotto Tensoriale di Spazi di Hilbert	84
2.1.3	Prodotto Tensoriale di Operatori	84
2.1.4	Esempio	84
2.1.5	Esistenza degli Stati Entangled	85
2.1.6	Caso di Due Particelle a Spin 1/2	85
2.1.7	Base di Bell	86
2.2	Lezione 17	87
2.2.1	Il Problema del Teletrasporto	87
2.2.2	Teorema No Cloning	88
2.2.3	Teletrasporto tramite Entanglement	88
2.2.4	Informazione Incompleta	90
2.2.5	Caso Classico	90
2.2.6	Caso Quantistico	91
2.3	Lezione 18	92
2.3.1	Misure di Osservabili su Stati Puri	92
2.3.2	Esempi in cui l'informazione è incompleta	92
2.3.3	Operatore Densità	93
2.3.4	Proprietà Generali dell'Operatore Statistico	94
2.3.5	Operatore Statistico Ridotto	96
2.3.6	Esempio	97

2.4	Lezione 19	97
2.4.1	Stati Puri di un Sistema e dei Sottosistemi	98
2.4.2	Entropia di von Neumann	98
2.4.3	Proprietà dell'Entropia di von-Neumann	99
2.4.4	Massima Entropia	99
2.4.5	Distribuzione di Boltzmann	100
2.5	Lezione 20	101
2.5.1	Impostazione del Problema	101
2.5.2	Problemi della Meccanica Quantistica	103
2.5.3	Esperimento Ideale di EPR	104
2.5.4	Disuguaglianza di Bell	105
3	Invarianza di Gauge	107
3.1	Lezione 21	107
3.1.1	Invarianza di Gauge in Meccanica Classica	107
3.1.2	Invarianza di Gauge in Meccanica Quantistica	108
3.1.3	Inclusione dello Spin	112
3.2	Lezione 22	112
3.2.1	Recap Lezione Precedente	112
3.2.2	Monopolo Magnetico nelle Equazioni di Maxwell	112
3.2.3	Potenziale Vettore di un Monopolo Magnetico	113
3.2.4	Potenziali Vettori in due carte	114
3.2.5	Meccanica Classica	116
3.2.6	Quantizzazione della Carica Elettrica	116
4	Integrale dei Cammini di Feynman	118
4.1	Lezione 23	118
4.1.1	Ricapitolazione sull'Evolutore Temporale	118
4.1.2	Sviluppo di Dyson	119
4.1.3	Funzione di Green	120
4.1.4	Funzione di Green per la Particella Libera	121
4.1.5	Integrale dei Cammini	122
4.1.6	Funzione di Green "Infinitesima" nello Spazio delle Configurazioni	123
4.2	Lezione 24	124
4.2.1	Integrale dei Cammini	124
4.2.2	Formulazione dell'Integrale dei Cammini nello Spazio delle Fasi	125
4.2.3	Caso di un Sistema di Particelle in Tre Dimensioni	126
4.2.4	Caso in presenza di Campo Elettromagnetico	127
4.3	Lezione 25	130
4.3.1	Effetto di Ahornov-Bohm	130
4.3.2	Variante Elettrostatica dell'Effetto AB	133
4.3.3	Variante Gravitazionale dell'Effetto AB	135
4.4	Lezione 26a	136
4.4.1	Integrale sui Cammini con lo Spin	136
4.4.2	Funzione di Partizione con Integrale sui Cammini	136

5	Struttura Iperfine	138
5.1	Lezione 26b	138
5.1.1	Struttura Iperfine degli Spettri Atomici	138
5.2	Lezione 27	139
5.2.1	Recap sullo Scattering	140
5.2.2	Scattering da Sfera Dura	142
5.2.3	Potenziale di Yukawa	143
5.2.4	Potenziale a Delta	144
5.3	Lezione 28	145
5.3.1	Forma Implicita dell'Hamiltoniana Iperfine	145
5.3.2	Numeri Quantici e Ordini di Grandezza	147
5.3.3	Struttura Iperfine degli Stati s	148
5.4	Lezione 29	149
5.4.1	Emissione Spontanea	149
5.4.2	Campo Elettromagnetico Incoerente	150
5.4.3	Rate di Transizione al Primo Ordine Perturbativo	151
5.4.4	Vite Medie di Stati Eccitati Iperfini	152
6	Invarianza e Simmetrie in Meccanica Quantistica	154
6.1	Lezione 30	154
6.1.1	Premesse	154
6.1.2	Enunciato del Teorema di Wigner	155
6.1.3	Dimostrazione del Teorema di Wigner	156
6.2	Lezione 31	158
6.2.1	Fine dimostrazione Teorema di Wigner	158
6.2.2	Isometrie dello Spazio Euclideo	160
6.2.3	Unitarietà degli Operatori relativi a Rototraslazioni	161
6.2.4	Espressione degli Operatori di Rototraslazione	162
6.3	Lezione 32	163
6.3.1	Gruppi e Algebre di Lie	163
6.3.2	Mappa Esponenziale	164
6.3.3	Rappresentazioni	165
6.3.4	Algebra di Lie di $E(3)$	165
6.3.5	Generatori Infinitesimali degli Operatori di Rototraslazione	166
6.3.6	Rototraslazioni finite di Sistemi Quantistici	166
6.3.7	Natura della Rappresentazione di $E(3)$ per una Singola Particella con Spin	167
6.4	Lezione 33	168
6.4.1	Parte Configurazionale della Rappresentazione di $E(3)$ per una Particella con Spin	168
6.4.2	Caso di un Sistema di Particelle	169
6.4.3	Invarianza di Grandezze Fisiche	169
6.4.4	Operatori Tensoriali Irriducibili	169
6.4.5	Importanza degli Operatori Tensoriali Irriducibili	172
6.5	Lezione 34	172
6.5.1	Somme di Momenti Angolari	172
6.5.2	Coefficienti di Clebsch-Gordan	173
6.5.3	Teorema di Wigner-Eckart	174
6.5.4	Applicazioni del Teorema di Wigner-Eckart	176
6.6	Lezione 35	178
6.6.1	Momento Magnetico come Operatore Vettoriale	178
6.6.2	Rotazioni di Spin $1/2$	178
6.6.3	Proiezione di Stati Ruotati su Stati non Ruotati	180
6.7	Lezione 36	181
6.7.1	Rotazioni per Particelle a Spin 1	181
6.7.2	Recap sull'Operatore Statistico	182
6.7.3	Stato Puro di una Particella a Spin $1/2$	182
6.7.4	Miscela Statistica di una Particella a Spin $1/2$	183

Programma

Processi di scattering a canale singolo e a canali multipli. Scattering da potenziale centrale nella teoria classica. Sezione d'urto differenziale, sezione d'urto totale. Formula approssimata della sezione d'urto per piccoli angoli di deflessione. Formula di Rutherford. Il modello nucleare dell'atomo (Landau-Lifshitz).

Operatori unitari ed isometrici. Limiti di vettori ed operatori. L'integrale gaussiano. Evoluzione libera di un pacchetto d'onda gaussiano (Taylor).

Scattering di una particella senza spin da potenziale in Meccanica Quantistica. Condizione asintotica, completezza asintotica. Operatori di Moeller, operatore di scattering. Relazione di interpolazione per gli operatori di Moeller. Conservazione dell'energia. Matrice T on shell. Ampiezza di scattering. Costruzione degli operatori di Moeller per lo scattering da potenziale centrale (Taylor).

Sviluppo in onde parziali dell'ampiezza di scattering. Teorema ottico. Matrice S (Caldirola).

Scattering da una buca quadrata. Effetto Ramsauer-Townsend, risonanze, formula di Breit-Wigner. Stati metastabili. Decadimento di uno stato metastabile (Caldirola).

Approssimazione di Born. Derivazione dell'approssimazione di Born mediante la teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo. Diffusione anelastica di un elettrone da parte di un atomo di idrogeno (Caldirola).

Struttura iperfine degli spettri atomici dei metalli alcalini, dell'idrogeno e del deuterio (Caldirola). La riga a 21 cm dell'idrogeno atomico. Vita media del livello iperfine $1s^1/F = 1$ dell'atomo di idrogeno. (Coehen-Tannoudji).

L'operatore statistico. Equazione di Liouville-von Neumann, operatore statistico ridotto, entropia di von-Neumann, operatore statistico per l'ensemble canonico (Caldirola-Sakurai).

Stati di Bell, Teorema "no cloning", teletrasporto quantistico. Articolo di Einstein-Podolsky-Rosen, disuguaglianza di Bell (Sakurai).

Nozioni sui gruppi, gruppi $SO(n)$, $O(n)$, $SU(n)$. Omomorfismo tra gruppi, i kernel di un omomorfismo. L'omomorfismo tra $SU(2)$ e $SO(3)$. Rappresentazioni di gruppi, rappresentazioni riducibili e totalmente riducibili, rappresentazioni proiettive. Gruppi di Lie, omomorfismi tra algebre di Lie, rappresentazioni di algebre di Lie. Generatori infinitesimi di gruppi di Lie. Algebre di Lie di $SO(3)$ e $SU(2)$. La mappa esponenziale (Balachandran).

Simmetria ed invarianza in Meccanica Quantistica. Teorema di Wigner. Rotazione degli stati di un sistema quantistico, definizione generale del momento angolare di un sistema quantistico. Operatori scalari e vettoriali. Dinamiche invarianti per rotazioni. Deduzione dell'espressione del momento angolare di un sistema di particelle con spin arbitrario. Rotazioni finite dello stato di una particella con spin qualsiasi. Forma esplicita delle matrici di rotazione per particelle con spin $1/2$ ed 1 (Caldirola-Sakurai).

Il gruppo euclideo $E(3)$ dei moti rigidi. Algebra di Lie di $E(3)$. Azione di $E(3)$ sugli stati di un sistema quantistico. Gli operatori del momento angolare e dell'impulso come generatori infinitesimi di $E(3)$ (Balachandran-Sakurai).

Operatori tensoriali irriducibili. Teorema di Wigner-Eckart. Decomposizione di prodotti di operatori tensoriali irriducibili in tensori irriducibili (Messiah).

La molecola di ammoniaca come sistema a due livelli. Il maser ad ammoniaca.

Risonanza magnetica nucleare.

Potenziali elettromagnetici e trasformazioni di gauge in meccanica classica ed in meccanica quantistica. Il monopol magnetico. Quantizzazione di una particella carica nel campo di un monopol magnetico, quantizzazione della carica elettrica (Sakurai).

Integrale di Feynman sui cammini. L'integrale sui cammini di Feynman, nello spazio delle configurazioni e delle fasi (T.D. Lee). Esperimento di Bohm-Aharonov (Sakurai). La funzione di partizione di un sistema quantistico all'equilibrio, scritta come integrale sui cammini. Frequenze di Matsubara.

Programma delle Lezioni

Scattering

Lezione 1 Processi di scattering a canale singolo e a canali multipli. Scattering da potenziale centrale nella teoria classica. Completezza asintotica nello scattering classico. Potenziali a corto range.

Lezione 2 Sezione d'urto differenziale per un bersaglio fisso, sezione d'urto totale. Calcolo della sezione d'urto classica per diffusione da potenziale centrale. Sezione d'urto classica del modello atomico di Rutherford.

Lezione 3 Operatori unitari ed isometrici. Limiti di vettori ed operatori. L'integrale gaussiano. Evoluzione libera di un pacchetto d'onda gaussiano.

Lezione 4 Scattering di una particella senza spin da potenziale in Meccanica Quantistica. Condizione asintotica, completezza asintotica. Operatori di Moller.

Lezione 5 Operatore di scattering. Relazione di interpolazione per gli operatori di Moeller. Conservazione dell'energia. Matrice T on shell. Ampiezza di scattering.

Lezione 6 Esercitazione. Ricapitolazione dell'eq. di Schrodinger di una particella senza spin in un potenziale centrale. La particella libera in coordinate sferiche. Sviluppo delle onde piane in onde sferiche.

Lezione 7 Significato statistico della sezione d'urto differenziale in meccanica quantistica. Relazione tra sezione d'urto differenziale ed ampiezza di scattering.

Lezione 8 Teorema ottico, condizioni al contorno soddisfatte dalle auto-funzioni di scattering,

Lezione 9 Sviluppo dell'ampiezza di scattering in onde parziali.

Lezione 10 Scattering da buca quadrata. Effetto Ramsauer-Townsend.

Lezione 11 Risonanza. Formula di Breit-Wigner. Relazione tra risonanze ed ampiezza della funzione d'onda nel campo di forza.

Lezione 12 Sistemi a due livelli. Precessione di uno spin nel campo magnetico. La molecola di ammoniaca come sistema a due livelli. RMN.

Lezione 13 Stati metastabili. Cenni sulla teoria di Gamow.

Lezione 14 Approssimazione di Born

Lezione 15 Derivazione dell'approssimazione di Born mediante la teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo. Diffusione anelastica di un elettrone da parte di un atomo di idrogeno.

Entanglement

Lezione 16 Stati di sistemi con più particelle e prodotto tensore. Stati entangled. Base di Bell per un sistema di due particelle con due stati.

Lezione 17 Teletrasporto quantistico, traccia di operatori.

Lezione 18 Operatore statistico, stati puri e stati miscela, equazione di Liouville quantistica, operatore statistico ridotto.

Lezione 19 Entropia di von-Neumann.

Lezione 20 EPR e disuguaglianza di Bell

Invarianza di Gauge

Lezione 21 Invarianza di gauge per una particella carica in un campo em, in meccanica classica ed in meccanica quantistica.

Lezione 22 Quantizzazione di una particella carica nel campo di un monopolio magnetico. Quantizzazione della carica elettrica.

Integrale dei Cammini di Feynman

Lezione 23 Proprietà dell'operatore di evoluzione. Funzione di Green dell'operatore di Schroedinger per la particella libera.

Lezione 24 Integrale di Feynman sui cammini per una particella in una dimensione spaziale. Integrale sui cammini nello spazio delle fasi. Generalizzazione per un sistema di N particelle senza spin e per una particella in campo elettromagnetico.

Lezione 25 Esperimento di Aharonov-Bohm. Un esperimento d'interferenza con neutroni nel campo gravitazionale.

Lezione 26a La funzione di partizione di un sistema quantistico all'equilibrio, scritta come integrale sui cammini. Frequenze di Matsubara.

Struttura Iperfine degli Spettri Atomici ad un Elettrone

Lezione 26b Momenti magnetici dei nuclei atomici. Struttura iperfine degli spettri di righe dell'idrogeno e dei metalli alcalini.

Capitolo 1

Scattering

1.1 Lezione 1

1.1.1 Introduzione

Scattering principale tecnica della teoria quantistica. Ci rendiamo conto di questo ricordando: l'esperimento di Rutherford (particelle alfa); l'esperimento di Franck-Hertz (dove osservarono la diffusione di elettroni da un vapore di mercurio contenuto in un tubo a vuoto, dimostrando che l'atomo di mercurio ha uno spettro discreto, come postulata da Bohr pochi anni prima); un altro esperimento di Rutherford che dimostrò che il nucleo ha struttura (collisione $^{14}\text{N} + \alpha \rightarrow ^{17}\text{O} + \text{p}$, implicando che l'atomo di azoto è composto).

Nello studio di fisica delle particelle subnucleare lo scattering ci permette di capire anche la struttura interna delle particelle oltre che il potenziale di interazione. Ad esempio un tale processo è $\text{p} + \text{p} \rightarrow \text{p} + \text{p} + \pi^0$.

Possiamo dividere lo scattering in due categorie: collisioni non relativistiche e collisioni relativistiche. Noi ci limitiamo alle prime, in quanto le seconde richiedono l'uso di teoria quantistica dei campi. Possiamo poi dividere in processi a canale singolo, in cui dati reagenti possono avere un unico insieme di prodotti, e multi-canale, con più insieme di prodotti.

Ritorniamo all'esperimento di Rutherford con atomi di azoto. Questa è una collisione multi-canale.

A bassa energia esempi di esperimento a singolo canale sono $\text{e} + \text{p} \rightarrow \text{e} + \text{p}$, $\text{n} + \alpha \rightarrow \text{n} + \alpha$. In realtà in natura non esistono processi rigorosamente a canale singolo, ma possiamo considerare scattering a canale singolo se ci limitiamo a certe condizioni, ad esempio a basse energie. Il modo più semplice in cui uno scattering è a multi-canale è tramite la produzione o meno di fotoni.

Un esempio semplice di collisione a singolo canale è quello a bersaglio fisso, come nel primo esperimento di Rutherford, dove particelle alfa incidono su atomi di Oro; $\alpha^+ \text{Au} \rightarrow \alpha^+ \text{Au}$. Il più semplice modello di diffusione considerato è quello di Rutherford ed è quello che studieremo più in dettaglio. Questo è valido con buona approssimazione in quanto possiamo sempre separare il moto del centro di massa da quello relativo, notando però che se un corpo è molto più massivo di un altro allora il centro di massa coincide con la posizione della particella più massiva. Possiamo pertanto considerare separatamente il moto del centro di massa e il moto relativo, dove il secondo è dato dalla diffusione da bersaglio fisso.

Tipicamente i potenziali coinvolti sono poi potenziali centrali, di tipo newtoniano.

1.1.2 Scattering Classico

Iniziamo a trattare lo scattering da potenziale con il formalismo classico, in quanto con buona approssimazione fornisce un risultato che chiarisce le generalità di questo fenomeno.

Consideriamo un proiettile incidente su un potenziale, non necessariamente centrale (ad esempio su un gruppo di atomi). Il raggio d'azione del potenziale è dell'ordine di una certa lunghezza d molto piccola. Questo significa che non riusciamo ad osservare la regione di interazione direttamente. Inoltre il tempo di interazione è molto piccolo.

Ad esempio se $d \approx 10^{-8}\text{cm}$ e $v \approx 10^6\text{m s}^{-1}$ allora $\tau \approx 10^{-16}\text{s}$. Pertanto noi in realtà conosciamo la particella solo prima e dopo la collisione. Pertanto nella condizione iniziale e finale la particella si muove di moto rettilineo uniforme. Gli stati della particella sono dunque descritti ciascuno da una retta che descrive la direzione del moto (determinata da certi parametri) e la velocità con cui è percorsa.

1.1.3 Orbita di scattering

L'equazione del moto classica è quella data dalla legge di Newton per una particella in un campo di forze conservativo:

$$m\ddot{\vec{x}} = -\nabla U(\vec{x}) \quad (1.1)$$

Con condizione iniziale:

$$\vec{x}(t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \vec{x}_{in}(t) = \vec{a}_{in} + \vec{v}_{in}t \quad t \ll \tau \quad (1.2)$$

con τ "istante" di interazione (per limite intendiamo $\lim_{t \rightarrow -\infty} |\vec{x}(t) - \vec{x}_{in}(t)| = 0$).

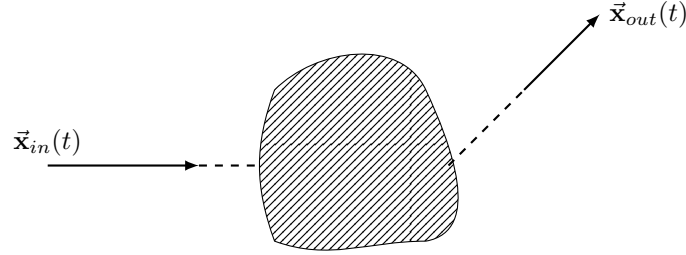
Mentre sappiamo che dopo il moto:

$$\vec{x}(t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \vec{x}_{out}(t) = \vec{a}_{out} + \vec{v}_{out}t \quad t \gg \tau \quad (1.3)$$

dove ci aspettiamo che $\vec{a}_{out}, \vec{v}_{out}$ sono determinati univocamente da $\vec{a}_{in}, \vec{v}_{in}$.

Le funzioni $\vec{x}_{in}, \vec{x}_{out}$ sono detti asintoti in ed out rispettivamente. Dal punto sperimentale (classico) noi possiamo determinare solo questi, ossia i 12 parametri scalari che li definiscono.

Possiamo dunque visualizzare lo scattering classico nella seguente figura.



1.1.4 Tipi di orbite

Supponiamo adesso siano noti $(\vec{a}_{in}, \vec{v}_{in})$. Se possiamo calcolare $(\vec{a}_{out}, \vec{v}_{out})$ allora il problema è risolto ai fini pratici (possiamo prevedere il risultato dell'esperimento). In realtà se il potenziale è attrattivo in certe regioni ci aspettiamo esistano anche moti limitati $\vec{x}(t)$, che però non descrivono i processi di collisioni.

Dividiamo dunque le orbite $\vec{x}(t)$ in orbite limitate (corrispondenti a stati legati) e orbite non limitate (corrispondenti a stati non legati). Queste seconde orbite si dividono in: orbite di scattering, ossia orbite con asintoti di in e out; altro, che includa processi di cattura (con solo asintoto di in), di disintegrazione (solo asintoto di out).

La situazione ideale nella teoria dello scattering è quella in cui le orbite di scattering sono tutte e sole le orbite non limitate. Questa situazione (che non si verifica esattamente) dipende dal tipo di potenziale considerato (ossia da come interagiscono le due particelle).

Troveremo ad esempio che per un potenziale coulombiano, che non è a corto range, l'asintoto di out non è un moto libero ma sono necessarie correzioni logaritmiche nel tempo (la retta non è percorsa a velocità costante). In realtà praticamente questo non esclude molto, ad esempio in fisica atomica l'interazione coulombiana con un nucleo è schermata a grande distanza dagli elettroni che orbitano attorno ad esso.

Iniziamo a considerare il caso di un potenziale centrale. Supponiamo che questo si annulli all'infinito:

$$U(\vec{x}) = U(r) \quad r = |\vec{x}| \quad \lim_{r \rightarrow \infty} U(r) = 0 \quad (1.4)$$

Ricordiamo alcuni risultati di meccanica classica: il momento angolare rispetto al centro del campo di forze $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m\vec{r} \times \vec{v}$ è conservato e dunque il moto giace in un piano Σ . L'orbita della particella è dunque limitata ad un piano ed è descritta dalle coordinate polari $\vec{r}(t) = (r(t), \phi(t))$.

1.1.5 Traiettoria Radiale

La proiezione del momento sull'asse z (perpendicolare al piano) è dato da:

$$L_z = mr^2\dot{\phi} > 0 \Rightarrow \dot{\phi} = \frac{L}{mr^2} > 0 \quad (1.5)$$

Pertanto ϕ è una funzione strettamente crescente di t .

Ricordiamo che l'energia della particella è data da:

$$W = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + U(r) = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + U_{\text{eff}}(r) \quad (1.6)$$

Ossia il momento angolare risulta in una barriera centrifuga che fornisce un potenziale efficace. Siccome la forza è conservativa allora W è una costante del moto. Possiamo isolare \dot{r} , scegliendo il segno a seconda di avvicinamento e allontanamento:

$$\dot{r} = \pm \left[\frac{2}{m}(W - U(r)) \right]^{1/2} \Rightarrow dt = \pm \frac{dr}{\left[\frac{2}{m}(W - U(r)) \right]^{1/2}} \quad (1.7)$$

Pertanto integrando quest'equazione troviamo $t(r)$ che possiamo invertire trovando $r(t)$, almeno formalmente:

$$t - t_0 = \pm \int_{r_0}^r \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}(W - U(x))}} \quad (1.8)$$

Infatti questo integrale difficilmente può essere calcolato esattamente e dunque è difficile da invertire. Fornisce comunque utili informazioni al moto.

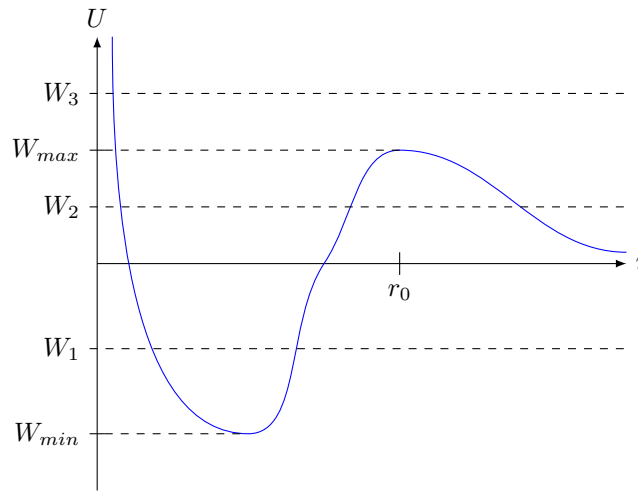
1.1.6 Tipi di Orbite e Potenziali

Potenziale Asintoticamente Completo

Possiamo capire le caratteristiche del moto disegnando un grafico del potenziale efficace. Consideriamo il caso di un potenziale che decade a 0 in $+\infty$ più velocemente di $1/r^2$ e va a $+\infty$ in 0 più lentamente di $1/r^2$.

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 U(r) = 0 \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{U(r)}{r^2} = 0 \quad (1.9)$$

Consideriamo poi un primo caso di un potenziale efficace che ha un minimo negativo e massimo positivo, come in figura.



Pertanto a basse distanze la barriera centrifuga (il cui valore dipende dal valore di $L > 0$ scelto) predomina mentre a grande distanze prevale il potenziale. Troviamo dunque un minimo negativo e un massimo positivo. Dato un livello W allora il moto avviene per i valori di r per cui $U(r) < W$. Esaminiamo i possibili casi.

Se $W_1 < 0$ le orbite sono limitate, e certamente non sono non-limitate e in particolare di scattering.

Se $0 < W_2 < W_{max}$ allora ci sono due possibilità. Se r_0 appartiene alla regione esterna allora il moto è non limitato (corrisponde al caso di una velocità non sufficiente a penetrare nella barriera centrifuga, che è un esempio di orbita di scattering), mentre se appartiene alla regione interna allora è limitato (non ci interessa).

Per $W_3 \geq W_{max}$ le orbite possibili sono tutte non limitate. Sebbene siano possibili orbite non limitate e non di scattering, l'insieme di queste soluzioni è di misura nulla (e dunque trascurabili nel caso di medie sulle soluzioni, quelle effettivamente interessanti negli esperimenti).

Se $W_3 = W_{max}$ si trova infatti che se $r > r_0$ allora il moto impiega un tempo infinito ad arrivare in r_0 e dunque fa un numero infinito di giri attorno al centro (moto a spirale, senza asintoto di out), risultando nella cattura. Questa soluzione può dunque essere ignorata per ogni scopo pratico.

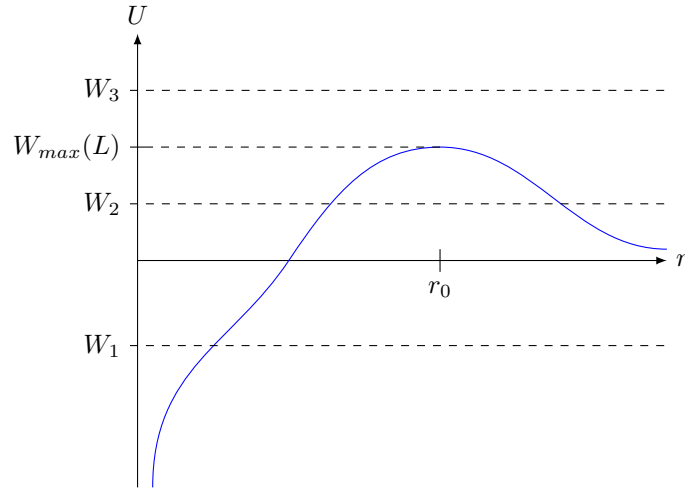
Potenziale Non Asintoticamente Completo

In realtà esistono casi in cui esiste un insieme di tali soluzioni non a misura nulla.

Consideriamo un caso in cui $U(r)$ va a 0 più velocemente di $1/r^2$. Il caso più semplice è:

$$U(r) = -\frac{q}{r^3} \Rightarrow \lim_{r \rightarrow 0} r^2 U(r) = -\infty \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{U(r)}{r^2} = 0 \quad (1.10)$$

In questo caso vi è un unico massimo in W_{max} , che dipende dal valore di L scelto $W_{max}(L)$.



Se $0 < W < W_{max}$ allora ritroviamo moti non limitati per r nella regione esterna e un moto limitato. Per $W > W_{max}$ vi è invece un moto attrattivo in cui la particella compie un numero finito di giri attorno al centro (il potenziale efficace non è più repulsivo nell'origine). Sono possibili dunque sia catture che decadimenti (a seconda di come è percorsa la curva), che formano un insieme di misura non nulla (anzi, infinita, rispetto a quella finita dei moti di scattering). Diciamo dunque che il processo di scattering non è asintoticamente completo.

1.1.7 Potenziale Puramente Repulsivo

Notiamo che **potenziali puramente repulsivi** $U(r) > 0$ sono **sempre asintoticamente completi**. In questo caso non esistono orbite limitate per ogni $W(> 0)$ infatti le orbite sono instabili e non limitate e dunque di scattering.

Cerchiamo adesso come calcolare l'angolo totale di deflessione θ . Questo valore insieme alla distanza tra le rette che passano nel centro con stessa pendenza degli asintoti, che prende il nome di parametro di impatto b , fornisce univocamente \vec{v}_{out} a partire da \vec{v}_{in} .

Le equazioni rilevanti sono:

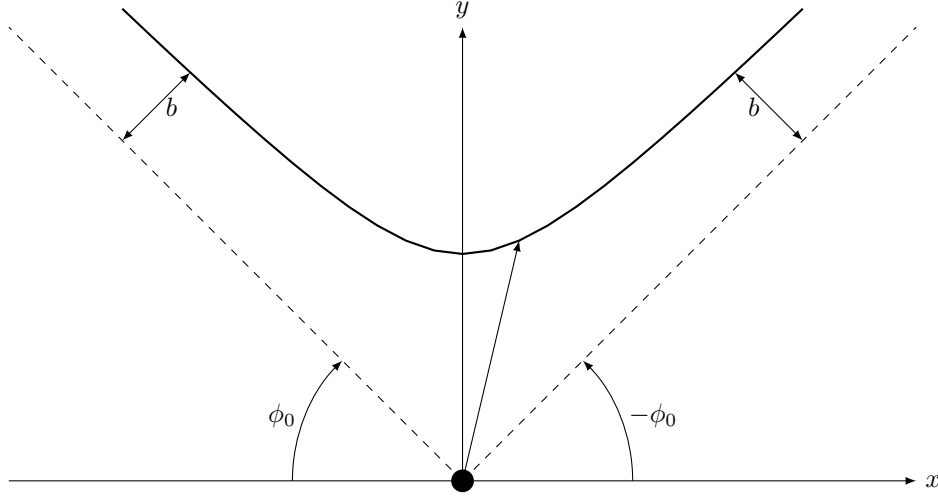
$$\begin{cases} \dot{r} = \pm \left[\frac{2}{m} (W - U(r)) \right]^{1/2} \\ \dot{\phi} = \frac{L}{mr^2} \end{cases} \Rightarrow \frac{dr}{d\phi} = \frac{\dot{r}}{\dot{\phi}} = \mp \frac{mr^2}{L} \sqrt{\frac{2}{m} (W - U_{eff}(r))} \quad (1.11)$$

da cui:

$$\boxed{d\phi = \mp \frac{L}{r^2} \frac{dr}{\sqrt{2m(W - U_{eff}(r))}}} \quad (1.12)$$

con $-$ per avvicinamento e $+$ di allontanamento.

Questa può essere integrata tra $r = \pm\infty$ fornendo il valore dell'angolo di deviazione. Notiamo in realtà che dobbiamo distinguere tra il caso di avvicinamento e allontanamento, dividendo in due l'integrale. Notiamo che la traiettoria è simmetrica rispetto al punto di inversione. Infatti una volta l'integrale va fatto tra $r = +\infty$ ed $r = r_0$ con segno $-$, e nell'altro tra $r = r_0$ ed $r = +\infty$ con segno $+$. Pertanto scegliendo come sistema di riferimento uno (destrorso) con il punto di inversione per cui $r = r_0$ giace su un asse, troviamo $\phi(t = -\infty) = \phi_0, \phi(t = +\infty) = -\phi_0$. Inoltre in questo caso $\phi_0 < \pi/2$. L'angolo ϕ_0 è misurato tra le semirette che partono dal centro parallele agli asintoti e l'asse OA.



Troviamo dunque:

$$\phi(r) = \pm \int_{r_0}^r \frac{L}{x^2} \frac{dx}{\sqrt{2m(W - U_{\text{eff}}(x))}} \quad (1.13)$$

dove $W - U_{\text{eff}}(r_0) = 0$, per determinare la posizione di inversione del moto. Fissati W, L allora r_0 è determinato univocamente se il potenziale puramente repulsivo (o comunque lo è in una certa regione), ossia $r_0 = r_0(W, L)$.

Troviamo poi:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \phi(t) = \pm\phi_0 = \pm \int_{r_0}^{\infty} \frac{L}{x^2} \frac{dx}{\sqrt{2m(W - U_{\text{eff}}(x))}} \quad (1.14)$$

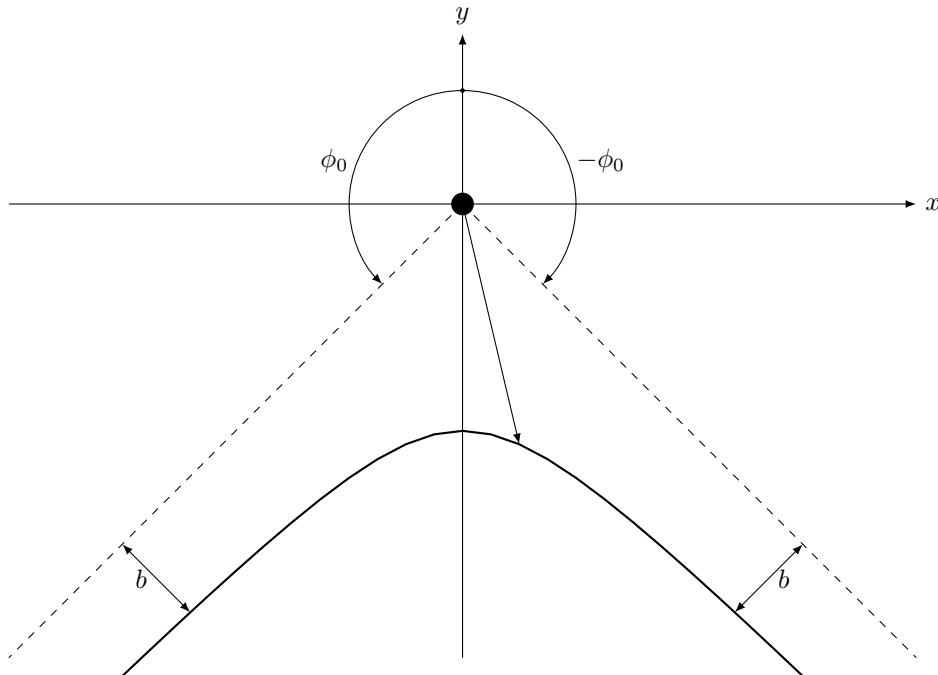
L'angolo di scattering coincide dunque con $\theta = \pi - 2\phi_0$, da cui $\pi \geq \theta \geq 0$.

Per determinare poi il parametro di impatto b facciamo uso della conservazione dell'energia e del momento angolare:

$$L = mv_{\infty} b \quad W = \frac{1}{2}mv_{\infty}^2 \Rightarrow b = \frac{L}{mv_{\infty}} \quad (1.15)$$

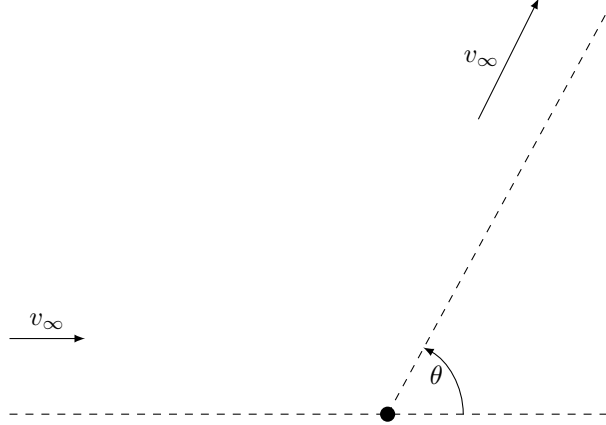
1.1.8 Potenziale non puramente Repulsivo

Se invece il potenziale non è puramente repulsivo allora il problema cambia. Troviamo $\phi_0 > \pi/2$. In questo caso $\tilde{\theta} = 2\phi_0 - \pi$ e dunque è possibile anche $\tilde{\theta} > \pi$, ossia è possibile anche che la particella compia un giro intero attorno al nucleo. Siccome non sappiamo questo usiamo la definizione generale $\theta = \pm\tilde{\theta} + 2m\pi$ con $0 \leq \theta \leq \pi$, ossia lo scegliamo (tramite m opportuno) sempre positivo e tra 0 e π .



Chiaramente se $\phi_0 < \pi$ (come in figura) allora $\tilde{\theta} < \pi$ e dunque $\theta = \tilde{\theta}$.

Troviamo poi che l'angolo di deflessione θ è una funzione del parametro di impatto e della velocità asintotica (o equivalenti) $\theta = \theta(v_\infty, b) = \theta(W, L)$, ma solo nel caso in cui $U(r)$ abbia completezza asintotica.



Riferimenti: Taylor (21-25), Landau-Lifshitz/Goldstein per il problema di scattering classico da potenziale centrale.

1.2 Lezione 2

1.2.1 Condizione di moto libero asintotico

Vogliamo adesso trovare sotto quale condizione l'asintoto viene percorso con legge lineare (di moto libero/rettilineo uniforme). Questo sperimentalmente non viene misurato da strumenti quali la lastra fotografica, ma è invece possibile per la camera multifilo. La condizione di convergenza dipende in realtà da quanto velocemente il potenziale va a 0.

Per determinare questa è sufficiente qualche calcolo.

Poniamoci nel sistema di riferimento tale che:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} y(t) = b \quad \lim_{t \rightarrow -\infty} x(t) = r(t) \quad (1.16)$$

Vediamo sotto quali condizioni vale ($v_\infty = \sqrt{2mW} > 0$):

$$x(t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} x_0 - v_\infty t \quad (1.17)$$

Ricordiamo l'equazione della legge oraria $t(r)$ nel caso di avvicinamento (segno $-$), con condizione iniziale $r(0) = r_0$ distanza minima:

$$t(r; v_\infty, b) = - \int_{r_0}^r \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}(W - U(x))}} = - \int_{r_0}^r \frac{dx}{\sqrt{v_\infty^2 - \frac{2U(x)}{m} - \frac{v_\infty^2 b^2}{x^2}}} \quad (1.18)$$

Vogliamo imporre la condizione di moto libero iniziale, che insieme a quella asintotica di retta:

$$r(t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} x(t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} x_0 - v_\infty t \quad (1.19)$$

Pertanto per $r \gg r_0$, possiamo scegliere un $R \gg r_0$ tale che $R < r$ (con R fissato) tale che:

$$t = - \int_{r_0}^R \frac{dx}{\sqrt{v_\infty^2 - \frac{2U(x)}{m} - \frac{v_\infty^2 b^2}{x^2}}} - \int_R^r \frac{dx}{\sqrt{v_\infty^2 - \frac{2U(x)}{m} - \frac{v_\infty^2 b^2}{x^2}}} = -A(R) - \int_R^r \frac{dx}{\sqrt{v_\infty^2 - \frac{2U(x)}{m} - \frac{v_\infty^2 b^2}{x^2}}} \quad (1.20)$$

dove il secondo termine è il resto.

Siccome R, r sono grandi allora anche x nel resto è grande e dunque $U(x), 1/x^2$ sono piccoli. Possiamo allora fare uno sviluppo di Taylor, fermandoci al primo ordine:

$$\begin{aligned} t &= -A(R) - \frac{1}{v_\infty} \int_R^r \frac{dx}{\sqrt{1 - \frac{2U(x)}{v_\infty^2 m} - \frac{b^2}{x^2}}} \approx \\ &= -A(R) - \frac{1}{v_\infty} \int_R^r dx \left[1 - \frac{U(x)}{mv_\infty^2} - \frac{b^2}{2x^2} \right] = \\ &= -A(R) - \frac{r-R}{v_\infty} + \frac{1}{v_\infty} \int_R^r dx \frac{U(x)}{mv_\infty^2} - \frac{1}{v_\infty} \int_R^r dx \frac{b^2}{2x^2} \end{aligned} \quad (1.21)$$

Imponiamo a questo punto la condizione di integrale a corto range, ossia che converge assolutamente all'infinito:

$$\int_R^\infty |U(x)| dx < \infty \quad (1.22)$$

Pertanto gli integrali considerati convergono tutti:

$$t = -A(R) - \frac{r-R}{v_\infty} + \frac{1}{v_\infty} \int_R^r dx \frac{U(x)}{mv_\infty^2} + \frac{1}{v_\infty} \int_R^r dx \frac{b^2}{2x^2} = -A(R) - \frac{r-R}{v_\infty} + A'_b + A''_v \quad (1.23)$$

Chiaramente troviamo al primo ordine:

$$t = k(R) - \frac{r}{v_\infty} \Rightarrow r = -k(R) - v_\infty t \quad (1.24)$$

La condizione $r \gg r_0$ chiaramente è rispettata se $t \ll 0$, ossia:

$$k(R) = -b \quad (1.25)$$

e dunque la funzione $k(R)$ coincide con il parametro di impatto. Abbiamo dunque trovato che per un potenziale assolutamente convergente il moto asintotico è effettivamente libero (vi è simmetria nella traiettoria e legge oraria, basta dimostrarlo per $t \rightarrow -\infty$). Questo è valido anche tenendo conto delle altre correzioni, in quanto dipendono da r solo debolmente (grazie all'assoluta convergenza, che li rende poco significativi e poco variabili per $r \rightarrow \infty$).

Chiaramente questo non è soddisfatto per il potenziale Coulombiano, che dunque non è a corto range. A questo punto non vale più le ipotesi di piccole condizioni, ma addirittura vi è divergenza logaritmica in r :

$$A''_v = \frac{1}{v_\infty} \int_R^r dx \frac{U(x)}{mv_\infty^2} = B + \frac{C}{v_\infty} \log \frac{r}{R} \quad (1.26)$$

da cui:

$$t = -\bar{k} - \frac{r}{v_\infty} + \frac{C}{v_\infty} \log \frac{r}{R} \quad r \rightarrow \infty \quad (1.27)$$

La correzione è equivalentemente logaritmica in t :

$$r = -\bar{k} - v_\infty t + C \log \frac{r}{R} \approx -\bar{R} - v_\infty t + C \log \left(-\frac{v_\infty t}{R} \right) + \dots \quad (1.28)$$

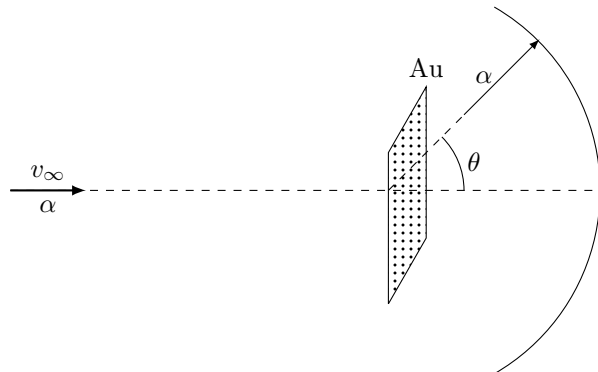
Notiamo comunque che per t grande in realtà la correzione logaritmica è trascurabile rispetto alla parte lineare.

1.2.2 Sezione d'Urto

Ricapitoliamo. Data una particella che incide su un'altra particella con parametro di impatto b e velocità v_∞ , allora dato il potenziale di interazione, se questo è asintoticamente completo (e a corto raggio), lo stato asintotico iniziale è univocamente determinato da questi due parametri ed è in particolare definito dall'angolo di deflessione $\theta = \theta(v_\infty, b) = \theta(W, L)$.

Notiamo a questo punto che in un esperimento non è noto il parametro di impatto nè la velocità di una particella incidente, in quanto sono la sorgente di particelle emette in varie direzioni e varie posizioni.

Nel caso dell'esperimento di Rutherford ad esempio la sorgente (scatola di Polonio) emette particelle alfa ($Z = 2$) su un foglio di oro ($Z = 79$), che contiene i centri di diffusione. Le particelle alfa vengono poi deflesse e vengono trovate da uno schermo di solfuro, da cui ricaviamo la deflessione dell'angolo. Si trova in particolare che la deflessione è tipicamente piccola e le deflessioni grandi sono molto rare, così che ha senso usare uno schermo limitato.



Possiamo usare questo modello in quanto la distanza tra gli atomi è tale da poter considerare sempre la collisione tra una particella alfa e un nucleo di oro alla volta. Gli elettroni atomici non contribuiscono in quanto la loro massa è molto più piccola delle particelle alfa e dunque il loro effetto è trascurabile (come è chiaro dalla conservazione del momento). Tuttavia il potenziale deve comunque tenere conto dell'effetto di schermaggio degli elettroni, in modo tale che il potenziale di interazione tra una particella alfa e un nucleo di oro non è quello Coulombiano ma uno che è nullo "fuori" dall'atomo ed è Coulombiano a brevi distanze (minori del raggio atomico). Chiaramente questo implica anche che il parametro di impatto non può essere molto maggiore del raggio atomico e dunque chiaramente non potremo misurarlo direttamente (oltre al problema dell'alto numero di particelle).

Dobbiamo dunque ricorrere ad un approccio statistico. Possiamo immaginare prima di tutto di fornire alle particelle alfa un'energia media data, da cui una velocità media, con una distribuzione sufficientemente stretta da poterci limitare a considerare il suo contributo in prima analisi (ad esempio per Rutherford $W = 5.5\text{MeV}$, $v_\infty = 1.6 \cdot 10^7\text{m s}^{-1}$). Questo è dovuto alla legge dei grandi numeri, essendo le particelle coinvolte dell'ordine del numero di Avogadro. Per risolvere il problema del parametro di impatto invece ci aspettiamo una distribuzione sostanzialmente uniforme e dunque dovremo considerare il contributo di tutti i parametri di impatto possibili. Questo è dunque opposto a quanto detto per l'energia, che ci assumiamo assumere sostanzialmente un unico valore.

Per fare questo introduciamo alcuni concetti.

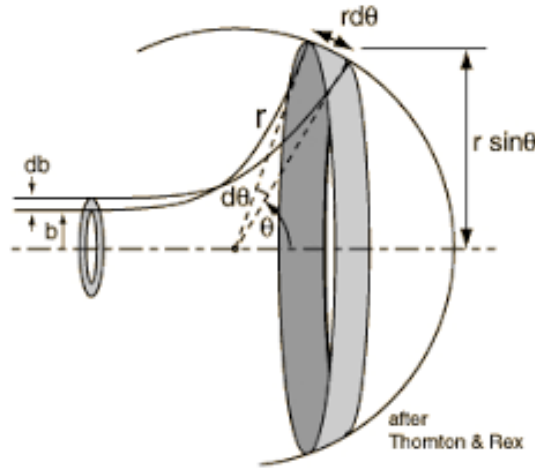
Definiamo prima di tutto il flusso di particelle incidenti n_{in} , con $[n_{in}] = \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$. Detto dn il numero infinitesimo di particelle che sono deflessi di un angolo θ nell'unità di tempo e attraversano una superficie $d\sigma(\theta)$ del foglio su cui giacciono i centri diffusori allora:

$$dn = n_{in} d\sigma(\theta) \quad [d\sigma] = \text{m}^2 \quad (1.29)$$

Pertanto $d\sigma(\theta)$ è la sezione d'urto di diffusione efficace. Chiaramente stiamo considerando solo diffusioni singole. Questo significa che il foglio è sufficientemente sottile. Inoltre supponiamo che la distanza d_{ij} tra due bersagli sia molto maggiore del raggio d'azione $d \ll |d_{ij}|$.

Supponiamo adesso che, per v_∞ fissato, θ sia strettamente decrescente in b , ossia la deflessione è tanto più piccola quanto è più grande il parametro di impatto (l'interazione è poco significativa) e che per $b \rightarrow 0 \Rightarrow \theta \rightarrow \pi$. Questo significa che $\theta(b)$ è invertibile e in particolare che un intervallo infinitesimo $(\theta, \theta + d\theta)$ corrisponde ad un intervallo $(b + db, b)$. Questo significa che il numero infinitesimo di particelle dn con angolo di deflessione tra $\theta, \theta + d\theta$ corrisponde al numero di particelle con parametro d'impatto tra $b + db, b$. Ma questo corrisponde al numero di particelle che attraversano la corona circolare di raggio b :

$$dn = n_{in} 2\pi b |db| = n_{in} d\sigma \Rightarrow d\sigma = 2\pi b |db| = 2\pi b(\theta) \left| \frac{db}{d\theta} \right| d\theta \quad (1.30)$$



Chiamiamo $\frac{d\sigma}{d\theta}$ sezione d'urto differenziale rispetto all'angolo di deflessione, che troviamo si può scrivere come segue:

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = 2\pi b(\theta) \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad (1.31)$$

Per motivi sperimentali ci conviene considerare la sezione efficace delle particelle deflesse nell'angolo solido $d\Omega$ (sotteso dalla corona circolare $\theta, \theta + d\theta$) invece che nell'angolo di deflessione. Chiaramente:

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta \Rightarrow d\theta = \frac{d\Omega}{2\pi \sin \theta} \quad (1.32)$$

da cui:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b(\theta)}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad (1.33)$$

Infatti questa quantità è più locale ed è più interessante per casi in cui non vi è simmetria azimutale (dovuta alla simmetria a sferica). In generale infatti se il potenziale non è centrale allora il moto non sta in un piano e dunque sono necessari due angoli per specificare la deflessione $b = b(\theta, \phi)$.

In certi casi ha anche senso parlare della sezione d'urto totale:

$$\sigma_{tot} = \int_{4\pi} d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (1.34)$$

Ma abbiamo visto che:

$$\sigma_{tot} = 2\pi \int_0^{b_{max}} b db = \pi b_{max}^2 \quad (1.35)$$

Pertanto se il potenziale va a 0 per una distanza infinita allora la sezione d'urto totale è infinita. Equivalentemente σ_{tot} è finita se e solo se $U(r) = 0$ per ogni $r > b_{max}$. In realtà questo vale solo nel caso classico, diversamente da quanto troveremo nel caso quantistico, dove cambia la definizione di sezione d'urto differenziale.

Notiamo che la definizione $dn = n_{in} d\sigma$ della sezione d'urto efficace è del tutto generale e vale anche in meccanica quantistica. La definizione $dn = 2\pi b db$ è invece solamente classica.

1.2.3 Sezione d'urto di Rutherford

Calcoliamo adesso la sezione d'urto differenziale nel caso di un potenziale Coulombiano, cosiddetta di Rutherford. Indichiamo con m, q_1 massa e carica della particella incidente, e con q_2 carica del centro diffusore (che ha massa infinita nella nostra approssimazione). Sia b parametro di impatto e v_∞ velocità iniziale. Nelle unità gaussiane il potenziale è dato da $U = q_1 q_2 / r$.

Notiamo che l'angolo di deflessione θ coincide con l'angolo formato tra il momento iniziale e finale \vec{p}, \vec{p}' , ossia:

$$\Delta p = 2p \sin \frac{\theta}{2} \quad (1.36)$$

Possiamo trovare in questo caso $\theta(b)$ a partire da Δp , usando il teorema dell'impulso:

$$\Delta p = \Delta p_z = \int_{-\infty}^{\infty} F_z dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q_1 q_2}{r(t)^2} \cos(\phi(t)) dt \quad (1.37)$$

Notiamo poi che per la conservazione del momento:

$$L = pb = mr^2 \dot{\phi} \Rightarrow \frac{dt}{r^2} = \frac{m}{pb} d\phi \quad (1.38)$$

da cui:

$$\Delta p = \frac{q_1 q_2 m}{pb} \int_{-\pi/2+\theta/2}^{\pi/2-\theta/2} \cos \phi d\phi = \frac{2mq_1 q_2}{pb} \cos \frac{\theta}{2} \quad (1.39)$$

Uguagliando le due espressioni per Δp troviamo la relazione $\theta(b)$:

$$2p \sin \frac{\theta}{2} = \frac{2mq_1 q_2}{pb} \cos \frac{\theta}{2} \Rightarrow \tan \frac{\theta}{2} = \frac{q_1 q_2}{2Wb} \quad (1.40)$$

che notiamo essere invertibile.

Possiamo dunque scrivere la sezione d'urto differenziale di Rutherford:

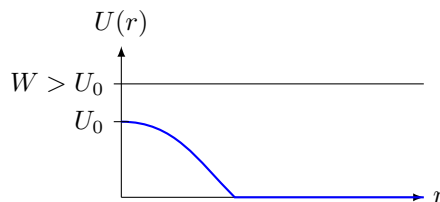
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left(\frac{q_1 q_2}{2W} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad (1.41)$$

1.2.4 Potenziale Repulsivo finito a range finito

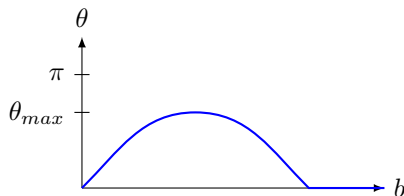
Consideriamo il caso di un potenziale repulsivo a range finito R , ossia:

$$\lim_{r \rightarrow 0} U(r) < \infty \quad U(r < R) > 0 \quad U(r \geq R) = 0 \quad (1.42)$$

È sottinteso che la derivata non cambia segno, ossia il potenziale è decrescente.



Notiamo che chiaramente per $b > R$ non vi è interazione dunque $\theta(b > R) = 0$. Questo rende $\theta(b)$ non invertibile per $b > R$. Tuttavia notiamo che il problema persiste anche a per b più piccoli a causa del fatto che U non va a infinito per $r \rightarrow 0$, ma anzi $U(0) = U_0$. Consideriamo una particella con $b = 0$ e $W > U_0$, allora chiaramente $\theta = 0$. Ci aspettiamo dunque un andamento come in figura.



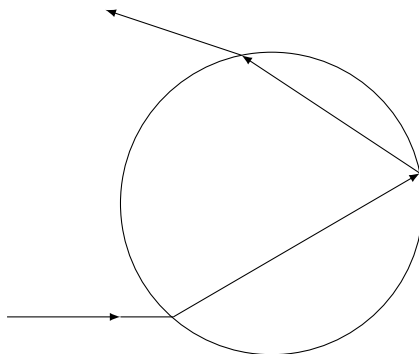
Troviamo dunque che $\theta(b)$ non è strettamente crescente nell'intervallo $(0, R)$ e dunque non è invertibile, ossia per ogni $\theta < \theta_{max}$ esisteranno due valori di b corrispondenti.

In questo caso allora la sezione d'urto infinitesima va generalizzata, sommando sul numero di b_i con $\theta(b_i) = \theta$:

$$d\sigma(\theta) = \sum_i 2\pi b_i \left| \frac{db}{d\theta} \right|_{b=b_i} d\theta \quad (1.43)$$

Notiamo inoltre che per $\theta = \theta_{max} = \theta(\bar{b})$ allora $\frac{d\theta}{db} = 0$, ossia $\left| \frac{db}{d\theta} \right| = +\infty$ e dunque la sezione d'urto diverge.

Calcolando l'angolo di deflessione per il problema di un raggio luminoso (fotone) che invece su una sfera attraversando la prima superficie e venendo riflessa dalla seconda (per poi uscire attraversando nuovamente la superficie), si trova che ha simili andamenti rispetto al parametro di impatto, indicando una sezione d'urto infinita anche se il potenziale ha range finito.



1.3 Lezione 3

1.3.1 Operatore Unitario

Ricordiamo la definizione di operatore unitario come un operatore su uno spazio di Hilbert lineare $U: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, caratterizzato dalle proprietà: $\mathcal{D}(U) = \mathcal{R}(U) = \mathcal{H}$ (suriettività); $\|U|\psi\rangle\| = \||\psi\rangle\|$ (conservazione della norma).

Dimostriamo che l'operatore è invertibile, ossia è iniettivo. Siano $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$; dimostriamo che $U|\psi_1\rangle = U|\psi_2\rangle \iff |\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle$. Questo si può dimostrare verificando che la norma della differenza è zero:

$$U|\psi_1\rangle - U|\psi_2\rangle = U(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) = U|\chi\rangle = 0 \iff \|U|\chi\rangle\| = \||\chi\rangle\| = 0 \iff |\chi\rangle = 0 \iff |\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle \quad (1.44)$$

Questo implica che $\exists U^{-1}$ tale che $U^{-1}U = UU^{-1} = \mathbb{1}$. Notiamo che l'operatore è limitato e invertibile e dunque ammette certamente operatore aggiunto U^\dagger . Notiamo che per definizione di operatore unitario:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \|U\psi\|^2 = \langle U\psi|U\psi\rangle = \langle\psi|U^\dagger U|\psi\rangle \quad (1.45)$$

Detto $A = U^\dagger U$, dimostriamo che $A = \mathbb{1} \iff U^\dagger = U^{-1}$. Questo è equivalente a richiedere che $\forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vale $\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$.

Per dimostrare questo utilizziamo la relazione trovata per la somma e la somma "complessa" dei due vettori generici:

$$(\langle \phi | + \langle \psi |) A (|\phi\rangle + |\psi\rangle) = (\langle \phi | + \langle \psi |)(|\phi\rangle + |\psi\rangle) \quad (\langle \phi | - i \langle \psi |) A (|\phi\rangle + i |\psi\rangle) = (\langle \phi | - i \langle \psi |)(|\phi\rangle + i |\psi\rangle) \quad (1.46)$$

Usando la linearità del prodotto scalare e dell'operatore A nel primo caso:

$$\begin{aligned} \langle \phi | A | \psi \rangle + \langle \psi | A | \psi \rangle + \langle \phi | A | \psi \rangle + \langle \psi | A | \phi \rangle &= \langle \phi | \phi \rangle + \langle \psi | \psi \rangle + \langle \phi | \psi \rangle + \langle \psi | \phi \rangle \\ \langle \phi | A | \psi \rangle + \langle \psi | A | \phi \rangle &= \langle \phi | \psi \rangle + \langle \psi | \phi \rangle \end{aligned} \quad (1.47)$$

e nel secondo:

$$\langle \phi | A | \psi \rangle - \langle \psi | A | \phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle - \langle \psi | \phi \rangle \quad (1.48)$$

Ma questo implica a sua volta che:

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \iff A = U^\dagger U = \mathbb{1} \iff U^\dagger = U^{-1} \quad (1.49)$$

come volevasi dimostrare.

Usando questa proprietà troviamo anche la conservazione del prodotto scalare. Per fare questo usiamo la suriettività dell'operatore:

$$\forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} \exists |\psi\rangle \in \mathcal{H} : |\phi\rangle = U |\psi\rangle \quad (1.50)$$

e l'associatività del prodotto di operatori:

$$|\phi\rangle = U |\psi\rangle = U(U^\dagger U) |\psi\rangle = (UU^\dagger) U |\psi\rangle = (UU^\dagger) |\phi\rangle \quad (1.51)$$

da cui $UU^\dagger = \mathbb{1} = U^\dagger U$.

1.3.2 Operatore Isometrico

Un operatore isometrico U è un operatore lineare su spazio di Hilbert che conserva la norma. Chiaramente un operatore unitario è isometrico, ma in questo caso non vi è necessariamente suriettività e dunque non tutti gli operatori isometrici sono unitari.

Un tale operatore è uno che definito su una base ortonormale numerabile $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ opera da traslazione $\Omega |n\rangle = |n+1\rangle$. Chiaramente l'operatore non è suriettivo in quanto $|1\rangle$ non è immagine di alcun vettore tramite Ω . Questo significa che $\mathcal{R}_\perp(\Omega) = \text{span}\{|1\rangle\} \neq \emptyset$. Usando la proprietà di conservazione della norma e la linearità ci permette di definire l'operatore aggiunto e di verificare la seguente proprietà:

$$\Omega^\dagger \Omega = \mathbb{1} \quad (1.52)$$

In generale non possiamo dimostrare $\Omega \Omega^\dagger = \mathbb{1}$, ma un'identità più generale che mette in relazione Ω^\dagger e Ω^{-1} . Infatti il primo è definito su tutto lo spazio di Hilbert, essendo Ω limitato, mentre l'inverso è definito solo sul range:

$$\Omega^\dagger: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad \Omega^{-1}: \mathcal{R}(\Omega) \rightarrow \mathcal{H} \quad (1.53)$$

Chiaramente sul range i due operatori devono coincidere:

$$|\psi\rangle = \Omega^\dagger \Omega |\psi\rangle = \Omega^\dagger |\phi\rangle \Rightarrow \Omega^\dagger |\phi\rangle = \Omega^{-1} |\phi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{R}(\Omega) \quad (1.54)$$

Notiamo che $|\phi\rangle \in \mathcal{R}_\perp(\Omega) \iff \langle \phi | \Omega | \psi \rangle = 0 \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Ma questa condizione è a sua volta equivalente a:

$$\langle \psi | \Omega^\dagger | \phi \rangle = 0 \iff \Omega^\dagger | \phi \rangle = 0 \quad (1.55)$$

Pertanto:

$$\Omega^\dagger = \begin{cases} \Omega^{-1} & \mathcal{R}(\Omega) \\ 0 & \mathcal{R}_\perp(\Omega) \end{cases} \quad (1.56)$$

Pertanto $\Omega \Omega^\dagger \neq \mathbb{1}$. Infatti se $|\phi\rangle \in \mathcal{R}_\perp(\Omega) \Rightarrow \Omega \Omega^\dagger |\phi\rangle = 0 \neq |\phi\rangle$.

1.3.3 Convergenza di Vettori e Operatori

Nella teoria dello scattering siamo interessati a trattare l'evoluzione di uno stato quantistico, ossia un insieme di vettori e operatori che dipendono parametricamente dal tempo:

$$|\psi_t\rangle \in \mathcal{H} \quad A_t: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (1.57)$$

Vogliamo dunque definire un concetto di limite per vettori e operatori nel caso di $t \rightarrow \pm\infty$.

1.3.4 Limiti di Vettori

Diciamo che $|\psi_t\rangle$ converge al vettore $|\psi\rangle$ per $t \rightarrow \pm\infty$ se e solo se:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|\psi_t - \psi\| = 0 \quad (1.58)$$

Questo è ben definito in quanto la norma è una funzione scalare, che composta alla funzione $t \rightarrow |\psi_t\rangle$ fornisce una funzione da \mathbb{R} in \mathbb{R}^+ .

Questo concetto di convergenza implica che $|\psi_t\rangle$ è fisicamente indistinguibile da $|\psi\rangle$ per $t \rightarrow \pm\infty$. Possiamo rendere quest'affermazione rigorosa ricordando gli assiomi della meccanica quantistica.

Ricordiamo infatti che la probabilità di overlap, ossia la probabilità di misurare uno stato $|\psi\rangle$ in un certo stato $|\phi\rangle$ (tutti normalizzati), è data da:

$$|\langle\phi|\psi\rangle|^2 \quad (1.59)$$

Ad esempio tipicamente $\langle\phi|$ è l'autostato di un autovalore e dunque la probabilità di osservarlo è pari al modulo quadro del corrispondente coefficiente di Fourier. Dimostriamo che l'esito di una qualunque misura fatta sul limite di $|\psi_t\rangle$ coincide con l'esito della stessa misura fatta su $|\psi\rangle$ (ossia le probabilità coincidono).

Per fare questo usiamo la disuguaglianza di Schwarz:

$$|\langle\phi|\psi_t\rangle - \langle\phi|\psi\rangle| = |\langle\phi|(|\psi_t\rangle - |\psi\rangle)| \leq \|\phi\| \|\psi_t - \psi\| = \|\psi_t - \psi\| \quad (1.60)$$

Pertanto:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\langle\phi|\psi_t\rangle - \langle\phi|\psi\rangle| = 0 \iff \lim_{t \rightarrow \infty} |\langle\phi|\psi_t\rangle|^2 = |\langle\phi|\psi\rangle|^2 \quad (1.61)$$

come volevasi dimostrare.

Tipicamente nella teoria dello scattering consideriamo due famiglie di vettori parametrizzati:

$$|\psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi\rangle \quad |\psi_t^0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} |\tilde{\psi}\rangle \quad (1.62)$$

con \hat{H} hamiltoniana con interazione con il potenziale (conservativo) ed \hat{H}_0 hamiltoniana della particella libera. Ha senso anche dire che queste due famiglie convergono allo stesso vettore, ossia sono fisicamente indistinguibili:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|\psi_t - \psi_t^0\| = 0 \quad (1.63)$$

Data una famiglia parametrica di stati $|\psi_t\rangle$, cerchiamo come capire quando ammette limite ed eventualmente quale è questo. In generale è complicato capire se è direttamente verificata la condizione in quanto dovremmo conoscere lo stato $|\psi\rangle$, che però è difficile da costruire. Cerchiamo dunque un criterio che ci permetta di capire se la famiglia ammette limite. Questa è analoga al criterio di Cauchy per una successione di numeri complessi $a_t \in \mathbb{C}$:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |a_t - a| = 0 \quad (1.64)$$

Il criterio di Cauchy afferma che a_t ammette limite per $t \rightarrow \infty$ se e solo se:

$$\lim_{t, t' \rightarrow \infty} |a_t - a_{t'}| = 0 \quad (1.65)$$

Il vantaggio di questo criterio è che è sufficiente conoscere la successione a_t , senza dover calcolarne effettivamente il limite.

Possiamo estendere il criterio di Cauchy a spazi di Hilbert, dove afferma che $|\psi_t\rangle$ ammette limite per $t \rightarrow \infty$ se e solo se:

$$\lim_{t, t' \rightarrow \infty} \|\psi_t - \psi_{t'}\| = 0 \quad (1.66)$$

Consideriamo un caso particolare tipico della teoria dello scattering:

$$|\psi_t\rangle = \int_0^t d\tau |\phi_\tau\rangle \quad (1.67)$$

Cerchiamo di applicare il Criterio di Cauchy in questo caso particolare per trovare un risultato più immediato da applicare. Notiamo che la norma della differenza coincide con:

$$\left\| \int_0^t d\tau |\phi_\tau\rangle - \int_0^{t'} d\tau |\phi_\tau\rangle \right\| = \left\| \int_t^{t'} d\tau |\phi_\tau\rangle \right\| \quad (1.68)$$

Una condizione sufficiente è data da una generalizzazione della disuguaglianza triangolare (notando che l'integrale è una somma di vettori):

$$\left\| \int_t^{t'} d\tau |\phi_\tau\rangle \right\| \leq \int_t^{t'} d\tau \|\phi_\tau\| \quad (1.69)$$

Pertanto $|\psi_t\rangle$ ammette limite se:

$$\lim_{t,t' \rightarrow \infty} \int_t^{t'} d\tau \|\phi_\tau\| = 0 \quad (1.70)$$

Questo non è altro che il criterio di Cauchy applicato all'integrale:

$$\int_0^\infty d\tau \|\phi_\tau\| < \infty \quad (1.71)$$

Pertanto per verificare che $|\psi_t\rangle$ (nel caso considerato) converga è sufficiente verificare che l'integrale di $|\phi_\tau\rangle$ converga all'infinito. Questo ci fornisce un metodo algoritmico per verificare che una tale famiglia di vettori ammette limite.

Ricapitoliamo. Abbiamo verificato che se una famiglia $|\psi_t\rangle$ converge a $|\psi\rangle$ per $t \rightarrow \infty$ allora sono fisicamente indistinguibili, ossia le probabilità di overlap convergono $\langle \phi | \psi_t \rangle \rightarrow \langle \phi | \psi \rangle$. Notiamo che questa seconda condizione non implica la prima. Chiamiamo infatti il primo concetto di convergenza "forte" e il secondo convergenza "debole". Facciamo un esempio.

Sia una particella libera con Hamiltoniana $\hat{\mathcal{H}}_0 = p^2/2m$, da cui l'operatore temporale associato $U_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t}$ e lo stato ad un dato istante $|\psi_t\rangle = U_0(t) |\psi\rangle$ con $|\psi\rangle$ un dato stato iniziale (ad esempio Gaussiano). Pertanto nello spazio dei momenti troviamo che il pacchetto iniziale si muove con una certa velocità e contemporaneamente si allarga. Consideriamo la probabilità di overlap con la posizione \vec{x} :

$$|\langle \vec{x}' | \psi_t \rangle|^2 = |\psi_t(\vec{x}')|^2 \quad (1.72)$$

Chiaramente, per $t \rightarrow \infty$, il pacchetto si allontana e si slarga, in modo tale che la probabilità in un dato punto si deve annullare:

$$|\psi_t(\vec{x}')|^2 \rightarrow 0 \quad t \rightarrow \infty \quad (1.73)$$

Chiaramente siccome questo è valido per ogni \vec{x}' , che è una base dello spazio, allora deve valere anche per ogni vettore:

$$|\langle \phi | \psi_t \rangle|^2 \rightarrow 0 \quad (1.74)$$

Tuttavia $|\psi_t\rangle$ non va al vettore nullo, in quanto l'operatore U_0 è unitario e dunque non può mandare ψ_t al vettore nullo. Pertanto la famiglia $|\psi_t\rangle$ tende al vettore nullo in senso debole ma non in senso forte.

Pertanto la convergenza forte non è implicata da quella debole, come ci aspettavamo.

1.3.5 Limiti di Operatori

Consideriamo adesso il concetto di limite per una famiglia di operatori $t \mapsto A_t: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ per $t \rightarrow \infty$. Questo è definito dal concetto di divergenza forte per i vettori:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A_t = A \iff \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \exists \lim_{t \rightarrow \infty} A_t |\psi\rangle = |A\psi\rangle \quad (1.75)$$

Iniziamo con il notare che non valgono alcune proprietà che sembrerebbero veri:

$$\begin{aligned} A_t \rightarrow A &\not\Rightarrow A_t^\dagger \rightarrow A \\ B_t \rightarrow B &\not\Rightarrow A_t B_t \rightarrow AB \end{aligned} \quad (1.76)$$

Queste proprietà sono verificate per concetti di convergenza operatoriale forte, attraverso l'uso della norma per operatori limiti, ma non sono utili nella teoria dello scattering.

Nella teoria dello scattering siamo in particolare interessati a limiti di operatori unitari:

$$U_t \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \Omega \quad (1.77)$$

In questo caso possiamo dire certamente che Ω è isometrico, per definizione di convergenza (debole) di operatori:

$$\|\Omega\psi\| = \lim_{t \rightarrow \infty} \|U_t\psi\| = \|\psi\| \Rightarrow \Omega^\dagger \Omega = \mathbb{1} \quad (1.78)$$

Tuttavia non è vero in generale che Ω è unitario, ossia il suo range non è tutto lo spazio di Hilbert.

1.3.6 Integrale Gaussiano

Cerchiamo adesso di stabilire alcune proprietà per l'integrale gaussiano:

$$I(A, B) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{A}{2}x^2 + Bx} \quad A, B \in \mathbb{C}, \operatorname{Re}\{A\} > 0 \quad (1.79)$$

Per calcolare il suo valore prima di tutto ricordiamo il valore nel caso $A = 1, B = 0$:

$$I(1, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}x^2} = \sqrt{2\pi} \quad (1.80)$$

Nell'ipotesi $\operatorname{Re}\{A\} > 0$ possiamo fare il completamento del quadrato:

$$\frac{A}{2}x^2 - Bx = \frac{A}{2}\left(x - \frac{B}{A}\right)^2 - \frac{B^2}{2A} \quad (1.81)$$

Detto C il cammino di integrazione sull'asse \mathbb{R} e C_1 il cammino traslato di $\operatorname{Im}\{B/A\}$, applicando il Teorema di Cauchy:

$$I(A, B) = e^{\frac{B^2}{2A}} \int_{C_1} dz e^{-\frac{A}{2}\left(z - \frac{B}{A}\right)^2} \quad (1.82)$$

Facciamo un cambio di variabili ad $u = z - B/A$, in modo da ritornare al cammino originario:

$$I(A, B) = e^{\frac{B^2}{2A}} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-\frac{A}{2}u^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{A}} e^{-\frac{B^2}{2A}} \quad (1.83)$$

Pertanto:

$$\boxed{I(A, B) = \sqrt{\frac{2\pi}{A}} e^{B^2/2A}} \quad \operatorname{Re}\{A\} > 0 \quad (1.84)$$

In realtà possiamo dimostrare che questo risultato continua a valere anche per $\operatorname{Re}\{A\} = 0, \operatorname{Im}\{A\} \neq 0$. In questo caso l'integrale è oscillante e in particolare non è integrabile secondo Lebesgue, in quanto, posti $A \in \mathbb{R} \setminus \{0\}, B \in \mathbb{C}$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left| e^{-i\frac{A}{2}x^2 + Bx} \right| = \infty \quad (1.85)$$

Tuttavia l'integrale è ben definito come integrale improprio nel senso di Riemann, ossia come limite di un integrale:

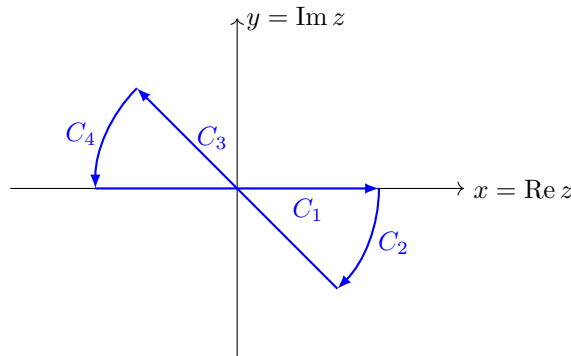
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{A}{2}x^2 + Bx} = \lim_{c \rightarrow \infty} \int_{-c}^c dx e^{-i\frac{A}{2}x^2 + Bx} \quad (1.86)$$

Questo limite è convergente e in particolare lo possiamo calcolare usando il Teorema di Cauchy nel piano complesso¹.

Per calcolare l'integrale dobbiamo separare i due casi $A < 0$ e $A > 0$. Consideriamo il caso $A > 0$, mentre l'altro è analogo. Valutiamo il seguente integrale sul piano complesso:

$$\oint_C dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} \quad (1.87)$$

dove C è il percorso chiuso costituito da un segmento simmetrico sull'asse reale (da sinistra verso destra), un segmento sulla bisettrice dei due assi del secondo e quarto quadrante (dal basso verso l'alto) e due archi che collegano gli estremi di questi segmenti, come in figura.



¹Vedi la risposta nel seguente post <https://physics.stackexchange.com/a/390910/212528>

Siccome l'esponenziale non ammette poli, e in particolare non ne ammette al bordo del circuito nè al suo interno, allora vale il Teorema di Cauchy per percorsi chiusi di funzioni olomorfe:

$$\oint_C dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} = 0 \quad (1.88)$$

Mandando il raggio degli archi all'infinito allora la parte dell'integrale sugli archi si annulla:

$$\oint_C dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} = \int_{C_1} dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} + \int_{C_3} dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} = 0 \quad (1.89)$$

Il primo coincide con l'integrale che vogliamo calcolare, in quanto il percorso sta sull'asse reale e dunque $z = x$ reale. Il secondo possiamo ricondurlo all'integrale gaussiano ordinario con la parametrizzazione $z = -e^{-i\pi/4}t$. Infatti siccome questa retta passa per l'origine e per $-e^{-i\pi/4}$ allora t è reale e non cambia l'ordine dell'integrale:

$$\begin{aligned} \int_{C_1} dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} &= - \int_{C_3} dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{A}{2}x^2} &= -e^{-i\pi/4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-e^{-i\pi/2}i\frac{A}{2}t^2} = -e^{-i\pi/4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{A}{2}t^2} = -e^{-i\pi/4} I(A, 0) = \\ &= -e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2\pi}{A}} = \sqrt{e^{-i\pi/2} \frac{2\pi}{A}} = \sqrt{e^{-i\pi/2} \frac{2\pi}{A}} = \sqrt{\frac{2\pi}{iA}} \end{aligned} \quad (1.90)$$

Abbiamo dunque dimostrato quanto cercato:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{A}{2}x^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{iA}} \quad A > 0 \quad (1.91)$$

Analogamente si può fare per $A < 0$ scegliendo la bisettrice del primo e terzo quadrante opportunamente orientata, con la parametrizzazione $z = e^{i\pi/4}t$.

Infine abbiamo ottenuto il seguente risultato generale, ossia che l'integrale gaussiano è una funzione ben definita sul semipiano complesso non negativo privato dell'origine:

$$I(A, B) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{A}{2}x^2 + Bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{A}} e^{\frac{B^2}{2A}} \quad A, B \in \mathbb{C}, \begin{cases} \text{Re}\{A\} > 0 \\ \text{Re}\{A\} = 0, \text{Im}\{A\} \neq 0 \end{cases} \quad (1.92)$$

Per $A < 0$ l'integrale diverge, con parte reale che va a $+\infty$. Nell'origine invece l'integrale non converge neppure secondo Riemann, ma converge nel senso delle distribuzioni ad una delta di Dirac.

1.3.7 Evoluzione Libera di un Paccetto Gaussiano

Vogliamo i risultati della sezione precedente per descrivere l'evoluzione temporale di una particella libera inizialmente in un pacchetto gaussiano (nello spazio delle posizioni). Inizialmente, a meno di normalizzazione:

$$\langle \vec{x} | \psi(0) \rangle = e^{-\frac{(\vec{x}-\vec{a})^2}{2\xi^2}} \quad (1.93)$$

Siccome l'hamiltoniana è diagonale nella base dell'impulso allora esprimiamo $|\psi(0)\rangle$ in questa base:

$$|\psi(0)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p} | \psi(0) \rangle \Rightarrow \psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} |\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} |\psi(0)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p} | \psi(0) \rangle \quad (1.94)$$

Pertanto esplicitando la funzione d'onda nella rappresentazione delle posizioni:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar} t} \langle \vec{p} | \psi(0) \rangle = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar} t} \langle \vec{p} | \vec{x}' \rangle \psi(\vec{x}', 0) \end{aligned} \quad (1.95)$$

Usando poi l'identità:

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \quad (1.96)$$

troviamo:

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{x}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t} \langle \vec{p} | \vec{x}' \rangle \psi(\vec{x}', 0) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t} e^{-\frac{(\vec{x}' - \vec{a})^2}{2\xi^2}} = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}') - i \frac{p^2}{2m\hbar} t - \frac{(\vec{x}' - \vec{a})^2}{2\xi^2}\right) \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \int_{\mathbb{R}^3} d^3y \exp\left(-\frac{y^2}{2\xi^2} - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{y} + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{a}) - i \frac{p^2}{2m\hbar} t\right) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \exp\left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{a})\right) \int_{\mathbb{R}^3} d^3y \exp\left(-\frac{y^2}{2\xi^2} - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{y}\right) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \exp\left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{a})\right) I_1 I_2 I_3
\end{aligned} \tag{1.97}$$

dove gli integrali I_k dipendono implicitamente da \vec{p} e hanno valore:

$$I_k = I(A_k, B_k) \quad A_k = \frac{1}{\xi^2} \quad B_k = -\frac{i}{\hbar} p_k \Rightarrow \frac{B^2}{2A} = -\frac{\xi^2 p_k^2}{2\hbar^2} \Rightarrow I_1 I_2 I_3 = (2\pi)^{3/2} \xi^3 e^{-\frac{\xi^2 p^2}{2\hbar^2}} \tag{1.98}$$

Inseriamo questo e facciamo l'integrale in d^3p , che sempre si riconduce ad integrali gaussiani:

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi)^{3/2} \xi^3 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \exp\left(-\frac{\xi^2 p^2}{2\hbar^2} - i \frac{p^2}{2m\hbar} t + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{a})\right) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi)^{3/2} \xi^3 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{\xi^2}{\hbar^2} + i \frac{1}{m\hbar} t\right) p^2 + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{a})\right) \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi)^{3/2} \xi^3 J_1 J_2 J_3
\end{aligned} \tag{1.99}$$

con:

$$A_k = \frac{\xi^2}{\hbar^2} + \frac{it}{m\hbar}, \quad B_k = \frac{i}{\hbar} (x_k - a_k) \quad J_k = I(A_k, B_k) = \frac{(2\pi)^{3/2}}{\left(\frac{\xi^2}{\hbar^2} + \frac{it}{m\hbar}\right)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(x_k - a_k)^2}{2\left(\frac{\xi^2}{\hbar^2} + \frac{it}{m\hbar}\right)^{3/2}}\right) \tag{1.100}$$

Infine troviamo la seguente espressione per la funzione d'onda (a meno di normalizzazione):

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{\left(1 + \frac{i\hbar t}{m\xi^2}\right)} \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{a})^2}{2\xi^2\left(1 + \frac{i\hbar t}{m\xi^2}\right)}\right) = \frac{1}{\left(1 + \frac{i\hbar t}{m\xi^2}\right)} \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{a})^2}{2\xi_t^2}\right) \tag{1.101}$$

Pertanto la funzione d'onda è ancora una gaussian con una dispersione ξ_t che varia (aumenta) nel tempo, come ci aspettavamo:

$$\xi_t = \xi \left(1 + \frac{i\hbar t}{m\xi^2}\right)^{1/2} \tag{1.102}$$

In realtà la quantità osservabile è l'ampiezza:

$$|\psi(\vec{x}, t)| = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\xi}\right)^2\right]^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\vec{x} - \vec{a})^2}{2\xi^2\left(1 + \frac{\hbar t}{m\xi^2}\right)^2}\right] \tag{1.103}$$

Troviamo dunque quantitativamente che $\lim_{t \rightarrow +\infty} |\psi(\vec{x}, t)|^2 = 0$, come prima supposto qualitativamente.

1.4 Lezione 4

1.4.1 Scattering Quantistico

Consideriamo adesso lo scattering di una particella senza spin da parte di un potenziale esterno. Le considerazioni sono vicine a quelle fatte nel caso classico.

Ricordiamo che una teoria di scattering classica è ben definita se le uniche orbite possibili sono quelle limitate e quelle di scattering (ossia non limitate con asintoti sia passati che futuri). Abbiamo visto che se il potenziale tende a zero all'infinito sufficientemente velocemente allora è soddisfatta la condizione asintotica. Inoltre il potenziale nell'origine deve andare a zero sufficientemente lentamente affinché vi sia anche completezza asintotica.

La corrispondente quantistica dell'orbita classica $\vec{x}(t) \iff (\vec{q}(t), \vec{p}(t))$ soluzione dell'equazione di Newton/di Hamilton è la famiglia di vettori $|\psi_t\rangle$ soluzione dell'equazione di Schrodinger $|\psi_t\rangle = U(t)|\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi\rangle$. Lo spazio delle soluzioni classico è dunque lo spazio euclideo \mathbb{R}^3 , mentre quello quantistico è lo spazio delle funzioni a quadrato integrabile $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ o uno spazio di Hilbert unitariamente equivalente. Noi ci limitiamo a potenziali scalari locali conservativi, ossia un'hamiltoniana della forma:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + V(\vec{x}) \quad (1.104)$$

a cui sono associati i seguenti operatori di evoluzione:

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \quad U_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \quad (1.105)$$

In particolare siamo interessanti a stati iniziali dati da stati liberi:

$$|\psi_t\rangle = U(t)|\psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} U^0(t)|\psi_{in}\rangle \iff \lim_{t \rightarrow \infty} \|U(t)|\psi\rangle - U^0(t)|\psi_{in}\rangle\| = 0 \quad (1.106)$$

dove $|\psi_{in}\rangle$ è l'asintoto "in", ossia nel passato. Pertanto lo stato $|\psi_{in}\rangle$ sostituisce i parametri $\vec{a}_{in}, \vec{v}_{in}$, indicando che il problema si complica "infinitamente", ossia passiamo da 6 parametri ad un numero infinito, necessario a determinare il vettore.

Analogamente diciamo che la famiglia ammette asintoto futuro se:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|U(t)|\psi\rangle - U^0(t)|\psi_{out}\rangle\| = 0 \quad (1.107)$$

Notiamo che queste condizioni sono molto più forti della condizioni asintotica classica tramite il Teorema di Ehrenfest sui valori medi di posizione e momento, in quanto stabiliscono solo come si muove il centro del pacchetto, ma non affermano convergenza debole (e dunque che gli stati sono fisicamente indistinguibili).

In generale non tutte le orbite $|\psi_t\rangle$ hanno asintoti, ossia stati che si evolvono nel passato/futuro da particelle libere e sono indistinguibili da quelli considerati.

Indichiamo con $\mathcal{R} \subset \mathcal{H}$ il sottospazio di Hilbert a cui appartengono gli stati di scattering $|\psi\rangle$ rispetto a $V(\vec{x})$, e con $\mathcal{B} \subset \mathcal{H}$ l'insieme degli stati legati sempre in $V(\vec{x})$. Dimosteremo che questi sono sempre ortogonali e nel caso della completezza asintotica sono il complemento ortogonale dell'altro. Pertanto in questo caso lo spazio di Hilbert è la somma diretta di questi due sottospazi $\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B}$. Pertanto la completezza asintotica nel caso quantistico è equivalente a richiedere valida l'identità $\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B}$.

1.4.2 Condizioni per la Completezza Asintotica

Notiamo che non esiste attualmente un elenco di condizioni necessarie e sufficienti a caratterizzare la completezza asintotica, ma comunque noi troveremo condizioni sufficienti per certe classi di potenziali particolarmente importanti.

Nel caso di potenziale centrale bastano tre condizioni. Per enunciare queste ricordiamo la notazione di O grande:

$$V(r) = O(r^p) \iff |V(r)| \leq cr^p \quad c > 0, \forall r \quad (1.108)$$

In particolare ha senso dire che $V(r) = O(r^p)$ per un certo punto di accumulazione finito r_0 (ad esempio l'origine) se la condizione è valida in un certo intorno di r_0 (ossia esiste un $\delta > 0$ ampiezza dell'intervallo). Vale anche per $r_0 \rightarrow \infty$ se la condizione è valida per ogni $r > M$ per un certo $M > 0$.

Enuciamo ora le condizioni sufficienti per la completezza asintotica di un potenziale centrale.

Teorema 1 (Completezza Asintotica). *Sia una particella immersa in un potenziale scalare centrale $V(r)$, se sono soddisfatte le seguenti condizioni:*

1. $V(r) = O(r^{-3-\varepsilon})$ per qualche $\varepsilon > 0$ per $r \rightarrow \infty$, ossia che il potenziale va a 0 all'infinito più velocemente di $1/r^3$;
2. $V(r) = O(r^{-3/2+\varepsilon})$ per qualche $\varepsilon > 0$ per $r \rightarrow 0$, ossia che il potenziale va all'infinito a 0 più velocemente di $1/r^{3/2}$;
3. $V(r)$ è continua su $\mathbb{R} \setminus \{0\}$, con numero finito di discontinuità di prima specie.

allora vale la completezza asintotica, ossia detto \mathcal{R} il sottospazio degli stati di scattering e \mathcal{B} il sottospazio degli stati legati vale $\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B}$.

Possiamo generalizzare queste condizione ad un potenziale anche non centrale, come ad esempio la somma di potenziali centrali con diversi centri, ma in questo corso ci limiteremo a potenziali centrali.

Notiamo prima di tutto che anche in questo caso queste ipotesi non sono soddisfatte dal potenziale coulombiano. Queste ipotesi includono ad esempio la buca sferica (che descrive bene lo scattering di nucleoni a bassa energia) e il potenziale di Yukawa.

1.4.3 Dimostrazione della Condizione Asintotica

Sebbene dimostrare la completezza asintotica sia piuttosto complicato e fuori dagli scopi del corso, possiamo comunque dimostrare la condizione asintotica.

Prima di tutto la enunciamo rigorosamente:

$$\begin{aligned} \forall |\psi_{in}\rangle \in \mathcal{H} \quad \exists! |\psi\rangle : U(t)|\psi\rangle - U_0(t)|\psi_{in}\rangle \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} 0 \\ \forall |\psi_{out}\rangle \in \mathcal{H} \quad \exists! |\psi\rangle : U(t)|\psi\rangle - U_0(t)|\psi_{out}\rangle \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0 \end{aligned} \quad (1.109)$$

Questa condizione afferma dunque che se prepariamo un pacchetto e lo facciamo evolvere "libero" nel passato/futuro allora possiamo sempre scegliere un unico stato la cui evoluzione "con interazione" nel passato/futuro è indistinguibile da quest'ultima.

Ma per le proprietà degli operatori unitari, questa definizione è equivalente a:

$$\begin{aligned} \forall |\psi_{in}\rangle \in \mathcal{H} \quad \exists! |\psi\rangle : U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{in}\rangle \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} |\psi\rangle \\ \forall |\psi_{out}\rangle \in \mathcal{H} \quad \exists! |\psi\rangle : U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{out}\rangle \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} |\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.110)$$

Questo è a sua volta equivalente a richiedere che:

$$\begin{aligned} \forall |\psi_{in}\rangle \in \mathcal{H} \quad \exists \lim_{t \rightarrow -\infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{in}\rangle \\ \forall |\psi_{out}\rangle \in \mathcal{H} \quad \exists \lim_{t \rightarrow +\infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{out}\rangle \end{aligned} \quad (1.111)$$

Per dimostrare questo nelle nostre ipotesi facciamo uso dell'equazione di Schrodinger per l'operatore di evoluzione temporale:

$$\frac{d}{dt}(U^\dagger(t)U_0(t)) = \frac{i}{\hbar}U^\dagger(t)(\hat{H} - \hat{H}_0)U_0(t) = \frac{i}{\hbar}U^\dagger(t)VU_0(t) \quad (1.112)$$

con condizione iniziale $U(0) = U_0(0) = \mathbb{1}$. Integrando formalmente quest'equazione troviamo:

$$U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{in}\rangle = |\psi_{in}\rangle + \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau U^\dagger(\tau)VU_0(\tau)|\psi_{in}\rangle \quad (1.113)$$

Pertanto se $\forall |\psi_{in}\rangle$ questa famiglia di vettori ammette limite a $t \rightarrow -\infty$ (e per $t \rightarrow \infty$) allora il potenziale soddisfa la condizione asintotica.

Possiamo dunque applicare il criterio di Cauchy, che afferma una condizione sufficiente per l'esistenza del limite:

$$\int_{-\infty}^0 d\tau \|U^\dagger(\tau)VU_0(\tau)\psi_{in}\| < \infty \quad (1.114)$$

Cerchiamo di dimostrare questa. Usando prima di tutto l'unitarietà di $U(\tau)$:

$$\int_{-\infty}^0 d\tau \|U^\dagger(\tau)VU_0(\tau)\psi_{in}\| = \int_{-\infty}^0 d\tau \|VU_0(\tau)\psi_{in}\| \quad (1.115)$$

Iniziamo con il considerare i pacchetti Gaussiani centrati in qualche \vec{a} :

$$\langle \vec{x}|\psi_{in}\rangle = e^{-\frac{(\vec{x}-\vec{a})^2}{2\xi^2}} \Rightarrow |\langle \vec{x}|U_0(\tau)\psi_{in}\rangle|^2 = \left(1 + \frac{\tau^2\hbar^2}{m^2\xi^4}\right)^{-3/2} \exp\left[-\frac{(\vec{x}-\vec{a})^2}{2\xi^2\left(1 + \frac{\tau^2\hbar^2}{m^2\xi^4}\right)}\right] \quad (1.116)$$

Da cui:

$$\|VU_0(\tau)\psi_{in}\| = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |V(\vec{x})|^2 \left(1 + \frac{\tau^2\hbar^2}{m^2\xi^4}\right)^{-3/2} \exp\left[-\frac{(\vec{x}-\vec{a})^2}{2\xi^2\left(1 + \frac{\tau^2\hbar^2}{m^2\xi^4}\right)}\right] \leq \left(1 + \frac{\tau^2\hbar^2}{m^2\xi^4}\right)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |V(\vec{x})|^2 < \infty \quad (1.117)$$

Dove abbiamo usato l'ipotesi di convergenza sotto integrale (e che l'esponentiale ha argomento negativo). Notiamo che questa condizione chiaramente non richiede che il potenziale sia centrale ed è più debole delle condizioni di convergenza a 0 (l'integrale va come r^{-3}) e ∞ (l'integrale va come r^{-6}), più le discontinuità a salto.

Troviamo dunque che l'integrale che volevamo calcolare nel caso gaussiano viene maggiorato dal prodotto di due integrali, che sono entrambi convergenti:

$$\int_{-\infty}^0 d\tau \|VU_0(\tau)\psi_{in}\| \leq \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |V(\vec{x})|^2 \int_{-\infty}^0 \left(1 + \frac{\tau^2 \hbar^2}{m^2 \xi^4}\right)^{-3/2} < \infty \quad (1.118)$$

Siccome la dipendenza temporale sta solo in τ^2 allora questa vale anche per $t \rightarrow +\infty$.

A questo punto per generalizzare a qualunque $|\psi_{in}\rangle$ dovremmo dimostrare che i pacchetti gaussiani sono una base completa dello spazio di Hilbert:

$$\forall |\psi_{in}\rangle \in \mathcal{H}, \forall \varepsilon > 0 \quad \exists \sum_k c_k |\psi_k^{gauss}\rangle : \left\| \psi_{in} - \sum_k c_k \psi_k^{gauss} \right\| < \varepsilon \quad (1.119)$$

Infatti per la disuguaglianza triangolare:

$$\left\| U^\dagger(\tau) V U_0(\tau) \sum_k c_k \psi_k^{gauss} \right\| \leq \sum_k |c_k| \left\| U^\dagger(\tau) V U_0(\tau) \psi_k^{gauss} \right\| \quad (1.120)$$

da cui:

$$\int_{-\infty}^0 \left\| U^\dagger(\tau) V U_0(\tau) \psi_{in} \right\| = \int_{-\infty}^0 \left\| U^\dagger(\tau) V U_0(\tau) \sum_k c_k \psi_k^{gauss} \right\| \leq \sum_k |c_k| \left\| U^\dagger(\tau) V U_0(\tau) \psi_k^{gauss} \right\| < \infty \quad (1.121)$$

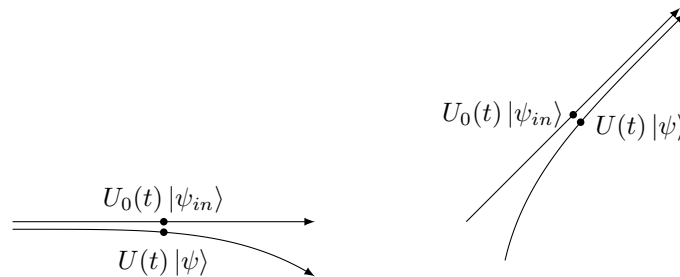
1.4.4 Operatori di Moeller e Ortogonalità di Stati Legati/Scattering

Notiamo a questo punto che il limite è lineare in $|\psi_{in}\rangle$ e dunque permette di definire un operatore isometrico (nel senso debole, limite di un operatore unitario):

$$\Omega_\pm = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^\dagger(t) U_0(t) \quad (1.122)$$

Questi sono detti **operatori d'onda di Moeller**. Abbiamo dunque dimostrato che per un potenziale centrale che soddisfa le proprietà proposte allora esistono gli operatori d'onda di Moeller, che sono operatori isometrici su \mathcal{H} .

Possiamo capire meglio il significato di questi operatori facendo una figura. Descriviamo l'evoluzione temporale degli stati come orbite classiche. L'evoluzione libera dell'asintoto $|\psi_{in}\rangle$ coincide dunque con una retta. Per la condizione asintotica l'operatore di Moeller Ω_+ definisce uno stato $|\psi\rangle$ (posizione e velocità) tale che la sua evoluzione temporale con interazione è una certa curva che converge a $-\infty$ con la retta. Analogamente per l'asintoto futuro.



Immaginiamo adesso che le nostre particelle incidenti sono preparate da una certa sorgente (un acceleratore di particelle, un collimatore, ecc...). Indichiamo lo stato prodotto da questa sorgente con $|\phi\rangle$, ossia siamo interessati al caso $|\psi_{in}\rangle = |\phi\rangle$. Dopo l'interazione il rivelatore fa una misura sulle particelle uscenti, in modo da stabilire esattamente lo stato finale, che chiamiamo $|\psi_{out}\rangle = |\chi\rangle$. Chiaramente gli strumenti reali non sono perfetti, ossia non producono/misurano un certo stato definito, ma è un utile esperimento mentale. Classicamente infatti produrre uno stato ben definito equivale a richiedere che una sorgente produce particelle con lo stesso momento e lo stesso parametro di impatto (che nel caso non centrale è un vettore, non uno scalare positivo).

Indichiamo gli stati interagenti corrispondenti agli asintoti liberi con la seguente notazione (nel caso di potenziali che soddisfano la condizione asintotica):

$$|\phi, +\rangle \equiv \Omega_+ |\phi\rangle \quad |\chi, -\rangle \equiv \Omega_- |\chi\rangle \quad (1.123)$$

Riprenderemo questa notazione più avanti.

Ci chiediamo a questo punto se è vero che ogni stato $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ definisce un'orbita interagente $U(t)|\psi\rangle$ che ammette asintoti $|\psi_{in}\rangle, |\psi_{out}\rangle$. Chiaramente questo è tipicamente non vero a causa della presenza di stati legati (escludiamo orbite non limitate senza entrambi gli asintoti per la completezza asintotica, che supponiamo essere dimostrata per i potenziali considerati). Infatti gli autostati dell'hamiltoniana sicuramente non ammettono asintoti, ossia non si evolvono mai come uno stato libero, ma rimane nello stato a meno di una fase:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Rightarrow U(t)|\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\psi\rangle \quad (1.124)$$

La condizione asintotica è dunque equivalente a richiedere che gli operatori di Moeller Ω_{\pm} sono ben definiti su tutto \mathcal{H} . Indichiamo con $\mathcal{R}_{\pm} = \mathcal{R}(\Omega_{\pm})$, che in generale non coincidono con tutto lo spazio di Hilbert.

Dimostriamo adesso il Teorema di ortogonalità.

Teorema 2 (Teorema di Ortogonalità). *Se $V(r)$ soddisfa le condizioni I-III allora $\mathcal{R}_{+}, \mathcal{R}_{-} \perp \mathcal{B}$.*

Dimostrazione. Sia $|\psi\rangle \in \mathcal{B}$, nel caso particolare di $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Sia poi $|\phi\rangle \in \mathcal{R}_{+}$, ossia $\exists! |\phi_{in}\rangle \in \mathcal{H} : |\phi\rangle = \Omega_{+}|\phi_{in}\rangle$. Verifichiamo che questi sono ortogonali.

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \langle U(t)\phi | U(t)\psi \rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle U(t)\phi | U(t)\psi \rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle U_0(t)\phi_{in} | e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi \rangle = \\ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \langle U_0(t)\phi_{in} | \psi \rangle \right) \end{aligned} \quad (1.125)$$

Prendendo il caso $|\phi_{in}\rangle$ pacchetto gaussiano allora la probabilità di overlap (e dunque il coefficiente di Fourier corrispondente) va a 0 e analogamente per un generico vettore per la disuguaglianza triangolare:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \langle U_0(t)\phi_{in} | \psi \rangle \right) = 0 \quad (1.126)$$

Chiaramente poi se $|\psi\rangle$ è perpendicolare ad ogni elemento della base di \mathcal{B} allora è perpendicolare anche ad ogni elemento di \mathcal{B} , come volevasi dimostrare. \square

1.4.5 Completezza Asintotica

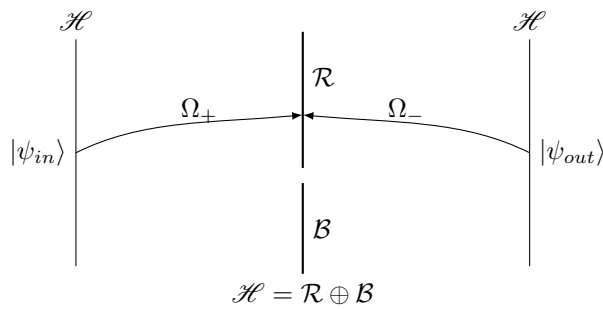
Nella notazione stabilita, possiamo dimostrare che nelle ipotesi date sul potenziale vale:

$$\begin{cases} \mathcal{R}_{+} = \mathcal{R}_{-} = \mathcal{R} \\ \hat{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B} \end{cases} \quad (1.127)$$

Siccome questo è piuttosto complicato, non lo dimostreremo.

Illustriamo graficamente questo risultato. Abbiamo lo spazio di Hilbert \mathcal{H} a cui appartiene $|\psi_{in}\rangle$. Abbiamo poi lo spazio di Hilbert a cui appartengono gli stati con l'interazione, dati dagli stati di scattering \mathcal{R} e gli stati legati \mathcal{B} . Abbiamo infine lo spazio di Hilbert \mathcal{H} a cui appartengono $|\psi_{out}\rangle$.

Se vale la completezza asintotica $\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B}$. Gli operatori Ω_{\pm} mandano dunque \mathcal{H} in \mathcal{R} .



La parte difficile da dimostrare è che $\mathcal{R}_{+} = \mathcal{R}_{-}$, così che coincidono con l'intero spazio degli stati di scattering, e che i sottospazi \mathcal{R}, \mathcal{B} sono uno il complemento ortogonale dell'altro, oltre ad essere ortogonali.

1.5 Lezione 5

1.5.1 Operatore di Scattering

Notiamo che essendo gli operatori isometrici $\Omega_{\pm}^{\dagger}\Omega_{\pm} = \mathbb{1}$ allora dato uno stato asintotico riusciamo sempre a trovare il corrispondente stato interagente:

$$\begin{cases} |\psi\rangle = \Omega_{+}|\psi_{in}\rangle \\ |\psi\rangle = \Omega_{-}|\psi_{out}\rangle \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} |\psi_{in}\rangle = \Omega_{+}^{\dagger}|\psi\rangle \\ |\psi_{out}\rangle = \Omega_{-}^{\dagger}|\psi\rangle \end{cases} \quad (1.128)$$

Ma siccome i $|\psi\rangle$ coincidono (perchè?) allora possiamo stabilire una corrispondenza tra asintoto passato e futuro:

$$|\psi_{out}\rangle = \Omega_-^\dagger |\psi\rangle = \Omega_-^\dagger \Omega_+ |\psi_{in}\rangle \quad (1.129)$$

Definiamo dunque l'**operatore (matrice) di scattering**:

$$S = \Omega_-^\dagger \Omega_+ \Rightarrow |\psi_{out}\rangle = S |\psi_{in}\rangle \quad (1.130)$$

Pertanto se troviamo l'operatore di scattering allora abbiamo risolto il problema di scattering, in quanto fornisce tutte le informazioni necessarie.

Sia adesso $|\phi\rangle$ lo stato asintotico iniziale di emissione della particella considerata da una sorgente. Lo stato asintotico finale è legato a questo tramite $|\psi_{out}\rangle = S|\phi\rangle$. Il rivelatore verifica se la particella si trova o meno in uno stato $|\chi\rangle$. Esplicitiamo adesso la probabilità di osservare l'asintoto finale in questo stato.

All'istante $t = 0$ lo stato asintotico iniziale corrisponde a:

$$|\phi\rangle \rightarrow \Omega_+ |\phi\rangle = |\phi, +\rangle \quad (1.131)$$

Lo stato $|\chi\rangle$ corrisponde invece a:

$$|\chi\rangle \rightarrow \Omega_- |\chi\rangle = |\chi, -\rangle \quad (1.132)$$

La probabilità che la particella inizialmente nello stato $|\phi\rangle$ finisca nello stato $|\chi\rangle$ è data dunque da:

$$W(\phi \rightarrow \chi) = |\langle \chi, - | \phi, + \rangle|^2 = \left| \langle \chi | \Omega_-^\dagger \Omega_+ | \phi \rangle \right|^2 = |\langle \chi | S | \phi \rangle|^2 \quad (1.133)$$

Pertanto la probabilità di overlap tra uno stato asintotico iniziale e un dato stato finale dopo un'interazione è data dal modulo quadro dell'elemento di matrice dell'operatore di scattering tra questi due stati. Pertanto l'operatore di Scattering fornisce tutte le informazioni necessarie a ricavare il risultato di un esperimento di scattering ideale.

A questo punto dimostriamo alcune proprietà dell'operatore di scattering. Iniziamo con il notare che S è un operatore unitario. Siccome è il prodotto di operatori isometrici allora è a sua volta isometrico. Tuttavia è anche isometrico in quanto il suo range coincide con tutto lo spazio di Hilbert. Questo è verificato nel caso di completezza asintotica. Siccome Ω_+ manda un qualunque vettore $|\psi_{in}\rangle$ in un vettore di \mathcal{R} allora Ω_-^\dagger che agisce su \mathcal{R} coincide con Ω_-^{-1} , che a sua volta ha range pari a tutto \mathcal{H} . Pertanto S è unitario:

$$\mathcal{R}(S) = \mathcal{R}(\Omega_-^{-1} \Omega_+) = \mathcal{H} \quad (1.134)$$

Ricordiamo che tutti gli stati considerati finora sono normalizzati (o normalizzabili), ad eccezione degli autostati della posizione e del momento. Chiaramente essendo S isometrico allora manda uno stato normalizzabile in un altro stato normalizzabile.

Notiamo poi che S conserva anche l'energia del sistema. Intuitivamente notiamo che in realtà l'hamiltoniana conservata nel processo di scattering è quella libera $\hat{\mathcal{H}}_0$, non quella con interazione $\hat{\mathcal{H}}$, in quanto gli stati asintotici evolvono con l'hamiltoniana libera, non con quella d'interazione. Verifichiamo questo quantitativamente.

Per fare questo facciamo uso della relazione di interpolazione $\hat{\mathcal{H}}\Omega_\pm = \Omega_\pm \hat{\mathcal{H}}_0$. Ricordiamo che gli operatori di Moeller sono definiti come segue:

$$\Omega_\pm = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} (U^\dagger(t) U_0^t) = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} \left(e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} \right) \quad (1.135)$$

Applichiamo $U^\dagger(\tau)$ a questi operatori:

$$\begin{aligned} U^\dagger(\tau) \Omega_\pm &= e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} \tau} \lim_{t \rightarrow \mp\infty} \left(e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} \right) = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} \left(e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t+\tau)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} \right) = \left[\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \left(e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t+\tau)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0(t+\tau)} \right) \right] e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 \tau} = \\ &= \left[\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \left(e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} \right) \right] e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 \tau} = \Omega_\pm e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 \tau} = \Omega_\pm U_0(\tau) \end{aligned} \quad (1.136)$$

Ma siccome τ è arbitrario allora deve valere anche per tempi infinitesimi, ossia troviamo le relazioni di interpolazione:

$$\hat{\mathcal{H}}\Omega_\pm = \Omega_\pm \hat{\mathcal{H}}_0 \quad (1.137)$$

come volevasi dimostrare.

Usando questa troviamo:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}\Omega_\pm &= \Omega_\pm \hat{\mathcal{H}}_0 \\ \Omega_\pm^\dagger \hat{\mathcal{H}}\Omega_\pm &= \Omega_\pm^\dagger \Omega_\pm \hat{\mathcal{H}}_0 \\ \Omega_\pm^\dagger \hat{\mathcal{H}}\Omega_\pm &= \hat{\mathcal{H}}_0 \end{aligned} \quad (1.138)$$

Notiamo l'importanza della distinzione tra operatori isometrici e unitari. Infatti se gli operatori di Moeller fossero unitari allora l'hamiltoniana con interazione sarebbe unitariamente equivalente all'hamiltoniana libero, implicando in particolare che solo hamiltoniane che hanno spettro puramente continuo possono ammettere operatori di Moeller unitari, ma tipicamente vi sarà sempre una componente discreta dello spettro (associata a stati legati) che impedisce questa proprietà.

Troviamo infine che l'operatore S commuta con l'hamiltoniana libera:

$$S\hat{\mathcal{H}}_0 = \Omega_-^\dagger (\Omega_+ \hat{\mathcal{H}}_0) = (\Omega_-^\dagger \hat{\mathcal{H}}) \Omega_+ = \hat{\mathcal{H}}_0 (\Omega_-^\dagger \Omega - +) = \hat{\mathcal{H}}_0 S \iff [S, \hat{\mathcal{H}}_0] = 0 \quad (1.139)$$

Da questo troviamo che il valore medio dell'energia (e anche tutti i momenti della distribuzione) è conservato:

$$\langle \psi_{out} | \hat{\mathcal{H}}_0 | \psi_{out} \rangle = \langle \psi_{in} | S^\dagger \hat{\mathcal{H}}_0 S | \psi_{in} \rangle = \langle \psi_{in} | \hat{\mathcal{H}}_0 S^\dagger S | \psi_{in} \rangle = \langle \psi_{in} | \hat{\mathcal{H}}_0 | \psi_{in} \rangle \quad (1.140)$$

Siccome S commuta con $\hat{\mathcal{H}}_0$ ed $\hat{\mathcal{H}}_0$ è diagonale nella base dei momenti (non normalizzabile) è allora naturale trovare gli elementi di matrice in questa base. In questa base l'operatore di scattering è anche detto matrice di scattering S :

$$\langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle \quad (1.141)$$

Pertanto questi non sono ampiezze fisiche ma solo il nucleo di integrazione usato per calcolare l'azione della matrice S nello spazio dei momenti:

$$\psi_{out}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi_{out} \rangle = \int d^3 \vec{p}' \langle \vec{p} | S | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \psi_{in} \rangle = \int d^3 \vec{p}' \langle \vec{p} | S | \vec{p}' \rangle \psi_{in}(\vec{p}') \quad (1.142)$$

Per trovare questo nucleo usiamo la conservazione dell'energia:

$$0 = \langle \vec{p}' | [\hat{\mathcal{H}}_0, S] | \vec{p} \rangle = (E_{p'} - E_p) \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle \Rightarrow \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle \delta(E_p - E_{p'}) + R(\vec{p}, \vec{p}') \quad (1.143)$$

dove $R(\vec{p}, \vec{p}')$ è un certo resto che contribuisce quando \vec{p}, \vec{p}' hanno la stessa energia. Questo suggerisce di fattorizzare l'operatore di scattering come segue:

$$S = \mathbb{1} + R \quad (1.144)$$

Ci aspettiamo chiaramente che per $V(\vec{x}) = 0$ allora lo stato asintotico futuro e passato coincidono, ossia $S = \mathbb{1} \Rightarrow R = 0$. Pertanto R deve misurare l'effetto del potenziale, che ci aspettiamo dipendere in maniera non banale dalla presenza di questo. Chiaramente poi in ipotesi di completezza asintotica l'hamiltoniana commuta anche con il resto $[\hat{\mathcal{H}}_0, R] = 0$. In questo caso ha ancora senso ricondurre gli elementi di matrice nella base dei momenti alla delta di Dirac dell'energia:

$$\langle \vec{p}' | R | \vec{p} \rangle = -2\pi i \delta(E_{p'} - E_p) t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad (1.145)$$

con $t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ una certa funzione di \vec{p} e \vec{p}' che dipende dal potenziale V . Possiamo poi riscrivere S come:

$$\langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \delta_3(\vec{p}' - \vec{p}) - 2\pi i \delta(E_{p'} - E_p) t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad (1.146)$$

da cui:

$$\psi_{out}(\vec{p}') = \psi_{in}(\vec{p}') - 2\pi i \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \delta(E_{p'} - E_p) t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \psi_{in}(\vec{p}) \quad (1.147)$$

Pertanto per ogni \vec{p}' dobbiamo fare un integrale sulla sfera di raggio \vec{p}' in $d^3 \vec{p}$, ossia il momento incidente può solo cambiare direzione ma non modulo (analogamente a quanto visto nel caso classico).

Si può dimostrare che l'ampiezza t è non solo regolare rispetto a \vec{p}, \vec{p}' ma presenta anche proprietà di analiticità rispetto ad entrambi gli argomenti, che possiamo sfruttare per semplificare i conti e dimostrare altre proprietà relative allo scattering.

Notiamo adesso che l'equazione 1.145 definisce l'ampiezza $t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ solo per $E_p = E_{p'}$, ossia si dice che è definita "on shell", ossia nell'equazione è definita in realtà solo una funzione del modulo del momento. Pertanto $t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ non definisce a priori l'elemento di matrice di un operatore:

$$\langle \vec{p}' | t | \vec{p} \rangle \stackrel{?}{=} t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad (1.148)$$

Si può però dimostrare che $t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ è la restrizione di una funzione analitica in \vec{p}, \vec{p}' definita anche off-shell, a cui è associato anche un operatore.

1.5.2 Ampiezza di Scattering

Definiamo adesso l'ampiezza di scattering f , con cui ci siamo riferiti impropriamente a t e da cui differisce di un fattore moltiplicativo:

$$\langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \delta_3(\vec{p}' - \vec{p}) + \frac{i}{2\pi m \hbar} \delta(E_{p'} - E_p) f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = -(2\pi)^2 m \hbar f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad (1.149)$$

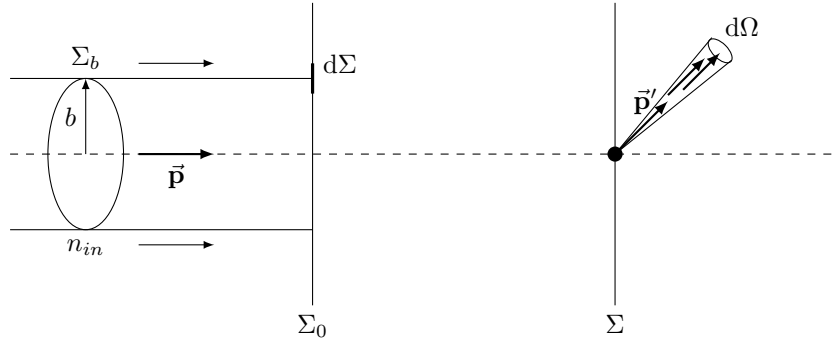
con m massa della particella (consideriamo solo particelle non relativistiche, che hanno tutte massa).

Questa definizione è dovuta al fatto che l'ampiezza di scattering è direttamente legata alla sezione d'urto differenziale rispetto all'angolo solido, tramite la seguente relazione, che ora dimostriamo:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')|^2 \quad (1.150)$$

Ricordiamo la definizione di questa. Sia un bersaglio e delle particelle incidenti con un impulso approssimativamente ben definito (cioè con data direzione e modulo). Dato un piano Σ perpendicolare alla direzione dell'impulso delle particelle incidenti e un piano Σ_0 lontano dal bersaglio, allora il flusso n_{in} delle particelle incidenti, che hanno momento \vec{p} , è definito come il numero di particelle che attraversano un elemento $d\Sigma$ del piano per unità di tempo:

$$dn_{in} = n_{in} d\Sigma \quad (1.151)$$



Ha ancora senso dire che la singola particella attraversa un elemento $d\Sigma$ in senso quantistico ragionando in termini di valore medio della posizione, se i pacchetti sono sufficientemente localizzati (ma non troppo da rendere la variazione su \vec{p} troppo grande). Pertanto ha ancora senso anche parlare del parametro di impatto, come la distanza tra la posizione media e la retta parallela a \vec{p} che passa per il bersaglio. Tuttavia comunque non ha senso parlarne per una singola particella, ma solo per il fascio, in quanto non può essere misurato a priori per la singola particella. Possiamo però richiedere che il parametro di impatto massimo abbia un certo valore, ossia tutto il fascio sia racchiuso in una certa superficie finita di raggio R , che identifichiamo dunque con Σ_0 . Supponendo che questo sia distribuito uniformemente allora questo è equivalente a richiedere che il flusso sia uniforme su Σ_0 .

Nell'esperimento siamo interessati alle particelle che vengono deflesse con momento \vec{p}' nell'angolo solido infinitesimo $d\Omega$ centrato nel bersaglio. La sezione d'urto differenziale è definita da:

$$dn(d\Omega) = n_{in} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p}', \vec{p}) d\Omega \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p}', \vec{p}) = \frac{1}{n_{in}} \frac{dn}{d\Omega} \quad (1.152)$$

In realtà siccome il modulo è conservato la sezione d'urto differenziale allora sono necessari solo cinque parametri invece che sei, con uno dato dal modulo o l'energia e gli altri quattro dati ad esempio da angoli in un sistema di riferimento polare:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega}(E_p, \alpha', \beta', \alpha, \beta) \quad (1.153)$$

Indichiamo con $W(\psi_{in} \rightarrow d^3p)$ la probabilità di trovare la particella con momento contenuto nell'elemento di volume $d^3\vec{p}$ centrato intorno a \vec{p} :

$$W(\psi_{in} \rightarrow d^3p) = d^3p |\psi_{out}(\vec{p})|^2 \quad (1.154)$$

dove lo stato è normalizzato. Notiamo dunque che per ricavare lo stato asintotico finale allora nel caso quantistico (ideale di stato iniziale perfettamente definito e noto) il risultato della misura è comunque di natura statistica, ossia una singola misura non ci permette di determinare lo stato asintotico, ma solo misure ripetute. Oltre a questo vi è poi il problema pratico per cui lo stato delle particelle non è ben definito, ma dovremo considerare un'altra componente statistica nel produrre gli stati, oltre che nel misurarli.

Passiamo adesso alla rappresentazione delle posizioni:

$$\tilde{\psi}_{in}(\vec{x}) \equiv \langle \vec{x} | \psi_{in} \rangle \quad (1.155)$$

Consideriamo il ruolo del parametro di impatto e in particolare la proprietà per cui è distinto tra le varie particelle.

Indichiamo con $|\phi\rangle = |\psi_{in}\rangle$ lo stato asintotico di una particella. Allora lo stato asintotico di una particella con parametro di impatto traslato di un certo vettore $\vec{\rho}$ è dato da:

$$\langle \vec{x} | \phi_{\vec{\rho}} \rangle = \tilde{\psi}_{in}(\vec{x} - \vec{\rho}) \quad (1.156)$$

Siccome noi siamo interessati a traslazioni in un piano allora limitiamo $\vec{\rho}$ a Σ_0 . Notiamo che se $|\psi_{in}\rangle$ è lo stato asintotico di una particella con parametro di impatto nullo, allora la richiesta che il fascio sia contenuto in una circonferenza (la superficie di Σ_0) equivale alla condizione $|\vec{\rho}| \leq R$. Tuttavia in pratica noi ci limitiamo a considerare R infinito. In questo caso allora non è rilevante richiedere che il parametro di impatto di $|\psi_{in}\rangle$ sia nullo, in quanto traslando di una quantità finita un qualunque integrale in $d^2\rho$ su un dominio infinito non cambia valore (che è quello per cui usiamo $\vec{\rho}$, per fare una media sugli stati, ossia un integrale su Σ_0 , che approssimiamo a tutto \mathbb{R}^2).

Cerchiamo adesso di capire che legame c'è tra $\phi_{\vec{\rho}}$ e ϕ . Per fare questo passiamo alla rappresentazione dei momenti:

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{\rho}}(\vec{p}) &= \langle \vec{p} | \phi_{\vec{\rho}} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \phi_{\vec{\rho}} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \tilde{\psi}_{in}(\vec{x} - \vec{\rho}) = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\rho}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{\rho})} \tilde{\psi}_{in}(\vec{x} - \vec{\rho}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\rho}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}'} \tilde{\psi}_{in} \vec{x}' = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\rho}} \psi_{in}(\vec{p}) \end{aligned} \quad (1.157)$$

Pertanto dato uno stato asintotico $|\psi_{in}\rangle$ di una particella, gli stati asintotici di ogni altra particella nella rappresentazione dei momenti sono dati da:

$$\phi_{\vec{\rho}}(\vec{p}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\rho}} \psi_{in}(\vec{p}) \quad (1.158)$$

al variare di $\vec{\rho}$ su Σ_0 . Nell'ipotesi di flusso uniforme allora $\vec{\rho}$ è una variabile casuale distribuita uniformemente nel piano Σ_0 . Pertanto scriviamo più precisamente:

$$dn_{in}(\vec{\rho} \in d^2\rho) = n_{in} d^2\rho \quad (1.159)$$

con dn_{in} particelle che attraversano Σ_0 con "parametro di impatto" $\vec{\rho}$ nell'unità di tempo ed n_{in} flusso di particelle attraverso.

Per calcolare la sezione d'urto differenziale dovremo dunque fare una media "classica" su tutti i valori possibili $\vec{\rho}$ nel piano Σ_0 . Tramite questo calcolo potremo ricondurre l'ampiezza di scattering alla sezione d'urto differenziale.

1.6 Lezione 6

Consideriamo il caso di una particella immersa in un potenziale conservativo, l'equazione di Schrodinger si scrive:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \quad (1.160)$$

Siccome il potenziale è conservativo allora possiamo cercare soluzioni fattorizzate in tempo e posizione:

$$\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r}) \tau(t) \quad (1.161)$$

da cui:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\tau}{dt}(t) = W\tau \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] u(\vec{r}) = Wu(\vec{r}) \end{cases} \quad (1.162)$$

Noi studieremo solo la seconda, che è l'equazione agli autovalori dell'Hamiltoniana (nella rappresentazione delle posizioni).

Noi siamo interessati al caso del potenziale centrale, nel qual caso conviene esprimere il laplaciano in coordinate polari:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (1.163)$$

Nel caso di potenziale centrale possiamo poi fattorizzare nella variabile radiale e quelle angolari:

$$u(\vec{r}) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (1.164)$$

Possiamo riscrivere l'equazione agli autovalori in due equazioni differenziali in Y, R :

$$\begin{cases} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -\lambda Y \\ \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{im_p}{\hbar^2} [W - U(r)] r^2 = \lambda \end{cases} \quad (1.165)$$

Separiamo la prima in $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$, notando che non dipende dal potenziale e dunque saranno soluzioni tipiche di ogni potenziale centrale:

$$\begin{cases} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \Theta \lambda \sin^2 \theta = \mu \Theta \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -\mu \Phi \\ \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{im_p}{\hbar^2} [W - U(r)] r^2 = \lambda \end{cases} \quad (1.166)$$

1.6.1 Equazione Angolare

Ricordiamo che $\phi \in [0, 2\pi]$ e $\theta \in [0, \pi]$ ed $r \in [0, \infty)$. Pertanto dobbiamo porre equazioni di periodicit  per Φ, Θ , ossia condizioni di continuit  sulla funzione e la sua derivata:

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi) \quad \Phi'(0) = \Phi'(2\pi) \quad (1.167)$$

Nel caso $\mu = 0$ troviamo $\Phi = A$ con A una certa costante. Per $\mu \neq 0$ troviamo:

$$\begin{cases} A + B = Ae^{i\sqrt{\mu}2\pi} + Be^{-i\sqrt{\mu}2\pi} \\ i\sqrt{\mu} [Ae^{i\sqrt{\mu}2\pi} - Be^{i\sqrt{\mu}2\pi}] = i\sqrt{\mu}(A - B) \end{cases} \quad (1.168)$$

La condizione affinch  esiste ed   unica la soluzione   data dalla condizione che il determinante del sistema   nullo, che si trova essere $\cos(2\pi\sqrt{\mu} - 1) = 0$, ossia che $\sqrt{\mu}$   un intero. Troviamo dunque, posto $\sqrt{\mu} = m \in \mathbb{Z}$:

$$\Phi(\phi) = A_m e^{im\phi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (1.169)$$

Risolviamo poi l'equazione rispetto a Θ , passando alla variabile $\xi = \cos \theta$, cos  che si riscrive come segue:

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi)^2 \frac{d\Theta}{d\xi} \right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) \Theta = 0 \quad (1.170)$$

Notiamo che l'equazione ammette singolarit  in $\xi = \pm 1$, cosiddette di tipo "fuchsiano". In particolare si trova che per ξ vicino a ± 1 :

$$\begin{cases} \Theta_1(\xi) = (1 - \xi)^{|m|/2} g_1(\xi) & \xi \approx 1 \\ \Theta_2(\xi) = (1 + \xi)^{|m|/2} \tilde{g}_1(\xi) & \xi \approx -1 \end{cases} \quad (1.171)$$

Esistono anche altre soluzioni ma non sono sufficientemente regolari e dunque non appartengono allo spazio di Hilbert. Ci aspettiamo dunque una soluzione di questo tipo:

$$\Theta(\xi) = (1 - \xi^2)^{|m|/2} f(\xi) \quad (1.172)$$

Inseriamo quest'ansatz nella soluzione:

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2 f}{d\xi^2} - 2(|m| + 1)\xi \frac{df}{d\xi} + [\lambda - |m|(|m| + 1)]f = 0 \quad (1.173)$$

L'equazione   regolare e dunque ci aspettiamo una soluzione analitica per f :

$$f = \sum_{s=0}^{\infty} c_s \xi^s \quad (1.174)$$

Inseriamo quest'ansatz, trovando la relazione di ricorrenza per i coefficienti c_s :

$$c_{s+2} = \frac{(s + |m|)(s + |m| + 1) - \lambda}{(s + 2)(s + 1)} c_s \quad (1.175)$$

Pertanto fissati c_0, c_1 troviamo tutti gli altri (da c_0 abbiamo i coefficienti pari e da c_1 quelli dispari). Chiaramente se $c_0 \neq 0, c_1 = 0$ allora la funzione è pari (solo potenze pari), mentre viceversa se $c_0 = 0, c_1 \neq 0$ allora la funzione è dispari (solo potenze dispari). Possiamo dunque scrivere questa funzione come segue:

$$f(\xi) = c_0 F(\xi^2) + c_1 \xi G(\xi^2) \quad \begin{cases} F = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{c_{2s}}{c_0} \xi^{2s} \\ G = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{c_{2s+1}}{c_1} \xi^{2s} \end{cases} \quad (1.176)$$

dove F, G sono funzioni pari di ξ oppure generiche di ξ^2 . Vogliamo dunque che le funzioni siano regolari, ossia il raggio di convergenza della serie di potenze sia maggiore di 1, in modo da comprendere l'intervallo $[-1, 1]$.

Notiamo in particolare che l'equazione di ricorrenza:

$$\frac{c_{s+2}}{c_s} \rightarrow 1 \quad (1.177)$$

Questo significa che per $\xi = \pm 1$ le funzioni F, G non sono regolari e dunque l'unica possibilità è che siano troncati per un certo $\nu = s_{max}$. Dobbiamo dunque imporre che per $c_\nu \neq 0$ allora $c_{\nu+2} = 0$. Questo fornisce una condizione su λ :

$$\lambda = (\nu + |m|)(\nu + |m| + 1) \quad (1.178)$$

Chiaramente sia F che G non possono essere contemporaneamente somma finita di polinomi, in quanto se ν è pari allora G non converge in ± 1 (mentre F converge) mentre per ν dispari F non converge. Pertanto per ν pari richiediamo $c_1 = 0$ e per ν dispari richiediamo $c_0 = 0$ (in modo che nel limite il loro contributo è nullo). Pertanto $f_\nu(\xi)$ ha la stessa parità di ν .

Definiamo poi una variabile che sostituisce l e semplifica l'espressione di λ :

$$l = \nu + |m| \Rightarrow \lambda = l(l + 1) \quad (1.179)$$

Ricordiamo dunque che f dipende da λ, μ o equivalentemente da $l, |m|$ e analogamente Θ :

$$\Theta = \Theta_l^{|m|} = (1 - \xi^2)^{|m|/2} f_l^{|m|}(\xi) \quad (1.180)$$

con:

$$m \in \mathbb{Z} \quad l = |m|, |m| + 1, \dots \quad (1.181)$$

Per trovare le soluzioni notiamo che una base di polinomi che risolve l'equazione in Θ per $m = 0$ è data dai Polinomi di Legendre $P_l(\xi)$, che sono normalizzati con certi coefficienti C_l :

$$P_l(\xi) = (-1)^l \frac{1}{l!2^l} \frac{d^l}{d\xi^l} (1 - \xi^2)^l \quad \Theta_l^0(\xi) = C_l P_l(\xi) \quad (1.182)$$

Nota la soluzione per $m = 0$ possiamo trovare soluzioni per m generico verificando che la derivata $|m|$ -esima di questa è ancora soluzione per il corrispondente m :

$$f_l^{|m|} = \frac{d^{|m|} f_l^0}{d\xi^{|m|}} \Rightarrow \Theta_l^{|m|} = (1 - \xi^2)^{|m|/2} f_l^{|m|}(\xi) = C_l^{|m|} P_l^{|m|}(\xi) \quad (1.183)$$

In particolare sfruttando le proprietà dei coefficienti di Legendre si trova:

$$C_l^{|m|} = \sqrt{\frac{(2l+1)}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \quad (1.184)$$

Infine troviamo le cosiddette armoniche sferiche:

$$Y_{lm}(\phi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\phi} \sqrt{\frac{(2l+1)}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) (-1)^{\frac{|m|-m}{2}} \quad (1.185)$$

Questo sono una base ortonormale per $\mathcal{L}^2(\Omega)$:

$$\int_{4\pi} d\Omega Y_{l'm'}^* Y_{lm} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (1.186)$$

1.6.2 Equazione Radiale

Esprimendo $\lambda = l(l+1)$, riscriviamo l'equazione radiale:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_p}{\hbar^2} \left(W - U - \frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0 \quad (1.187)$$

Ancora una volta il contributo angolare funzione da potenziale radiale efficace. Inoltre la dipendenza da l indica che i valori di W dipendono da l , ossia dobbiamo usare W_l . Distinguiamo adesso le soluzioni proprie e le soluzioni improprie. Le prime sono a quadrato integrabile e corrispondono a spettro discreto (ossia le soluzioni dipendono dall'energia in maniera "discreta", ossia tramite un indice intero $R_W = R_n$):

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3r |u(\vec{r})|^2 < \infty \Rightarrow \int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2 < \infty \quad (1.188)$$

Le seconde invece sono un insieme continuo di soluzioni R_W , dove ogni pacchetto di soluzioni è integrabile:

$$\int_0^\infty dr r^2 \left| \int_W^{W+dW} dW' R_{W'}(r) \right|^2 < \infty \quad (1.189)$$

Semplifichiamo l'equazione passando alla funzione $R(r) = y(r)/r$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) + \frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y(r) = W_l y(r) \quad (1.190)$$

In questo caso la condizione su soluzioni proprie e improprie si semplifica:

$$\int_0^\infty dr |y|^2 < \infty \quad \int_0^\infty dr \left| \int_W^{W+dW} dW' y_{W'} \right|^2 < \infty \quad (1.191)$$

Notiamo adesso che per $r = 0$ gli angoli non sono ben definiti e dunque ci aspettiamo singolarità nell'origine. Possiamo comunque richiedere certe condizioni di regolarità:

$$\lim_{r \rightarrow 0} R(r) < \infty \quad R' \text{ regolare} \quad (1.192)$$

Questo significa in particolare che $y(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} O(r)$.

Supponiamo $U(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$ per semplicità. Pertanto per $r \rightarrow \infty$ l'equazione si semplifica in quanto scompare il potenziale e la barriera centrifuga:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2}{dr^2} \right) y(r) = W_l y(r) \quad (1.193)$$

Possiamo scrivere ansatz per quest'equazione a seconda del segno di W somma di esponenziali. Per $W < 0$:

$$y_l \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_l(W) e^{-\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_p |W|} r} + B_l(W) e^{\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_p |W|} r} \quad (1.194)$$

Mentre per $W > 0$:

$$y_l \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_l(W) e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m_p |W|} r} + D_l(W) e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m_p |W|} r} \quad (1.195)$$

Notiamo che affinché la soluzione per $W < 0$ sia regolare all'infinito (ossia sia integrabile) allora non ci possono essere termini crescenti esponenzialmente, ossia:

$$B_l(W) = 0 \quad (1.196)$$

e dunque la soluzione è propria. Il vincolo $B_l(W)$ trova implicitamente anche lo spettro discreto W_l , che ci aspettiamo essere indicizzato da un indice intero n oltre che da l (ossia troviamo uno spettro discreto per ogni l , corrispondente ad un diverso operatore sullo spazio delle funzioni radiali). Questo ci permette di usare la notazione W_{nl} e y_{nl} per le soluzioni per $W < 0$.

Per $W > 0$ le soluzioni non sono mai proprie (eccetto il caso nullo), ma sono improprie:

$$\int |y_l|^2 = \infty \quad \int \left| \int dW' y_{W'} \right|^2 < \infty \quad (1.197)$$

In questo caso ogni valore di $W > 0$ implica possibili soluzioni improprie. Pertanto per ogni l ritroviamo uno spettro continuo dato dalla semiretta reale positiva e dunque possiamo dimenticarci di l per indicizzare W . Pertanto potremo

indicizzare l'energia e le soluzioni con un parametro continuo equivalente a $W \in (0, \infty)$, ad esempio il momento $p = \sqrt{2m_p W}$. Possiamo dunque usare W_p (anche se per lo spettro continuo usiamo semplicemente W) e poi y_{pl} .

Richiediamo adesso che oltre alla regolarità delle funzioni, queste siano ortonormali:

$$\begin{cases} \int_0^\infty dr y_{n'l}^*(r) y_{nl}(r) = \delta_{nn'} \\ \int_0^\infty dr y_{p'l}^*(r) y_{pl}(r) = \delta(p - p') \\ \int_0^\infty dr y_{pl}^*(r) y_{nl}(r) = 0 \end{cases} \quad (1.198)$$

È sottinteso che per $l \neq l'$ le soluzioni sono ancora ortogonali in quanto appartengono a spazi di Hilbert distinti (not sure). Queste condizioni sono quelle che forniscono i coefficienti $A_l(W)$, $B_l(W)$, $C_l(W)$, $D_l(W)$.

Per fare questo, nel caso delle soluzioni improprie (non ci interessano quelle proprie), consideriamo le equazioni differenziali in y_{pl} , $y_{p'l}$ e moltiplichiamo per il complesso coniugato dell'altro:

$$\begin{aligned} y_{p'l}^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) + \frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_{pl} &= W y_{p'l}^* y_{pl} \\ y_{pl}^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) + \frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_{p'l} &= W' y_{pl}^* y_{p'l} \end{aligned} \quad (1.199)$$

Facciamo poi la differenza delle due equazioni ed integriamo in dr :

$$\int_0^r dr' [y_{p'l}^* y_{pl} - y_{pl}^* y_{p'l}] = \int_0^r dr' [W y_{p'l}^* y_{pl} - W' y_{pl}^* y_{p'l}] \quad (1.200)$$

Da questa troviamo:

$$(p'^2 - p^2) \int_0^r dr y_{p'l}^*(r') y_{pl}(r') = \hbar^2 \left(y_{p'l}^* \frac{dy_{pl}}{dr} - \frac{dy_{p'l}^*}{dr} y_{pl} \right) \quad (1.201)$$

Pertanto per $r \rightarrow \infty$ possiamo esplicitare il lato sinistro usando l'ansatz delle soluzioni improprie, che si esplicita come segue:

$$i\hbar(p' + p) \left[C^*(p') C(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')r} - D^*(p') D(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')r} \right] + i\hbar(p' - p) \left[C^*(p') D(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(p+p')r} - D^*(p') C(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p+p')r} \right] \quad (1.202)$$

Nel caso $p = p'$ troviamo una condizione sui coefficienti:

$$0 = 2i\hbar p (|C_l|^2 - |D_l|^2) \Rightarrow |C_l|^2 = |D_l|^2 \quad (1.203)$$

Per trovare un ulteriore vincolo nel caso $p \neq p'$ usiamo il Teorema di Riemann-Lebesgue per le trasformate di Fourier, che afferma che se $f(\xi)$ è integrabile:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{i\xi l} f(\xi) \xrightarrow{l \rightarrow 0} 0 \quad (1.204)$$

Pertanto dato $g(p)$ integrabile allora $g(p) e^{ipr} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$ nel senso delle distribuzioni. Questo permette di porre a zero il secondo termine nel membro sinistro dell'equazione trovata per i coefficienti.

$$i\hbar \frac{1}{p' + p} \left[C^*(p') D(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(p+p')r} - D^*(p') C(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p+p')r} \right] \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad (1.205)$$

Pertanto l'equazione si è ridotta a:

$$(p'^2 - p^2) \int_0^r dr y_{p'l}^*(r') y_{pl}(r') = \frac{i\hbar}{p' - p} \left[C^*(p') C(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')r} - D^*(p') D(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')r} \right] \quad (1.206)$$

Possiamo poi scrivere per $r \rightarrow \infty$ il secondo membro nel modo seguente:

$$\begin{aligned} &\rightarrow \frac{i\hbar}{p' - p} \left[\left(|C_l|^2 + O(p' - p) \right) e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')r} - \left(|D_l|^2 + O(p' - p) \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')r} \right] \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{2\hbar |C_l|^2}{p - p'} \sin[(p - p') \frac{r}{\hbar}] \rightarrow 2\pi\hbar |C_l|^2 \delta(p - p') \end{aligned} \quad (1.207)$$

Troviamo infine:

$$|C_l| = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Rightarrow C_l = \frac{e^{\alpha_l(p)}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad D_l = \frac{e^{-i\alpha_l(p)}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (1.208)$$

con $2\alpha_l$ differenza di fase tra C_l e D_l , che dipende dalla forma del potenziale.

1.6.3 Particella Libera

Consideriamo adesso il caso della particella libera $U = 0$. In questo caso l'equazione agli autovalori diventa della forma:

$$\frac{d^2 y}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) y = 0 \quad k = \sqrt{\frac{2m_p W}{\hbar^2}} \quad (1.209)$$

Risolviamo per $l = 0$, che è quella di un oscillatore armonico (classico):

$$y_0(r) = A_0 \sin(kr) + B_0 \cos(kr) \quad (1.210)$$

Siccome vogliamo che $y \rightarrow 0$ per $r \rightarrow 0$ allora $B_0 = 0$ e dunque:

$$y_0(r) = A_0 \sin(kr) \quad (1.211)$$

Se $W > 0$ la soluzione è regolare, mentre se $W < 0$ la soluzione diverge esponenzialmente e dunque non è a quadrato integrabile e dunque la scartiamo.

Come prima troviamo dunque per $W > 0$ la seguente normalizzazione:

$$y_0(p, r) = \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right) \quad p = \hbar k = \sqrt{2m_p W} \quad (1.212)$$

In questo caso $\alpha_0(p) = -\frac{\pi}{2}$.

Per $l \neq 0$ ci conviene rendere adimensionale la variabile $r \rightarrow \rho = kr$:

$$\frac{d^2 y}{d\rho^2} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) y = 0 \quad (1.213)$$

Notiamo che l'equazione differenziale ammette nuovamente in $\rho = 0 = r$ una singolarità di tipo fuchsiano. Pertanto le soluzioni devono essere della forma:

$$\sim \rho^{l+1} \quad \sim \rho^{-l} \quad (1.214)$$

dove la seconda è singolare e dunque va scartata. Pertanto usiamo l'ansatz:

$$y_l(l) = \rho^{l+1} \chi_l(\rho) \quad (1.215)$$

rispetto a cui l'equazione diventa (il secondo passaggio si ottiene applicando $\frac{d}{d\rho}$):

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \chi_l}{d\rho^2} + \frac{2(l+1)}{\rho} \frac{d\chi_l}{d\rho} + \chi_l &= 0 \\ \frac{d^2}{d\rho^2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{d\chi_{l+1}}{d\rho} \right) + \frac{2(l+2)}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{d\chi_{l+1}}{d\rho} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{d\chi_{l+1}}{d\rho} &= 0 \end{aligned} \quad (1.216)$$

Notiamo dunque che l'equazione così trovata è la stessa per χ_{l+1} , a meno di un eventuale costante:

$$\chi_{l+1} = c_l \frac{1}{\rho} \frac{d\chi_l}{d\rho} \quad (1.217)$$

da cui ricorsivamente a partire da χ_0 , che conosciamo esplicitamente:

$$\chi_l = N_l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \chi_0 \quad (1.218)$$

Troviamo infine:

$$y_l(\rho) = N_l e^{l+1} \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right) \quad (1.219)$$

Notiamo in particolare che per $\rho \rightarrow \infty \iff r \rightarrow \infty$ troviamo:

$$y_l(\rho) \rightarrow N_l \frac{d^l}{d\rho^l} \sin \rho = N_l (-1)^l \sin \left(\rho - l \frac{\pi}{2} \right) \quad (1.220)$$

A questo punto N_l lo troviamo per confronto con la soluzione impropria per $r \rightarrow \infty$ nel caso $U(r)$ generico (comunque $U(r) \rightarrow 0$ per $r \rightarrow \infty$).

A questo punto mettiamo insieme la soluzione fattorizzata per una particella libera:

$$u_{plm}(r, \theta, \phi) = R_{pl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad R(r) = \frac{y_{pl}(r)}{r} \quad y_{pl}(r) = (-1)^l \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \left[\rho^{l+1} \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right) \right]_{\rho=pr/\hbar} \quad (1.221)$$

con:

$$l = 0, 1, \dots \quad m = -l, \dots, l \quad p \in (0, +\infty) \quad (1.222)$$

A questo punto riscriviamo la R rispetto a delle funzioni speciali, cosiddette **funzioni di Bessel** j_l :

$$R_{pl}(\rho) = \frac{1}{\hbar^{3/2}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} p j_l(\rho) \quad (1.223)$$

Scriviamo i comportamenti asintotici:

$$j_l(\rho) \begin{cases} \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \\ \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \end{cases} \quad (1.224)$$

Confrontiamo adesso la soluzione ottenuta con le soluzioni fattorizzate in coordinate cartesiane:

$$u_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \quad (1.225)$$

In particolare per $p = |\vec{p}|$ queste funzioni sono relative alla stessa energia W e dunque ricoprono lo stesso spazio di Hilbert. In particolare potremo scrivere:

$$u_{\vec{p}}(\vec{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm}(\vec{p}) u_{plm}(r, \theta, \phi) \quad (1.226)$$

Per calcolare i c_{lm} consideriamo il caso $\vec{p} = p\hat{z}$, in modo che $\vec{p} \cdot \vec{x} = pr \cos \theta$. Troviamo dunque:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} = e^{\frac{i}{\hbar} pr \cos \theta} = \sum_{l,m} c'_{lm}(p) j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.227)$$

Per trovare i c'_{lm} usiamo l'ortonormalizzazione delle armoniche sferiche:

$$c'_{lm}(p) j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) = \int_{4\pi} d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) e^{\frac{i}{\hbar} pr \cos \theta} \quad (1.228)$$

Usando la definizione delle armoniche sferiche rispetto ai polinomi di Legende associati e l'ortogonalità degli esponenziali in $d\phi$ troviamo:

$$\int_{4\pi} d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) e^{\frac{i}{\hbar} pr \cos \theta} = \delta_{m0} \sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \int_{-1}^1 d\xi P_l(\xi) e^{\frac{i}{\hbar} pr \xi} \quad (1.229)$$

Passiamo poi al limite $r \rightarrow \infty$ usando il comportamento asintotico delle funzioni di Bessel:

$$c'_{lm}(p) \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) = \delta_{m0} \sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \frac{2\pi i^l}{pr} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \quad (1.230)$$

da cui:

$$c_{lm'} = \delta_{m0} \sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{2l+1}{2}} 2i^l \Rightarrow e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) P_l(\cos \theta) \quad (1.231)$$

ossia:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) P_l(\cos \theta) \quad (1.232)$$

Per considerare un orientamento generico di \vec{p} usiamo il teorema di addizione delle armoniche sferiche:

$$P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) = \frac{2\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\alpha, \beta) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}} = \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{|\vec{p}||\vec{x}|} \quad (1.233)$$

con α, β angoli \vec{p} rispetto al solito sistema di coordinate sferiche (con asse in z).

Con questa si trova che sostituendo $\theta = \widehat{p\vec{z}}$ con $\widehat{p\vec{x}}$ allora:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) Y_{lm}^*(\alpha, \beta) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.234)$$

Troviamo infine:

$$u_{\vec{p}}(\vec{x}) = \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) u_{plm}(r, \theta, \phi) \quad (1.235)$$

1.7 Lezione 7

Ricordiamo che dato l'operatore di scattering $S = \Omega_-^\dagger \Omega_+$ allora:

$$\psi_{out}(\vec{p}') = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle \psi_{in}(\vec{p}) \quad (1.236)$$

Abbiamo poi definito il resto $S = \mathbb{1} + R$, da cui l'ampiezza di scattering f , definita on-shell, ossia per $E_p = E_{p'} \iff |\vec{p}| = |\vec{p}'|$:

$$\langle \vec{p}' | R | \vec{p} \rangle = \frac{i}{2\pi m \hbar} \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{i}{2\pi m \hbar} \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad (1.237)$$

Possiamo dimostrare poi che f è una funzione continua e regolare, senza discontinuità. Il fatto che f sia definita on-shell significa che sottintendiamo la notazione:

$$f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \Big|_{|\vec{p}|=|\vec{p}'|} = f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \Big|_{E_p=E_{p'}} = \quad (1.238)$$

Ricordiamo poi che due particelle successive in generale avranno uno stato distinto almeno per una traslazione casuale distribuita uniformemente lungo un piano. Per quanto l'approccio sia banale, è comunque una stima molto migliore della singola particella in uno stato ben definito. Abbiamo dunque trovato che nello spazio dei momenti le funzioni d'onda delle particelle rispetto ad una data si possono parametrizzare con $\vec{\rho} \in \Sigma_0$, con Σ_0 un piano o comunque una regione grande rispetto al raggio d'azione del bersaglio:

$$\phi_{\vec{\rho}}(\vec{p}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\rho}} \phi(\vec{p}) \quad (1.239)$$

Ricordiamo poi che detto $dN(d^2\rho)$ il numero di particelle (nell'unità di tempo) con $\vec{\rho}$ contenuto in un area infinitesima $d^2\rho$ allora il flusso di particelle incidenti è dato da:

$$dN(d^2\rho) = n_{in} d^2\rho \quad (1.240)$$

Il numero di particelle diffuse (nell'unità di tempo) nell'angolo solido $d\Omega$ sarà dato dunque dalla somma delle particelle incidenti con la relativa probabilità:

$$dN_{sc}(d\Omega) = \int dN(d^2\rho) W(\psi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) = \int_{\Sigma_0} d^2\rho n_{in} W(\psi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) \quad (1.241)$$

Supponendo che il flusso sia uniforme, ossia la distribuzione di $\vec{\rho}$ sia uniforme, allora:

$$dN_{sc}(d\Omega) = n_{in} \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\psi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) \quad (1.242)$$

Ricordiamo ora la definizione della sezione d'urto differenziale (dello stato ϕ) nell'angolo solido:

$$dN_{sc}(d\Omega) = n_{in} d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) \quad (1.243)$$

Otteniamo dunque la seguente espressione per la sezione d'urto differenziale:

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\psi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) \quad (1.244)$$

Classicamente i possibili valori di W sono solo 0 ed 1, ossia una particella può solo essere diffusa o meno. Pertanto nel limite classico questa definizione coincide effettivamente con la sezione d'urto efficace.

Se il pacchetto $\phi(\vec{p})$ è sufficientemente piccolo attorno ad un certo \vec{p}_0 (condizione che specificheremo più avanti(?)) allora possiamo dimostrare che la sezione d'urto differenziale non dipende dall'intera funzione d'onda, ma solo dal parametro \vec{p}_0 :

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = d\sigma(\vec{p}_0 \rightarrow d\Omega) \quad (1.245)$$

Questa è una conseguenza della media classica su $\vec{\rho}$.

In realtà lo stato delle particelle è lo stesso non solo a meno di traslazioni, ma anche di forma dei pacchetti. In tal caso possiamo comunque fare un'altra media:

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = \sum_k \pi_k \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\phi_{\vec{\rho}}^{(k)} \rightarrow d\Omega) \quad \sum_k \pi_k = 1 \quad (1.246)$$

Dimostrando il risultato per cui non vi è dipendenza dalla forma del pacchetto nel primo caso allora naturalmente questo continua a essere vero nel caso generale, fintanto che richiediamo che tutti i pacchetti $\phi^{(k)}$ sono sufficientemente piccati intorno a $\vec{\mathbf{p}}_0$.

Notiamo che in realtà dovremmo tenere conto anche della media sui bersagli contenuti nel foglio (sufficientemente sottile da impedire diffusioni multiple e con distanze atomiche che impediscono diffusioni "doppie" non centrali). Tuttavia sempre nell'ipotesi di picco intorno ad un $\vec{\mathbf{p}}_0$ questa ulteriore media non incide sul risultato finale. Pertanto in questa ipotesi la formula continua a rimanere vera, ossia validità molto generale ed è un'ottima approssimazione in molti esperimenti:

$$\boxed{d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = d\sigma(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow d\Omega)} \quad (1.247)$$

Vediamo ora di dimostrarla, nel caso semplice di un solo pacchetto con traslazione distribuita uniformemente su Σ_0 , che abbiamo detto condurre anche a casi più generali.

Esplicitiamo prima di tutto la probabilità di scattering nell'angolo solido:

$$W(\phi_{\vec{\mathbf{p}}} \rightarrow d\Omega) = d\Omega \int_0^\infty dp p^2 |\psi_{out}(\vec{\mathbf{p}})|^2 \quad (1.248)$$

dove:

$$\begin{aligned} \psi_{out}(\vec{\mathbf{p}}) &= \psi_{in}(\vec{\mathbf{p}}) + \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) \psi_{in}(\vec{\mathbf{p}}) = \\ &= \phi_{\vec{\mathbf{p}}}(\vec{\mathbf{p}}) + \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) \phi_{\vec{\mathbf{p}}}(\vec{\mathbf{p}}) \end{aligned} \quad (1.249)$$

L'ipotesi di picco del momento intorno a $\vec{\mathbf{p}}_0$ implica che la direzione del momento del pacchetto è contenuto in un certo angolo solido infinitesimo $d\Omega_0$.

Facciamo poi un'ipotesi essenziale: non facciamo osservazioni nella direzione "in avanti" (trascuriamo le particelle che subiscono "forward scattering", ossia quelle deviate di poco e in particolare con direzione ancora vicina a quella iniziale). Questo significa che non facciamo misure per un angolo solido vicino ad $d\Omega_0$, ossia l'angolo $d\Omega$ considerato è tale che:

$$d\Omega \cap d\Omega_0 = \emptyset \quad (1.250)$$

Questo significa che il contributo di $\psi_{in}(\vec{\mathbf{p}})$ all'integrale della probabilità di scattering è nullo, ossia facciamo l'approssimazione:

$$\psi_{out}(\vec{\mathbf{p}}) \approx \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{p}}' \cdot \vec{\mathbf{p}}} \phi(\vec{\mathbf{p}}') \quad \hat{p} \in d\Omega, \quad d\Omega \cap d\Omega_0 = \emptyset \quad (1.251)$$

Sostituiamo questa nel calcolo della probabilità:

$$\begin{aligned} d\sigma &= \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\psi_{\vec{\mathbf{p}}} \rightarrow d\Omega) = d\Omega \int_{\Sigma_0} d^2\rho \int_0^\infty dp p^2 |\psi_{out}(\vec{\mathbf{p}})|^2 = \\ &= d\Omega \int_{\Sigma_0} d^2\rho \int_0^\infty dp p^2 \left| \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{p}}' \cdot \vec{\mathbf{p}}} \phi(\vec{\mathbf{p}}') \right|^2 = \\ &= \frac{d\Omega}{(2\pi m\hbar)^2} \int_{\Sigma_0} d^2\rho \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{p}}' \cdot \vec{\mathbf{p}}} \phi(\vec{\mathbf{p}}') \int_{\mathbb{R}^3} d^3p'' \delta(E_p - E_{p''}) f^*(\vec{\mathbf{p}}'' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{p}}'' \cdot \vec{\mathbf{p}}} \phi^*(\vec{\mathbf{p}}'') = \\ &= \frac{d\Omega}{(2\pi m\hbar)^2} \int_{\Sigma_0} d^2\rho \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p'' \delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_p - E_{p''}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) f^*(\vec{\mathbf{p}}'' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{\mathbf{p}}'' - \vec{\mathbf{p}}') \cdot \vec{\mathbf{p}}} \phi(\vec{\mathbf{p}}') \phi^*(\vec{\mathbf{p}}'') = \\ &= \frac{d\Omega}{(2\pi m\hbar)^2} \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p'' \delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_p - E_{p''}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) f^*(\vec{\mathbf{p}}'' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) \phi(\vec{\mathbf{p}}') \phi^*(\vec{\mathbf{p}}'') \int_{\Sigma_0} d^2\rho e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{\mathbf{p}}'' - \vec{\mathbf{p}}') \cdot \vec{\mathbf{p}}} \end{aligned} \quad (1.252)$$

Supponendo Σ_0 coincidente con tutto il piano xy (ossia $\vec{\mathbf{p}}_0$ diretto lungo z), allora possiamo usare la seguente identità:

$$\int_{\Sigma_0} e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{\mathbf{p}}'' - \vec{\mathbf{p}}') \cdot \vec{\mathbf{p}}} d^2\rho = (2\pi\hbar)^2 \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) \quad (1.253)$$

ossia che contribuiscono all'integrale solo i valori di $\vec{\mathbf{p}}', \vec{\mathbf{p}}''$ che hanno stesse componenti x, y . Notiamo poi che $\delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_p - E_{p''}) = \delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_{p'} - E_{p''})$:

$$d\sigma = \frac{d\Omega}{m^2} \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p'' \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) \delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_{p'} - E_{p''}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) f^*(\vec{\mathbf{p}}'' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) \phi(\vec{\mathbf{p}}') \phi^*(\vec{\mathbf{p}}'') \quad (1.254)$$

Notiamo inoltre che (siccome con le due delta deve risultare $p''_x = p'_x, p''_y = p'_y$ e inoltre per le proprietà della delta $\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x)$):

$$\delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) \delta(E_{p'} - E_{p''}) = \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) \delta\left(\frac{p_z'^2 - p_z''^2}{2m}\right) = 2m \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) \delta(p_z'^2 - p_z''^2) \quad (1.255)$$

Per esplicitare questa usiamo un teorema della δ di Dirac. Sia $y(x)$ tale che per certi x_i vale $y(x_i) = 0, y'(x_i) \neq 0$ (ossia gli zeri sono localmente invertibili). Possiamo dunque fare un cambio di variabili nel seguente integrale:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(y(x)) f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(y)}{\left|\frac{dy}{dx}\right|} f(x(y)) = \sum_i \frac{f(x_i)}{\left|\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_i}} \quad (1.256)$$

Siccome f è generica allora questa diventa un'identità per la composizione della δ ad una funzione che ha solo zeri semplici:

$$\delta(y(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{\left|\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_i}} \quad (1.257)$$

Pertanto nel caso $x \rightarrow p''_z, y(x) \rightarrow p'_z - p_z''^2, x_i \rightarrow \pm p'_z$ troviamo:

$$\delta(p_z''^2 - p_z'^2) = \frac{1}{2|p'_z|} \delta(p''_z - p'_z) + \frac{1}{2|p'_z|} \delta(p''_z + p'_z) \quad (1.258)$$

da cui:

$$\delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) \delta(E_{p'} - E_{p''}) = \frac{m}{|p'_z|} \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) (\delta(p''_z - p'_z) + \delta(p''_z + p'_z)) \quad (1.259)$$

Siccome $\phi(\vec{\mathbf{p}}), \phi(\vec{\mathbf{p}}')$ sono centrati intorno a $\vec{\mathbf{p}}_0 = p_0 \hat{\mathbf{z}}$ allora $p_z'' \approx p_0 > 0, p'_z \approx p_0$, ossia la seconda δ in parentesi non contribuisce all'integrale:

$$\begin{aligned} d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) &= \frac{d\Omega}{m} \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p'' \frac{1}{|p'_z|} \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) [\delta(p''_z - p'_z) + \delta(p''_z + p'_z)] \cdot \\ &\quad \cdot \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) f^*(\vec{\mathbf{p}}'' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) \phi(\vec{\mathbf{p}}') \phi^*(\vec{\mathbf{p}}'') = \\ &= \frac{d\Omega}{m} \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p'' \frac{1}{|p'_z|} \delta_3(\vec{\mathbf{p}}' - \vec{\mathbf{p}}'') \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) f^*(\vec{\mathbf{p}}'' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) \phi(\vec{\mathbf{p}}') \phi^*(\vec{\mathbf{p}}'') = \\ &= d\Omega \int_0^\infty \frac{p dp}{m} p \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} \delta(E_p - E_{p'}) |f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 = \\ &= d\Omega \int_0^\infty dE_p p \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} \delta(E_p - E_{p'}) |f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 = \\ &= d\Omega \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} \int_0^\infty dE_p p \delta(E_p - E_{p'}) |f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 = \end{aligned} \quad (1.260)$$

Notiamo ora che in realtà f non dipende "interamente" da $\vec{\mathbf{p}}$ ma solo da $|\vec{\mathbf{p}}| = |\vec{\mathbf{p}}'|$, in quanto è definita on-shell. Possiamo dunque portarla fuori dal secondo integrale:

$$\begin{aligned} d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) &= d\Omega \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} |f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})| |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \int_0^\infty dE_p p \delta(E_p - E_{p'}) = \\ &= d\Omega \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{|p'|}{|p'_z|} |f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \end{aligned} \quad (1.261)$$

A questo punto facciamo l'ipotesi (ragionevole) che $|f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2$ varia poco nel supporto D_ϕ di $\phi(\vec{\mathbf{p}})$, centrato in $\vec{\mathbf{p}}_0$, ossia che sia approssimativamente costante:

$$|f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \approx |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \quad \forall \vec{\mathbf{p}}' \in D_\phi \quad (1.262)$$

Notiamo che questa ipotesi verrà a mancare quando andremo a discutere del fenomeno delle risonanze.

Sempre per $\vec{\mathbf{p}} \in D_\phi$ vale anche:

$$|p'_z| \approx |p'| \Rightarrow \frac{|p'|}{|p'_z|} \approx 1 \quad (1.263)$$

Usando poi la normalizzazione dello stato:

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = d\Omega |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 = d\Omega |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \quad (1.264)$$

da cui il risultato cercato, come volevasi dimostrare:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\phi \rightarrow d\Omega) = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p}_0 \rightarrow \vec{p}) = |f(\vec{p}_0 \rightarrow \vec{p})|^2 \quad (1.265)$$

Se invece l'ampiezza di scattering varia rapidamente allora possiamo dire comunque:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\phi \rightarrow d\Omega) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \frac{|p'|}{|p'_z|} |f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})|^2 |\phi(\vec{p}')|^2 \quad (1.266)$$

Questo avviene ad esempio in presenza di risonanze, come vedremo nelle prossime lezioni.

1.8 Lezione 8

1.8.1 Caso del Forward Scattering

Ci chiediamo adesso cosa succede proviamo a rivelare le particelle che subiscono forward scattering. In questo caso riusciamo a trovare che la sezione d'urto è infinita e perde di significato. Dimostriamo che per $d\Omega \cap d\Omega_0$ l'integrale che definisce la sezione d'urto differenziale diverge:

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\phi_{\vec{p}} \rightarrow d\Omega) \quad (1.267)$$

Notiamo adesso che siccome W è (semi)definita positiva allora per ogni $R > 0$:

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\phi_{\vec{p}} \rightarrow d\Omega) \geq \int_{|\vec{p}| > R} d^2\rho W(\phi_{\vec{p}} \rightarrow d\Omega) \quad (1.268)$$

D'altra parte per $R \gg d$ non vi è deflessione e dunque per ogni \vec{p} di modulo maggiore di R , l'asintoto uscente è uguale a quello entrante (in quanto il pacchetto ha centro molto distante dal bersaglio):

$$\psi_{out}(\vec{p}) \approx \psi_{in}(\vec{p}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{p}} \phi(\vec{p}) \quad (1.269)$$

da cui:

$$\begin{aligned} \int_{|\vec{p}| > R} d^2\rho W(\phi_{\vec{p}} \rightarrow d\Omega) &= \int_{|\vec{p}| > R} d^2\rho d\Omega \int_0^\infty dp p^2 |\phi_{\vec{p}}(\vec{p})|^2 = \int_{|\vec{p}| > R} d^2\rho d\Omega \int_0^\infty dp p^2 |\phi(\vec{p})|^2 = \\ &= d\Omega \int_0^\infty dp p^2 |\phi(\vec{p})|^2 \int_{|\vec{p}| > R} d^2\rho \end{aligned} \quad (1.270)$$

dove il secondo integrale diverge.

Nel caso $d\Omega \cap d\Omega_0 = \emptyset$ allora non vi sono direzioni \vec{p} contenute sia in $d\Omega$ che in $d\Omega_0$ e $|\phi(\vec{p})| = 0$. Pertanto il prodotto $0 \cdot \infty$ è indeterminato; ci aspettiamo che sia finito e assuma il valore che abbiamo calcolato sopra con l'ampiezza di scattering.

Se invece $d\Omega \neq d\Omega_0 \emptyset$ allora all'interno di $d\Omega$ vi saranno direzioni appartenenti anche a $d\Omega_0$. Pertanto $|\phi(\vec{p})| \neq 0$ e dunque il valore è infinito. Ma siccome questo integrale è un minorante della sezione d'urto allora anche questa diverge, come ci aspettavamo.

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = +\infty \quad (1.271)$$

Pertanto non ha senso fisicamente rivelare per particelle nella direzione di incidenza. Questo risultato si intuisce notando che l'infinito deriva dal fatto che le particelle distanti dal bersaglio non sono deviate e dunque vi è probabilità 1 che finiscano nella direzione iniziale. Pertanto facendo la media sui \vec{p} troviamo un valore infinito.

Questo infinito è in realtà una conseguenza della media classica sui valori di \vec{p} . Se infatti potessimo produrre un pacchetto ben definito spazialmente su scala microscopica allora non dovremmo fare la media e dunque troveremmo valore finito anche in questo caso.

Notiamo come in realtà questo è limite è singolare, in quanto per estrapolazione ci aspettiamo che il limite sia finito:

$$\lim_{\vec{p}' \rightarrow \vec{p}} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})|^2 < \infty \quad (1.272)$$

Dal punto di vista sperimentale, possiamo dunque ricavare l'ampiezza di (forward) scattering, estrapolando il valore della sezione d'urto differenziale per $\vec{p}' \rightarrow \vec{p}$ dai valori misurati. È ovvio che per fare questo dobbiamo preparare pacchetti iniziali ben collimati in modo che per $\vec{p}' \approx \vec{p}$ comunque \vec{p}' non appartenga a $d\Omega_0$ (ossia il momento finale deve essere vicino a quello iniziale, ma non tanto da intersecare $d\Omega_0$, e dunque affinché anche il pacchetto finale sia sufficientemente collimato ci aspettiamo che anche quello iniziale debba essere molto ben collimato).

1.8.2 Teorema Ottico

Dimostriamo adesso un importante teorema, conseguenza del fatto che S è unitario $S^\dagger S = SS^\dagger = \mathbb{1}$ (ossia ogni asintoto entrato viene mandato in un asintoto uscente dal potenziale). Usando l'unitarietà troviamo la seguente identità per R , equivalente ad essa:

$$\mathbb{1} = S^\dagger S = (1 + R^\dagger)(1 + R) = 1 + R + R^\dagger + R^\dagger R \Rightarrow R + R^\dagger = -R^\dagger R \quad (1.273)$$

Calcoliamo l'elemento di matrice nella rappresentazione degli impulsi:

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}' | R | \vec{p} \rangle + \langle \vec{p}' | R^\dagger | \vec{p} \rangle &= - \langle \vec{p}' | R^\dagger R | \vec{p} \rangle \\ \langle \vec{p}' | R | \vec{p} \rangle + \langle \vec{p} | R | \vec{p}' \rangle^* &= - \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p}'' \langle \vec{p}' | R^\dagger | \vec{p}'' \rangle \langle \vec{p}'' | R | \vec{p} \rangle \\ \langle \vec{p}' | R | \vec{p} \rangle + \langle \vec{p} | R | \vec{p}' \rangle^* &= - \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p}'' \langle \vec{p}'' | R | \vec{p}' \rangle^* \langle \vec{p}'' | R | \vec{p} \rangle \end{aligned} \quad (1.274)$$

Esplicitiamo adesso gli elementi di matrice rispetto all'ampiezza di scattering:

$$\begin{aligned} \frac{i\delta(E_{p'} - E_p)}{2\pi m\hbar} [f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') - f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})^*] &= - \frac{1}{(2\pi m\hbar)^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p}'' \delta(E_{p''} - E_{p'}) \delta(E_{p''} - E_p) f^*(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}'') f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'') \\ \frac{i\delta(E_{p'} - E_p)}{2\pi m\hbar} [f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') - f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})^*] &= - \frac{1}{(2\pi m\hbar)^2} \delta(E_{p'} - E_p) \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p}'' \delta(E_{p''} - E_p) f^*(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}'') f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'') \\ [f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') - f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})^*] &= \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p}'' \delta(E_{p''} - E_p) f^*(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}'') f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'') \end{aligned} \quad (1.275)$$

La semplificazione della $\delta(E_p - E_{p'})$ va comunque accompagnata dall'ulteriore condizione che $E_p = E_{p'}$ in altri eventuali calcoli/integrali.

Poniamo adesso $\vec{p}' = \vec{p}$:

$$\begin{aligned} f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') - f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})^* &= \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p}'' \delta(E_{p''} - E_p) |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')|^2 \\ 2i \operatorname{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} &= \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{4\pi} d\Omega'' \int_0^\infty dp'' p''^2 \delta\left(\frac{p''^2 - p^2}{2m}\right) |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')|^2 = \\ &= \frac{i}{2\pi m\hbar} 2m \int_{4\pi} d\Omega'' \int_0^\infty dp'' p''^2 \delta(p''^2 - p^2) |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')|^2 = \\ &= \frac{i}{\pi\hbar} \int_{4\pi} d\Omega'' \int_0^\infty \frac{1}{2} dp''^2 p'' \delta(p''^2 - p^2) |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')|^2 = \\ &= \frac{ip}{2\pi\hbar} \int_{4\pi} d\Omega'' |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')|^2 = \\ &= \frac{ip}{2\pi\hbar} \int_{4\pi} d\Omega'' \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'') = \frac{ip}{2\pi\hbar} \sigma(\vec{p}) \end{aligned} \quad (1.276)$$

con $\sigma(\vec{p})$ sezione d'urto totale per un fascio di particelle con momento (piccato in) \vec{p} . Questa è finita in quanto consideriamo l'estrapolazione di $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ per $\vec{p}' \rightarrow \vec{p}$, piuttosto che il valore infinito che abbiamo trovato nella sezione precedente.

Troviamo infine l'enunciato del Teorema Ottico (per un processo di scattering da potenziale con completezza asintotica, nel caso di pacchetti emessi piccati intorno a \vec{p} traslati su un piano uniformemente):

$$\boxed{\operatorname{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} = \frac{p}{4\pi\hbar} \sigma(\vec{p})} \quad (1.277)$$

Notiamo chiaramente che $\sigma(\vec{p})$ può essere infinita (come visto nel caso classico) e dunque anche la parte immaginaria di f nella direzione in avanti.

Il teorema ottico, insieme alla relazione:

$$|f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})|^2 = \lim_{\vec{p}' \rightarrow \vec{p}} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad (1.278)$$

ci permette di ricavare l'ampiezza di (forward) scattering attraverso misure della sezione d'urto differenziale e totale. Infatti da quella totale troviamo la parte immaginaria, mentre da quella differenziale troviamo la parte reale a meno di

un segno:

$$|f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})|^2 = (\text{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\})^2 + (\text{Re}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\})^2 \Rightarrow$$

$$|\text{Re}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\}| = \sqrt{|f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})|^2 - (\text{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\})^2} = \sqrt{\lim_{\vec{p}' \rightarrow \vec{p}} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') - \left(\frac{p}{4\pi\hbar}\sigma(\vec{p})\right)^2} \quad (1.279)$$

Il teorema ottico implica in particolare che l'ampiezza di scattering non è reale in quanto la sezione d'urto totale è una quantità positiva non nulla.

1.8.3 Calcolo della Matrice di Scattering per un dato potenziale

Vogliamo ora esplicitare la matrice di scattering rispetto al potenziale considerato. Esprimiamo prima di tutto l'elemento di matrice come prodotto scalare di due stati di momento (non normalizzabili):

$$\langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}' | \Omega_-^\dagger \Omega_+ | \vec{p} \rangle = \langle \Omega_- \vec{p}' | \Omega_+ \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}' - | \vec{p} + \rangle \quad (1.280)$$

Indichiamo le funzioni di $|\vec{p}, \pm\rangle$ nella rappresentazione delle posizioni come segue:

$$u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \vec{p} \pm \rangle \quad (1.281)$$

Notiamo che gli stati $|\vec{p}, \pm\rangle$ sono autostati di $\hat{\mathcal{H}}$ (e dunque sono normalizzabili), per le relazioni di interpolazione $\hat{\mathcal{H}}\Omega_{\pm} = \Omega_{\pm}\hat{\mathcal{H}}_0$:

$$\hat{\mathcal{H}}|\vec{p} \pm \rangle = \hat{\mathcal{H}}\Omega_{\pm}|\vec{p}\rangle = \Omega_{\pm}\hat{\mathcal{H}}_0|\vec{p}\rangle = \frac{p^2}{2m}\Omega_{\pm}|\vec{p}\rangle = \frac{p^2}{2m}|\vec{p} \pm \rangle \quad (1.282)$$

In particolare gli stati $|\vec{p} \pm \rangle$ hanno la stessa energia (e la stessa di $|\vec{p}\rangle$), e che appartengono allo spettro continuo di $\hat{\mathcal{H}}$.

Ricordiamo adesso che nel caso di potenziale centrale, nella rappresentazione delle configurazioni possiamo trovare soluzioni fattorizzate nella variabile radiale e quelle angolari (ossia le sferiche armoniche). In particolare lo spettro discreto è indicizzato da p e gli autostati da p, l, m così che possiamo scrivere:

$$\langle r, \theta, \phi | p, l, m \rangle = u_{plm}(\vec{x}) = R_{pl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{y_{pl}(r)}{r}Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.283)$$

dove le y_{pl} soddisfano la seguente equazione:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] y_{pl}(r) = E_p y_{pl}(r) \quad (1.284)$$

Gli stati e le autofunzioni soddisfano condizioni di ortonormalizzazione improprie:

$$\langle p' l' m' | p l m \rangle = \delta(p' - p) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad \int_0^\infty dr y_{p'l'}^*(r) y_{pl}(r) = \delta(p' - p) \delta_{ll'} \quad (1.285)$$

Essendo le $|\vec{p} \pm \rangle$ autostati di $\hat{\mathcal{H}}$ di energia definita E_p allora si potranno scrivere come combinazione delle $|plm\rangle$ a p fissato:

$$|\vec{p} \pm \rangle = \sum_{lm} c_{lm}^{(\pm)}(\vec{p}) |p, l, m\rangle \quad (1.286)$$

o equivalentemente in termini delle autofunzioni:

$$u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x}) = \sum_{lm} c_{lm}^{(\pm)}(\vec{p}) u_{plm}(\vec{x}) \quad (1.287)$$

Vogliamo dunque calcolare i coefficienti $c_{lm}(p)^{(\pm)}$ per esplicitare la matrice di scattering. Per fare questo dobbiamo capire che forma hanno gli stati $|p, l, m\rangle$ e $|\vec{p} \pm \rangle$.

1.8.4 Autofunzioni Improprie

Vogliamo ora dimostrare che le autofunzioni improprie "di scattering" $u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x})$ di $\hat{\mathcal{H}}$ soddisfano la seguente condizione asintotica:

$$u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p} \cdot \vec{x}} + f^{(\pm)}(p, \theta_{\vec{p}\vec{x}}) \frac{e^{\pm \frac{i}{\hbar}pr}}{r} \right] \quad (1.288)$$

Pertanto la condizione asintotica sulle autofunzioni è che coincidano con la sovrapposizione di un'onda piana diretta come \vec{p} e un'onda sferica di momento p che è entrante o uscente a seconda del segno ed è modulata da una certa funzione che dipende dal momento e dall'angolo tra il vettore momento e il vettore posizione considerato.

Sia adesso $|\psi_{in}\rangle$ un asintoto entrante e $|\psi\rangle$ il corrispondente stato interagente. Nella rappresentazione dei momenti troviamo:

$$\begin{aligned} |\psi_{in}\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) |\vec{p}\rangle \\ |\psi\rangle &= \Omega_+ |\psi_{in}\rangle = \Omega_+ \int d^3p c(\vec{p}) |\vec{p}\rangle = \int d^3p c(\vec{p}) |\vec{p}, +\rangle \end{aligned} \quad (1.289)$$

Per definizione degli operatori di Moeller (sottintendendo il limite in senso forte) troviamo:

$$0 = \lim_{t \rightarrow -\infty} (|\psi_t\rangle - |\psi_t^0\rangle) = \lim_{t \rightarrow -\infty} U(t) |\psi\rangle - U_0(t) |\psi_{in}\rangle \quad (1.290)$$

Per verificare che la condizione asintotica in r sulle autofunzioni è vera, è sufficiente dimostrare che entrambe la famiglia interagente $|\psi_t\rangle$ ha lo stesso limite in $t \rightarrow -\infty$ della famiglia non interagente $|\psi_t^0\rangle$.

Prima di tutto, per esplicitare l'azione degli evolutori temporali ci conviene passare alla nella rappresentazione di $|\vec{p}\rangle, |\vec{p}, +\rangle$ rispettivamente, dove sappiamo che $\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{\mathcal{H}}$ sono diagonali:

$$\begin{aligned} U_0(t) |\psi_{in}\rangle &= \int d^3p c(\vec{p}) U_0(t) |\vec{p}\rangle = \int d^3p c(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} |\vec{p}\rangle \\ U(t) |\psi\rangle &= \int d^3p c(\vec{p}) U(t) |\vec{p}, +\rangle = \int d^3p c(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} |\vec{p}, +\rangle \end{aligned} \quad (1.291)$$

Siccome la condizione asintotica è imposta sulle autofunzioni allora dobbiamo passare alla rappresentazione delle posizioni, ossia verificare che:

$$0 = \lim_{t \rightarrow -\infty} (\langle \vec{x} | \psi_t \rangle - \langle \vec{x} | \psi_t^0 \rangle) = \lim_{t \rightarrow -\infty} (\psi(\vec{x}, t) - \psi_{in}(\vec{x}, t)) \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \quad (1.292)$$

dove:

$$\begin{aligned} \psi_{in}(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x} | U_0(t) |\psi_{in}\rangle = \int d^3p c(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{p^2}{2m} t)} \\ \psi(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x} | U(t) |\psi\rangle = \int d^3p c(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (1.293)$$

Facciamo adesso uso di un teorema dell'analisi di Fourier, il cosiddetto Teorema di Lebesgue.

Teorema 3 (Teorema di Lebesgue). *Sia f regolare (in particolare almeno integrabile \mathcal{L}^1 , nel nostro caso \mathcal{L}^2), allora:*

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \int_{\mathbb{R}} dx f(x) e^{ixt} \quad (1.294)$$

Infatti per ogni \vec{x} appartenente ad una regione finita, ad esempio una sfera centrata nell'origine di raggio R arbitrariamente grande, la funzione $u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})$ sarà integrabile rispetto a \vec{p} e dunque soddisfa il Teorema di Lebesgue (per $x \rightarrow \vec{p}$ e $t \rightarrow -\frac{t}{2m\hbar}$). Possiamo dunque dire che nel limite $t \rightarrow -\infty$ entrambe le funzioni vanno a 0 in quanto trasformata di Fourier di funzioni integrabili di \vec{p} per \vec{x} limitato:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \psi_{in}(\vec{x}, t) = \lim_{t \rightarrow -\infty} \psi(\vec{x}, t) = 0 \quad \forall |\vec{x}| = r < R \quad (1.295)$$

Resta dunque da verificare solo il caso per \vec{x} illimitato, dove possiamo esplicitare la condizione asintotica:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p c(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \left[e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} + f^{(\pm)}(p, \theta_{\vec{p}\vec{x}}) \frac{e^{+\frac{i}{\hbar} pr}}{r} \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p c(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{p^2}{2m} t)} + \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p c(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} (pr - \frac{p^2}{2m} t)} \frac{f^{(\pm)}(p, \theta_{\vec{p}\vec{x}})}{r} = \\ &= \psi_{in}(\vec{x}, t) + \psi_{sc}(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (1.296)$$

Pertanto abbiamo trovato che se è valida la condizione asintotica vale anche che la funzione d'onda interagente è uguale a quella libera (asintotica) più una componente di scattering (che asintoticamente ha dipendenza solo radiale):

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_{in}(\vec{x}, t) + \psi_{sc}(\vec{x}, t) \quad \psi_{sc}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p c(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} (pr - \frac{p^2}{2m} t)} \frac{f^{(\pm)}(p, \theta_{\vec{p}\vec{x}})}{r} \quad (1.297)$$

Resta dunque da dimostrare che la componente di scattering va a 0 per $t \rightarrow -\infty$, sempre $\forall r > R$:

$$\begin{aligned}\psi_{sc}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p c(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(pr - \frac{p^2}{2m}t)} \frac{f^{(\pm)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}})}{r} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}r} \int dp p^2 e^{\frac{i}{\hbar}(pr - \frac{p^2}{2m}t)} \int d\Omega_{\vec{p}} c(\vec{p}) f(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}r} \int dp h(p) e^{\frac{i}{\hbar}(pr - \frac{p^2}{2m}t)}\end{aligned}\quad (1.298)$$

Notiamo adesso che formalmente, questo pacchetto equivale alla propagazione temporale di un pacchetto unidimensionale $\phi^+(r, t)$ lungo una certa retta r , in direzione positiva (essendo $p > 0$) e dunque $h(p) = 0$ per $p \leq 0$. Questo significa che per $t \rightarrow -\infty$ il pacchetto sta sul semiasse $r < 0$ non fisico. Ma siccome noi siamo interessati al caso $\forall r > R > 0$ allora il pacchetto è nullo, ossia:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \psi_{sc}(\vec{x}, t) = 0 \quad \forall r > R \quad (1.299)$$

Abbiamo dunque dimostrato la condizione asintotica per $u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})$. Analogamente possiamo fare il calcolo nel caso $-$, ossia per $t \rightarrow +\infty$. In questo caso continua a valere il Teorema di Lebesgue e le considerazioni sul pacchetto unidimensionale, che stavolta viaggia in direzione negativa e dunque per $t \rightarrow +\infty$ si trova ancora una volta sul semiasse non fisico.

Notiamo adesso che le condizioni sono simmetriche per inversione temporale (coniugazione e inversione del momento). Più precisamente, se $u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})$ soddisfa la condizione asintotica per $r \rightarrow \infty$:

$$u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} + \frac{f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}})}{r} e^{\frac{i}{\hbar}pr} \right] \quad (1.300)$$

allora $u_{-\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})^*$ soddisfa la condizione asintotica per $u_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{x})$ per $f^{(-)}$ opportuna:

$$\begin{aligned}u_{-\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})^* &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} + \frac{f^{(+)}(p, \theta_{-\widehat{p\vec{x}}})^*}{r} e^{-\frac{i}{\hbar}pr} \right] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} + \frac{f^{(+)}(p, \pi - \theta_{\widehat{p\vec{x}}})^*}{r} e^{-\frac{i}{\hbar}pr} \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} + \frac{f^{(-)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}})}{r} e^{-\frac{i}{\hbar}pr} \right] = u\end{aligned}\quad (1.301)$$

dove:

$$f^{(-)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) = f^{(+)}(p, \pi - \theta_{\widehat{p\vec{x}}})^* \quad (1.302)$$

Pertanto se conosciamo la condizione asintotica per $u_{\vec{p}}^{(+)}$ (al variare di \vec{p}) conosciamo anche la condizione asintotica per $u_{\vec{p}}^{(-)}$.

1.9 Lezione 9

Adesso vogliamo dimostrare che il coefficiente che modula l'onda sferica nella condizione asintotica delle $u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})$ coincide con l'ampiezza di (forward) scattering:

$$\boxed{f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) = f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')} \quad (1.303)$$

Notiamo che la formulazione dello scattering attualmente usata è basata su autofunzioni dell'operatore hamiltoniano nella rappresentazione delle posizioni e dunque indipendente dal tempo. La formulazione precedente era invece basata sull'evoluzione temporale tramite gli operatori di Moeller, la matrice di Scattering e l'ampiezza di scattering, che facevano uso di soluzioni dipendenti dal tempo con un dato comportamento asintotico (nel tempo). Abbiamo ora perso la dipendenza temporale e ridotto il problema dello scattering in un formalismo indipendente del tempo.

Notiamo che questo non è banale a priori in quanto le soluzioni asintotiche non sono stazionarie, ma continuano ad evolversi, sia nel formalismo classico che quantistico. Questo è dunque ben diverso da approcci elementari che invece usano le seguenti relazioni come basi:

$$\hat{\mathcal{H}}|\vec{p}\pm\rangle = \frac{p^2}{2m}|\vec{p}\pm\rangle \quad u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} + \frac{f^{(\pm)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}})}{r} e^{\pm \frac{i}{\hbar}pr} \right] \quad (1.304)$$

senza tenere conto della natura fortemente dipendente dal tempo del problema, che a priori non è banale eliminare.

Ricordiamo adesso che le autofunzioni (improprie) di scattering $u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x})$ possono essere scritte nella base delle soluzioni fattorizzate (improprie) 1.283, 1.287:

$$u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x}) = \sum_{lm} c_{lm}^{(\pm)}(\vec{p}) u_{plm}(\vec{x}) \quad (1.305)$$

dove:

$$u_{plm}(\vec{x}) = \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) - \frac{\hbar^2}{2m} y_{pl}'' + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) y_{pl} = \frac{p^2}{2m} y_{pl} \quad (1.306)$$

Pertanto per verificare la condizione data dobbiamo verificare prima di tutto il comportamento asintotico per le $u_{plm}(\vec{x})$. Siccome siamo nelle ipotesi di 1 allora il potenziale è a corto range e dunque per $r \rightarrow \infty$ il potenziale e la barriera centrifuga non contribuiscono, in modo che l'onda è un'onda sferica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} y_{pl}'' = \frac{p^2}{2m} y_{pl} \quad (1.307)$$

Notiamo adesso che l'equazione esatta per y_{pl} è una ODE al secondo ordine a coefficienti non costanti. Pertanto la soluzione più generale è la combinazione lineare di due soluzioni linearmente indipendenti. In particolare possiamo sempre trovare soluzioni linearmente indipendenti con il seguente comportamento asintotico in $r \rightarrow 0$ (a meno di costanti):

$$y(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \begin{cases} r^{l+1} \\ r^{-l} \end{cases} \quad (1.308)$$

Siccome le soluzioni devono essere regolari con limite finito in $r \rightarrow 0$ allora possiamo scartare quelle che vanno come r^{-l} , ossia vi è una sola soluzione accettabile per l'equazione esatta. Siccome i coefficienti di questa sono reali allora data una soluzione regolare, anche il suo complesso coniugato soddisfa la stessa combinazione ed è ancora regolare. Prendendo la somma della soluzione più il suo complesso coniugato troviamo dunque una soluzione ancora regolare. Possiamo dunque scegliere le y_{pl} puramente reali per ogni valore di p ed l . Questo significa che nell'equazione per $r \rightarrow \infty$ dobbiamo scegliere la soluzione reale (a meno di costanti):

$$y_{pl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) \quad (1.309)$$

dove notiamo che in generale lo sfasamento dipende sia da p che da l , che compaiono nell'equazione completa.

Inoltre siccome le soluzioni reali sono determinate a meno di un segno, anche per la condizione asintotica questo continua a valere. Questo significa che le fasi $\alpha_l(p)$ sono determinate a meno di $n\pi$ con $n \in \mathbb{Z}$.

1.9.1 Ortonormalizzazione delle Funzioni Improprie

Ci aspettiamo dunque che le soluzioni "normalizzate" u_{plm} abbiano il seguente comportamento asintotico:

$$u_{plm}(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \frac{1}{r} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.310)$$

dove per condizione di normalizzazione intendiamo:

$$\langle p'l'm' | plm \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r u_{p'l'm'}^*(\vec{x}) u_{plm}(\vec{x}) = \delta(p-p') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (1.311)$$

Verifichiamo adesso questa condizione, così che la scelta fatta e le costanti scelti siano opportune.

Siano ora $|\phi_{lm}\rangle, |\psi_{lm}\rangle$ due pacchetti a partire dalle u_{plm} :

$$\begin{cases} |\psi_{lm}\rangle = \int_0^\infty dp c(p) u_{plm}(\vec{x}) \\ |\phi_{lm}\rangle = \int_0^\infty dp d(p) u_{plm}(\vec{x}) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \psi_{lm}(\vec{x}) = \int_0^\infty dp c(p) u_{plm}(\vec{x}) \\ \phi_{lm}(\vec{x}) = \int_0^\infty dp d(p) u_{plm}(\vec{x}) \end{cases} \quad (1.312)$$

Notiamo adesso che per definizione di delta di Dirac, la seguente condizione è necessaria e sufficiente a dimostrare che il prodotto scalare delle funzioni improprie soddisfa la condizione di ortonormalizzazione:

$$\langle u_{p'l'm'} | u_{plm} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(p-p') \iff \int_0^\infty dp' \int_0^\infty dp d^*(p') c(p) \langle u_{p'l'm'} | u_{plm} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \int_0^\infty dp d^*(p) c(p) \quad (1.313)$$

per ogni $c(p), d(p)$ a quadrato integrabile.

Ma per definizione di pacchetti di queste autofunzioni a partire da $c(p), d(p)$, questo equivale a richiedere che il prodotto scalare abbia la seguente forma:

$$\langle \phi_{l'm'} | \psi_{lm} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \int_0^\infty dp d^*(p) c(p) \quad (1.314)$$

Per fare questo a priori non è sufficiente la condizione asintotica, e ci conviene tornare al formalismo dipendente dal tempo. In questo modo possiamo applicare nuovamente il Teorema di Lebesgue, che nei limiti $t \rightarrow \pm\infty$ annulla i contributi della funzione d'onda per r finiti, ossia quando è diversa dal suo limite asintotico per $r \rightarrow \infty$.

Per l'unitarietà dell'evolvente temporale (interagente, in quanto le u_{plm} sono autofunzioni dell'intera hamiltoniana $\hat{\mathcal{H}}$), il prodotto scalare è conservato:

$$\langle \phi_{l'm'} | \psi_{lm} \rangle = \langle \phi_{l'm'}(t) | \psi_{lm}(t) \rangle \quad \forall t \quad (1.315)$$

D'altra parte possiamo esplicitare l'evoluzione temporale dei pacchetti come segue:

$$\psi_{lm}(\vec{x}, t) = \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} u_{plm}(\vec{x}) \quad (1.316)$$

Pertanto per $r \rightarrow \infty$ troviamo la condizione asintotica (che vogliamo verificare):

$$\begin{aligned} \psi_{lm}(\vec{x}, t) &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \frac{1}{r} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) Y_{lm}(\theta, \phi) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \frac{1}{r} \left[e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right)} + e^{-i\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right)} \right] Y_{lm}(\theta, \phi) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \left[e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - \frac{p^2}{2m\hbar} t + \alpha_l(p)\right)} + e^{-i\left(\frac{pr}{\hbar} + \frac{p^2}{2m\hbar} t + \alpha_l(p)\right)} \right] \end{aligned} \quad (1.317)$$

Siccome questo è valido per ogni t , prendiamo adesso il limite per $t \rightarrow +\infty$. In questo limite, espandendo il prodotto in parentesi quadra, troviamo che il secondo termine è quello di un pacchetto di che si propaga nella direzione negativa dell'asse r , ed è dunque supportata nell'asse $r < 0$, che è non fisico. Siccome noi siamo interessati al limite $r \rightarrow +\infty$ (ossia ogni $r > R$ per un certo $R > 0$ grande a piacere) allora questo termine è nullo ossia:

$$\psi_{lm}(\vec{x}, t) \stackrel{r, t \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - \frac{p^2}{2m\hbar} t + \alpha_l(p)\right)} \quad (1.318)$$

Questo vale per ogni pacchetto considerato.

Esplicitiamo ora il prodotto scalare per $t \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{l'm'} | \psi_{lm} \rangle &= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \phi_{l'm'}(t) | \psi_{lm}(t) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \int d^3x \int_0^\infty dp' \int_0^\infty dp d^*(p') c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2 - p'^2}{2m}\right) t} u_{p'l'm'}^*(\vec{x}) u_{plm}(\vec{x}) = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int d\Omega \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\infty dp' \int_0^\infty dp d^*(p') c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2 - p'^2}{2m}\right) t} u_{p'l'm'}^*(\vec{x}) u_{plm}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (1.319)$$

Usiamo ora il Teorema di Lebesgue che ci permette di dire che i contributi delle autofunzioni per $r < R$ sono nulli. Pertanto possiamo estendere l'integrale ad $r = -\infty$ e sostituire nell'integrale la condizione asintotica:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{l'm'} | \psi_{lm} \rangle &= \frac{1}{2\pi \hbar} \lim_{t \rightarrow \infty} \int d\Omega \int_{-\infty}^\infty dr r^2 \frac{1}{r^2} Y_{l'm'}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp' \int_0^\infty dp d^*(p') c(p) e^{i\left(\frac{(p-p')r}{\hbar} - \frac{(p^2 - p'^2)}{2m\hbar} t + \alpha_l(p) - \alpha_{l'}(p')\right)} = \\ &= \frac{1}{2\pi \hbar} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dp' \int_0^\infty dp d^*(p') c(p) e^{i\left(\frac{(p-p')r}{\hbar} - \frac{(p^2 - p'^2)}{2m\hbar} t + \alpha_l(p) - \alpha_{l'}(p')\right)} \end{aligned} \quad (1.320)$$

Sfruttiamo adesso l'identità seguente:

$$\frac{1}{2\pi \hbar} \int_{-\infty}^\infty dr e^{\frac{i}{\hbar} (p-p')r} = \delta(p - p') \quad (1.321)$$

ossia che la trasformata dell'onda a piana è una delta di Dirac, che è il motivo per cui abbiamo esteso l'integrale ad $r \rightarrow -\infty$.

Infatti siccome l'unica dipendenza di r sta nell'esponenziale allora possiamo scambiare l'ordine di integrazione e trovare la delta di Dirac, che riduce l'integrale proprio a quello cercato:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{l'm'} | \psi_{lm} \rangle &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dp' \int_0^\infty dp d^*(p') c(p) e^{-i\left(\frac{(p^2 - p'^2)}{2m\hbar} t - \alpha_l(p) + \alpha_{l'}(p')\right)} \frac{1}{2\pi \hbar} \int_0^\infty dr e^{i\left(\frac{(p-p')r}{\hbar}\right)} = \\ &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dp' \int_0^\infty dp d^*(p') c(p) e^{-i\left(\frac{(p^2 - p'^2)}{2m\hbar} t - \alpha_l(p) + \alpha_{l'}(p')\right)} \delta(p - p') = \\ &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \int_0^\infty dp d^*(p) c(p) e^{i(\alpha_l(p) - \alpha_{l'}(p))} \end{aligned} \quad (1.322)$$

D'altra parte siccome il contributo è nullo per $l = l'$ allora:

$$\langle \phi_{l'm'} | \psi_{lm} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \int_0^\infty dp d^*(p) c(p) \quad (1.323)$$

che dimostra che la condizione asintotica soddisfa l'ortonormalizzazione delle funzioni improprie $u_{plm}(\vec{x})$.

1.9.2 Particella Libera

Ricordiamo adesso che la soluzione esatta per la particella libera si trovano le soluzioni:

$$u_{plm}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} p j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.324)$$

dove le $j_l(\rho)$ sono le funzioni sferiche di Bessel di prima specie (per la regolarità). Inoltre queste godono della condizione asintotica attesa:

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} j_l(\rho) = \frac{1}{\rho} \cos\left[\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right] \quad (1.325)$$

e dunque una possibile scelta (a meno di $n\pi$ con n che varia anche per ogni l e p) degli sfasamenti $\alpha_l(p)$ di una particella libera è data da:

$$\alpha_l^0(p) = -(l+1)\frac{\pi}{2} \quad (1.326)$$

che notiamo dipende solo da l e non da p . Questo suggerisce di definire gli sfasamenti $\delta_l(p)$ come segue:

$$\delta_l(p) = \alpha_l(p) - \alpha_l^0(p) \iff \alpha_l(p) = -(l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p) \quad (1.327)$$

Riscriviamo rispetto a questi la condizione asintotica:

$$u_{plm}(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{r} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.328)$$

oppure equivalentemente rispetto alle y_{pl}, R_{pl} :

$$R_{pl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{r} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right) \quad y_{pl} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right) \quad (1.329)$$

1.9.3 Decomposizione delle autofunzioni di scattering nella base delle autofunzioni improprie

Vogliamo adesso dimostrare che i coefficienti c_{lm} di $u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})$ nella base degli u_{plm} , per un generico potenziale centrale (che soddisfa le ipotesi date), sono dati da:

$$c_{lm}^{(+)}(\vec{p}) = \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{i\delta_l(p)} \quad (1.330)$$

con α, β coordinate angolari rispetto all'asse z e il piano xy . L'espansione delle autofunzioni di scattering $u_{\vec{p}}^{(+)}$ sarà data dunque da:

$$u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) = \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{i\delta_l(p)} u_{plm}(\vec{x}) \quad (1.331)$$

Per verificare che i coefficienti sono corretti è sufficiente considerare questo nel limite $r \rightarrow \infty$. In questo caso possiamo usare lo sviluppo asintotico 1.288 trovato nella lezione precedente:

$$u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} + f^{(\pm)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \frac{e^{\pm \frac{i}{\hbar} pr}}{r} \right] \quad (1.332)$$

Vogliamo dunque verificare l'uguaglianza seguente, per un'opportuna $f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}})$:

$$\begin{aligned} u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{i\delta_l(p)} u_{plm}(\vec{x}) \\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} + f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \frac{e^{\frac{i}{\hbar} pr}}{r} \right] &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{i\delta_l(p)} u_{plm}(\vec{x}) \\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} + f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \frac{e^{\frac{i}{\hbar} pr}}{r} \right] &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{i\delta_l(p)} \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{r} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) Y_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (1.333)$$

Questo ci permetterà anche di trovare esplicitamente la funzione $f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}})$ a partire dai coefficienti $c_{lm}^{(+)}(\vec{p})$ nel caso generale.

Per fare questo ricordiamo il teorema di addizione delle armoniche sferiche 1.233:

$$P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\alpha, \beta) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.334)$$

e lo sviluppo dell'onda piana (autostato dell'hamiltoniana libera in coordinate cartesiane) nelle u_{plm} 1.234:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) \quad (1.335)$$

Usando lo sviluppo asintotico delle funzioni di Bessel 1.325 troviamo poi lo sviluppo asintotico per l'onda piana:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\hbar}{pr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \cos \left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1) \frac{\pi}{2} \right] P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) \quad (1.336)$$

Indichiamo con (1) il termine sinistro all'uguaglianza che vogliamo verificare:

$$\begin{aligned} (1) &= \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{i\delta_l(p)} \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \frac{1}{r} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) Y_{lm}(\theta, \phi) = \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \frac{1}{rp} \sum_l i^l \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) e^{i\delta_l(p)} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \frac{1}{rp} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) e^{i\delta_l(p)} \left[e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right)} + e^{-i\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right)} \right] = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \frac{1}{rp} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) \left[e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + 2\delta_l(p)\right)} + e^{-i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} \right] = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \frac{1}{rp} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) \left[e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + 2\delta_l(p)\right)} + e^{-i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} + e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} - e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} \right] = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \frac{1}{rp} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) \left[2 \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) + e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + 2\delta_l(p)\right)} - e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} \right] = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \frac{1}{rp} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) \left[2 \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) + e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} (e^{2i\delta_l(p)} - 1) \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi \hbar)^{3/2}} 2\pi \hbar \frac{1}{rp} \sum_l i^l \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) 2 \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) + \\ &+ \frac{1}{(2\pi \hbar)^{3/2}} \frac{e^{i\frac{pr}{\hbar}}}{r} \left[\frac{1}{4\pi} 2\pi \hbar \frac{1}{p} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) e^{-i(l+1)\frac{\pi}{2}} (e^{2i\delta_l(p)} - 1) \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi \hbar)^{3/2}} \frac{\hbar}{rp} \sum_l i^l (2l+1) \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) + \\ &+ \frac{1}{(2\pi \hbar)^{3/2}} \frac{e^{i\frac{pr}{\hbar}}}{r} \left[\frac{\hbar}{2p} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) i^{-l-1} (e^{2i\delta_l(p)} - 1) \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi \hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} + f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) \frac{e^{i\frac{pr}{\hbar}}}{r} \right] \end{aligned} \quad (1.337)$$

dove:

$$f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) = \frac{\hbar}{2ip} \sum_l (2l+1) (e^{2i\delta_l(p)} - 1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) = \frac{\hbar}{p} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l(p)} \sin(\delta_l(p)) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\bar{x}}}) \quad (1.338)$$

Abbiamo dunque verificato che per una f opportuna, le $u_{\vec{p}}^{(+)}$ ammettono i coefficienti $c_{lm}^{(+)}(\vec{p})$ della forma data, e abbiamo scritto esplicitamente questa funzione.

Ricordando che $u_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{x}) = u_{-\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})^*$ troviamo ora i $c_{lm}^{(-)}(\vec{p})^*$:

$$\begin{aligned} u_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{x}) &= u_{-\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})^* = \sum_{lm} \frac{(-i)^l}{p} Y_{lm}(\alpha', \beta') e^{-i\delta_l(p)} u_{plm}^*(\vec{x}) = \\ &= \sum_{lm} \frac{(-i)^l}{p} Y_{lm}(\pi - \alpha, \pi + \beta) e^{-i\delta_l(p)} \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{lm}^*(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (1.339)$$

Ricordiamo adesso due proprietà delle armoniche sferiche (nella convenzione delle fasi tipica), ossia che una coniugazione equivale ad un cambiamento di segno di m , e che la parità delle armoniche sferiche è uguale ad l :

$$Y_{lm}^*(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{l, -m}(\theta, \phi) \quad Y_{lm}(\pi - \alpha, \pi + \beta) = (-1)^l Y_{lm}(\alpha, \beta) \quad (1.340)$$

Troviamo dunque, ricordando che m è un indice muto su cui stiamo facendo la somma che varia su insieme simmetrico per inversione di segno, pertanto non cambia nullo passare da $m \rightarrow -m$:

$$\begin{aligned} u_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{x}) &= \sum_{lm} \frac{(-i)^l}{p} Y_{lm}(\pi - \alpha, \pi + \beta) e^{-i\delta_l(p)} \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{lm}^*(\theta, \phi) = \\ &= \sum_{lm} \frac{(-i)^l}{p} (-1)^m (-1)^l Y_{lm}(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{l, -m}(\theta, \phi) = \\ &= \sum_{lm} \frac{(-i)^l}{p} (-1)^{-m} (-1)^l Y_{l, -m}(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{l, m}(\theta, \phi) = \\ &= \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{l, m}^*(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{l, m}(\theta, \phi) = \\ &= \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{l, m}^*(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} u_{plm}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (1.341)$$

da cui:

$$c_{lm}^{(-)}(\vec{p}) = \frac{i^l}{p} Y_{l, m}^*(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} \quad (1.342)$$

1.9.4 Cambiamento di Base

Ci aspettiamo adesso che in realtà anche i $|\vec{p}+\rangle$ e $|\vec{p}-\rangle$ formino una base ortonormale di autostati dell'hamiltoniana. Questo è equivalente a richiedere che lo sviluppo 1.287 sia invertibile. Notiamo tuttavia che siccome le $u_{\vec{p}}^{(+)}$ sono parametrizzate tramite tre parametri vettoriali continui, allora le u_{plm} non saranno date da una somma delle $u_{\vec{p}}^{(+)}$, ma da un integrale sulle possibili direzioni, ossia su $d\Omega_{\alpha\beta}$:

$$u_{plm}(\vec{x}) = \int d\Omega_{\alpha\beta} c_{lm}(p, \alpha, \beta) u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) \quad (1.343)$$

La forma dei coefficienti è chiara quando notiamo che nei $c_{lm}^{(+)}(\vec{p})$ appaiono le armoniche sferiche, che sono ortonormali. Infatti moltiplicando le $u_{\vec{p}}^{(+)}$ per le armoniche sferiche ed integrando sull'angolo troviamo:

$$\int d\Omega_{\alpha\beta} u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) Y_{lm}(\alpha, \beta) = \sum_{lm} \frac{i^l}{p} \int d\Omega_{\alpha\beta} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) Y_{lm}(\alpha, \beta) e^{i\delta_l(p)} u_{plm}(\vec{x}) = \frac{i^l}{p} e^{i\delta_l(p)} u_{plm}(\vec{x}) \quad (1.344)$$

da cui:

$$c_{lm}(p, \alpha, \beta) = (-i)^l p e^{-i\delta_l(p)} Y_{lm}(\alpha, \beta) \Rightarrow u_{plm}(\vec{x}) = (-i)^l p e^{-i\delta_l(p)} \int d\Omega_{\alpha\beta} u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) Y_{lm}(\alpha, \beta) \quad (1.345)$$

Analogamente questo vale per i $|\vec{p}-\rangle$ e le $u_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{x})$.

1.9.5 Ampiezza di Scattering e Autofunzioni Improprie di Scattering

Dimostriamo adesso quello che ci siamo posti a inizio lezione, ossia che:

$$f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{p}'}}) \quad (1.346)$$

Per fare questo esplicitiamo la matrice di scattering tra i due stati "di scattering" $|\vec{p}+\rangle, |\vec{p}-\rangle$, così da poterla comparare con la definizione dell'ampiezza di scattering:

$$\begin{aligned} S(\vec{p}, \vec{p}') &= \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}' - | \vec{p} + \rangle = \sum_{l'm'} \sum_{lm} \frac{(-i)^{l'} i^l}{p' p} e^{i(\delta_{l'}(p') - \delta_l(p))} Y_{l'm'}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) \langle p' l' m' | p l m \rangle = \\ &= \sum_{l'm'} \sum_{lm} \frac{(-i)^{l'} i^l}{p' p} e^{i(\delta_{l'}(p') + \delta_l(p))} Y_{l'm'}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(p - p') = \frac{1}{p^2} \delta(p - p') \sum_{lm} e^{2i\delta_l(p)} Y_{lm}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) = \\ &= \frac{1}{p^2} \delta(p - p') \sum_{lm} Y_{lm}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) + \frac{1}{p^2} \delta(p - p') \sum_{lm} \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) Y_{lm}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) \end{aligned} \quad (1.347)$$

A questo punto usiamo la condizione di ortonormalizzazione delle armoniche sferiche, che può essere scritta nella forma equivalente:

$$\sum_{l,m} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) Y_{lm}(\alpha', \beta') = \delta(\cos \alpha - \cos \alpha') \delta(\beta - \beta') = \delta(\hat{p} - \hat{p}') \quad (1.348)$$

dove \hat{p}, \hat{p}' sono i versori dei due vettori momento considerati, che hanno angoli sferici (α, β) e (α', β') rispettivamente. Troviamo infine:

$$\begin{aligned} S(\vec{p}, \vec{p}') &= \frac{1}{p^2} \delta(p - p') \sum_{lm} Y_{lm}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) + \frac{1}{p^2} \delta(p - p') \sum_{lm} \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) Y_{lm}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) = \\ &= \frac{1}{p^2} \delta(p - p') \delta(\hat{p} - \hat{p}') + \frac{1}{p^2} \delta(p - p') \sum_l \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta_{\widehat{pp'}}) = \\ &= \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{1}{4\pi p^2} \delta(p - p') \sum_{l=0} (2l+1) \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) P_l(\cos \theta_{\widehat{pp'}}) \end{aligned} \quad (1.349)$$

D'altra parte per le proprietà della delta di Dirac (ricordando che $p, p' > 0$, quindi $\delta(p + p') = 0$ per ogni $p, p' > 0$):

$$\delta(E_p - E_{p'}) = 2m\delta(p^2 - p'^2) = \frac{m}{p} \delta(p - p') \quad (1.350)$$

da cui:

$$S(\vec{p}, \vec{p}') = \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{1}{4\pi m p} \delta(E_p - E_{p'}) \sum_{l=0} (2l+1) \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) P_l(\cos \theta_{\widehat{pp'}}) \quad (1.351)$$

Ricordando l'espressione di $f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{px}})$:

$$f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{px}}) = \frac{\hbar}{2ip} \sum_l (2l+1) \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) P_l(\cos \theta_{\widehat{px}}) \Rightarrow \sum_l (2l+1) \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) P_l(\cos \theta_{\widehat{px}}) = \frac{2ip}{\hbar} f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{px}}) \quad (1.352)$$

allora:

$$\begin{aligned} S(\vec{p}, \vec{p}') &= \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{1}{4\pi p^2} \delta(p - p') \sum_{l=0} (2l+1) \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) P_l(\cos \theta_{\widehat{pp'}}) = \\ &= \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{1}{2\pi p^2} \delta(p - p') \frac{ip}{\hbar} f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{pp'}}) = \\ &= \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{i}{2\pi m \hbar} \delta(E_p - E_{p'}) f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{pp'}}) \end{aligned} \quad (1.353)$$

Compariamo ora con la definizione di ampiezza di scattering:

$$S(\vec{p}, \vec{p}') = \delta_3(\vec{p}' - \vec{p}) + \frac{i}{2\pi m \hbar} \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad (1.354)$$

e infine:

$$f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{pp'}}) = f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad (1.355)$$

Non ci sorprende la dipendenza di f solo dal modulo e dall'angolo di deflessione in quanto per un potenziale centrale il moto è in un piano e inoltre per la conservazione dell'energia i due moduli coincidono.

Questo significa che l'unico calcolo che bisogna svolgere per trovare la matrice o l'ampiezza di scattering, che forniscono entrambe tutta l'informazione relativa allo scattering (e si trovano infatti anche nelle condizioni asintotiche sulle $u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x})$, è quello relativo agli sfasamenti $\delta_l(p)$.

L'equazione che definisce l'ampiezza di scattering rispetto a queste quantità è detta sviluppo in onde parziali dell'ampiezza di scattering per un potenziale centrale (con completezza asintotica):

$$\boxed{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = \frac{\hbar}{p} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l(p)} \sin(\delta_l(p)) P_l(\cos \theta_{\widehat{pp'}})} \quad (1.356)$$

Ricapitoliamo. Abbiamo trovato la condizione asintotica per le autofunzioni improprie $u_{plm}(\vec{x})$ nel caso di un potenziale centrale a cort range e verificato la loro ortonormalizzazione. Queste sono determinate univocamente dagli sfasamenti $\delta_l(p)$ (determinati a meno di un multiplo intero di π). Abbiamo espanso le autofunzioni improprie $u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x})$ in questa base, trovando che entrambe le famiglie di funzioni sono una base ortonormale. Inoltre noti i coefficienti abbiamo calcolato le funzioni $f^{(\pm)}(p, \theta_{\widehat{px}})$ e infine verificato che $f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{pp'}})$ coincide con l'ampiezza di scattering $f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$.

1.10 Lezione 10

Nota l'ampiezza di scattering, ricaviamo anche la sezione d'urto differenziale tramite il modulo quadro:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) = |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')|^2 = \left| \frac{\hbar}{p} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l(p)} \sin(\delta_l(p)) P_l(\cos \theta) \right|^2 \quad (1.357)$$

Da cui ricaviamo la seguente espressione per la sezione d'urto totale:

$$\sigma_{tot}(p) = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) = 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) \quad (1.358)$$

Usando poi la condizione di ortonormalizzazione dei polinomi di Legendre, nel modulo quadro contribuiscono solo i termini dati dal prodotto delle quantità e dei loro coniugati con $l = l'$:

$$\int_{-1}^1 x P_l(x) P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (1.359)$$

da cui:

$$\sigma_{tot}(p) = 4\pi \frac{\hbar^2}{p^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(p) \quad (1.360)$$

Notiamo che l'ampiezza di scattering (e dunque sezione d'urto differenziale e totale) è ben definita rispetto agli sfasamenti. Infatti facendo la sostituzione $\delta_l(p) \rightarrow \delta_l(p) + \pi$ il prodotto $e^{i\delta_l(p)} \sin \delta_l(p)$ non cambia di segno.

Vediamo adesso che il Teorema ottico si dimostra immediatamente a partire dalle espressioni per l'ampiezza di scattering in avanti e la sezione d'urto totale. Calcoliamo la parte immaginaria di $f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})$:

$$\text{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} = \frac{\hbar}{p} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(p) = \frac{p}{4\pi\hbar} \sigma_{tot}(p) \quad (1.361)$$

Questa dimostrazione è però meno significativa in quanto il ruolo dell'unitarietà dell'operatore di scattering interviene solo indirettamente attraverso l'espressione dell'ampiezza di scattering.

Notiamo poi che l'espressione dell'ampiezza di scattering e della sezione d'urto (differenziale e totale) è in generale non applicabile in quanto richiede una soluzione esatta per gli sfasamenti di $\delta_l(p)$ e la possibilità di esplicitare la somma di una serie. Cerchiamo dunque un metodo che ci permette di approssimare la serie o troncarsi ad un numero finito termini. In particolare vogliamo adesso dimostrare che per $E_p \rightarrow 0$ allora la somma di un numero di l finiti è una buona approssimazione.

Per fare questo consideriamo un semplice esempio di potenziale a corto range, che descrive bene lo scattering tra nuclei, che interagiscono con un potenziale che va a 0 fuori dal nucleo.

1.10.1 Buca Quadrata Sferica

Consideriamo adesso il potenziale centrale a buca quadrata, ossia:

$$V(r) = \begin{cases} -U_0 & r < b \\ 0 & r > b \end{cases} \quad (1.362)$$

Le autofunzioni in coordinate sferiche saranno della forma:

$$u_{plm}(\vec{x}) = R_{pl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.363)$$

dove le Y_{lm} sono armoniche sferiche e le R_{pl} soddisfano la seguente equazione differenziale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) \right] = (E_p - V(r)) R(r) \quad (1.364)$$

Notiamo che a b fissato, per U_0 sufficientemente negativo allora per ogni l si troverà un insieme di stati legati $E_{nl} < 0$ con $n = 0, \dots, N_l$. Noi siamo interessati al caso $E_p = \frac{p^2}{2m} > 0$ (spettro continuo e discreto sono disgiunti), dove l'equazione diventa:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(\alpha^2(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad \alpha^2(r) = \begin{cases} \frac{2m}{\hbar^2} (E_p + U_0) = \frac{p^2 + 2mU_0}{\hbar^2} \bar{k}^2 & r < b \\ \frac{2m}{\hbar^2} E_p = \frac{p^2}{\hbar^2} k^2 & r > b \end{cases} \quad (1.365)$$

A questo punto facciamo il cambio di variabile:

$$\rho = \begin{cases} \bar{k}r & r < b \\ kr & r > b \end{cases} \quad (1.366)$$

e l'equazione per parte radiale diventa quella per le funzioni sferiche di Bessel di prima e seconda specie $j_l(\rho), n_l(\rho)$:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) R = 0 \quad (1.367)$$

Ricordiamo che gli andamenti asintotici di queste per $\rho \rightarrow 0, \rho \rightarrow \infty$ sono i seguenti:

$$\begin{cases} j_l(\rho) \rightarrow \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} & \rho \rightarrow 0 \\ j_l(\rho) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) & \rho \rightarrow \infty \end{cases} \quad \begin{cases} n_l(\rho) \rightarrow -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} & \rho \rightarrow 0 \\ n_l(\rho) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) & \rho \rightarrow \infty \end{cases} \quad (1.368)$$

Per un dato l la soluzione generale sarà dunque la combinazione lineare di queste due. Per determinare i coefficienti dobbiamo imporre le condizioni al contorno all'origine e di raccordo all'interfaccia tra le due regioni del potenziale:

$$\lim_{r \rightarrow 0} R_{pl}(r) < \infty \quad R_{pl}(r^+) = R_{pl}(r^-) \quad R'_{pl}(r^+) = R'_{pl}(r^-) \quad (1.369)$$

Per la condizione di regolarità in $r = 0$ troviamo:

$$R_{pl}(r) = \begin{cases} A j_l(\bar{k}r) & 0 < r < b \\ C j_l(kr) + D n_l(kr) & r > b \end{cases} \quad (1.370)$$

Anticipando il risultato che otterremo, per semplificare i calcoli, facciamo le seguenti posizioni:

$$D = E \cos \delta_l \quad D = -E \sin \delta_l \quad (1.371)$$

con $E, \delta_l(p)$ opportuni. Ci aspettiamo dunque che i $\delta_l(p)$ siano gli sfasamenti che abbiamo definito nelle lezioni precedenti.

Per le condizioni di raccordo:

$$\begin{cases} A j_l(\bar{k}b) = E[\cos \delta_l j_l(kb) - \sin \delta_l n_l(kb)] \\ \bar{k} A j'_l(\bar{k}b) = E k[\cos \delta_l j'_l(kb) - \sin \delta_l n'_l(kb)] \end{cases} \Rightarrow \frac{j'_l(\bar{k}b)}{j_l(\bar{k}b)} = k \frac{\cos \delta_l j'_l(kb) - \sin \delta_l n'_l(kl)}{\cos \delta_l j_l(kb) - \sin \delta_l n_l(kb)} \quad (1.372)$$

Per determinare A oppure E dovremmo poi imporre la condizione di normalizzazione, che però non ci interessa. Possiamo comunque trovare i $\delta_l(p)$ tramite un'equazione trascendente, invertendo quella precedente:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{k} j'_l(\bar{k}b)}{j_l(\bar{k}b)} &= k \frac{j'_l(kb) - \tan \delta_l n'_l(kl)}{j_l(kb) - \tan \delta_l n_l(kb)} \\ \bar{k} j'_l(\bar{k}b)(j_l(kb) - \tan \delta_l n_l(kb)) &= k j_l(\bar{k}b)(j'_l(kb) - \tan \delta_l n'_l(kl)) \\ \bar{k} j'_l(\bar{k}b)(j_l(kb) - \tan \delta_l n_l(kb)) &= k j_l(\bar{k}b)(j'_l(kb) - \tan \delta_l n'_l(kl)) \\ [k j_l(\bar{k}b) n'_l(kl) - \bar{k} j'_l(\bar{k}b) n_l(kb)] \tan \delta_l &= k j_l(\bar{k}b) j'_l(kb) - \bar{k} j'_l(\bar{k}b) j_l(kb) \\ \tan \delta_l(p) &= \frac{k j_l(\bar{k}b) j'_l(kb) - \bar{k} j'_l(\bar{k}b) j_l(kb)}{k j_l(\bar{k}b) n'_l(kb) - \bar{k} j'_l(\bar{k}b) n_l(kb)} \end{aligned} \quad (1.373)$$

Per verificare che i $\delta_l(p)$ sono effettivamente gli sfasamenti, facciamo uso della condizione asintotica attesa [1.329](#):

$$R_{pl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{r} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right) \quad (1.374)$$

Ma per l'espressione trovata e i comportamenti asintotici di j_l, n_l :

$$\begin{aligned} R_{pl}(r) &\stackrel{r \geq b}{=} E[\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)] \stackrel{r \rightarrow \infty}{=} \\ &\stackrel{r \rightarrow \infty}{=} \frac{E}{kr} \left[\cos \delta_l \cos\left(kr - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) - \sin \delta_l \sin\left(kr - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \right] = \\ &= \frac{E}{kr} \cos\left(kr - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right) \end{aligned} \quad (1.375)$$

Ma siccome $kr = \rho = \frac{pr}{\hbar}$ allora i $\delta_l(p)$ sono effettivamente gli sfasamenti soliti.

Studiamo adesso i limiti dell'equazione che definisce $\tan \delta_l(p)$, ricordando gli andamenti asintotici delle due funzioni in $p \rightarrow 0, p \rightarrow \infty$, che conosciamo esattamente. Notiamo che rispetto a k, \bar{k} questi due limiti corrispondono a:

$$\begin{cases} k = \frac{p}{\hbar} \rightarrow 0 & \bar{k} = \sqrt{\frac{p^2 + 2mU_0}{\hbar^2}} \rightarrow \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}} & p \rightarrow 0 \\ k = \frac{p}{\hbar} \rightarrow \infty & \bar{k} = \sqrt{\frac{p^2 + 2mU_0}{\hbar^2}} \rightarrow \infty & p \rightarrow \infty \end{cases} \quad (1.376)$$

Ricaviamo prima di tutto gli andamenti delle derivate (teniamo conto solo dei termini di ordine maggiore):

$$\begin{cases} j_l'(\rho) \rightarrow \frac{l\rho^{l-1}}{(2l+1)!!} & \rho \rightarrow 0 \\ j_l'(\rho) \rightarrow -\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) = -n_l(\rho) & \rho \rightarrow \infty \end{cases} \quad \begin{cases} n_l'(\rho) \rightarrow (l+1) \frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+2}} & \rho \rightarrow 0 \\ n_l'(\rho) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) = j_l(\rho) & \rho \rightarrow \infty \end{cases} \quad (1.377)$$

Ci conviene fare poi le posizioni $\rho = kb, \bar{\rho} = \bar{k}b$, in modo che:

$$\tan \delta_l(p) = \frac{\rho j_l(\bar{\rho}) j_l'(\rho) - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho}) j_l(\rho)}{\rho j_l(\bar{\rho}) n_l'(\rho) - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho}) n_l(\rho)} \quad \begin{cases} p \rightarrow 0 \Rightarrow \rho \rightarrow 0, \bar{\rho} \rightarrow \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} b \\ p \rightarrow \infty \Rightarrow \rho, \bar{\rho} \rightarrow \infty \end{cases} \quad (1.378)$$

In particolare notiamo che in queste posizioni:

$$\bar{\rho} - \rho = \frac{pb}{\hbar} \sqrt{1 + \frac{2mU_0}{p^2}} - \frac{pb}{\hbar} \xrightarrow{p \rightarrow \infty} \frac{pb}{\hbar} \sqrt{1 + \frac{2mU_0}{p^2}} - \frac{pb}{\hbar} = \frac{mU_0 b}{p\hbar} \quad (1.379)$$

Facciamo ora il limite per $p \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \tan \delta_l(p) &= \frac{\rho j_l(\bar{\rho}) \frac{l\rho^{l-1}}{(2l+1)!!} - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho}) \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}}{\rho j_l(\bar{\rho}) (l+1) \frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+2}} - \bar{\rho} \frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} j_l'(\bar{\rho})} = \frac{[j_l(\bar{\rho}) - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho})] \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}}{[(l+1) j_l(\bar{\rho}) - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho})] \frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}} = \\ &= \frac{[j_l(\bar{\rho}) - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho})] \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}}{[(l+1) j_l(\bar{\rho}) - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho})] \frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}} \frac{1}{(2l-1)!!(2l+1)!!} \rho^{2l+1} = \beta \rho^{2l+1} \end{aligned} \quad (1.380)$$

Calcoliamo poi il limite per $p \rightarrow \infty$, notando che l'andamento delle funzioni è lo stesso:

$$\begin{aligned} \tan \delta_l(p) &= \frac{\rho j_l(\bar{\rho}) j_l'(\rho) - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho}) j_l(\rho)}{\rho j_l(\bar{\rho}) n_l'(\rho) - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho}) n_l(\rho)} = \frac{(\bar{\rho} - \rho) j_l(\rho) n_l(\rho)}{\rho j_l(\rho) j_l(\rho) + \rho n_l(\rho) n_l(\rho)} = \\ &= \frac{(\bar{\rho} - \rho)}{\frac{1}{\rho}} \frac{1}{\rho^2} \frac{\sin\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)}{\cos^2\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) + \sin^2\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} = \\ &= \frac{(\bar{\rho} - \rho)}{\rho} \sin\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \stackrel{?}{=} \bar{\rho} - \rho \end{aligned} \quad (1.381)$$

Riassumendo:

$$\begin{cases} \tan \delta_l(p) \xrightarrow{p \rightarrow 0} \beta \rho^{2l+1} = \beta (kb)^{2l+1} = \beta \left(\frac{pb}{\hbar}\right)^{2l+1} \\ \tan \delta_l(p) \xrightarrow{p \rightarrow \infty} \frac{mU_0 b}{p\hbar} \end{cases} \quad (1.382)$$

e dunque $\tan \delta_l(p)$ va a 0 come p^{2l+1} , ossia va più lentamente a 0 per l maggiore, mentre per $p \rightarrow \infty$ va a 0 come $1/p$ indipendentemente da l .

Per fissare univocamente $\delta_l(p)$ per ogni l, p , possiamo imporre le seguenti condizioni (che applichiamo ad un generico potenziale):

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \delta_l(p) = 0 \quad \lim_{p \rightarrow p_0} \delta_l(p) = \delta_l(p_0) \quad \forall p_0 \quad (1.383)$$

La prima chiaramente è convenzionale in quanto potevamo scegliere un qualunque multiplo di π (che è compatibile con l'andamento asintotico di $\tan \delta_l(p)$ nel caso della buca quadrata e in generale).

In particolare questo implica anche che:

$$\delta_l(0) = n_l \pi \quad (1.384)$$

per n_l un certo intero finito, come implicato dalla condizione di continuità di $\delta_l(p)$ e la condizione di $\tan \delta_l(p)$ per $p \rightarrow 0$ (che vale in generale). Senza fissare la condizione asintotica $p \rightarrow \infty$ sullo sfasamento possiamo dire in generale:

$$\delta_l(0) - \delta_l(\infty) = n_l \pi \quad (1.385)$$

Enunciamo adesso senza dimostrazione (sta su [Tay]) il seguente teorema, valido p.

Teorema 4 (Teorema di Levinson). n_l è uguale al numero di stati legati che esistono per il dato valore del momento angolare (ossia la degenerazione del sottospazio).

Per l'andamento asintotico di $\tan \delta_l(p)$ in $p \rightarrow 0$ troviamo anche quello di $\delta_l(p)$:

$$\delta_l(p) = n_l \pi - a_l k^{2l+1} + c_l k^{2l+3} + \dots \quad k = \frac{p}{\hbar} \quad (1.386)$$

Chiaramente per p piccoli le correzioni $k^{2(l+m)}$, con m un altro intero, diventano meno significative e dunque per p sufficientemente piccolo possiamo considerare tutti gli sfasamenti costanti e pari ad un certo multiplo di π .

Nota questa possiamo anche calcolare la formula per l'ampiezza di scattering, usando la:

$$f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) P_l(\cos \theta) \quad (1.387)$$

Possiamo espandere per $p \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2ik} \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\approx} \frac{1}{2ik} \left(\exp[2i(n_l \pi - a_l k^{2l+1} + \dots)] - 1 \right) = \frac{1}{2ik} \left(e^{2i(-a_l k^{2l+1} + \dots)} - 1 \right) = \\ &= \frac{1}{2ik} (-a_l k^{2l+1}) = -a_l k^{2l} + \dots \end{aligned} \quad (1.388)$$

Da cui al primo ordine:

$$f(p, \theta) = - \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [a_l k^{2l} + \dots] P_l(\cos \theta) \quad (1.389)$$

Notiamo adesso che per $k \rightarrow 0$ l'ordine predominante è quello per $l = 0$, che ha un contributo costante ($P_0(x) = 1$), ossia l'ordine maggiore è quello dell'onda s :

$$f(p, \theta) \stackrel{k \rightarrow 0}{\approx} -a_0 \quad (1.390)$$

Pertanto per piccoli momenti incidenti la sezione d'urto differenziale è indipendente da θ .

Da questa possiamo poi ricavare anche la sezione d'urto totale, integrando su $d\Omega$:

$$\sigma_{tot}(p) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [a_l^2 k^{4l} + \dots] = \sum_l \sigma_l(p) \quad (1.391)$$

dove notiamo che $\sigma_l(p) \rightarrow 0$ per $p \rightarrow 0$.

Vedere [Cal, p.446] per grafici degli sfasamenti e sezioni d'urto totale a vari ordini di l a cui si tronca la serie.

Notiamo adesso come i risultati qualitativi sull'espansione in potenze di $\delta_l(p)$ per $p \rightarrow 0$, e dunque di $f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}_0)$ e $\sigma_{tot}(p)$, continua ad essere valida.

Consideriamo adesso il generale contributo dell'onda p all'ampiezza di scattering di un potenziale centrale (e quindi sezione d'urto differenziale e totale). Ricordando che $P_0(x) = 1$, $P_1(x) = x$ allora troviamo:

$$f(p, \theta) = \frac{\hbar}{p} [e^{i\delta_0} \sin \delta_0 + 3e^{i\delta_1} \sin \delta_1 \cos \theta] \quad (1.392)$$

da cui:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) = |f(p, \theta)|^2 = \frac{\hbar^2}{p^2} [\sin^2 \delta_0 + 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos(\delta_1 - \delta_0) + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta] \quad (1.393)$$

Questo ci fornisce un fit in θ per valori di p sufficientemente piccoli, con i due parametri δ_0, δ_1 da determinare. Facendo questo al variare di p , sempre per valori piccoli, riusciamo anche a trovare i coefficienti a_0, a_1 per gli ordini più bassi di correzione all'espressione costante $\delta_0(p) = n_0 \pi$, $\delta_1(p) = n_1 \pi$.

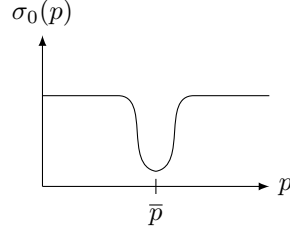
Piccole incertezze sui parametri suggeriscono che l'ipotesi di potenziale centrale a corto range sia valida. In tal caso possiamo fare anche modelli per $V(r)$ che giustificano gli andamenti degli sfasamenti ottenuti.

Se il fit non è adatto, la fonte dei problemi del modello potrebbe essere dovuta all'approssimazione ad onda p , ossia valore di l di troncamento troppo basso (i valori di p non sono sufficientemente piccoli). Se il fit ancora non fornisce risultati accettabili allora il problema potrebbe stare nel modello di potenziale centrale o problemi più generali, come l'interazione con lo spin, correzioni relativistiche, del modello stesso, e così via.

1.10.2 Effetto Ramsauer-Townsend

Supponiamo adesso che per qualche valore di $p = \bar{p}$, per un dato valori di $l = \bar{l}$, lo sfasamento $\delta_{\bar{l}}(\bar{p}) = m\pi$ con $m \in \mathbb{Z}$. Allora $\sin \delta_{\bar{l}}(\bar{p}) = 0$ e dunque si annulla il contributo della data onda parziale al dato impulso. Questo significa anche che la sezione d'urto totale corrisponde si annulla $\sigma_{\bar{l}}(\bar{p}) = 0$.

Per certi potenziali centrali $V(r)$ è addirittura possibile che questo accade per $\bar{l} = 0$ e \bar{p} piccolo. Pertanto alla data energia la sezione d'urto totale alla data energia non è più dominata dall'onda s , ma dall'onda p . Troviamo dunque un (anti-)risonanza per p vicino a \bar{p} .



Se in un tipico esperimento, a partire da un basso valori di p , troviamo una diffusione isotropa in ogni direzione, a un certo punto aumentando p si trova che le particelle attraversano il bersaglio come se non interagissero con questo e aumentandolo ancora ritroviamo che continuano ad interagire. Questo è un fenomeno notoriamente quantistico.

Questo effetto è stato ad esempio osservato per scattering di elettroni su gas nobili. Ad esempio nel caso dell'argon si è trovato che accade per $E_{\bar{p}} = 0.7\text{eV}$.

Questo si osserva tipicamente in presenza di stati legati. Questo si osserva debolmente con la buca quadrata, in quanto i contributi delle onde parziali di ordine superiore non sono trascurabili. È tuttavia notevole ad esempio nel caso di potenziale di interazione tra un gas nobile nello stato fondamentale e un elettrone.

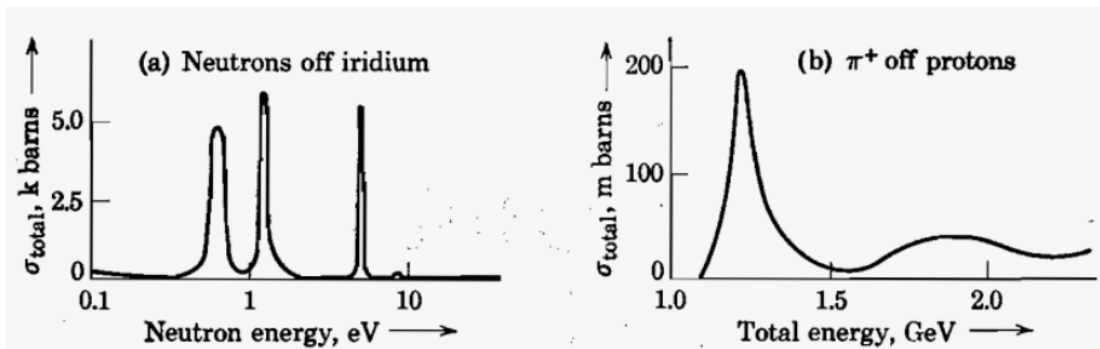
Infatti in presenza di più di due stati legati (per un dato \bar{l}) il range dello sfasamento va da 0 ad almeno di 3π . Per la condizione di continuità allora $\delta_{\bar{l}}(p)$ sicuramente interseca un multiplo di π per qualche \bar{p} . L'effetto di Ramsauer diventa notevole quando i contributi delle altre onde parziali sono trascurabili.

1.11 Lezione 11

Iniziamo adesso a trattare in dettaglio il fenomeno delle risonanze, che abbiamo visto nella scorsa lezione nel caso particolare dell'effetto di Ramsauer-Townsend.

Chiamiamo una risonanza di un processo di scattering un valore dell'energia (detta energia di risonanza) nel cui intorno si osserva una rapida variazione della sezione d'urto totale.

Il caso più semplice è la presenza di un picco in $\sigma(p)$ in corrispondenza di certi valori di $p \iff E_p$. Questi picchi possono essere anche di diversi ordini di grandezza più grandi della sezione d'urto fuori dalla risonanza. Storicamente infatti questo giustifica l'uso del nome "barn" per l'unità di misura della sezione d'urto, in quanto il "barn" ("fienile" in italiano) era usato dagli americani per indicare qualcosa di grandi dimensioni. Ma come si vede nella figura 13.1(a) del [Tay], possono avere anche una grande ampiezza e perfino una coda. Vedremo che la formazione di queste è legata alla formazione di stati metastabili, "quasi-legati"; ossia è come se proiettili incidenti a date energie vengano intrappolati dal potenziale per tempi lunghi, formando stati metastabili.

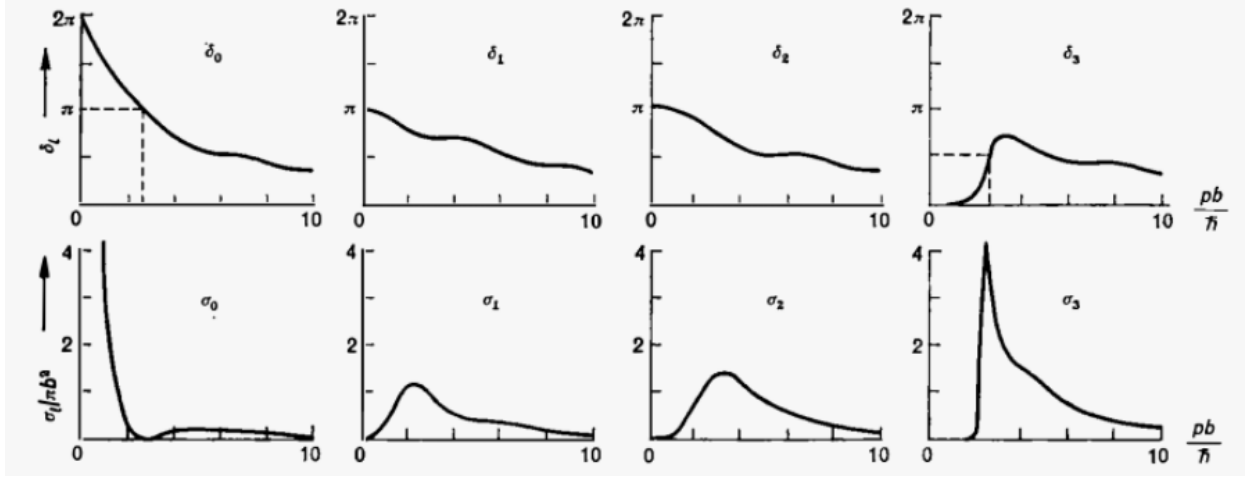


Dall'espressione della sezione d'urto totale:

$$\sigma_{tot}(p) = 4\pi \frac{\hbar^2}{p^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(p) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(p) \quad (1.394)$$

ci aspettiamo che questo accada in corrispondenza di una rapida variazione di uno sfasamento $\delta_l(p)$ intorno ad un certo valore dell'impulso/energia. Infatti per la continuità di \sin , una rapida variazione di $\delta_l(p)$ corrisponde ad una rapida variazione di $\sin^2 \delta_l(p)$ e dunque di $\sigma_l(p)$ (e dunque di $\sigma_{tot}(p)$).

Ad esempio, come si vede nella figura VII.35 del [Cal], troviamo che lo sfasamento $\delta_3(p)$ della buca quadrata ha una rapida variazione intorno ad un certo valore di p . In corrispondenza di questo $\sigma_3(p)$ presenta un picco, anche se non particolarmente pronunciato, in quanto i contributi di $\sigma_l(p)$ per $l \neq 3$ non sono trascurabili rispetto all'altezza del picco.

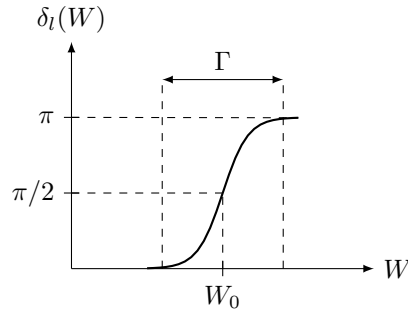


Notiamo adesso che ci conviene fare il cambiamento di variabile $p \rightarrow W = \frac{p^2}{2m}$ in $\delta_l(p) \rightarrow \delta_l(W)$, in modo di parlare di energia di risonanza piuttosto che di impulso.

1.11.1 Formula di Breit-Wigner

Supponiamo che per un dato valore dell'energia W_0 , esiste un qualche l tale che $\delta_l(W_0) = \pi/2$ (dove $\sin^2 \delta_l(p)$ è massimo). Inoltre supponiamo che per valori di energia più bassi $\delta_l(p)$ vada a 0 e per valori maggiori $\delta_l(p)$ vada a π .

Un andamento tipico è il seguente.



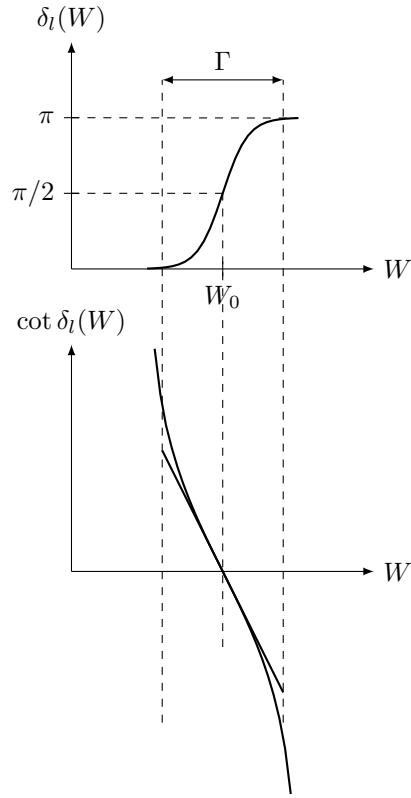
Potremmo dunque immaginarci uno sviluppo lineare intorno a W_0 come prima approssimazione:

$$\delta_l(W) = \frac{\pi}{2} + \frac{2}{\Gamma}(W - W_0) \quad \Gamma = \frac{2}{\left. \frac{d\delta_l}{dW} \right|_{W=W_0}} \quad (1.395)$$

Tuttavia il range di energia in cui è valido risulta troppo ristretto, in quanto ci aspettiamo che δ_l vada a 0 e π molto più rapidamente che linearmente.

Una strategia migliore è quella fatta da Breit e Wigner. Questi infatti proposero di fare l'approssimazione lineare sul $\cot \delta_l(W)$. Infatti $\cot \frac{\pi}{2} = 0, \cot(0) = +\infty, \cot(\pi) = -\infty$. Pertanto l'approssimazione lineare se \cot molto più da vicino:

$$\cot \delta_l(W) = \frac{d}{dW} \cot \delta_l(W) \Big|_{W=W_0} (W - W_0) = \frac{d \cot \delta_l}{d\delta_l} \Big|_{\delta_l=\pi/2} \frac{d\delta_l}{dW} \Big|_{W=W_0} (W - W_0) = -\frac{2}{\Gamma}(W - W_0) \quad (1.396)$$



Questo significa che possiamo espandere il termine l -esimo nello sviluppo in onde parziali dell'ampiezza di scattering come segue:

$$\begin{aligned}
 e^{i\delta_l} \sin \delta_l &= \frac{\sin \delta_l}{e^{-i\delta_l}} = \frac{\sin \delta_l}{\cos \delta_l - i \sin \delta_l} = \frac{1}{\cot \delta_l - i} \approx \\
 &\approx \frac{1}{-\frac{2}{\Gamma}(W - W_0) - i} = -\frac{\Gamma/2}{(W - W_0) + i\frac{\Gamma}{2}}
 \end{aligned} \tag{1.397}$$

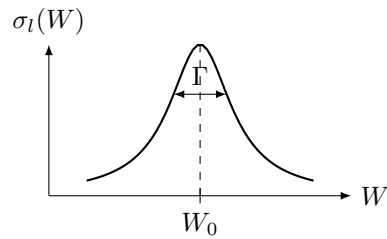
Da cui ricaviamo la componente l -esima della sezione d'urto in approssimazione risonante:

$$\sigma_l(W) = 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} \sin^2 \delta_l(W) \tag{1.398}$$

da cui la Formula di Breit-Wigner:

$$\boxed{\sigma_l(W) = 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} \frac{(\Gamma/2)^2}{(W - W_0)^2 + (\Gamma/2)^2}} \tag{1.399}$$

Se $\sigma_l(W)$ domina per $W \approx W_0$ allora $\sigma(W) \approx \sigma_l(W)$ per $W \approx W_0$ e dunque ha lo stesso andamento. Notiamo in particolare che l'andamento è quello di una lorentziana centrata in W_0 e di ampiezza (FWHM) pari a Γ .



Notiamo adesso come più in generale è possibile che per $W \approx W_0$ l'andamento della fase sia il seguente:

$$\delta_l(W) = \bar{\delta}_l + \delta_l^{res}(W) \quad \bar{\delta}_l \in [0, \pi] \tag{1.400}$$

con $\delta_{ris}(W)$ funzione che varia nella maniera descritta. Pertanto un andamento più generale è uno in cui vi è una traslazione della corrispondente fase. Ci chiediamo adesso cosa succede alla componente l -esima della sezione d'urto totale:

$$\begin{aligned}\sigma_l(W) &= 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} \sin^2 \delta_l(W) = 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} \sin^2 [\bar{\delta}_l + \delta_l^{ris}(W)] = \\ &= 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} [\sin \bar{\delta}_l \cos \delta_l^{ris}(W) + \cos \bar{\delta}_l \sin \delta_l^{ris}(W)]^2\end{aligned}\quad (1.401)$$

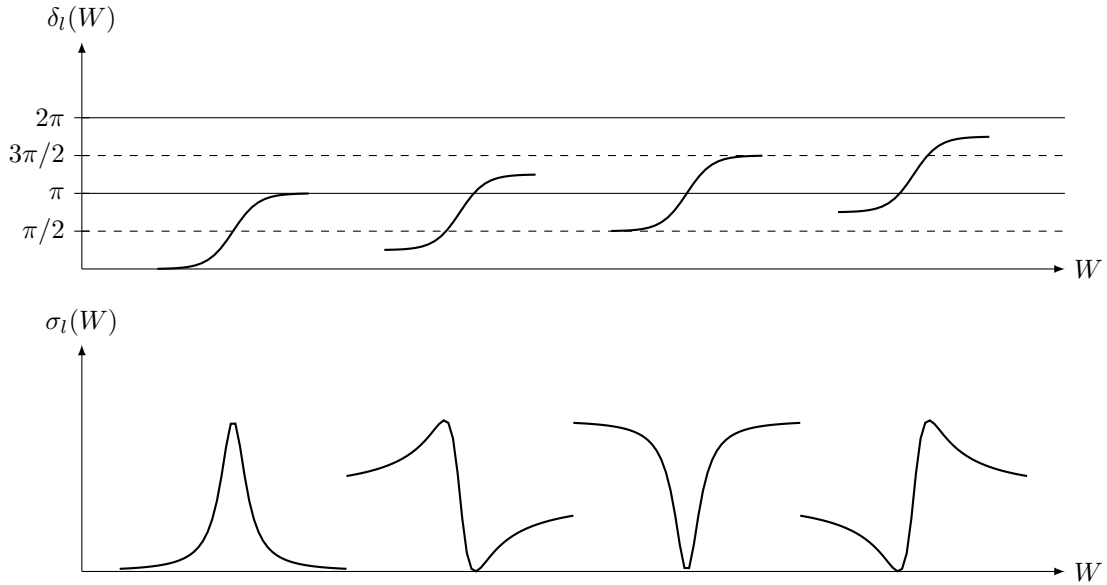
Dall'espansione precedente ricaviamo:

$$\sin \delta_l^{ris}(W) \approx \frac{\Gamma/2}{\sqrt{(W-W_0)^2 + (\Gamma/2)^2}} \quad \cos \delta_l^{ris}(W) \approx \frac{W_0 - W}{\sqrt{(W-W_0)^2 + (\Gamma/2)^2}} \quad (1.402)$$

da cui:

$$\begin{aligned}\sigma_l(W) &= 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} [\sin \bar{\delta}_l \cos \delta_l^{ris}(W) + \cos \bar{\delta}_l \sin \delta_l^{ris}(W)]^2 \approx \\ &\approx 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} \frac{[(W-W_0) \sin \bar{\delta}_l + \Gamma/2 \cos \bar{\delta}_l]^2}{(W-W_0)^2 + (\Gamma/2)^2}\end{aligned}\quad (1.403)$$

Troviamo dunque sostanzialmente quattro possibili tipi di risonanza a seconda dei valori di $\bar{\delta}_l$. Per $\bar{\delta}_l = 0$ la funzione $\sigma_l(W)$ ammette un solo punto stazionario in W_0 , dove è un massimo. Per $0 < \bar{\delta}_l < \pi/2$ vi sono un massimo e un minimo, che sono simmetrici per $\bar{\delta}_l = \pi/4$, con il massimo che viene prima e il minimo dopo (ossia aumentando W), per il quale la sezione d'urto è nulla. Per $\bar{\delta}_l = \pi/2$ vi è poi un solo minimo, analogo all'effetto di Ramsauer-Townsend. Per $\pi/2 < \bar{\delta}_l < \pi$ nuovamente si formano un massimo e un minimo, dove stavolta il minimo è seguito dal massimo. In ognuno di questi casi, che sono piuttosto generali, troviamo dunque che una rapida variazione dello sfasamento è responsabile di formazioni di risonanze nella sezione d'urto.



Ci chiediamo adesso in quali condizioni fisiche è possibile osservare i dettagli della risonanza (ossia la presenza di picchi).

Ricordiamo adesso che per ricavare l'equazione:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) = |f(p, \theta)|^2 \quad (1.404)$$

abbiamo supposto che $f(p, \theta)$ vari lentamente nell'intervallo Δp in cui è supportato il pacchetto incidente $\psi_{in}(\vec{p})$, in modo da poterlo tirare fuori dall'integrale 1.266.

La risposta è dunque che l'incertezza ΔW dell'energia del proiettile (equivalente a Δp) sia piccola rispetto a Γ , in modo da poter ancora applicare l'ipotesi di variazione lenta e dunque ottenere la formula attesa:

$$\Delta W \ll \Gamma \quad (1.405)$$

Infatti se $\Delta W \approx \Gamma$ o addirittura $\Delta W \gg \Gamma$ non potremo osservare la risonanza nella sezione d'urto, in quanto ci sarà una sorta di convoluzione con la distribuzione dell'energia della particella che nasconde la risonanza (l'appiattisce).

1.11.2 Risonanze, Pura Crescita dello Sfasamento, Stati Legati e Metastabili

Usando l'ipotesi di rapida variazione dello sfasamento, ossia che $\frac{d\delta_l}{dW}|_{W=W_0}$ è "grande" (in modulo), facciamo adesso delle manipolazioni con l'equazione di Schroedinger. In questo modo possiamo mettere in relazione l'ipotesi all'esistenza di certi stati.

Definiamo adesso le funzioni radiali seguenti, coincidenti con le condizioni asintotiche della parte radiale delle soluzioni fattorizzate dell'equazione di Schroedinger per un potenziale centrale, ma definite per ogni r :

$$w_{pl}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \cos \left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l \right] \quad r \geq 0 \quad (1.406)$$

Queste risolvono la seguente equazione:

$$-w_{pl}''(r) = \frac{p^2}{\hbar^2} w_{pl}(r) \quad (1.407)$$

Moltiplichiamo questa per $w_{p'l}(r)$ e poi ne otteniamo un'altra scambiando $p \rightarrow p'$:

$$\begin{cases} -w_{p'l}(r)w_{pl}''(r) = \frac{p^2}{\hbar^2} w_{p'l}(r)w_{pl}(r) \\ -w_{pl}(r)w_{p'l}''(r) = \frac{p'^2}{\hbar^2} w_{pl}(r)w_{p'l}(r) \end{cases} \quad (1.408)$$

Sottraiamo la prima alla seconda ed integriamo in dr' tra 0 ed r :

$$\begin{aligned} \frac{(p'^2 - p^2)}{\hbar^2} w_{pl}(r)w_{p'l}(r) &= w_{p'l}(r)w_{pl}''(r) - w_{pl}(r)w_{p'l}''(r) \\ \frac{(p'^2 - p^2)}{\hbar^2} \int_0^r dr' w_{pl}(r')w_{p'l}(r') &= \int_0^r dr' [w_{p'l}(r')w_{pl}''(r') - w_{pl}(r')w_{p'l}''(r')] \end{aligned} \quad (1.409)$$

Possiamo fare l'integrale al membro destro immediatamente riscrivendo l'integrando come derivata totale:

$$w_{p'l}(r)w_{pl}''(r) - w_{pl}(r)w_{p'l}''(r) = \frac{d}{dr} [w_{p'l}(r)w_{pl}'(r) - w_{p'l}'(r)w_{pl}(r)] \quad (1.410)$$

da cui:

$$\frac{(p'^2 - p^2)}{\hbar^2} \int_0^r dr' w_{pl}(r')w_{p'l}(r') = [w_{p'l}(r')w_{pl}'(r') - w_{p'l}'(r')w_{pl}(r')]_0^r \quad (1.411)$$

Useremo questa relazione più avanti.

Scriviamo adesso le autofunzioni fattorizzata in coordinate sferiche per un potenziale centrale:

$$u_{plm}(r, \theta, \phi) = \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.412)$$

dove:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} y_{pl}''(r) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] y_{pl} &= \frac{p^2}{2m} y_{pl}(r) \\ -y_{pl}''(r) + \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] y_{pl} &= \frac{p^2}{\hbar^2} y_{pl}(r) \end{aligned} \quad (1.413)$$

Moltiplichiamo per $y_{p'l}(r)$ entrambi i membri e poi scambiamo i due indici come prima (sottintendendo la quantità in parentesi quadra):

$$\begin{cases} -y_{p'l}(r)y_{pl}''(r) + y_{p'l}(r)[]y_{pl}(r) = \frac{p^2}{\hbar^2} y_{p'l}(r)y_{pl}(r) \\ -y_{pl}(r)y_{p'l}''(r) + y_{pl}(r)[]y_{p'l}(r) = \frac{p'^2}{\hbar^2} y_{pl}(r)y_{p'l}(r) \end{cases} \quad (1.414)$$

Sottraendo membro a membro ed integrando notiamo che la quantità in parentesi quadra non dipende da p e dunque si cancella, riducendo alla situazione in assenza di potenziale e barriera centrifuga:

$$\frac{(p'^2 - p^2)}{\hbar^2} \int_0^r dr' y_{pl}(r')y_{p'l}(r') = [y_{p'l}(r')y_{pl}'(r') - y_{p'l}'(r')y_{pl}(r')]_0^r \quad (1.415)$$

Ricordiamo che le condizioni asintotiche le y_{pl} in $r \rightarrow 0$ sono regolari e in particolare vanno come r^{l+1} , con andamento indipendente da p . Pertanto il contributo per $r' = 0$ si annulla:

$$\frac{(p'^2 - p^2)}{\hbar^2} \int_0^r dr' y_{pl}(r')y_{p'l}(r') = y_{p'l}(r)y_{pl}'(r) - y_{p'l}'(r)y_{pl}(r) \quad (1.416)$$

Isolando l'integrale in questa e nell'equazione analoga per le w_{pl} , troviamo:

$$\begin{aligned} \int_0^r dr' y_{pl}(r') y_{p'l}(r') &= \frac{\hbar^2}{p'^2 - p^2} [y_{p'l}(r) y'_{pl}(r) - y'_{p'l}(r) y_{pl}(r)] \\ \int_0^r dr' w_{pl}(r') w_{p'l}(r') &= \frac{\hbar^2}{p'^2 - p^2} [w_{p'l}(r) w'_{pl}(r) - w'_{p'l}(r) w_{pl}(r)] \Big|_0^r \end{aligned} \quad (1.417)$$

Ricordiamo adesso che per $r \rightarrow \infty$ vale la condizione asintotica $y_{pl}(r) = w_{pl}(r)$. Dato un certo valore a grande allora possiamo scrivere:

$$\int_0^a dr' [y_{pl}(r') y_{p'l}(r') - w_{pl}(r') w_{p'l}(r')] = \frac{\hbar^2}{p'^2 - p^2} [w_{p'l}(r') w'_{pl}(r') - w'_{p'l}(r') w_{pl}(r')] \Big|_{r'=0} \quad (1.418)$$

Facciamo adesso il limite $p' \rightarrow p$, applicando la regole di L'Hopital, ma senza entrate nei dettagli dei calcoli:

$$\begin{aligned} \int_0^a dr' [y_{pl}^2(r') - w_{pl}^2(r')] &= \hbar^2 \lim_{p' \rightarrow p} \frac{[w_{p'l}(r') w'_{pl}(r') - w'_{p'l}(r') w_{pl}(r')] \Big|_{r'=0}}{p'^2 - p^2} \\ \int_0^a dr' [y_{pl}^2(r') - w_{pl}^2(r')] &= \hbar^2 \lim_{p' \rightarrow p} \frac{\frac{d}{dp'} [w_{p'l}(r') w'_{pl}(r') - w'_{p'l}(r') w_{pl}(r')] \Big|_{r'=0}}{2p'} \\ \int_0^a dr' [y_{pl}^2(r') - w_{pl}^2(r')] &= \frac{1}{\pi} \left[\frac{d\delta_l(p)}{dp} - \frac{1}{2p} (-1)^l \sin(2\delta_l(p)) \right] \end{aligned} \quad (1.419)$$

Questo è equivalente alla seguente identità (ricordiamo che le funzioni sono reali):

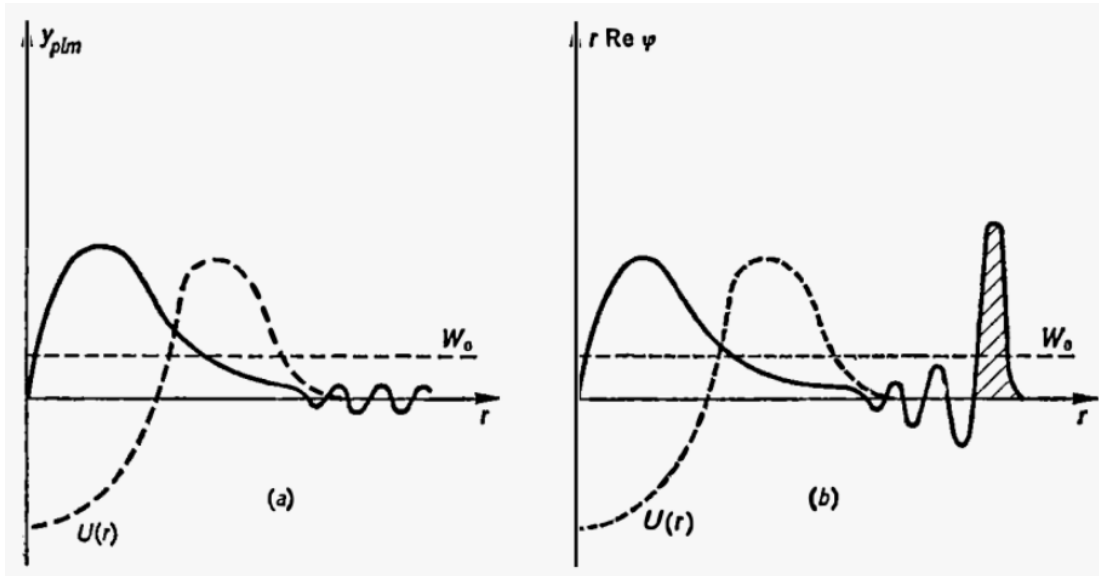
$$\frac{d\delta_l(p)}{dp} \approx \pi \int_0^a dr' [|y_{pl}(r')|^2 - |w_{pl}(r')|^2] + \frac{1}{2p} (-1)^l \sin(2\delta_l(p)) \quad (1.420)$$

Questo pone un limite inferiore alla derivata dello sfasamento:

$$\frac{d\delta_l(p)}{dp} \leq -\pi \int_0^a dr' |w_{pl}(r')|^2 - \frac{1}{2p} = -\left(\frac{1}{2p} + \frac{2a}{\hbar} \right) \quad (1.421)$$

Abbiamo dunque dimostrato che lo sfasamento non può decrescere troppo rapidamente, ossia possiamo solo richiedere che vi sia una rapida crescita, ma non una rapida decrescita. Questo significa che una risonanza sarà sempre in presenza di una crescita rapida dello sfasamento, come implicitamente avevamo assunto nell'esempio trattato nella formula di Breit-Wigner.

Notiamo a questo punto che l'unico termine che permette alla derivata di diventare molto grande è l'integrale di $|y_{pl}(r)|^2$. Pertanto abbiamo dimostrato che si ha una risonanza in W_0 se $|y_{p_0l}(r)|^2$ è molto più grande di $|w_{p_0l}(r)|^2$ per grandi valori di r (vedi [Cal] fig. VII.39).



Questa a sua volta è equivalente a richiedere l'ampiezza delle $u_{plm}(\vec{x})$ (nella regione dove il potenziale è significativo) è maggiore dell'ampiezza delle funzioni dove il potenziale è assente (dove assume la forma libera, dove la parte angolare è la stessa e quella radiale è data dalle w_{pl}).

Vedremo nella prossima lezione che questo è equivalente all'esistenza di stati metastabili, ossia stati di scattering che sono temporaneamente intrappolati nel potenziale.

1.12 Lezione 12

MASER ed NMR.

1.12.1 Spin in Campo Magnetico Costante

Consideriamo l'interazione di una particella non relativistica, che abbia carica e spin, con un campo magnetico classico (costante). Sappiamo che vi è un momento di dipolo magnetico associato pari a:

$$\vec{\mu} = g \frac{q}{2m} \vec{S} = \gamma \vec{S} \quad (1.422)$$

dove g è detto fattore giromagnetico.

Considerando il campo magnetico come un campo classico allora l'hamiltoniana si scrive come segue:

$$\hat{\mathcal{H}}_S = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B} \quad (1.423)$$

Ci poniamo nell'ipotesi $\vec{B} = B\hat{z}$, in modo che:

$$\hat{\mathcal{H}}_S = -\gamma B \hat{S}_z \quad (1.424)$$

da cui l'evolutore temporale:

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_S t} = e^{-\frac{i}{\hbar} (-\gamma B t) \hat{S}_z} \quad (1.425)$$

Chiamiamo $|\pm\rangle$ gli autostati dello spin e dunque dell'hamiltoniana:

$$\hat{S}_z |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \Rightarrow \hat{\mathcal{H}}_S |\pm\rangle = -\gamma B \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \quad (1.426)$$

Usiamo adesso la decomposizione di uno stato con spin in direzione \hat{n} lungo gli stati $|\pm\rangle$:

$$|+\rangle_n = |\hat{n}, +\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |-\rangle \quad (1.427)$$

dove la direzione \hat{n} è individuata nel sistema di angoli rispetto all'asse z dall'angolo polare θ e l'angolo azimutale ϕ .

Supponiamo che il sistema si trovi inizialmente nello stato diretto lungo un certo \hat{n} :

$$|\psi, 0\rangle = \cos \frac{\theta_0}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi_0} |-\rangle \quad (1.428)$$

Pertanto all'istante t :

$$\begin{aligned} |\psi, t\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_S t} |\psi, 0\rangle = \cos \frac{\theta_0}{2} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_S t} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi_0} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_S t} |-\rangle = \\ &= \cos \frac{\theta_0}{2} e^{i\gamma B t/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi_0} e^{-i\gamma B t/2} |-\rangle = \\ &= e^{i\gamma B t/2} \left[\cos \frac{\theta_0}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi_0} e^{-i\gamma B t} |-\rangle \right] = \\ &= e^{i\gamma B t/2} \left[\cos \frac{\theta_0}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi(t)} |-\rangle \right] \end{aligned} \quad (1.429)$$

dove:

$$\phi(t) = \phi_0 - \gamma B t \quad (1.430)$$

Abbiamo dunque trovato che lo stato di spin ruota attorno all'asse z con velocità angolare costante $\omega = -\gamma B$. Questo è analogo al caso classico, dove il momento angolare che definisce il momento magnetico di dipolo ruota con velocità angolare, cosiddetta frequenza di Larmor:

$$\omega_L = -\gamma B \quad (1.431)$$

oppure come relazione vettoriale:

$$\vec{\omega}_L = -\gamma \vec{B} \quad (1.432)$$

Pertanto la particella precede con velocità angolare $\vec{\omega}_L$ sia nel caso classico che quantistico.

Riscriviamo dunque l'hamiltoniana e l'operatore di evoluzione temporale come di conseguenza:

$$\hat{\mathcal{H}}_S = \vec{\omega}_L \cdot \vec{S} \quad U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega}_L \cdot \vec{S} t} \quad (1.433)$$

1.12.2 Sistema a Due Livelli

La più generica hamiltoniana di un sistema a due livelli (indipendente dal tempo), in una base $|1\rangle, |2\rangle$, è una matrice hermitiana 2×2 . Può dunque essere scritta come combinazione lineare delle matrici di Pauli:

$$\hat{\mathcal{H}} = g_0 \mathbb{1} + g_1 \sigma_1 + g_2 \sigma_2 + g_3 \sigma_3 = g_0 \mathbb{1} + \vec{g} \cdot \vec{\sigma} = g_0 \mathbb{1} + g \hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma} \quad (1.434)$$

con $g = \sqrt{g_1^2 + g_2^2 + g_3^2}$. Siccome $\hat{\mathcal{H}}$ è hermitiana si trova infatti che g_0, g_i sono tutti reali.

In analogia allo spin, in quanto $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ per $|1\rangle = |+\rangle, |2\rangle = |-\rangle$, chiamiamo $|\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle$ gli autostati della matrice $\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma}$ (che coincidono con quelli di spin diretti lungo $\hat{\mathbf{n}}$):

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma} |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle = \pm |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle \quad (1.435)$$

Infatti essendo le matrici di Pauli idem-potenti $\sigma_i^2 = \mathbb{1}$ allora gli autovalori sono ± 1 .

Troviamo immediatamente che questi sono anche gli autostati di $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\hat{\mathcal{H}} |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle = (g_0 \mathbb{1} + g \hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma}) |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle = (g_0 \pm g) |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle \quad (1.436)$$

e dunque $|\hat{\mathbf{n}}, +\rangle$ è lo stato eccitato e $|\hat{\mathbf{n}}, -\rangle$ è quello fondamentale, con $\Delta E = 2g$.

In particolare tramite la relazione $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ possiamo sempre associare uno spin fittizio \vec{S} tale che:

$$\hat{\mathcal{H}} = g_0 \mathbb{1} + \frac{2}{\hbar} g \hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{S} \quad (1.437)$$

da cui troviamo la velocità angolare di precessione corrispondente al sistema a due livelli dato:

$$\vec{\omega}_L = \frac{2}{\hbar} \vec{g} \quad (1.438)$$

1.12.3 Molecola di Ammoniaca

Un tipico esempio di sistema a due livelli è l'ammoniaca NH_3 . Il potenziale in cui è immerso il nucleo di azoto è infatti a doppia buca simmetrica rispetto al centro della base della piramide. Pertanto ci aspettiamo uno stato fondamentale pari e uno dispari. A basse energie questi sono gli unici stati rilevanti e dunque il sistema sarà a due stati. Questi saranno poi dati dalle combinazioni lineari degli stati fondamentali delle singole buche armoniche considerate non interagenti, che sono indicati con $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$.

Chiamiamo E_0 l'energia di un singolo stato fondamentale di una buca e Δ l'energia di interazione allora possiamo supporre (che troveremo essere esatto):

$$\hat{\mathcal{H}} = E_0 \mathbb{1} - \Delta \sigma_1 = \begin{pmatrix} E_0 & -\Delta \\ -\Delta & E_0 \end{pmatrix} \quad (1.439)$$

con $|1\rangle = |\uparrow\rangle, |2\rangle = |\downarrow\rangle$. Troviamo dunque:

$$\vec{g} = (-\Delta, 0, 0) \quad (1.440)$$

e quindi:

$$E = E_0 \pm \Delta \Rightarrow |E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \quad |G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad (1.441)$$

con "G" ground state ed "E" stato eccitato.

Ci chiediamo adesso come si evolve lo stato del sistema se inizialmente sta in uno dei due stati fondamentali della buca:

$$\begin{aligned} |\psi, 0\rangle &= |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|G\rangle + |E\rangle) \\ |\psi, t\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 - \Delta)t} |G\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + \Delta)t} |E\rangle \right] = \\ &= \frac{1}{2} e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \left[e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) + e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \right] = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \left[\cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) |\downarrow\rangle \right] \end{aligned} \quad (1.442)$$

Troviamo dunque la frequenza di oscillazione, di cui proponiamo la stima sperimentale:

$$\omega = \frac{2\Delta}{\hbar} = 23.7 \text{GHz} \quad (1.443)$$

1.12.4 MASER

Consideriamo adesso cosa succede quando consideriamo il comportamento di questo sistema in un campo elettrico. Notiamo che ognuno dei due stati $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ ha un momento di dipolo elettrico associato, tale che l'energia da considerare vale:

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{E} \quad (1.444)$$

Pertanto questa energia di interazione distingue lo stato $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$:

$$\hat{\mathcal{H}} = E_0 \mathbb{1} - \Delta \sigma_1 + \mu \mathcal{E} \quad (1.445)$$

da cui:

$$E_{G,E} = E_0 \pm \sqrt{\mu^2 \mathcal{E}^2 + \Delta^2} \quad (1.446)$$

Se il campo è debole ($\mu \mathcal{E} \ll \Delta$) allora vale l'approssimazione:

$$E_{G,E} = E_0 \pm \left(\Delta + \frac{1}{2} \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2}{\Delta} \right) \quad (1.447)$$

Ci chiediamo adesso come forzare il passaggio dello stato eccitato a quello fondamentale attraverso l'applicazione di un opportuno campo elettrico.

Prima di tutto vogliamo selezionare solo le molecole nello stato eccitato. Immaginiamo di considerare un gas di ammoniaca immerso in un campo elettrico con gradiente non nullo. Più precisamente immaginiamo di lanciare molecole di ammoniaca attraverso una fessura perpendicolarmente ad un campo elettrico, che ha un certo valore in una regione e un valore maggiore in un'altra.

Notiamo adesso che E_G è decrescente in \mathcal{E} mentre E_E è crescente in \mathcal{E} . Questo significa che le molecole nello stato eccitato vanno in regioni dove il campo è più piccolo mentre le molecole nello stato fondamentale vanno nelle regioni dove il campo è più grande, in modo da minimizzare l'energia. In questo modo riusciamo a fare una selezione.

Per fare la transizione $G \rightarrow E$ dobbiamo usare un campo elettrico opportuno. Sicuramente senza il campo elettrico, essendo $|G\rangle$ un autostato dell'hamiltoniana, allora il sistema rimarrebbe in questo stato. Inseriamo dunque questi stati in una cavità risonante e facciamo uso del fenomeno dell'emissione stimolata di radiazione applicando un campo elettrico variante nel tempo $\mathcal{E}(t)$. Il problema è comunque semplificato in quanto stiamo trattando un sistema a due livelli.

Passando alla base $|E\rangle = |1\rangle, |G\rangle = |2\rangle$ possiamo scrivere l'hamiltoniana come segue:

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} E_0 + \Delta & \mu \mathcal{E} \\ \mu \mathcal{E} & E_0 - \Delta \end{pmatrix} \quad (1.448)$$

Cerchiamo adesso l'evoluzione temporale dei coefficienti $C_{E,G}(t)$ di uno stato generico in questa base per la data hamiltoniana. Siccome E_0 non cambia la natura del sistema (appare come una fase nell'evoluzione temporale) allora lo poniamo a 0 per semplicità:

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \Delta & \mu \mathcal{E} \\ \mu \mathcal{E} & -\Delta \end{pmatrix} \quad (1.449)$$

Notiamo adesso che nel caso $\mathcal{E} = 0$ i coefficienti evolvono come una fase, data la condizione iniziale $C_{E,G} = \beta_{E,G}$:

$$C_{E,G}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t} \beta_{E,G} \quad (1.450)$$

Questo suggerisce un'ansatz per $\mathcal{E} \neq 0$, che semplifica il conto e infatti disaccoppia i due stati (corrisponde ad una rotazione degli stati):

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} C_E(t) \\ C_G(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t} \beta_E(t) \\ e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t} \beta_G(t) \end{pmatrix} \quad (1.451)$$

da cui la nuova equazione di Schroedinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \beta_E(t) \\ \beta_G(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega_0 t} \mu \mathcal{E} \\ e^{-i\omega_0 t} \mu \mathcal{E} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_E(t) \\ \beta_G(t) \end{pmatrix} \quad (1.452)$$

con $\omega_0 = 2\Delta/\hbar$.

Consideriamo adesso il campo elettrico di un'onda piana (con condizione iniziale $\mathcal{E}(0) = 2\mathcal{E}_0$):

$$\mathcal{E}(t) = 2\mathcal{E}_0 \cos(\omega_0 t) = \mathcal{E}_0 (e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}) \quad (1.453)$$

da cui:

$$\begin{cases} i\dot{\beta}_E(t) = \frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} (1 + e^{2i\omega_0 t}) \beta_G(t) \\ i\dot{\beta}_G(t) = \frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} (1 + e^{-2i\omega_0 t}) \beta_E(t) \end{cases} \quad (1.454)$$

Quest'equazione può essere risolta esattamente ma per semplicità facciamo l'ipotesi $\mu\mathcal{E}_0 \ll \Delta \propto \omega_0$. Pertanto gli esponenziali complessi in parentesi variano molto velocemente rispetto a $\beta_{E,G}$ e dunque è come se agisce solo la loro media su un periodo, che è nulla, ossia li possiamo trascurare:

$$\begin{cases} \dot{\beta}_E = -i \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar} \beta_E \\ \dot{\beta}_G = -i \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar} \beta_G \end{cases} \quad (1.455)$$

Facendo una derivata alle due equazioni disaccoppiamo il sistema:

$$\begin{cases} \ddot{\beta}_E = -\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)^2 \beta_E \\ \ddot{\beta}_G = -\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)^2 \beta_G \end{cases} \quad (1.456)$$

da cui, con condizione iniziale $\beta_E(0) = 1, \beta_G(0) = 0$ (il caso a cui siamo interessato):

$$\beta_E(t) = \cos\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right) \quad \beta_G(t) = \sin\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right) \quad (1.457)$$

Notiamo dunque che la probabilità che lo stato $|E\rangle$ finisca nello stato $|G\rangle$ oscilla armonicamente:

$$P_G(t) = |C_G(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right) \quad (1.458)$$

Pertanto agli istanti:

$$T_n \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar} = n \frac{\pi}{2} \Rightarrow T_n = n \frac{\hbar}{\mu\mathcal{E}_0} \frac{\pi}{2} \quad (1.459)$$

la probabilità di transizione è 1. Amplificazione?

1.12.5 Risonanza Magnetica Nucleare

Spin in Campo Magnetico Ruotante

Siamo interessati adesso all'interazione tra una particella a spin 1/2 e un campo magnetico dipendente dal tempo del seguente tipo:

$$\vec{\mathbf{B}}(t) = B_0 \hat{\mathbf{z}} + B_1 (\hat{\mathbf{x}} \cos(\omega t) - \hat{\mathbf{y}} \sin(\omega t)) \quad (1.460)$$

ossia che ha una componente fissa lungo z e ha una componente rotante.

L'hamiltoniana è data dunque da:

$$\hat{\mathcal{H}}_S(t) = -\gamma \vec{\mathbf{B}}(t) \cdot \vec{\mathbf{S}} = -\gamma [B_0 \hat{S}_z + B_1 (\hat{S}_x \cos(\omega t) - \hat{S}_y \sin(\omega t))] \quad (1.461)$$

Notiamo che $[\hat{\mathcal{H}}_S(t_1), \hat{\mathcal{H}}_S(t_2)]$ e quindi non ammette stati stazionari e dunque non può essere risolta banalmente.

Possiamo cercare di eliminare la dipendenza dal tempo nell'hamiltoniana cambiando sistema di riferimento. In particolare possiamo pensare di porci nel sistema di riferimento che ruota attorno a $\hat{\mathbf{z}}$ con frequenza ω .

Vediamo cosa succede in questo sistema di riferimento quando $\vec{\mathbf{B}}(t) = 0$. Nel sistema stazionario lo spin è statico e il sistema non evolve, tuttavia nel sistema ruotante lo spin in generale ruota a meno che non sia allineato con l'asse di rotazione. Questo significa che l'hamiltoniana in questo sistema è comunque non nulla $\hat{\mathcal{H}}_R \neq 0$. In particolare sapendo che lo spin deve ruotare rispetto a $\hat{\mathbf{z}}$, noto il risultato nella prima sezione, possiamo supporre il seguente operatore temporale, da cui l'hamiltoniana ruotante in assenza di campo magnetico:

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \omega t \hat{S}_z} \Rightarrow \hat{\mathcal{H}}_R = \omega \hat{S}_z \quad (1.462)$$

In presenza di campo magnetico ci possiamo comunque aspettare che:

$$|\psi_R, t\rangle = U(t) |\psi, t\rangle \iff |\psi, t\rangle = U^\dagger(t) |\psi_R, t\rangle \Rightarrow |\psi_R, 0\rangle = |\psi, 0\rangle \quad (1.463)$$

con $U(t)$ operatore temporale nel sistema ruotante in assenza di campo. Derivando troviamo l'equazione di Schroedinger nel sistema ruotante:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_R, t\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [U(t) |\psi, t\rangle] = i\hbar (\partial_t U(t)) |\psi, t\rangle + i\hbar U \partial_t |\psi, t\rangle = \\ &= i\hbar (\partial_t U) U^\dagger |\psi_R\rangle + U \hat{\mathcal{H}}_S |\psi\rangle = \\ &= i\hbar (\partial_t U) U^\dagger |\psi_R\rangle + U \hat{\mathcal{H}}_S U^\dagger |\psi_R\rangle \end{aligned} \quad (1.464)$$

da cui:

$$i\hbar\partial_t |\psi_R, t\rangle = \left(U\hat{\mathcal{H}}_S U^\dagger + i\hbar(\partial_t U)U^\dagger \right) |\psi_R, t\rangle \quad (1.465)$$

e infine l'hamiltoniana ruotante:

$$\hat{\mathcal{H}}_R = U\hat{\mathcal{H}}_S U^\dagger + i\hbar(\partial_t U)U^\dagger \quad (1.466)$$

Esplicitiamo $U(t)$ nella derivata:

$$\hat{\mathcal{H}}_R(t) = U(t)\hat{\mathcal{H}}_S U^\dagger(t) + \omega\hat{S}_z \quad (1.467)$$

Possiamo ulteriormente esplicitare:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_R &= \omega\hat{S}_z + e^{-\frac{i}{\hbar}\omega\hat{S}_z t} \left[-\gamma(B_0\hat{S}_z + B_1(\hat{S}_x \cos(\omega t) - \hat{S}_y \sin(\omega t))) \right] e^{\frac{i}{\hbar}\omega\hat{S}_z t} = \\ &= (-\gamma B_0 + \omega)\hat{S}_z - \gamma B_1 e^{-\frac{i}{\hbar}\omega\hat{S}_z t} (\hat{S}_x \cos(\omega t) - \hat{S}_y \sin(\omega t)) e^{\frac{i}{\hbar}\omega\hat{S}_z t} = \\ &= (-\gamma B_0 + \omega)\hat{S}_z - \gamma B_1 M(t) \end{aligned} \quad (1.468)$$

Vediamo adesso come varia nel tempo la quantità $M(t)$, saltando i conti:

$$\partial_t M(t) = \dots = 0 \quad (1.469)$$

Questo significa che non varia effettivamente nel tempo e dunque possiamo porre $M(t) = M(0)$, dove $M(0) = \hat{S}_x$, che semplifica notevolmente il problema, riducendolo ad uno indipendente dal tempo:

$$\hat{\mathcal{H}}_R = (-\gamma B_0 - \omega)\hat{S}_z - \gamma B_1 \hat{S}_x = -\gamma \left[B_0 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0} \right) \hat{S}_z + B_1 \hat{S}_x \right] \quad (1.470)$$

Pertanto troviamo che l'hamiltoniana coincide con quella di uno spin che interagisce con un campo magnetico ruotante efficace:

$$\vec{\mathbf{B}}_R = B_1 \hat{\mathbf{x}} + B_0 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0} \right) \hat{\mathbf{z}} \Rightarrow \hat{\mathcal{H}}_R = -\gamma \vec{\mathbf{B}}_R \cdot \vec{\mathbf{S}} \quad (1.471)$$

Torniamo ora al sistema iniziale:

$$|\psi, t\rangle = U^\dagger |\psi_R, t\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\omega t \hat{S}_z} |\psi_R, t\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\omega t \hat{S}_z} e^{\frac{i}{\hbar}\gamma \vec{\mathbf{B}}_R \cdot \vec{\mathbf{S}}} |\psi, 0\rangle \quad (1.472)$$

e dunque l'evolutore effettivo sarà:

$$U(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\omega t \hat{S}_z} e^{\frac{i}{\hbar}\gamma \vec{\mathbf{B}}_R \cdot \vec{\mathbf{S}}} \quad (1.473)$$

Ci poniamo adesso nell'ipotesi $\omega = \omega_0$, in modo che $\vec{\mathbf{B}}_R = B_1 \hat{\mathbf{x}}$. Consideriamo poi come stato iniziale di spin quello diretto lungo z :

$$|\psi, 0\rangle = |\hat{\mathbf{z}}, +\rangle \quad (1.474)$$

Pertanto all'istante t :

$$|\psi, t\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\omega_0 t \hat{S}_z} e^{\frac{i}{\hbar}\omega_1 \hat{S}_x} |\hat{\mathbf{z}}, +\rangle \quad (1.475)$$

Questo significa che il primo operatore ad agire compie una rotazione attorno all'asse x con frequenza $\omega_1 = \gamma B_1$, mentre il secondo compie una rotazione attorno all'asse z con frequenza $\omega_0 = \gamma B_0$. Se $B_1 \ll B_0$ allora $\omega_1 \ll \omega_0$. Pertanto la rotazione attorno all'asse z è molto più veloce rispetto a quella attorno all'asse x . Questo permette la formazione di una spirale con asse $\hat{\mathbf{z}}$ che è percorsa dall'alto verso il basso tra gli stati $|\hat{\mathbf{z}}, +\rangle$ e $|\hat{\mathbf{z}}, -\rangle$. In

1.13 Lezione 13

Ricordiamo che abbiamo visto come la formazione di risonanze è legata ad una rapida variazione dello sfasamento. In particolare tramite la cotangente in approssimazione lineare abbiamo visto la formula di Breit-Wigner per $\sigma_l(p)$ per un dato l e valori intorno a certi p . Abbiamo poi dimostrato che la rapida variazione è possibile solo con crescita di δ_l ma non decrescita, che è limitata dal basso.

1.13.1 Stati Metastabili

Vediamo adesso come la formazione di risonanze è legata all'esistenza di stati metastabili, ossia che trascorrono un lungo tempo intrappolati nel potenziale.

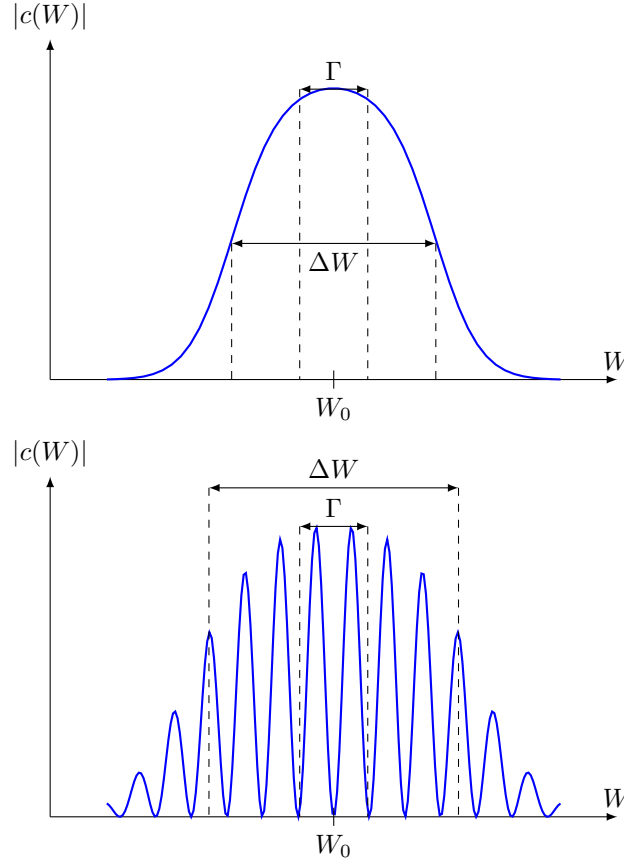
Chiaramente dobbiamo tornare ad un formalismo dipendente dal tempo e in particolare l'evoluzione dello stato nel tempo per tempi finiti, ossia non nel limite asintotico $t \rightarrow \pm\infty$. Ci limiteremo comunque a studiare la sua evoluzione per grandi valori di r , dove conosciamo l'andamento asintotico delle autofunzioni.

Consideriamo un sistema dove per un certo l esiste una risonanza per $W = W_0$ di larghezza Γ . Possiamo costruire uno stato dal pacchetto delle autofunzioni improprie in coordinate sferiche $u_{plm}(\vec{x})$, dove consideriamo l, m fissati per comodità:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int_0^\infty dp c(p) e^{i\delta_l(p)} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} u_{plm}(\vec{x}) \quad (1.476)$$

dove possiamo sempre separare $c(p)$ dallo sfasamento (che è utile per i calcoli che dobbiamo fare) in quanto non influenza la generalità del pacchetto e la sua integrabilità.

Supponiamo $c(p)$ sia centrata in $p_0 = \sqrt{2mW_0}$ con $\Delta W \gg \Gamma$, ossia che $c(p)$ sia praticamente costante in $p_0 - \frac{\Delta p}{2} \leq p \leq p_0 + \frac{\Delta p}{2}$, in modo da semplificare l'analisi. In particolare escludiamo ad esempi casi oscillanti. In figura troviamo un caso analogo al nostro e un caso oscillante che stiamo invece escludendo.



Questo implica che non osserveremo la risonanza nella sezione d'urto differenziale, ma ha ancora senso parlare di risonanza nel senso più generale di rapida variazione (crescita) di un dato sfasamento, con gli altri sfasamenti trascurabili (vicini ad un multiplo di π) in corrispondenza di questa.

Ricordiamo l'andamento asintotico delle autofunzioni:

$$\begin{aligned} u_{plm}(\vec{x}) &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \frac{1}{r} \cos \left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1) \frac{\pi}{2} + \delta_l(p) \right] Y_{lm}(\theta, \phi) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \frac{1}{r} \left[e^{i \left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1) \frac{\pi}{2} + \delta_l(p) \right]} + e^{-i \left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1) \frac{\pi}{2} + \delta_l(p) \right]} \right] Y_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (1.477)$$

da cui l'andamento per i pacchetti:

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{x}, t) &\stackrel{r \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{i\delta_l(p)} \left[e^{i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right]} + e^{-i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right]} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{i\delta_l(p)} \left[e^{i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right]} + e^{-i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right]} \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \left[e^{i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + 2\delta_l(p)\right]} + e^{-i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right]} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \left[e^{i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right]} (e^{2i\delta_l(p)} - 1) + e^{i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right]} + e^{-i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right]} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \left[2ie^{i\delta_l(p)} \sin \delta_l(p) e^{i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right]} + e^{i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right]} + e^{-i\left[\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right]} \right] = \\
&= \psi_{in}(\vec{x}, t) + \psi_{scatt}(\vec{x}, t)
\end{aligned} \tag{1.478}$$

Ritroviamo dunque la decomposizione in onda incidente e di scattering, dove, usando la formula di Breit-Wigner (in termini degli sfasamenti invece che delle sezioni d'urto) per il valore di l considerato:

$$\begin{aligned}
\psi_{in}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \left[e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} + e^{-i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} \right] = \frac{1}{r} (\psi_{in}^{(-)}(r, t) + \psi_{in}^{(+)}(r, t)) Y_{lm}(\theta, \phi) \\
\psi_{scatt}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \left[2ie^{i\delta_l(p)} \sin \delta_l(p) e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \left[\frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} e^{i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} \right] = \\
&= \frac{(-i)^{l+1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \left[\frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} e^{i\frac{pr}{\hbar}} \right]
\end{aligned} \tag{1.479}$$

Notiamo adesso che per grandi valori di r il termine $e^{ipr/\hbar}$ oscilla rapidamente allora possiamo usare il metodo della fase stazionaria al variare di p nel primo termine, ricordando che $c(p)$ è centrato in p_0 . In particolare l'integrale viene diviso in due (attenzione ai segni), in modo che i valori di r in cui la fase stazionaria sono:

$$\begin{cases} r = \frac{p_0}{m} t & \psi_{in}^{(-)} \\ r = -\frac{p_0}{m} t & \psi_{in}^{(+)} \end{cases} \tag{1.480}$$

Pertanto se $t < 0$ allora $\phi_{in}^{(-)}$ è trascurabile, e l'onda ψ_{in} è sostanzialmente non nulla solo per $r \approx -\frac{p_0 t}{m}$:

$$\psi_{in}(\vec{x}, t) \approx \frac{\phi_{in}^{(+)}}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{1.481}$$

Per tempi negativi l'onda corrispondente ad un l che ammette risonanza centrata nello stesso momento del pacchetto incidente è dunque un'onda sferica che viaggia verso il bersaglio. Possiamo dunque stimare la durata temporale del pacchetto (e l'estensione spaziale corrispondente) a partire dalla relazione di indeterminazione tempo-energia:

$$\Delta t = \frac{\hbar}{\Delta W} \quad \Delta x = \frac{p_0}{m} \Delta t \tag{1.482}$$

Per tempi positivi invece l'onda sferica è uscente dal bersaglio, ma ammette sempre stessa durata ed estensione spaziale.

Siccome $\Delta W \gg \Gamma$ allora la durata del pacchetto libero è molto breve e dunque non è quello di interesse.

Vediamo adesso l'evoluzione temporale del pacchetto dovuto alla parte di scattering.

$$\psi_{scat}(\vec{x}, t) = \frac{(-i)^{l+1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \left[\frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} e^{i\frac{pr}{\hbar}} \right] \quad r \rightarrow \infty \tag{1.483}$$

Ricordiamo adesso l'ipotesi per cui $c(p)$ varia lentamente intorno a p_0 e dunque grazie alla presenza della Lorentziana possiamo porre $c(p) \approx c(p_0)$ (che diventa dunque solo un fattore di normalizzazione).

Facciamo poi il cambiamento di variabile da momento ad energia:

$$W = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p dp = m dW \Rightarrow dp = \frac{m}{p} dW \approx \frac{m}{p_0} dW \tag{1.484}$$

e riscriviamo:

$$e^{\frac{i}{\hbar}pr} = e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_0 + \frac{m}{p_0}(W - W_0)\right)r} \quad e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}W_0t - \frac{i}{\hbar}(W - W_0)t} \quad (1.485)$$

Otteniamo dunque:

$$\begin{aligned} \psi_{scat}(\vec{x}, t) &= \frac{(-i)^{l+1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} \left[\frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} e^{i\frac{pr}{\hbar}} \right] \approx \\ &\approx \frac{(-i)^{l+1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \frac{m}{p_0} c(p_0) \int_0^\infty dW e^{-\frac{i}{\hbar}W_0t - \frac{i}{\hbar}(W - W_0)t} \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_0 + \frac{m}{p_0}(W - W_0)\right)r} = \\ &= \frac{(-i)^{l+1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} \frac{m}{p_0} c(p_0) e^{\frac{i}{\hbar}(p_0r - W_0t)} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dW \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} e^{-\frac{i}{\hbar}(W - W_0)\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)} \end{aligned} \quad (1.486)$$

Notiamo dunque che per $r \rightarrow \infty$ abbiamo trovato che il pacchetto di scattering si scrive come il prodotto di un termine contenente $c(p_0)$ e un termine J indipendente da questo, ossia dalla precisa forma del pacchetto. Siccome la lorentziana è stretta per una risonanza $\Gamma \ll W_0$ allora possiamo estendere l'integrale a $W \rightarrow -\infty$ con un piccolo errore, che semplifica l'integrale:

$$\begin{aligned} J &= \int_0^\infty dW \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} e^{-\frac{i}{\hbar}(W - W_0)\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)} \approx \\ &\approx \int_0^\infty dW \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} e^{-\frac{i}{\hbar}(W - W_0)\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)} \end{aligned} \quad (1.487)$$

Possiamo calcolare questo usando il teorema dei residui.

Notiamo che l'integrando possiede un polo in $W = W_0 - i\frac{\Gamma}{2}$, che giace nel quarto quadrante. Dobbiamo però distinguere due casi a seconda del valore di t, r :

$$t - \frac{m}{p_0}r < 0 \quad t - \frac{m}{p_0}r > 0 \quad (1.488)$$

Notiamo che la condizione $t > \frac{m}{p_0}r$, siccome r è grande ($r \rightarrow \infty$) equivale a studiare la particella per grandi tempi ($t \rightarrow +\infty$). La condizione $t < \frac{m}{p_0}r$ equivale invece a studiare la particella per tempi finiti.

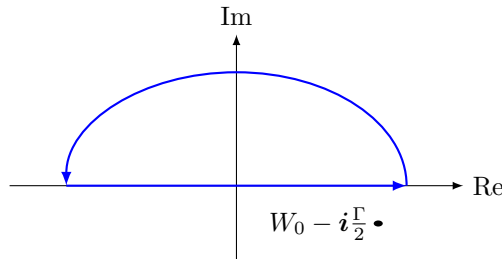
Nel primo caso, per W immaginario "positivo" l'argomento dell'esponenziale è negativo e dunque per W con parte immaginaria positiva arbitrariamente grande l'esponenziale va a 0:

$$\begin{cases} W = i\mathcal{W} & \mathcal{W} > 0 \\ t - \frac{m}{p_0}r = -\tau & \tau > 0 \end{cases} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(W - W_0)\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)\right) = e^{\frac{i}{\hbar}W\tau} \exp\left(\frac{i}{\hbar}W a\right) = e^{\frac{i}{\hbar}W\tau} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\mathcal{W}a\right) \rightarrow 0 \quad \mathcal{W} \rightarrow +\infty \quad (1.489)$$

Pertanto possiamo completare l'integrale sulla retta reale aggiungendo un semiarco di raggio R nel semipiano superiore del piano complesso, che ha contribuito nullo per $R \rightarrow \infty$. Siccome il circuito ottenuto è chiuso allora possiamo applicare il Teorema dei Residui, e siccome l'integrando non ha poli all'interno del circuito allora l'integrale è nullo:

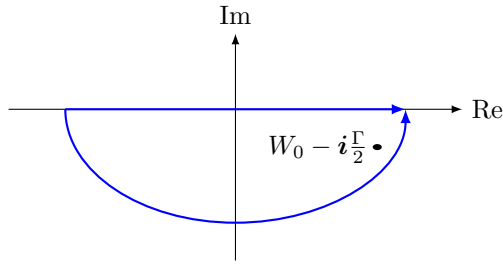
$$J = 0 \quad t - \frac{m}{p_0}r < 0 \Rightarrow \psi_{scat}(\vec{x}, t) = 0 \quad t < \frac{m}{p_0}r \quad (1.490)$$

In particolare questo implica che l'onda di scattering è nulla per tempi negativi (essendo $r > 0$), come già ci aspettavamo.



Nell'altro caso possiamo scegliere l'arco nel semipiano opposto, ma vi è un polo in $W = W_0 - i\frac{\Gamma}{2}$, così che J è in generale non nullo:

$$J = (-2\pi i)(-i\Gamma) e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar}\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)} = -2\pi\Gamma e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar}\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)} \quad (1.491)$$



Troviamo infine:

$$\psi_{scat}(\vec{x}, t) = \begin{cases} 0 & t < \frac{m}{p_0} r \\ -(-i)^{l+1} \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}} \frac{m}{p_0} \Gamma c(p_0) \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)}}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r\right)} & t > \frac{m}{p_0} r \end{cases} \quad (1.492)$$

Ricordando che:

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_{in}(\vec{x}, t) + \psi_{scat}(\vec{x}, t) \quad (1.493)$$

allora:

1. per $t < 0$ (per ogni r grande) la funzione è un'onda sferica entrante,
2. per $0 < t < \frac{m}{p_0} r$ la funzione è un'onda sferica uscente;
3. per $t > \frac{m}{p_0} r$ la funzione è una sovrapposizione di un'onda sferica uscente e dell'onda ψ_{scat} della forma trovata.

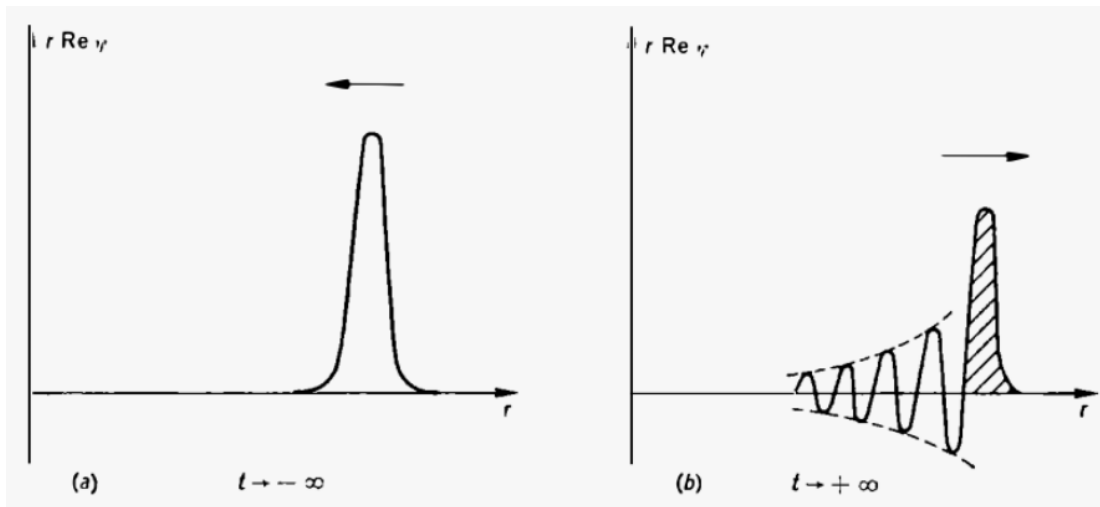
Notiamo adesso che per tempi finiti ψ_{scat} (e dunque ψ) è uno stato legato. Inoltre questo ha una durata (tempo caratteristico di decadimento), per un dato r , pari a:

$$\widetilde{\Delta t} = \frac{2\hbar}{\Gamma} \quad (1.494)$$

Ma per l'ipotesi iniziale $\Gamma \ll \Delta W$ allora:

$$\widetilde{\Delta t} \gg \frac{\hbar}{\Delta W} = \Delta t \quad (1.495)$$

Pertanto la durata del pacchetto di scattering ($\widetilde{\Delta t}$) è molto maggiore di quello incidente (Δt). Fisicamente la situazione può essere riassunta come segue (vedi [Cal, p.457], dove nella figura b notiamo una coda esponenziale di lunga durata più un'onda sferica di breve durata per grandi t (in quanto siamo a grandi r)).

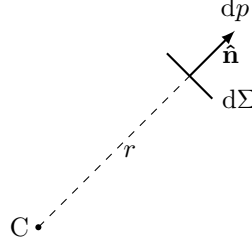


Abbiamo un'onda sferica incidente sul bersaglio. Quando questa entra nel campo di forze allora è possibile che queste attraversi indisturbata il campo (ossia onda sferica uscente) oppure vi è una probabilità $\propto |c(p_0)|^2$ che la particella rimanga intrappolata nel potenziale per un tempo dell'ordine di \hbar/Γ .

In questa analisi pertanto Γ rappresenta la vita media dello stato della particella, e non la larghezza della risonanza.

1.13.2 Legge di Decadimento degli stati Metastabili

Facciamo una figura. Sia C il centro di forze. Poniamoci ad una distanza r . Consideriamo un elemento di superficie $d\Sigma$ nella posizione e perpendicolare al raggio. Consideriamo un intervallo di tempo dt e calcoliamo la probabilità dP che la particella attraversi $d\Sigma$ nel tempo dt . Prendiamo un tempo $t \geq \frac{m}{p_0}r + \Delta t$ (con $\Delta t = \frac{\hbar}{\Delta W}$ durata del pacchetto incidente).



Pertanto per questi istanti di tempo il pacchetto incidente è già trascurabile e rimane solo la coda esponenziale:

$$\psi(\vec{x}, t) \approx \psi_{scat}(\vec{x}, t) \quad t \geq \frac{m}{p_0}r + \Delta t \quad (1.496)$$

Ricordiamo adesso la definizione del flusso di probabilità (densità di corrente di probabilità):

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{4\pi i m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (1.497)$$

da cui la probabilità di trasmissione attraverso $d\Sigma$ nel tempo dt :

$$dP = dt d\Sigma \hat{n} \cdot \vec{S} \quad (1.498)$$

Siccome $\hat{n} = \hat{r}$ allora:

$$dP = dt d\Sigma S_r = \frac{\hbar}{4\pi i m} dt d\Sigma (\psi^* \partial_r \psi - \psi \partial_r \psi^*) \approx \frac{\hbar}{4\pi i m} dt d\Sigma (\psi_{scat}^* \partial_r \psi_{scat} - \psi_{scat} \partial_r \psi_{scat}^*) \quad (1.499)$$

Notiamo adesso che ψ_{scat} dipende da r tramite il fattore di fase (con $1/r$) e il fattore esponenziale, mentre la parte rimanente A esce fuori dalla derivata e dunque ne facciamo il modulo quadro, che possiamo mettere in evidenza fuori dalla parentesi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{A} \partial_r \psi_{scat} &= \partial_r \left(\frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)} e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right)} \right) = \\ &= -\frac{1}{r^2} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)} e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right)} + \frac{i}{\hbar} p_0 \frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)} e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right)} + \frac{\Gamma}{2\hbar} \frac{m}{p_0} \frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)} e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right)} = \\ &= \left(-\frac{1}{r} + \frac{i}{\hbar} p_0 + \frac{\Gamma}{2\hbar} \frac{m}{p_0} \right) \frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)} e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right)} \\ \frac{1}{|A|^2} \psi_{scat}^* \partial_r \psi_{scat} &= \left(-\frac{1}{r} + \frac{i}{\hbar} p_0 + \frac{\Gamma}{2\hbar} \frac{m}{p_0} \right) \frac{1}{r^2} e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right)} \end{aligned} \quad (1.500)$$

Notiamo che in realtà l'unica parte rilevante è la derivata che si fa rispetto alla fase, in quanto per la presenza del fattore meno i fattori reali si cancellano. Infatti se $\psi = \phi e^{i a r}$ con ϕ reale:

$$\begin{aligned} \psi^* \partial \psi - \psi \partial \psi^* &= \phi e^{-i a r} (i a \phi e^{i a r} + e^{i a r} \partial \phi) - \phi e^{i a r} (-i a \phi e^{-i a r} + e^{-i a r} \partial \phi) = \\ &= i a \phi^2 + \phi \partial \phi + i a \phi^2 - \phi \partial \phi = 2i a \phi^2 \end{aligned} \quad (1.501)$$

da cui:

$$\frac{1}{|A|^2} (\psi_{scat}^* \partial_r \psi_{scat} - \psi_{scat} \partial_r \psi_{scat}^*) = \frac{2i}{\hbar} p_0 \frac{1}{r^2} e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right)} \quad (1.502)$$

Troviamo dunque:

$$\begin{aligned}
dP &= dt d\Sigma \frac{\hbar}{4\pi i m} (\psi_{scat}^* \partial_r \psi_{scat} - \psi_{scat} \partial_r \psi_{scat}^*) = \\
&= dt d\Sigma \frac{\hbar}{4\pi i m} \left| -(-i)^{l+1} \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}} \frac{m}{p_0} \Gamma c(p_0) Y_{lm}(\theta, \phi) \right|^2 \frac{2i}{\hbar} p_0 \frac{1}{r^2} e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r\right)} = \\
&= dt \frac{d\Sigma}{r^2} \frac{m}{p_0 \hbar} \Gamma^2 |c(p_0)|^2 |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r\right)} = \\
&= dt \frac{m}{p_0 \hbar} \Gamma^2 |c(p_0)|^2 |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r\right)} \propto dt e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} t}
\end{aligned} \tag{1.503}$$

dove abbiamo fatto implicitamente l'integrale sulla superficie sferica di raggio r , con $d\Sigma = r^2 d\Omega$. Notiamo dunque che gli stati metastabili decadono nel tempo seguendo la legge del decadimento radioattivo, che notiamo essere indipendente dal pacchetto d'onda (fintanto che $\Delta W \gg \Gamma$ e $c(p)$ è costante sull'intervallo Γ , in presenza di una risonanza di uno sfasamento). Ritroviamo poi il tempo caratteristico Δt , che coincide con quello di decadimento.

1.13.3 Stato Metastabile a breve distanze dal centro

Ci chiediamo adesso cosa succede al pacchetto $\psi(\vec{x}, t)$, che è uno stato metastabile, nella regione dove il potenziale è significativo, ossia per valori di r vicini al centro del potenziale.

Dalla fine della lezione 11 ricordiamo che affinché si verifichi una risonanza è necessario che l'ampiezza dell'autofunzione u_{plm} per p prossimo a p_0 nella regione in cui è significativo il potenziale è molto maggiore dell'ampiezza nella regione dove non è significativo il potenziale. Siamo però interessati all'intero pacchetto e non all'autofunzione, che non è normalizzabile.

Per tempi negativi, prima che arrivi il pacchetto, vi sarà interferenza distruttiva tra le onde monocromatiche, risultando in un'ampiezza trascurabile all'interno della buca di potenziale. Per tempi vicini a 0 (ma minori di $\hbar/\Delta W$), il picco si avvicina e l'interferenza diventa costruttiva (come nella figura VII.39.b del [Cal]); quando il picco (onda sferica) inizia ad allontanarsi, riducendo l'ampiezza nella regione nella buca (conservazione della probabilità). Per tempi positivi ma non troppo grandi $\hbar/\Delta W < t < \frac{\hbar}{\Gamma}$, il picco è uscito dalla buca, ma la ψ_{scatt} darò un grande contributo all'ampiezza dentro la regione e un contributo trascurabile al suo esterno, un andamento qualitativamente simile a quello di uno stato legato. Per questo motivo questi stati sono noti come stati metastabili. Per tempi molto positivi $t > \frac{\hbar}{\Gamma}$ si avrà di nuovo interferenza costruttiva e dunque ritroviamo la figura per $t \rightarrow +\infty$, con un picco di onda sferica seguito da un'onda esponenziale.

Ci chiediamo adesso quale deve essere qualitativamente la forma del potenziale affinché ci siano risonanze. Affinché esista uno stato metastabile (e dunque una risonanza?), si trova che una condizione necessaria è quella per cui, per un dato valore di W , esista una regione spaziale tale che:

$$W \leq U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = U_{\text{eff}}(r^2) \tag{1.504}$$

Ricordiamo infatti la parte radiale dell'equazione di Schroedinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} y_{pl}'' = (W - U_{\text{eff}}) y_{pl} \tag{1.505}$$

Quando è soddisfatta la condizione allora $\text{sign}(y_{pl}'') = \text{sign}(y_{pl})$ e dunque se $y_{pl} > 0$ allora $y_{pl}'' > 0$, ossia vi è una regione con concavità verso l'alto e dunque y_{pl} può crescere.

Notiamo che per un potenziale puramente attrattivo, in onda s non si può verificare questa condizione per $W > 0$ ($W < 0$ gli stati sono legati, non di scattering). Se vogliamo dunque che si verifichi in onda s allora è necessaria una regione repulsiva (come accade nella figura VII.39, profilo tratteggiato).

Questo ci porta ad accennare alla Teoria di Gamow per il decadimento alfa. In prima approssimazione possiamo immaginare questa particella come già esistente ed immersa in un potenziale centrale, creato dal resto del nucleo atomico. Questo potenziale avrà una parte attrattiva a breve distanza, di origine nucleare, e una parte repulsiva, dovuta alla repulsione coulombiana tra le cariche dei due nuclei (ma comunque a corto range).

1.14 Lezione 14

Nelle scorse lezioni abbiamo ottenuto risultati grazie allo sviluppo in onde parziali dell'ampiezza di scattering di una particella senza spin che viene diffusa da un potenziale centrale, che si riduce al calcolo degli sfasamenti e il calcolo di una serie infinita sulle onde parziali.

Abbiamo visto che il metodo è utilizzabile solo a basse energie, dove è possibile troncare la serie ai primi ordini del momento angolare l . Tuttavia è comunque in generale difficile calcolare gli sfasamenti eccetto che in casi molto specifici, che impedisce di fare previsioni anche a basse energie.

Iniziamo a studiare metodi perturbativi per il calcolo dell'ampiezza di scattering.

1.14.1 Approssimazione di Born

Iniziamo dal metodo di approssimazione di Born, che vedremo essere complementare a quello delle onde parziali, in quanto funziona meglio ad alti momenti di incidenza.

Ricordiamo che l'hamiltoniana della particella è data da quella libera più il termine di potenziale, che possiamo vedere rispettivamente come un termine libero e un termine perturbativo:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{x}) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_1 \quad (1.506)$$

dove ci aspettiamo $\hat{\mathcal{H}}_1$ dell'ordine di λ , un piccolo parametro adimensionale.

Nel metodo perturbativo tradizionale si suppone di conoscere gli autostati di $\hat{\mathcal{H}}_0$:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 u^{(0)}(\vec{x}) = W^{(0)} u^{(0)}(\vec{x}) \quad (1.507)$$

Si può dunque espandere dunque la generica autofunzione di $\hat{\mathcal{H}}$ e il suo autovalore in serie di potenze in λ , con dei termini che si possono scrivere come combinazioni lineari degli $u^{(0)}(\vec{x})$:

$$u(\vec{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n u^{(n)}(\vec{x}) \quad W = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n W^{(n)} \quad (1.508)$$

Tuttavia noi siamo interessati a stati di scattering e non stazionari legati. Ci aspettiamo poi che lo spettro continuo di $\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{\mathcal{H}}$ sia lo stesso è pari a $[0, \infty[$ (a meno di traslazioni), ossia ci limitiamo al caso $W > 0$. Questo significa che possiamo prendere W come l'energia esatta sia nel caso imperturbato che perturbato, ossia possiamo sempre considerare $u^{(0)}(\vec{x})$ e $u(\vec{x})$ autofunzioni $\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{\mathcal{H}}$ con stesso autovalore W . Siamo dunque interessati solo all'espansione perturbativa delle autofunzioni e non dei loro autovalori. Per semplicità poi includiamo λ^n all'interno delle autofunzioni, così che:

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} u^{(n)}(\vec{x}) \quad (1.509)$$

dove è sottinteso che $u^{(n)}(\vec{x})$ è dell'ordine di λ^n .

All'ordine zero, esplicitando l'hamiltoniana libera, otteniamo le seguenti equazioni:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u^{(0)}(\vec{x}) &= W u^{(0)}(\vec{x}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u^{(n)}(\vec{x}) + U(\vec{x}) u^{(0)}(\vec{x}) &= W u^{(1)}(\vec{x}) \\ &\dots = \dots \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u^{(n)}(\vec{x}) + U(\vec{x}) u^{(n-1)}(\vec{x}) &= W u^{(n)}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (1.510)$$

Chiaramente siccome W appartiene allo spettro continuo di $\hat{\mathcal{H}}_0$ allora ammette un grado di degenerazione infinito. Per individuare univocamente $u^{(0)}(\vec{x})$ dobbiamo imporre certe condizioni.

Dalla discussione generale sulla teoria dello scattering, ricordiamo che le autofunzioni di $\hat{\mathcal{H}}$ a cui siamo interessati sono quelle caratterizzate dal seguente andamento asintotico:

$$u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} + \frac{f(p, \theta_{\vec{p}\vec{x}})}{r} e^{\frac{i}{\hbar} pr} \right] \quad W = \frac{p^2}{2m} \quad (1.511)$$

Notiamo che per potenziali non centrali dovremmo sostituire $\theta_{\vec{p}\vec{x}}$ con gli angoli che individuano \vec{p} ed \vec{x} , ma non lo facciamo per comodità di notazione.

Chiaramente per $U(\vec{x})$ deve valere $f = 0$ e dunque f è almeno dell'ordine di λ , come U . Questo implica che le soluzioni imperturbate sono proprio le onde piane (e non loro pacchetti al variare di \vec{p} con $p^2 = 2mW$), che possiamo indicizzare con il vettore \vec{p} :

$$u_{\vec{p}}^{(0)}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \quad (1.512)$$

Richiediamo dunque che le correzioni soddisfino la seguente condizione asintotica:

$$u_{\vec{p}}^{(n)}(\vec{x}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} f^{(n)}(p, \theta_{\widehat{px}}) \frac{e^{\frac{i}{\hbar} pr}}{r} \quad (1.513)$$

Se la serie perturbativa converge allora l'ampiezza di scattering coincide con la serie di queste correzioni:

$$f(p, \theta_{\widehat{px}}) = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(p, \theta_{\widehat{px}}) \quad (1.514)$$

Questo metodo, in ipotesi di convergenza delle serie, è esatto. L'approssimazione di Born propriamente detta consiste nel troncamento dell'ampiezza di scattering al primo ordine:

$$\boxed{f(p, \theta_{\widehat{px}}) = f^{(1)}(p, \theta_{\widehat{px}})} \quad (1.515)$$

ossia vogliamo calcolare solo le $u_{\vec{p}}^{(1)}(\vec{x})$. In generale potremmo comunque pensare di calcolare altri termini.

1.14.2 Funzione di Green per l'equazione di Helmholtz

Posto $k = \frac{p}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mW}$ allora possiamo riscrivere le equazioni ai vari ordini nella seguente maniera compatta:

$$(\nabla^2 + k^2)u^{(n)}(\vec{x}) = j^{(n)}(\vec{x}) \quad j^{(n)}(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(\vec{x})u^{(n-1)}(\vec{x}) \quad (1.516)$$

Ad ogni ordine possiamo ritenere note le $j^{(n)}(\vec{x})$, in quanto sono state ottenute risolvendo l'equazione precedente oppure inserendo l'onda piana.

Quest'equazione è ben nota e risolvibile, una PDE al secondo ordine lineare a coefficienti costanti non omogenea, nota come equazione di Helmholtz. Questa può essere vista come generalizzazione dell'equazione di Poisson, a cui si riduce per $k = 0$.

$$\nabla^2 \phi(\vec{x}) = j(\vec{x}) \quad (1.517)$$

Nel caso di condizione al contorno libera $\phi(\vec{x}) \rightarrow 1/r, r \rightarrow \infty$ la soluzione è unica e vale la seguente formula, cosiddetta di Coulomb:

$$\phi(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{j(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \quad (1.518)$$

Notiamo che questo non interferisce con il definire le autofunzioni a meno di un fattore di fase costante, in quanto all'interno della $j(\vec{x})$ è contenuta la correzione precedente.

Questo significa che la sua funzione di Green è data da:

$$\tilde{G}(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|} \Rightarrow \nabla^2 \tilde{G}(\vec{x} - \vec{x}') = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \quad (1.519)$$

Infatti una funzione data da:

$$\phi(\vec{x}) = \int d^3x' \tilde{G}(\vec{x} - \vec{x}') j(\vec{x}') \quad (1.520)$$

soddisfa l'equazione di Poisson:

$$\nabla^2 \phi(\vec{x}) = \int d^3x' \nabla^2 \tilde{G}(\vec{x} - \vec{x}') j(\vec{x}') = \int d^3x' \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') j(\vec{x}') = j(\vec{x}) \quad (1.521)$$

che è possibile solo se $j(\vec{x})$ soddisfa condizioni al contorno libere.

Vogliamo adesso trovare la funzione di Green dell'equazione di Helmholtz:

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{x}) = \delta^3(\vec{x}) \quad (1.522)$$

che soddisfi la condizione asintotica seguente:

$$G_k(\vec{x}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} h(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.523)$$

Se riusciamo a trovare una tale funzione allora le soluzioni $u^{(n)}(\vec{x})$ saranno date da:

$$u^{(n)} = \int d^3x' G_k(\vec{x} - \vec{x}') j^{(n)}(\vec{x}') \quad (1.524)$$

Per semplicità, partiamo da un'ansatz e verifichiamo che soddisfa l'equazione:

$$G_k(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.525)$$

Per verificare questo dobbiamo calcolare la derivata di questa funzione (nel senso delle distribuzioni):

$$\nabla^2 G_k(\vec{x}) = \nabla^2 \left(-\frac{1}{4\pi r} \right) e^{ikr} + 2 \nabla \left(-\frac{1}{4\pi r} \right) \cdot \nabla (e^{ikr}) - \frac{1}{4\pi r} \nabla^2 e^{ikr} \quad (1.526)$$

Riconosciamo nel primo termine la funzione di Green della funzione di Poisson, da cui:

$$\nabla^2 G_k(\vec{x}) = \delta^3(\vec{x}) + 2 \nabla \left(-\frac{1}{4\pi r} \right) \cdot \nabla (e^{ikr}) - \frac{1}{4\pi r} \nabla^2 e^{ikr} \quad (1.527)$$

Siccome le funzioni da derivare dipendono solo dalla variabile radiale allora usiamo l'espressione del gradiente e del laplaciano in coordinate sferiche, trascurando i termini angolari:

$$\nabla(f(r)) = f'(r) \hat{\mathbf{x}} \quad \nabla^2(f(r)) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(rf(r)) = \frac{1}{r} \frac{d}{dr}(f(r) + rf'(r)) = \frac{2}{r} f'(r) + f''(r) \quad (1.528)$$

da cui:

$$\begin{aligned} \nabla^2 G_k(\vec{x}) &= \delta^3(\vec{x}) + 2 \left(\frac{\hat{\mathbf{x}}}{4\pi r^2} \right) \cdot (ike^{ikr} \hat{\mathbf{x}}) - \frac{1}{4\pi r} \left(ik \frac{2}{r} - k^2 \right) e^{ikr} = \\ &= \delta^3(\vec{x}) + \cancel{\frac{ik}{2\pi r^2} e^{ikr}} - \cancel{\frac{ik}{2\pi r^2} e^{ikr}} + k^2 \frac{1}{4\pi r} e^{ikr} = \\ &= \delta^3(\vec{x}) - k^2 G_k(\vec{x}) \end{aligned} \quad (1.529)$$

come volevasi dimostrare.

Questo ci permette di calcolare le $u^{(n)}(\vec{x})$ per ogni n . Ad esempio al primo e secondo ordine:

$$\begin{aligned} u_{\vec{p}}^{(1)}(\vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' G_k(\vec{x} - \vec{x}') j^{(1)}(\vec{x}') = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' G(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') u_{\vec{p}}^{(0)}(\vec{x}') = \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}'}}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|} U(\vec{x}') \\ u_{\vec{p}}^{(2)}(\vec{x}) &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x'' G_k(\vec{x} - \vec{x}'') U(\vec{x}'') u_{\vec{p}}^{(1)}(\vec{x}') = \\ &= \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x'' G_k(\vec{x} - \vec{x}'') U(\vec{x}'') \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' G_k(\vec{x}'' - \vec{x}') U(\vec{x}') e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}''} \end{aligned} \quad (1.530)$$

Pertanto all'ordine n -esimo dovremo fare integrali in $3n$ dimensioni.

1.14.3 Correzione all'Ampiezza di Scattering in Approssimazione di Born

Possiamo ora calcolare le correzioni all'ampiezza di scattering, considerando le condizioni asintotiche per queste funzioni. Per fare questo usiamo l'espansione di $1/|\vec{x} - \vec{x}'|$:

$$\frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \quad (1.531)$$

e dell'onda sferica:

$$|\vec{x} - \vec{x}'| \xrightarrow{r \rightarrow \infty} r - \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{r} + O\left(\frac{1}{r}\right) \quad (1.532)$$

Inseriamo questo nella prima correzione, notando che l'integrale è su \vec{x}' e dunque i fattori che dipendono da \vec{x}, r vanno fuori dall'integrale:

$$u_{\vec{p}}^{(1)}(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 x' U(\vec{x}') e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p} \frac{\vec{x}}{r}) \cdot \vec{x}'} \quad (1.533)$$

Per confronto con le definizioni delle correzioni dell'ampiezza di scattering troviamo:

$$f^{(1)}(p, \theta_{\widehat{px}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 x' U(\vec{x}') e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p} \frac{\vec{x}}{r}) \cdot \vec{x}'} \quad (1.534)$$

Spesso si usa anche la notazione:

$$\vec{p}' = p \frac{\vec{x}}{r} = p \hat{x} \quad \vec{q} = \vec{p}' - \vec{p} \quad (1.535)$$

da cui

$$f^{(1)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' U(\vec{x}') e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{x}'} \quad (1.536)$$

così che la prima correzione all'ampiezza di scattering è proporzionale alla trasformata di Fourier valutata in \vec{q} . Notiamo poi che \vec{q} è un vettore definito dal solo angolo θ tra il punto di osservazione e del momento dell'autofunzione, e dunque la prima correzione continua a dipendere solo da queste due variabili anche per potenziali non centrali (comunque richiediamo per questi completezza asintotica).

Al primo ordine troviamo poi anche la sezione d'urto differenziale facendo il modulo quadro:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) = \left| f^{(1)}(p, \theta) \right|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' U(\vec{x}') e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{x}'} \right|^2 \quad (1.537)$$

1.14.4 Approssimazione di Born per un Potenziale Centrale

Iniziamo a semplificare le espressioni ottenute per un potenziale centrale. Introduciamo un sistema di coordinate polari nell'integrale, prendendo il vettore $-\vec{q}$ come l'asse z :

$$\begin{aligned} f^{(1)}(p, \theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dr' r'^2 \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha U(r') e^{\frac{i}{\hbar} q r' \cos \alpha} = \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' U(r') r'^2 \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha e^{\frac{i}{\hbar} q r' \cos \alpha} = -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' U(r') r'^2 \int_{-1}^1 dx e^{\frac{i}{\hbar} q r' x} = \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' U(r') r'^2 \frac{\hbar}{i q r'} \left[2i \sin\left(\frac{q r'}{\hbar}\right) \right] = -\frac{2m}{\hbar} \frac{1}{q} \int_0^\infty dr r U(r) \sin\left(\frac{q r}{\hbar}\right) = \\ &= -\frac{2m}{\hbar} \frac{1}{|\vec{p} - p\hat{x}|} \int_0^\infty dr r U(r) \sin\left(|\vec{p} - p\hat{x}| \frac{r}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (1.538)$$

Esplicitiamo la dipendenza da θ :

$$q = |\vec{p} - p\hat{x}| = p^2 + p^2 - 2p\vec{p} \cdot \hat{x} = 2p^2(1 - \cos \theta) = 4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.539)$$

1.14.5 Validità dell'Approssimazione di Born

Ci chiediamo adesso in quale dominio sia valida l'approssimazione di Born. Nel caso del potenziale centrale, usando che $q \propto p$, allora se p è grande allora la $f^{(1)}(p, \theta) \propto \frac{1}{q}$ è piccola (e a maggiore ragione gli ordini successivi), ossia vale lo sviluppo perturbativo.

1.14.6 Approssimazione di Born per il Potenziale di Yukawa

Facciamo adesso un calcolo esplicito per calcolare l'ampiezza di Scattering in approssimazione di Born, considerando il potenziale di Yukawa:

$$U(r) = -g \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad \mu > 0 \quad (1.540)$$

Infatti il fattore $1/r$ si semplifica nell'integrale, in modo che l'integrando è un semplice esponenziale:

$$\begin{aligned} f^{(1)}(p, \theta) &= \frac{2mg}{\hbar q} \int_0^\infty dr e^{-\mu r} \sin\left(\frac{q r}{\hbar}\right) = \frac{mg}{i\hbar q} \int_0^\infty dr e^{-\mu r} \left(e^{i\frac{q}{\hbar} r} - e^{-i\frac{q}{\hbar} r} \right) = \\ &= \frac{mg}{i\hbar q} \left(\frac{1}{\mu - i\frac{q}{\hbar}} + \frac{1}{\mu + i\frac{q}{\hbar}} \right) = \frac{mg}{i\hbar q} \left(\frac{1}{\mu - i\frac{q}{\hbar}} - \frac{1}{\mu + i\frac{q}{\hbar}} \right) = \\ &= \frac{mg}{i\hbar q} \frac{2i\frac{q}{\hbar}}{\mu^2 + \left(\frac{q}{\hbar}\right)^2} = \frac{2mg}{\hbar^2} \frac{1}{\mu^2 + \left(\frac{q}{\hbar}\right)^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{g}{4\frac{p^2}{\hbar^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} + \mu^2} \end{aligned} \quad (1.541)$$

Sebbene il potenziale coulombiano sia a lungo range, possiamo comunque immaginare che formalmente questo coincide con il limite del potenziale di Yukawa per $\mu \rightarrow 0$ con un certo valore di g :

$$U_c(r) = \lim_{\mu \rightarrow 0} U_\gamma(r) \Big|_{g=-Z_1 Z_2 e^2} \quad (1.542)$$

che ci permette di trovare formalmente l'ampiezza di scattering in approssimazione di Born:

$$f_c^{(1)}(p, \theta) = -\frac{mZ_1Z_2e^2}{2p^2 \sin^2(\theta/2)} \quad (1.543)$$

e notiamo che da questa espressione ritroviamo la sezione d'urto differenziale di Rutherford:

$$\left| f_c^{(1)}(p, \theta) \right|^2 = \left[\frac{mZ_1Z_2e^2}{2p^2 \sin^2(\theta/2)} \right]^2 \quad (1.544)$$

Pertanto ritroviamo la sezione d'urto classica tramite l'approssimazione di Born.

Notiamo però che il potenziale di Coulomb è a lungo range e dunque non ammette completezza asintotica. Per questo va usato un metodo analitico ad hoc, che non discuteremo, ma è possibile ottenere un risultato esatto per l'ampiezza di scattering:

$$f_c(p, \theta) = -\frac{mZ_1Z_2e^2}{22 \sin^2(\theta/2)} \exp \left[i \left(-\frac{mZ_1Z_2e^2}{\hbar p} \log \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} \right) + 2\eta_0 \right) \right] \quad \eta_0 = \arg \Gamma \left(1 + i \frac{mZ_1Z_2e^2}{\hbar p} \right) \quad (1.545)$$

Notiamo che il fattore complicato aggiuntivo è un puro fattore di fase e dunque in realtà l'approssimazione di Born fornisce un risultato esatto per la sezione d'urto differenziale:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_c(p, \theta)|^2 = \left| f_c^{(1)}(p, \theta) \right|^2 = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{cl} = \left[\frac{mZ_1Z_2e^2}{2p^2 \sin^2(\theta/2)} \right]^2 \quad (1.546)$$

Notiamo inoltre che per $p \rightarrow \infty$ il fattore di fase va a 0, in quanto il primo va a 0 e il secondo va a $2 \arg \Gamma(1)$. Siccome $\Gamma(1) = 1$ allora $\arg \Gamma(1) = 0$ e dunque $f_c(p, \theta) \xrightarrow{p \rightarrow \infty} f_c^{(1)}(p, \theta)$, esattamente come ci aspettavamo dalla discussione sul dominio di validità dell'approssimazione di Born.

1.14.7 Accenni ai Processi Anelastici

Notiamo adesso come lo scattering di una particella da un potenziale è in generale un caso molto particolare, anche quando la massa del bersaglio è molto maggiore del proiettile incidente, in quanto sono spesso possibili anche processi in cui vi è perdita di energia (anelastici) e dunque non possono essere studiati solo tramite un potenziale.

Un tipico caso in cui questo accade è quando un elettrone incide su un atomo. Sia W l'energia dell'elettrone, ed E_0, E_1, E_2 (con $E_0 < E_1 < E_2$) le energie dei primi stati legati dell'elettrone con l'atomo, che sta nello stato fondamentale E_0 . Se $W < E_1 - E_0$ allora è possibile solo uno scattering elastico, ossia non può eccitare l'atomo in E_1 , che ci permette di applicare il discorso fatto finora. Se invece $E_1 - E_0 < W < E_2 - E_0 \iff E_1 < W + E_0 < E - 2$ allora è possibile che l'elettrone ecciti l'atomo nel primo stato eccitato, ma non nel secondo o i successivi, oltre che una possibile diffusione elastica. Nel caso in cui l'atomo sia eccitato ad E_1 allora l'elettrone perde energia $W_f = W_i - (E_1 - E_0)$ e il processo è anelastico, che non è descritto solo da un potenziale.

Nel primo caso vi è dunque un solo canale, mentre nel secondo caso vi sono due canali. Aumentando l'energia vi saranno ulteriori canali e addirittura se l'energia è tale da ionizzare l'atomo allora i canali sarebbero infiniti (spettro continuo).

Il formalismo in cui studiamo questo tipo di processi sarà basato invece sulla teoria delle perturbazioni del tempo e la regole d'oro di Fermi.

1.15 Lezione 15

1.15.1 Ricapitolazione della Teoria delle Perturbazioni Dipendente del Tempo

In questo metodo si suppone di poter scrivere l'hamiltoniana come segue:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t) \quad (1.547)$$

Dette $u_r^{(0)}$ le autofunzioni di \hat{H}_0 con autovalore $W_r^{(0)}$ (con spettro che assumiamo puramente discreto), allora le soluzioni stazionarie della corrispondente TDSE:

$$\psi_r^{(0)}(t) = u_r^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} W_r^{(0)} t} \quad (1.548)$$

da cui la soluzione più generica, data la condizione iniziale:

$$\psi^{(0)} = \sum_r c_r^{(0)} \psi_r^{(0)}(t) \quad (1.549)$$

Per cercare soluzioni della TDSE per l'hamiltoniana perturbata $\hat{\mathcal{H}}(t)$ usiamo il metodo delle variazioni delle costanti arbitrarie, ossia usiamo la seguente ansatz, che è sempre valida essendo le $u_r^{(0)}$ una base per lo spazio di Hilbert:

$$\psi(t) = \sum_r c_r(t) \psi_r^{(0)}(t) = \sum_r c_r(t) e^{-\frac{i}{\hbar} W_r^{(0)} t} u_r^{(0)} \quad (1.550)$$

Si trova che questi coefficienti $c_s(t)$ devono soddisfare:

$$i\hbar \frac{dc_s}{dt} = \sum_r \left[\hat{\mathcal{H}}_1(t) \right]_{sr} e^{\frac{i}{\hbar} (W_s^{(0)} - W_r^{(0)}) t} c_r(t) \quad \left[\hat{\mathcal{H}}_1(t) \right]_{sr} = \langle u_s^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}_1(t) | u_r^{(0)} \rangle \quad (1.551)$$

Queste possono essere risolte una volta che è assegnata una certa condizione iniziale $c_s(0) = c_s^{(0)}$. In questo modo possiamo trasformare l'equazione in un'equazione integrale:

$$c_s(t) = c_s^{(0)} - \frac{i}{\hbar} \sum_r \int_0^t dt' \left[\hat{\mathcal{H}}_1(t') \right]_{sr} e^{\frac{i}{\hbar} (W_s^{(0)} - W_r^{(0)}) t} c_r(t') \quad (1.552)$$

Quest'equazione può essere risolta iterativamente assumendo uno sviluppo in serie, che tronchiamo tipicamente al primo ordine:

$$c_s(t) = c_s^0 + c_s^1(t) \quad c_s^1(t) = O(\lambda) \quad (1.553)$$

con λ un parametro piccolo. In questo modo troviamo (sempre al primo ordine):

$$c_s(t) = c_s^0 - \frac{i}{\hbar} \sum_r c_r^0 \int_0^t dt' \left[\hat{\mathcal{H}}_1(t') \right]_{sr} e^{\frac{i}{\hbar} (W_s^{(0)} - W_r^{(0)}) t} \quad (1.554)$$

Il caso tipicamente considerato è quello in cui il sistema sta inizialmente in un autostato:

$$c_s^{(0)} = \delta_{sn} \quad (1.555)$$

da cui:

$$\begin{aligned} c_n(t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[\hat{\mathcal{H}}_1(t') \right]_{nn} \\ c_k(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[\hat{\mathcal{H}}_1(t') \right]_{kn} e^{\frac{i}{\hbar} (W_k^{(0)} - W_n^{(0)}) t} \quad k \neq n \end{aligned} \quad (1.556)$$

Noi siamo in realtà interessati al caso in cui la perturbazione è indipendente dal tempo. Non facciamo uso della teoria delle perturbazioni indipendente dal tempo in quanto è particolarmente adatta a previsioni per grandi tempi, che sono quelli di interesse per gli stati di scattering (non metastabili). In questo caso le espressioni dei coefficienti si semplificano notevolmente:

$$\begin{aligned} c_n(t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathcal{H}}_1 \right]_{nn} t \\ c_k(t) &= (\hat{\mathcal{H}}_1)_{kn} \frac{1}{W_k^{(0)} - W_n^{(0)}} \left[1 - e^{\frac{i}{\hbar} (W_k^{(0)} - W_n^{(0)}) t} \right] \quad k \neq n \end{aligned} \quad (1.557)$$

Siamo poi interessati alla probabilità di transizione allo stato k-esimo:

$$P_k(t) = |c_k(t)|^2 = 4 \left| (\hat{\mathcal{H}}_1)_{kn} \right|^2 \frac{1}{(W_k^{(0)} - W_n^{(0)})^2} \sin^2 \left[\frac{W_k^{(0)} - W_n^{(0)} t}{\hbar} \right] \quad k \neq n \quad (1.558)$$

Supponiamo adesso che esista una certa grandezza fisica (osservabile) \hat{K} che commuta con $\hat{\mathcal{H}}_0$ tale che costituisce un CSCO insieme ad $\hat{\mathcal{H}}_0$ (in generale ci sarà una collezione di osservabili, non uno solo). Pertanto K è una costante del moto per $\hat{\mathcal{H}}_0$ ed esiste una base di autovettori comuni ad entrambi, che si possono indicizzare come segue:

$$\left| W_r^{(0)}, K_j \right\rangle \quad \begin{cases} \hat{\mathcal{H}}_0 \left| W_r^{(0)}, K_j \right\rangle = W_r^{(0)} \left| W_r^{(0)}, K_j \right\rangle \\ \hat{K} \left| W_r^{(0)}, K_j \right\rangle = K_j \left| W_r^{(0)}, K_j \right\rangle \end{cases} \quad (1.559)$$

Supponiamo adesso che per ogni K_j , gli autovalori $W_r^{(0)}$ di $\hat{\mathcal{H}}_0$ siano tanto vicini da formare un sistema quasi-continuo con densità $\rho(W^{(0)}, K_j)$, detta densità di stati:

$$dN = dN(W^{(0)}, K_i) = \rho(W^{(0)}, K_i) dW_0 \quad (1.560)$$

che è dunque il numero di stati che hanno energia tra $W^{(0)}$ e $W^{(0)} + dW^{(0)}$ e valore K_i della grandezza K .

Supponiamo che per $t = 0$ il sistema si trovi in un autostato $|W_n^{(0)}, K_j\rangle \iff u_n^{(0)}$. La probabilità che al tempo t la grandezza \hat{K} assuma il valore $K_{j'}$ è data da:

$$\begin{aligned} P(K_{j'}|t) &= \int_{W_0}^{\infty} dW \rho(W, K_{j'}) 4 \left| \langle W, K_{j'} | \hat{H}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \frac{1}{(W - W_n^{(0)})^2} \sin^2 \left[\frac{W - W_n^{(0)} t}{\hbar} \right] = \\ &= \int_{W_0}^{\infty} dW \rho(W, K_{j'}) 4 \left| \langle W, K_{j'} | \hat{H}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 h(W, t) \end{aligned} \quad (1.561)$$

ossia la somma diventa un integrale sulla densità di stati.

Notiamo adesso che la funzione $h(W, t)$ è una funzione "a picco", centrata in $W_n^{(0)}$ (come funzione di W), che ha ampiezza $(\frac{t}{2\hbar})^2$ e larghezza \hbar/t .

Se nell'intervallo in cui $h(W, t)$ è un picco (intervallo di larghezza \hbar/t intorno a $W_n^{(0)}$) l'elemento di matrice moltiplicato per la densità di stati varia lentamente allora possiamo portarli fuori dall'integrale:

$$P(K_{j'}|t) = \rho(W_n^{(0)}, K_{j'}) 4 \left| \langle W_n^{(0)}, K_{j'} | \hat{H}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \int_{W_0}^{\infty} dW h(W, t) \quad (1.562)$$

Se il picco è sufficientemente stretto d'altra parte possiamo estendere l'integrale a $-\infty$ senza compiere un grande errore:

$$\begin{aligned} P(K_{j'}|t) &= \rho(W_n^{(0)}, K_{j'}) 4 \left| \langle W_n^{(0)}, K_{j'} | \hat{H}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dW \frac{1}{(W - W_n^{(0)})^2} \sin^2 \left[\frac{W - W_n^{(0)} t}{\hbar} \right] = \\ &= \frac{2\pi t}{\hbar} \left| \langle W_n^{(0)}, K_{j'} | \hat{H}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \rho(W_n^{(0)}, K_{j'}) \end{aligned} \quad (1.563)$$

dove abbiamo usato:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = \pi \quad x = \frac{(W - W_n^{(0)}) t}{2\hbar} \quad (1.564)$$

L'ipotesi di picco stretto rispetto alle altre grandezze dipendenti da W è vero certamente per $t \rightarrow \infty$, che è il caso di interesse per la teoria dello scattering.

Siamo infine interessati alla probabilità di transizione per unità di tempo, che si trova essere indipendente dal tempo nel caso considerato (perturbazione indipendente dal tempo, approssimazione al primo ordine, stato iniziale in autostato imperturbato con K_j , lenta variazione della densità di stati e elemento di matrice della perturbazione tra stato iniziale e finale). Questa prende il nome di regola d'oro di Fermi:

$$\pi(K_{j'}) = \frac{dP(K_{j'}|t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle W_n^{(0)}, K_{j'} | \hat{H}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \rho(W_n^{(0)}, K_{j'}) \quad (1.565)$$

Notiamo che una perturbazione indipendente dal tempo permette solo transizioni tra stati con uguale energie. Questo ce lo potevamo aspettare in quanto se vi è simmetria traslazionale allora vi è conservazione dell'energia.

1.15.2 Caso Elastico

Applichiamo adesso questo risultato nella teoria dello scattering per il calcolo di sezioni d'urto differenziali. Iniziamo dal caso elastico e poi vediamo cosa succede a quello anelastico.

Nel caso elastico:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad \hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} \quad \hat{H}_1 = U(r) \quad (1.566)$$

Notiamo tuttavia che \hat{H}_0 ha uno spettro puramente continuo, implicando che non possiamo applicare i risultati ottenuti, in quanto richiedevamo uno spettro discreto con una densità di stati finita. Possiamo però ridurci a questa situazione usando l'artificio matematico della condizione al bordo finita, ossia chiudiamo il sistema in una scatola cubica di lato L , grande macroscopicamente, e imponiamo condizioni al contorno periodiche.

In questo modo lo spazio di Hilbert diventa $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow \mathcal{L}^2(Q)$, con Q regione occupata dal cubo. In questo caso la posizione deve soddisfare per ogni $|\psi\rangle$:

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = \psi(x_1, x_2, x_3) \quad 0 \leq x_k \leq L \quad k = 1, 2, 3 \quad (1.567)$$

L'operatore momento ha poi come dominio le funzioni di periodo (spaziale) L :

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla \quad \mathcal{D}(\hat{p}_k) = \{\psi(\vec{x}) : \psi(\vec{x} + L\hat{\mathbf{x}}_k) = \psi(\vec{x})\} \quad (1.568)$$

In questo modo le onde piane possono essere normalizzate e inoltre gli impulsi possibili devono appartenere ad un reticolo discreto:

$$u_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \quad \int_Q d^3x |u_{\vec{p}}(\vec{x})|^2 = 1 \quad \vec{p} = \frac{2\pi\hbar}{L}(n_1, n_2, n_3) \quad n_k \in \mathbb{Z} \quad (1.569)$$

da cui lo spettro discreto per $\hat{\mathcal{H}}_0$. Se L è sufficientemente grande poi lo spettro è sufficientemente denso da poter essere considerato continuo nelle somme. Questo artificio è usato anche nel caso anelastico.

Vogliamo adesso calcolare la probabilità nell'unità di tempo che essa venga diffusa dal potenziale all'interno di un angolo solido $d\Omega$ intorno alla direzione \hat{l} . In questo caso identifichiamo l'osservabile \hat{K} con i due operatori equivalenti alla direzione del momento $\frac{\hat{\vec{p}}}{|\hat{\vec{p}}|}$.

Per trovare la densità di stati è sufficiente notare che il numero di stati dN infinitesimo è dato da:

$$d^3p = \left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^3 dN \Rightarrow dN = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 d^3p \quad (1.570)$$

D'altra parte esplicitando rispetto all'angolo solido e l'energia:

$$\begin{aligned} dN &= \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 d^3p = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 p^2 dp d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \frac{p}{2} dp^2 d\Omega = \\ &= \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 m p dW d\Omega = \rho(W, \hat{l}) dW d\Omega \end{aligned} \quad (1.571)$$

da cui la densità di stati:

$$\rho(W, \hat{l}) = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 m p d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 m \sqrt{2mW} d\Omega \quad (1.572)$$

Nota questa allora possiamo applicare direttamente la regole d'oro di Fermi:

$$\begin{aligned} \pi(\hat{l}) &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle u_{p_0 \hat{l}} | \hat{\mathcal{H}}_1 | u_{\vec{p}_0} \rangle \right|^2 \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 m \sqrt{2mW_0} d\Omega = \\ &= \frac{1}{L^3} \frac{m p_0}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_0 - p_0 \hat{l}) \cdot \vec{x}} \right|^2 d\Omega \end{aligned} \quad (1.573)$$

ossia la probabilità per unità di tempo che una particella libera sia diffusa con momento avente direzione \hat{l} .

Ricordiamo adesso la definizione di sezione d'urto differenziale:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p}', \vec{p}) = \frac{1}{n_{in}} \frac{dn}{d\Omega} \quad (1.574)$$

Nella notazione attuale, detto n il flusso di particelle incidenti (o meglio il numero di particelle che incidono sul bersaglio per unità di area e unità di tempo):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p}', \vec{p}) = \frac{1}{n} \frac{dN}{d\Omega} \quad (1.575)$$

Per calcolare il flusso delle particelle incidenti sul bersaglio possiamo immaginare di avere un grande numero N di particelle incidenti, tutte preparate nello stato $\psi^{(0)}$, autostato di $\hat{\mathcal{H}}_0$ avente impulso \vec{p}_0 . In questo modo possiamo identificare il flusso di particelle incidenti con il prodotto del numero di particelle per la corrente (flusso) di probabilità $\vec{S}^{(0)}$ proiettato in direzione del momento incidente:

$$n = N \vec{S}^{(0)} \cdot \hat{p}_0 \quad (1.576)$$

Conoscendo $\psi^{(0)}$ possiamo anche calcolare esplicitamente il flusso di probabilità, che troviamo essere:

$$S^{(0)}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^{(0)*} \nabla \psi^{(0)} - \psi^{(0)} \nabla \psi^{(0)*} \right) = \frac{1}{L^3} \frac{\vec{p}_0}{m} \quad (1.577)$$

Come ci potevamo aspettare questo è uniforme e indipendente dal tempo, che è un ipotesi importante nella teoria generale dello scattering elastico.

Troviamo dunque:

$$n = \frac{N}{L^3} \frac{p_0}{m} \quad (1.578)$$

Inoltre il numero di particelle diffuse per unità di tempo è pari a:

$$\begin{aligned} dN &= N d\pi = \frac{N}{L^3} \frac{mp_0}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_0 - p_0 \hat{l}) \cdot \vec{x}} \right|^2 d\Omega = \\ &= n \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2} \right)^2 \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_0 - p_0 \hat{l}) \cdot \vec{x}} \right|^2 d\Omega \end{aligned} \quad (1.579)$$

e infine per definizione di sezione d'urto:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p}', \vec{p}) = \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2} \right)^2 \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_0 - p_0 \hat{l}) \cdot \vec{x}} \right|^2 \quad (1.580)$$

Notiamo dunque che questa coincide esattamente con l'approssimazione di Born per la sezione d'urto differenziale, che non ci sorprende in quanto entrambi sono calcoli perturbativi approssimati al primo ordine per potenziali indipendenti dal tempo.

1.15.3 Urto di un Elettrone su un Atomo di Idrogeno

Consideriamo un elettrone con momento \vec{p} incidente su un atomo di idrogeno nello stato fondamentale, con nucleo fisso nel sistema del laboratorio (essendo $m_p \approx 2000m_e$). Supponiamo che gli elettroni siano distinguibili (questo è possibile scegliendo opportuni stati di spin, che non consideriamo). L'hamiltoniana (in unità gaussiane) si scrive:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (1.581)$$

Possiamo assumere come hamiltoniana imperturbata l'energia dell'elettrone incidente, l'energia dell'elettrone nell'atomo e l'energia di interazione di quest'ultimo con il nucleo. La perturbazione è invece l'interazione dell'elettrone incidente con il nucleo e con l'altro elettrone:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_2} \quad \hat{\mathcal{H}}_1 = -\frac{e^2}{r_1} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (1.582)$$

Inizialmente lo stato del sistema è etichettato dall'impulso dell'elettrone incidente e dai numeri quantici nlm che descrivono lo stato dell'atomo, nel nostro caso lo stato fondamentale:

$$u_{\vec{p},100}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_1} u_{100}(\vec{x}_2) \quad (1.583)$$

Vogliamo calcolare la probabilità che dopo la collisione l'atomo sia in uno stato eccitato e l'elettrone diffuso ad una certa direzione:

$$u_{\vec{p}',nlm}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}_1} u_{nlm}(\vec{x}_2) \quad (1.584)$$

L'hamiltoniana di interazione è indipendente dal tempo e dunque valgono le considerazioni di prima. Inoltre l'energia imperturbata si deve conservare, ossia:

$$W^{(0)} = \frac{p^2}{2m} + W_1 = \frac{p'^2}{2m} + W_n \Rightarrow \frac{p^2}{2m} > W_n - W_1 \quad (1.585)$$

Come ci aspettavamo pertanto l'energia cinetica della particella incidente deve essere maggiore della differenza di energia di stato finale e iniziale affinché sia possibile l'eccitazione.

Le costanti del moto imperturbate, oltre all'energia totale, sono: l'energia W_n , il modulo quadro del momento angolare \widehat{M}^2 , il momento angolare \widehat{M}_z lungo l'asse z e la direzione di \vec{p}' . Sottintendiamo dunque la notazione:

$$W_1 = W_{100} \quad W_n = W_{nlm} \quad W^{(0)} = W_{100,\vec{p}}^{(0)} = W_{nlm,\vec{p}'}^{(0)} \quad (1.586)$$

dove ricordiamo che \vec{p}' assume valori discreti, che possiamo etichettare con tre numeri interi n_x, n_y, n_z .

Questi formano un CSCO e dunque possiamo applicare la regola d'oro di Fermi:

$$d\pi = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle W^{(0)}, 100, \vec{p} \left| \hat{\mathcal{H}}_1 \right| W^{(0)}, nlm, \vec{p}' \right\rangle \right|^2 \rho(W^{(0)}, nlm, \vec{p}') \quad (1.587)$$

dove usiamo $d\pi$ al posto di π per indicare che stiamo considerando la probabilità per unità di tempo infinitesima per le particelle con \vec{p}' contenuto nell'angolo $d\Omega$.

Possiamo trovare la densità di stati analogamente a quanto fatto prima, ed esplicitare l'elemento di matrice, trovando:

$$d\pi = \frac{d\Omega}{L^3} \frac{m_e p'}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}_1} u_{nlm}^*(\vec{x}_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_1} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_1} u_{100}(\vec{x}_2) \right|^2 \quad (1.588)$$

Ottenuta questa possiamo usare il stesso ragionamento di prima per calcolare la sezione d'urto differenziale, che dobbiamo etichettare anche con nlm , oltre che il modulo finale dell'impulso e l'angolo di diffusione (in realtà dovremmo specificare anche lo stato iniziale con $100, p$, essendo la direzione di \vec{p}, \vec{p}' semplicemente deviata dell'angolo θ):

$$\frac{d\sigma_{nlm}}{d\Omega}(p', \theta) = \left(\frac{m_e}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{p'}{p} \left| e^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}_1} \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_1} \right) u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) \right|^2 \quad (1.589)$$

Possiamo calcolare l'elemento di matrice di $1/r_1$ in quanto gli stati dell'atomo sono ortonormali, e possiamo calcolare l'integrale improprio usando il metodo di Yukawa:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}_1} \frac{1}{r_1} u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}_1} \frac{1}{r_1} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) = \\ &= \delta_{n1} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}_1} \frac{1}{r_1} = \delta_{n1} \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}_1} \frac{1}{r_1} e^{-\mu r_1} = \\ &= \delta_{n1} \frac{4\pi\hbar^2}{(\vec{p} - \vec{p}')^2} \end{aligned} \quad (1.590)$$

Mentre nell'altro integrale:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}_1} \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}_2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}_2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3y e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{y}} \frac{1}{|\vec{y}|} = \\ &= \frac{4\pi\hbar^2}{\delta(\vec{p} - \vec{p}')} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}_2} \end{aligned} \quad (1.591)$$

Nel caso elastico $n = 1$ allora contribuiscono entrambi i termini. Nel caso anelastico $n > 1$ allora contribuisce solo l'elemento di matrice di $1/r_{12}$, che si riduce a:

$$\frac{d\sigma_{nlm}}{d\Omega}(p', \theta) = \frac{4m_e^2 e^4}{|\vec{p} - \vec{p}'|^4} \frac{p'}{p} \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x u_{nlm}^*(\vec{x}) u_{100}(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}} \right|^2 \quad (1.592)$$

che si può anche calcolare esplicitamente, anche se non lo faremo.

Capitolo 2

Entanglement

2.1 Lezione 16

2.1.1 Sistemi di N Particelle

Fisica Classica

Facciamo una ricapitolazione per sistemi di più particelle. In fisica classica gli stati di due particelle sono individuati da:

$$q_1 \in \Gamma_1, q_2 \in \Gamma_2 \quad q_1 = (\vec{x}_1, \vec{p}_1), q_2 = (\vec{x}_2, \vec{p}_2) \quad (2.1)$$

dove tipicamente $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \mathbb{R}^6$, ma in generale possono essere sottoinsiemi di \mathbb{R}^6 (anche diversi tra loro). Lo stato del sistema è individuato invece da una coppia $(q_1, q_2) \in \Gamma_1 \times \Gamma_2$. Analogamente vale per un sistema di N particelle.

Notiamo dunque che uno stato del sistema è specificato dagli stati delle singole particelle. È inoltre vero il contrario, ossia uno stato del sistema identifica gli stati delle singole particelle, ossia per ogni $q \in \Gamma_1 \times \Gamma_2$ è sempre possibile trovare q_1, q_2 stati delle due particelle tali che $q = (q_1, q_2)$. In fisica classica pertanto uno stato del sistema è equivalente ad un insieme ordinato di stati delle singole particelle.

Fisica Quantistica

In meccanica quantistica lo stato di una particella è identificato da un vettore di uno spazio di Hilbert $u \in V, w \in W$ con V, W corrispondenti agli spazi classici Γ_1, Γ_2 .

Ci chiediamo adesso come costruire lo spazio degli stati del sistema. Ci aspettiamo in particolare che lo spazio del sistema delle due particelle sia ancora uno spazio di Hilbert e lo stato un suo vettore. In particolare siamo interessati alla possibilità di definire operazioni di somma, prodotto e prodotto scalare su questo spazio. Le prime due operazioni equivalgono a richiedere che il principio di sovrapposizione continui a valere per il sistema delle due particelle.

Ci aspettiamo che lo spazio del sistema includa certamente coppie ordinate di stati (u, w) , che possiamo indicare con $u \otimes w$, in quanto come vedremo la richiesta di spazio vettoriale porta ad una struttura matematica oltre la semplice coppia ordinata, dove questa notazione è tipica ("prodotto tensoriale").

Per il principio di sovrapposizione ci aspettiamo tuttavia che la combinazione lineare (e in particolare la somma) di stati "prodotto" sia ancora uno stato che rappresenta il sistema delle due particelle. Inoltre supponiamo valga la seguente corrispondenza tra somma di stati prodotto e prodotto tra somma di stati:

$$(u_1 + u_2) \otimes w = u_1 \otimes w + u_2 \otimes w \quad u \otimes (w_1 + w_2) = u \otimes w_1 + u \otimes w_2 \quad \forall u_1, u_2, u \in V, w_1, w_2, w \in W \quad (2.2)$$

Mentre per i prodotti valga:

$$(au) \otimes w = u \otimes (aw) = a(u \otimes w) \quad (2.3)$$

Pertanto è ben definita l'operazione di prodotto tensoriale \otimes , che è un'operazione bilineare su V, W .

Dati gli stati prodotto $\psi_1 = u_1 \otimes w_1, \psi_2 = u_2 \otimes w_2$ per certi u_1, u_2, w_1, w_2 , in generale non esistono stati u, w tali che la somma di questi è ancora uno stato prodotto:

$$u_1 \otimes w_1 + u_2 \otimes w_2 = \psi_1 + \psi_2 = \psi \neq u \otimes w \quad (2.4)$$

Gli stati di un sistema di particelle che non sono prodotto tensoriale (non fattorizzabile) di due stati di singola particella sono detti stati **entangled**.

Pertanto non vale più la corrispondenza biunivoca tra stati del sistema e stati delle singole particella come in fisica classica. Gli stati entangled pertanto non hanno un analogo classico, come diretta conseguenza del principio di sovrapposizione.

2.1.2 Prodotto Tensoriale di Spazi di Hilbert

Siano V, W spazi vettoriali con $\dim V = N_1, \dim W = N_2$. Fissiamo per questi due basi ortonormali:

$$(e_1, \dots, e_{N_1}) \quad \langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij} \quad (f_1, \dots, f_{N_2}) \quad \langle f_k, f_l \rangle = \delta_{kl} \quad (2.5)$$

Lo spazio $V \otimes W$ è il prodotto tensoriale di V, W se esiste un'applicazione lineare $\otimes: V \times W \mapsto V \otimes W$ tale che $(e_i \otimes f_k)$ con $i = 1, \dots, N_1$ e $k = 1, \dots, N_2$ è una base ortonormale per $V \otimes W$.

Affinchè $V \otimes W$ sia uno spazio di Hilbert dobbiamo definire un prodotto scalare. Possiamo fare questo a partire dai prodotti scalari sui due spazi V, W . Per ogni $u_1, u_2 \in V, w_1, w_2 \in W$ possiamo definire l'operazione:

$$\langle u_1 \otimes w_1, u_2 \otimes w_2 \rangle = \langle u_1, u_2 \rangle_1 \langle w_1, w_2 \rangle_2 \quad (2.6)$$

Imponendo che questa sia un'operazione sesquilineare allora è ben definita su tutto lo spazio, per le ipotesi di spazio vettoriale. Posto:

$$\begin{cases} \psi = a_1 u_1 \otimes w_1 + a_2 u_2 \otimes w_2 \\ \phi = b_1 \bar{u}_1 \otimes \bar{w}_1 + b_2 \bar{u}_2 \otimes \bar{w}_2 \end{cases} \quad (2.7)$$

allora:

$$\begin{aligned} \langle \psi, \phi \rangle &= \langle a_1 u_1 \otimes w_1 + a_2 u_2 \otimes w_2, b_1 \bar{u}_1 \otimes \bar{w}_1 + b_2 \bar{u}_2 \otimes \bar{w}_2 \rangle = \\ &= a_1^* \langle u_1 \otimes w_1, b_1 \bar{u}_1 \otimes \bar{w}_1 + b_2 \bar{u}_2 \otimes \bar{w}_2 \rangle + a_2^* \langle u_2 \otimes w_2, b_1 \bar{u}_1 \otimes \bar{w}_1 + b_2 \bar{u}_2 \otimes \bar{w}_2 \rangle = \\ &= a_1^* b_1 \langle u_1 \otimes w_1, \bar{u}_1 \otimes \bar{w}_1 \rangle + a_1^* b_2 \langle u_1 \otimes w_1, \bar{u}_2 \otimes \bar{w}_2 \rangle + a_2^* b_1 \langle u_2 \otimes w_2, \bar{u}_1 \otimes \bar{w}_1 \rangle + a_2^* b_2 \langle u_2 \otimes w_2, \bar{u}_2 \otimes \bar{w}_2 \rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

Banalmente poi il prodotto è per definizione anche definito positivo perchè i prodotti scalari dei singoli spazi sono definiti positivi e per entrambi vale l'identità triangolare (non lo dimostriamo).

Notiamo infine che se lo spazio di Hilbert è infinito dimensionale allora facciamo la richiesta aggiuntiva che l'insieme $V \otimes W$ sia completo rispetto al prodotto scalare così definito.

2.1.3 Prodotto Tensoriale di Operatori

Indichiamo con $\mathcal{L}(V), \mathcal{L}(W)$ gli spazi degli operatori lineari su V, W rispettivamente. Possiamo definire (estendere) l'azione di ogni $\hat{A}_1 \in \mathcal{L}(V), \hat{B}_2 \in \mathcal{L}(W)$ su $V \otimes W$ per stati prodotto:

$$\hat{A}_1(u \otimes w) = (\hat{A}_1 u) \otimes w \quad \hat{B}_2(u \otimes w) = u \otimes (\hat{B}_2 w) \quad (2.9)$$

ed estendere per linearità per tutti gli altri stati:

$$\hat{A}_1(u_1 \otimes w_1 + u_2 \otimes w_2) = \hat{A}_1(u_1 \otimes w_1) + \hat{A}_1(u_2 \otimes w_2) \quad \hat{B}_2(u_1 \otimes w_1 + u_2 \otimes w_2) = \hat{B}_2(u_1 \otimes w_1) + \hat{B}_2(u_2 \otimes w_2) \quad (2.10)$$

Questo suggerisce di definire il prodotto tensoriale di due operatori lineari come segue:

$$\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2(u \otimes w) = (\hat{A}_1 u) \otimes (\hat{B}_2 w) \quad (2.11)$$

ed estendiamo per linearità:

$$\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2(u_1 \otimes w_1 + u_2 \otimes w_2) = (\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2)(u_1 \otimes w_1) + (\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2)(u_2 \otimes w_2) \quad (2.12)$$

Pertanto ogni volta che consideriamo l'azione di un operatore lineare $\hat{A}_1 \in \mathcal{L}(V), \hat{B}_2 \in \mathcal{L}(W)$, in realtà consideriamo l'azione dell'operatore corrispondente:

$$\hat{A}_1 \rightarrow \hat{A}_1 \otimes \mathbb{1}_2 \quad \hat{B}_2 \rightarrow \mathbb{1}_1 \otimes \hat{B}_2 \quad (2.13)$$

2.1.4 Esempio

Consideriamo adesso il caso specifico di due spazi di Hilbert $V = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}), W = \mathcal{L}^2([a, b])$. Verifichiamo che $V \otimes W = \mathcal{L}^2(\mathbb{R} \times [a, b])$. Questo importante risultato in generale ci permette di trovare che $\mathcal{L}^2(X) \otimes \mathcal{L}^2(Y) = \mathcal{L}^2(X \times Y)$ con X, Y due opportuni sottoinsiemi di \mathbb{R}^n . Alcuni esempi includono:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) &= \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^2) \\ \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) &= \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Verifichiamo che il prodotto puntuale tra due funzioni $f(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ e $h(y) \in \mathcal{L}^2([a, b])$ è un prodotto tensoriale:

$$(f \otimes h)(x, y) = f(x) \cdot h(y) \quad (2.15)$$

Questo prodotto è banalmente bilineare. Inoltre le funzioni $f_n(x)h_k(y)$ sono una base per $\mathcal{L}^2(\mathbb{R} \times [a, b])$. Pertanto questo definisce un prodotto tensoriale di spazi vettoriali.

2.1.5 Esistenza degli Stati Entangled

Facciamo prima considerazioni qualitative. Lo stato più generico di un sistema di due particelle è dato da:

$$\psi = \sum_{ik} c_{ik} e_i \otimes f_k \quad (2.16)$$

con i c_{ik} univocamente determinati, e in numero $N_1 + N_2$.

Lo stato fattorizzabile avrà la forma più generale:

$$\phi = u \otimes w = \left(\sum_i c_i e_i \right) \otimes \left(\sum_k d_k f_k \right) = \sum_{ij} c_i d_k e_i \otimes f_k \quad (2.17)$$

Notiamo che per la bilinearità del prodotto tensoriale i fattori u e w non sono univocamente determinati, in quanto:

$$\phi = u \otimes w = (au) \otimes \left(\frac{1}{a} w \right) \quad (2.18)$$

Questo significa che i coefficienti c_i, d_k non sono neppure univocamente determinati:

$$c_i \rightarrow \tilde{c}_i = ac_i \quad d_k \rightarrow \tilde{d}_k = \frac{1}{a} d_k \quad (2.19)$$

Pertanto il numero di coefficienti necessari a specificare uno stato fattorizzabile sono $N_1 + N_2 - 1$. Indichiamo con \mathcal{D} la varietà (non è un sottospazio lineare, in quanto non è chiuso) degli stati fattorizzabili. Se $\dim(\mathcal{D}) = \dim(V \otimes W)$ allora $\mathcal{D} = V \otimes W$, ossia tutti gli stati sono fattorizzabili.

Facciamo alcuni esempi:

N_1	N_2	$\dim(V \otimes W)$	$\dim(\mathcal{D})$
1	1	1	1
1	N_2	N_2	N_2
N_1	1	N_1	N_1
2	2	4	3

Pertanto se entrambi gli spazi hanno dimensione maggiore di 1 allora esistono stati entangled. Non solo, ma in generale sono già rari quanto $N_1 = N_2 = 2$ e aumentando le dimensioni diventano estremamente rari. Questo è ancora più evidente in spazi di funzioni a infinite dimensioni, dove infatti le funzioni fattorizzabili $\psi(x, y) = f(x)h(y)$ sono molto particolari.

2.1.6 Caso di Due Particelle a Spin 1/2

Consideriamo adesso il sistema di due particella a spin 1/2, trascurando il grado di libertà relativo al moto. Questo significa che dobbiamo considerare i spazi dei soli spin, che hanno dimensione $N_1 = N_2 = 2$. Continuiamo ad usare per ora la notazione astratta. Pertanto lo stato generico di questo stato è dato da:

$$\psi_A = a_{11} e_1 \otimes f_1 + a_{12} e_1 \otimes f_2 + a_{21} e_2 \otimes f_1 + a_{22} e_2 \otimes f_2 \quad (2.20)$$

Possiamo riassumere i coefficienti a_{ij} in una matrice:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

Se ψ_A è fattorizzabile (equivalentemente non-entangled) allora esistono $(a_1, a_2), (b_1, b_2)$ tali che:

$$\psi_A = (a_1 e_1 + a_2 e_2) \otimes (b_1 f_1 + b_2 f_2) = a_1 b_1 e_1 \otimes f_1 + a_1 b_2 e_1 \otimes f_2 + a_2 b_1 e_2 \otimes f_1 + a_2 b_2 e_2 \otimes f_2 \quad (2.22)$$

da cui:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

Troviamo dunque una condizione necessaria affinché uno stato sia fattorizzabile:

$$\det(A) = a_1 b_1 a_2 b_2 - a_1 b_2 a_2 b_1 = 0 \quad (2.24)$$

In realtà questa è anche sufficiente, ossia caratterizza univocamente stati fattorizzabili. Infatti in tal caso:

$$0 = \det A = a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21} \Rightarrow a_{11} a_{22} = a_{12} a_{21} \quad (2.25)$$

Consideriamo prima il caso (I) $a_{11} = 0$ che implica $a_{12}a_{21} = 0$. Sono dunque possibili i due casi (Ia) con $a_{12} = 0$ e (Ib) con $a_{21} = 0$ (che sono entrambi possibili). In questi due casi:

$$\psi_A = a_{12}e_1 \otimes f_2 + a_{21}e_2 \otimes f_1 + a_{22}e_2 \otimes f_2 = \begin{cases} a_{21}e_2 \otimes f_1 + a_{22}e_2 \otimes f_2 = e_2 \otimes (a_{21}f_1 + a_{22}f_2) & (Ia) \\ a_{12}e_1 \otimes f_2 + a_{22}e_2 \otimes f_2 = (a_{12}e_1 + a_{22}e_2) \otimes f_2 & (Ib) \end{cases} \quad (2.26)$$

e dunque nel caso (I) lo stato ψ_A è fattorizzabile.

Nel caso (II) $a_{11} \neq 0$ e dunque possiamo porre:

$$a_{22} = \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} \quad (2.27)$$

da cui:

$$\psi_A = a_{11}e_1 \otimes f_1 + a_{12}e_1 \otimes f_2 + a_{21}e_2 \otimes f_1 + \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}}e_2 \otimes f_2 \quad (2.28)$$

Moltiplichiamo per a_{11} per semplicità:

$$a_{11}\psi_A = a_{11}^2e_1 \otimes f_1 + a_{11}a_{12}e_1 \otimes f_2 + a_{21}a_{11}e_2 \otimes f_1 + a_{12}a_{21}e_2 \otimes f_2 \quad (2.29)$$

Notiamo chiaramente che questo è fattorizzabile se poniamo:

$$a_{12} = b_2 \quad a_{21} = a_2 \quad a_{11} = a_1 = b_1 \quad (2.30)$$

da cui:

$$a_{11}\psi_A = a_1b_1e_1 \otimes f_1 + a_1b_2e_1 \otimes f_2 + a_2b_1e_2 \otimes f_1 + a_2b_2e_2 \otimes f_2 \quad (2.31)$$

Questo vettore (e dunque il suo proporzionale ψ_A) è fattorizzabile, come volevasi dimostrare.

2.1.7 Base di Bell

Cerchiamo adesso di costruire una base di stati entangled, cosiddetta base di Bell per lo spazio prodotto tensoriale considerato.

Usiamo la notazione di Dirac, ponendo e_i, f_i come autostati di una componente di spin:

$$e_1 = |+\rangle_1 \quad e_2 = |-\rangle_1 \quad f_1 = |+\rangle_2 \quad f_2 = |-\rangle_2 \quad (2.32)$$

Ricordiamo che in notazione di Dirac si usa:

$$|\psi\rangle_1 \otimes |\phi\rangle_2 = |\psi\rangle |\phi\rangle = |\psi, \phi\rangle \quad (2.33)$$

Mantenendo gli indici la notazione non cambia se cambiamo l'ordine del prodotto:

$$|\psi\rangle_1 \otimes |\phi\rangle_2 = |\phi\rangle_2 \otimes |\psi\rangle_1 \quad (2.34)$$

Chiaramente se non usiamo gli indici allora l'ordinamento del prodotto è fondamentale per capire la forma dello stato, ma anche in assenza di questi l'unica possibilità di equivocità si presenta quando i due sottosistemi vivono nello stesso spazio di Hilbert $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2$ (che è però piuttosto comune).

Introduciamo gli stati della base di Bell. Questi si trovano in maniera natural considerando la somma dei momenti angolari, in quanto sono gli autostati comuni di S^2, S_z .

Definiamo il primo stato:

$$|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle |+\rangle + |-\rangle |-\rangle) \quad \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle = 1 \quad (2.35)$$

da cui la matrice dei coefficienti:

$$A_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbb{1} \quad (2.36)$$

E definiamo gli altri tre a partire da questo tramite la matrice (operatore) di Pauli:

$$|\phi_i\rangle = (\mathbb{1} \otimes \sigma_i) |\phi_0\rangle \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.37)$$

da cui:

$$\begin{aligned} |\phi_1\rangle &= (\mathbb{1} \otimes \sigma_1) |\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle |-\rangle + |-\rangle |+\rangle) \\ |\phi_2\rangle &= (\mathbb{1} \otimes \sigma_2) |\phi_0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|+\rangle |-\rangle - |-\rangle |+\rangle) \\ |\phi_3\rangle &= (\mathbb{1} \otimes \sigma_3) |\phi_0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|+\rangle |+\rangle - |-\rangle |-\rangle) \end{aligned} \quad (2.38)$$

Per le proprietà delle matrici di Pauli si trova:

$$\langle \phi_i | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | 1 \otimes \sigma_i | \phi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle + | + \rangle \langle + | + \rangle - \langle - | - \rangle \langle - | - \rangle) = 0 \quad (2.39)$$

da cui l'ortonormalizzazione di tutta la base:

$$\begin{aligned} \langle \phi_i | \phi_j \rangle &= \langle \phi_0 | (1 \otimes \sigma_i) (1 \otimes \sigma_j) | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | 1 \otimes \sigma_i \sigma_j | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | 1 \otimes \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k | \phi_0 \rangle = \\ &= \delta_{ij} \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle + i \epsilon_{ijk} \langle \phi_0 | 1 \otimes \sigma_k | \phi_0 \rangle = \delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.40)$$

da cui infine:

$$\langle \phi_\mu | \phi_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu} \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3 \quad (2.41)$$

Gli stati $|\phi_\mu\rangle$ formano la base di Bell. Ci chiediamo infine quali sono i coefficienti della base fattorizzata $|\pm\rangle|\pm\rangle$ nella base di Bell:

$$\begin{aligned} |+\rangle|+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_0\rangle + |\phi_3\rangle) \\ |-\rangle|-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_0\rangle - |\phi_3\rangle) \\ |+\rangle|-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle - i|\phi_2\rangle) \\ |-\rangle|+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle + i|\phi_2\rangle) \end{aligned} \quad (2.42)$$

e in generale:

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu=0}^3 c_\mu |\phi_\mu\rangle \quad (2.43)$$

Una misura di Bell su $|\psi\rangle$ ha dunque una probabilità $|c_\mu|^2$ per cui la particella si trova nello stato $|\psi_\mu\rangle$.

2.2 Lezione 17

2.2.1 Il Problema del Teletrasporto

Negli anni '50, nella nota serie televisiva Star Trek si faceva uso di un processo di teletrasporto di un oggetto fisico. Questo era permesso da due stazioni, dove in una l'oggetto veniva distrutto e nell'altro ricreato perfettamente.

Fisica Classica

Consideriamo il seguente apparato. Abbiamo due stazioni A, B separati spazialmente. Abbiamo un oggetto O nella stazione A . Vogliamo far viaggiare da A dell'informazione relativa ad O che consenta a B di ricreare il corpo O .

In fisica classica il corpo è costituito da un ben definito numero e tipo di atomi con un ben definito stato microscopico. Pertanto in principio se potessimo conoscere posizione e momento di tutti questi corpi da A a B allora B potrebbe essere in grado di ricomporre O ri assemblando gli stessi atomi nella stessa configurazione.

In realtà praticamente ogni misura classica è affetta da errore e dunque è impossibile conoscere perfettamente la configurazione dell'oggetto. Anche se avessimo a disposizione un apparato di misura classico ideale (con errore infinitesimo), occorrerebbe un numero infinito di bit, già per una sola coordinata di un solo atomo, e dunque una quantità infinita di informazione.

Fisica Quantistica

In fisica quantistica denotiamo con C il nostro oggetto. Per il momento limitiamoci a supporre che questo oggetto sia lo spin della particella. Questa si trova in un certo stato dato da:

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle_C + \beta |-\rangle_C \quad (2.44)$$

Alice sa che C sta in un ben definito stato quantomeccanica, ma non conosce i suoi coefficienti α, β . In questo caso parliamo di teletrasporto se Bob riesce a ricreare la particella C nello stato $|\psi\rangle$.

Analogamente a quanto detto nel caso classico, ci possiamo aspettare che una possibile modalità sia una in cui Alice misura i coefficienti α, β e li comunica a Bob.

In realtà siccome Alice dispone di una sola particella, se prova a fare una misura su $|\psi\rangle$, distrugge lo stato iniziale, in quanto lo stato collassa nello stato misurato. Ad esempio se fa una misura di S_z e trova uno dei due valori \pm , ricava solo che il corrispondente coefficiente è non nullo. Pertanto con una singolare misura non ricava nulla.

Per ovviare a questo problema Alice potrebbe pensare di creare un ensemble di particelle tutte nello stesso stato. Dovrebbe dunque di una macchina capace di duplicare la particelle e porla nello stesso stato $|\psi\rangle$. Avendo un ensemble, potrebbe compiere misure e trovare stime di α, β con un certo errore.

2.2.2 Teorema No Cloning

In realtà possiamo dimostrare che una tale macchina non può esistere, come semplice conseguenza dell'unitarietà dell'evolvente temporale, che esiste per ogni sistema fisico come affermato dai postulati della meccanica quantistica. Questo è implicato indirettamente dall'esistenza dell'operatore hamiltoniano che è autoaggiunto e genera il gruppo di trasformazioni ad un parametro corrispondente all'evolvente temporale.

Teorema 5 (Teorema No Cloning). *Non esiste una macchina M capace di clonare qualunque stato che può occupare una particella.*

Dimostrazione. Sia la particella C nello stato $|\psi\rangle$ e un dispositivo M che sta nello stato $|\phi_0\rangle$, capace di duplicare C e porre la nuova particella nello stato della particella di C . Pertanto il sistema della macchina e della particella si trova inizialmente in uno stato fattorizzato $|\psi\rangle \otimes |\phi_0\rangle$.

Dopo che la particella C è entrata nella macchina M , allora per definizione di macchina duplicatrice, lo stato finale è ancora uno stato fattorizzato, stavolta dato dal prodotto tensoriale dello stato per se stesso per un eventuale fattore di fase (in quanto un vettore rappresenta uno stato a meno di una fase):

$$|\psi\rangle \otimes |\phi_0\rangle \rightarrow |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle e^{i\alpha} \quad (2.45)$$

Ma per i postulati della meccanica quantistica il sistema è descritto da una certa hamiltoniana e dunque il suo evolvente temporale è unitario:

$$U |\psi\rangle \otimes |\phi_0\rangle = |\psi\rangle |\psi\rangle e^{i\alpha} \quad (2.46)$$

Ci chiediamo dunque se esiste un tale operatore unitario che compie questa operazione (e dunque la corrispondente hamiltoniana). Ad esempio se l'hamiltoniana è indipendente dal tempo allora:

$$U(\tau) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} \quad (2.47)$$

con τ durata della duplicazione.

Siccome vogliamo che questa macchina funzioni per uno stato qualsiasi (in quanto è ignoto) allora deve valere:

$$U |\psi_1\rangle |\phi_0\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_1\rangle e^{i\alpha} \quad U |\psi_2\rangle |\phi_0\rangle = |\psi_2\rangle |\psi_2\rangle e^{i\alpha'} \quad \forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \quad (2.48)$$

Facciamo il prodotto scalare tra i due membri della prima equazione con la seconda, ricordando che U conserva il prodotto scalare in quanto operatore unitario:

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | \langle \psi_1 | U^\dagger U | \phi_0 \rangle | \psi_2 \rangle &= (\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle)^2 e^{i(\alpha' - \alpha)} \\ \langle \phi_0 | \langle \psi_1 | \phi_0 \rangle | \psi_2 \rangle &= (\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle)^2 e^{i(\alpha' - \alpha)} \\ \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= (\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle)^2 e^{i(\alpha' - \alpha)} \end{aligned} \quad (2.49)$$

Ma questa è chiaramente non vera per ogni $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$, in quanto implica ad esempio che il modulo quadro coincide con il modulo del prodotto scalare:

$$|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 \iff |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} \quad (2.50)$$

che non è sempre vero. È dunque impossibile una tale macchina M , come volevasi dimostrare. \square

Notiamo in realtà che nello stato finale non è specificato lo stato della macchina, indicando che sarebbe necessaria una generale dimostrazione del teorema e la versione che abbiamo dimostrato è solo di livello elementare.

Questo teorema significa che più in generale Alice non può mai conoscere esattamente lo stato di una particella.

2.2.3 Teletrasporto tramite Entanglement

Sebbene non sia possibile il teletrasporto nelle modalità inizialmente descritte, è comunque possibile ottenerlo in altre modalità, che fanno uso dell'entanglement.

Consideriamo una macchina sorgente di coppie di particelle di spin 1/2 in uno stato entangled. Una particella A va da Alice e l'altra particella B va da Bob. Ad esempio possiamo considerare il sistema nello stato $|\phi_0\rangle$ di Bell:

$$|\phi_0\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A |+\rangle_B + |-\rangle_A |-\rangle_B) \quad (2.51)$$

Abbiamo poi la particella C , che sta insieme ad Alice, che si trova in un certo stato:

$$|\psi\rangle_C = \alpha|+\rangle_C + \beta|-\rangle_C \quad (2.52)$$

Il sistema complessivo è formato da tre particelle, così che lo spazio del sistema totale è dato da:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C \quad (2.53)$$

che ha dimensione 8.

Mentre lo stato iniziale è fattorizzato in C ed AB :

$$|\psi\rangle_{ABC} = |\psi\rangle_C \otimes |\phi_0\rangle_{AB} \quad (2.54)$$

Notiamo che specificando l'indice A, B, C non è rilevante l'ordine del prodotto tensoriale.

Alice esegue una misura di Bell $|\phi_\mu\rangle_{AC}$ sulle particelle A e C . La misura di Bell avrà un certo risultato $\bar{\mu} \in \{0, 1, 2, 3\}$ pari all'indice dello stato di Bell misurato. Alice poi telefona Bob e gli comunica il valore di $\bar{\mu}$. Notiamo che in questo modo viene distrutto lo stato iniziale di C , come detto inizialmente, e dunque il No Cloning Theorem è ancora soddisfatto.

Se $\bar{\mu} = 0$ allora Bob, senza effettuare misure, saprà che $|\psi\rangle_B = \alpha|+\rangle_B + \beta|-\rangle_B$, ossia che la particella B sta nello stato iniziale di C , anche se non conosce quale questo stato sia.

Se invece $\bar{\mu} = i = 1, 2, 3 \neq 0$ allora Bob dovrà eseguire una trasformazione unitaria σ_i sulla particella B , che vedremo comunque porta la particella B nello stato $|\psi\rangle_B = \alpha|+\rangle_B + \beta|-\rangle_B$.

In teoria dell'informazione quantistica una particella a spin $1/2$ (e più in generale un sistema quantistico a due livelli) è indicato come **qubit**, che ha un numero infinito di stati possibili, in contrasto ai due soli possibili stati di un bit classico. Notiamo in particolare che gli stati normalizzati di un sistema a due livelli sono in corrispondenza biunivoca ai punti di una sfera di raggio 1, con angoli specificati dal rapporto tra i coefficienti, detta sfera di Bloch.

Pertanto per trasferire un qubit da Alice a Bob è necessaria una coppia di particelle entangled e in generale per trasferire N qubit saranno necessarie N coppie di particelle entangled. Se il corpo è macroscopico (o anche mesoscopico) chiaramente il processo diventa impraticabile in quanto richiede di poter generare un numero dell'ordine di Avogadro di particelle in uno stato entangled.

Vediamo ora più in dettaglio quanto detto qualitativamente. Scriviamo prima di tutto in maniera esplicita lo stato iniziale del sistema:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_{ABC} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A |+\rangle_B + |-\rangle_A |-\rangle_B) \otimes (\alpha|+\rangle_C + \beta|-\rangle_C) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|+\rangle_A |+\rangle_C |+\rangle_C + \beta|+\rangle_C |-\rangle_C |+\rangle_B + \alpha|-\rangle_A |+\rangle_C |-\rangle_B + \beta|-\rangle_A |-\rangle_C |-\rangle_B) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(|+\rangle_A |+\rangle_C) |+\rangle_C + \beta(|+\rangle_A |-\rangle_C) |+\rangle_B + \alpha(|-\rangle_A |+\rangle_C) |-\rangle_B + \beta(|-\rangle_A |-\rangle_C) |-\rangle_B] = \\ &= \frac{1}{2} \left[\alpha(|\phi_0\rangle_{AC} + |\phi_3\rangle_{AC}) |+\rangle_C + \beta(|\phi_1\rangle_{AC} - i|\phi_2\rangle_{AC}) |+\rangle_B + \right. \\ &\quad \left. + \alpha(|\phi_1\rangle_{AC} + i|\phi_2\rangle_{AC}) |-\rangle_B + \beta(|\phi_0\rangle_{AC} - |\phi_3\rangle_{AC}) |-\rangle_B \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left[\alpha(|\phi_0\rangle_{AC} + |\phi_3\rangle_{AC}) |+\rangle_C + \beta(|\phi_1\rangle_{AC} - i|\phi_2\rangle_{AC}) |+\rangle_B + \right. \\ &\quad \left. + \alpha(|\phi_1\rangle_{AC} + i|\phi_2\rangle_{AC}) |-\rangle_B + \beta(|\phi_0\rangle_{AC} - |\phi_3\rangle_{AC}) |-\rangle_B \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left[|\phi_0\rangle_{AC} (\alpha|+\rangle_B + \beta|-\rangle_B) + |\phi_1\rangle_{AC} (\alpha|-\rangle_B + \beta|+\rangle_B) + \right. \\ &\quad \left. + i|\phi_2\rangle_{AC} (\alpha|-\rangle_B - \beta|+\rangle_B) + |\phi_3\rangle_{AC} (\alpha|+\rangle_B - \beta|-\rangle_B) \right] = \\ &= \frac{1}{2} [|\phi_0\rangle_{AC} \otimes |\psi\rangle_B + |\phi_1\rangle_{AC} \otimes \sigma_1 |\psi\rangle_B + |\phi_2\rangle_{AC} \otimes \sigma_2 |\psi\rangle_B + |\phi_3\rangle_{AC} \otimes \sigma_3 |\psi\rangle_B] \end{aligned} \quad (2.55)$$

Ora è dunque chiaro in reale stato si trova la particella B dopo una misura di stati di Bell $|\phi_\mu\rangle_{AC}$ su AC . Notiamo che i risultati della misura sono equiprobabili con probabilità $1/4$.

Se $\bar{\mu} = 0$ allora chiaramente, proiettando su questo:

$$|\phi_{ABC}\rangle \rightarrow |\phi_0\rangle_{AC} \otimes |\psi\rangle_B \quad (2.56)$$

Se invece $\bar{\mu} = i$ con $i, 2, 3$ allora:

$$|\phi_{ABC}\rangle \rightarrow |\phi_i\rangle_{AC} \otimes \sigma_i |\psi\rangle_B \quad (2.57)$$

Ma se in questo caso Bob agisce con l'operatore unitario $\mathbb{1}_A C \otimes \sigma_i^{(B)}$ (ossia agisce solo su B e non su AC), allora lo stato sarà:

$$|\phi_{ABC}\rangle \rightarrow |\phi_i\rangle_{AC} \otimes \sigma_i |\psi\rangle_B \xrightarrow{\mathbb{1}_A C \otimes \sigma_i^{(B)}} |\phi_1\rangle_{AC} \otimes |\psi\rangle_B \quad (2.58)$$

per le proprietà di idempotenza delle matrici di Pauli $\sigma_i^2 = \mathbb{1}$.

Pertanto usando questo operatore Bob è in grado di ottenere una copia di $|\psi\rangle_C$ nella particella B .

Notiamo poi come non solo C non sta più nello stato iniziale, ma sta in uno stato entangled con A che non ha alcuna memoria dello stato iniziale, ossia non contiene i coefficienti α, β :

$$|\phi_0\rangle_{AC} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A |+\rangle_C + |-\rangle_A |-\rangle_C) \quad (2.59)$$

Pertanto questa procedura effettivamente distrugge l'informazione iniziale per trasportarla da un'altra parte. Questo è diverso da quanto avviene in Star Trek, dove il corpo iniziale viene distrutto e ricreato altrove, ma comunque viene distrutto il suo stato iniziale e ricreato in un'altra particella.

2.2.4 Informazione Incompleta

Finora abbiamo supposto di trattare solo sistemi in cui lo stato iniziale era ben noto. Tuttavia è possibile anche che abbiamo solo conoscenza "parziale" del sistema. Ci chiediamo dunque in quale modo possiamo considerare il sistema in tal caso.

Ad esempio potremmo aver fatto una misura sullo stato di diverse grandezze, i cui operatori non sono però un CSCO per lo spazio di Hilbert del sistema, ossia la misura non determina univocamente uno stato. Come possiamo descrivere il sistema?

2.2.5 Caso Classico

Facciamo alcune analogie classiche a scopo didattico. In fisica classica lo stato di un sistema di N particelle appartiene allo spazio delle fasi Γ , ed è determinato dalle $3N$ coordinate lagrangiane e dalle $3N$ componenti dell'impulso e $\Gamma = \mathbb{R}^{6N}$. Sia ad esempio il sistema un gas di N atomi, nel qual caso è praticamente impossibile conoscere gli stati delle singole particelle e dunque determinare univocamente lo stato del sistema. Per descrivere il sistema si fa dunque uso di una descrizione statistica e si introduce una funzione $\rho(p)$ tale che:

$$dp = \rho(p)d\tau \quad (2.60)$$

è la probabilità che il sistema abbia uno stato contenuto all'interno del volume $d\tau$ nello spazio delle fasi, centrato attorno ad un certo p .

Se abbiamo un numero N sufficiente di copie del sistema, ossia un ensemble, allora:

$$dN = N\rho(p)d\tau \quad (2.61)$$

coincide con il numero di sistemi il cui stato è contenuto nel volume $d\tau$ nello spazio delle fasi.

La funzione $\rho(p)$ è detta funzione densità. Essendo una funzione di probabilità allora:

$$\int_{\Gamma} \rho(p)d\tau = 1 \quad \rho \geq 0 \quad (2.62)$$

Si può anche dimostrare che lungo una soluzione delle equazioni del moto ρ soddisfa una certa equazione di evoluzione temporale.

Ad un certo istante t , per definizione di ρ , vale:

$$dp = \rho(p, t)d\tau \quad (2.63)$$

Dopo un intervallo dt il volume si sarà in generale spostato e deformato in un $d\bar{\tau}$ centrato attorno a $\bar{p} = p + dp$. Ma per un sistema Hamiltoniano la misura del volume si deve conservare, ossia scriviamo (impropriamente):

$$d\bar{\tau} = d\tau \quad (2.64)$$

D'altra parte per la conservazione della probabilità all'interno di un volume nello spazio delle fasi:

$$\rho(p, t)d\tau = \rho(\bar{p}, t + dt)d\bar{\tau} = \rho(p, t + dt)d\tau \quad (2.65)$$

ossia:

$$\rho(p, t) = \rho(\bar{p}, t + dt) \quad (2.66)$$

Esplicitiamo \bar{p} :

$$p = (q_1, \dots, p_{3N}) \Rightarrow \bar{p} = (q_1 + dq_1, \dots, p_{3N} + dp_{3N}) \Rightarrow \begin{cases} dq_1 = \dot{q}_1 dt = \{q_1, H\} dt = \frac{\partial H}{\partial p_1} dt \\ \dots = \dots \\ dp_{3N} = \dot{p}_{3N} dt = \{p_{3N}, H\} dt = -\frac{\partial H}{\partial q_{3N}} dt \end{cases} \quad (2.67)$$

da cui:

$$\begin{aligned} \rho(\bar{p}, t + dt) &= \rho(t, p) + \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_1} \frac{\partial H}{\partial p_1} + \dots - \frac{\partial \rho}{\partial p_{3N}} \frac{\partial H}{\partial q_{3N}} \right) \right] dt = \\ &= \rho + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} - \{H, \rho\} \right) dt \end{aligned} \quad (2.68)$$

Ma per quanto detto:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \{H, \rho\} = 0 \iff \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}} \quad (2.69)$$

che è detta equazione di Liouville.

Sia un certo osservabile $\mathcal{F}(p)$. Allora il suo valore medio al tempo t è dato da:

$$\bar{\mathcal{F}}(t) = \int_{\Gamma} \mathcal{F}(p) \rho(p, t) d\tau \quad (2.70)$$

2.2.6 Caso Quantistico

Consideriamo adesso cosa succede alla descrizione di un sistema quantistico quando si ha informazione incompleta. Per semplicità limitiamoci per il momento a sistemi con spazi di Hilbert a dimensione finita $\dim(\mathcal{H}) = N < \infty$, così da non dover preoccuparci di completezza, domini e convergenza.

Traccia di un Operatore

Iniziamo con il definire la traccia di un operatore $\hat{A} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Sia $\{\phi_n\}$ una base ortonormale di \mathcal{H} , definiamo:

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_{r=1}^N \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_r \rangle \quad (2.71)$$

ossia la somma degli elementi diagonali della matrice associata ad \hat{A} nella base data.

Questa definizione è indipendente dalla scelta della base. Infatti, data un'altra base $\{\chi_n\}$:

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^N \langle \chi_s | \hat{A} | \chi_s \rangle &= \sum_{s,r,r'} \langle \chi_s | \phi_r \rangle \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_{r'} \rangle \langle \phi_{r'} | \chi_s \rangle = \\ &= \sum_{r,r'} \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_{r'} \rangle \langle \phi_{r'} | \sum_s |\chi_s\rangle \langle \chi_s| \phi_r \rangle = \sum_{r,r'} \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_{r'} \rangle \langle \phi_{r'} | \phi_r \rangle = \\ &= \sum_r \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_r \rangle = \text{Tr } \hat{A} \end{aligned} \quad (2.72)$$

come volevasi dimostrare.

Dimostriamo alcune proprietà della traccia. Notiamo che questa è una funzione lineare su $\mathcal{L}(\mathcal{H})$, per linearità di \hat{A} e del prodotto scalare:

$$\text{Tr}(\alpha \hat{A} + \beta \hat{B}) = \alpha \text{Tr } \hat{A} + \beta \text{Tr } \hat{B} \quad (2.73)$$

È meno ovvio dimostrare che la traccia del prodotto non dipende dal suo ordine, ossia la traccia di un commutatore è sempre nulla:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) &= \sum_{r=1}^N \langle \phi_r | \hat{A}\hat{B} | \phi_r \rangle = \sum_{r,s} \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_s \rangle \langle \phi_s | \hat{B} | \phi_r \rangle = \\ &= \sum_{r,s} \langle \phi_s | \hat{B} | \phi_r \rangle \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_s \rangle = \sum_{r,s} \langle \phi_s | \hat{B}\hat{A} | \phi_s \rangle = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A}) \end{aligned} \quad (2.74)$$

Sia un proiettore ortogonale \hat{P} , relativo al sottospazio R di \mathcal{H} con $\dim R = g$. Ricordiamo che questo equivale a richiedere che:

$$\hat{P}^2 = \hat{P} \quad \hat{P}^\dagger = \hat{P} \quad \mathcal{R}(\hat{P}) = R \quad (2.75)$$

Sia poi $\{\xi_i\}$ una base per R . Possiamo scrivere:

$$\hat{P} = \sum_{i=1}^g |\xi_i\rangle \langle \xi_i| \quad (2.76)$$

Calcoliamone la traccia:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{P} &= \sum_{r=1}^N \langle \phi_r | \hat{P} | \phi_r \rangle = \sum_{r=1}^N \sum_{i=1}^g \langle \phi_r | \xi_i \rangle \langle \xi_i | \phi_r \rangle = \\ &= \sum_{i=1}^g \sum_{r=1}^N \langle \xi_i | \phi_r \rangle \langle \phi_r | \xi_i \rangle = \sum_{i=1}^g \langle \xi_i | \xi_i \rangle = g \end{aligned} \quad (2.77)$$

Quando passiamo a spazi di Hilbert infinito-dimensionali le somme diventano serie infinite, che non è detto abbiano limite o comunque convergano ad una quantità finita (ad esempio la traccia dell'identità è una serie che diverge positivamente). Dovremo dunque il dominio di Tr restringere ad una certa sottoclasse di operatori inclusa in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.

2.3 Lezione 18

2.3.1 Misure di Osservabili su Stati Puri

Consideriamo un sistema in uno stato iniziale $|\psi_0\rangle$ ben definito, ottenuto ad esempio misurando grandezze che formano un CSCO. L'evoluzione temporale è dunque univocamente determinata dall'equazione di Schrodinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad \psi(t_0) = \psi_0 \quad (2.78)$$

Supponiamo adesso di voler fare una misura dell'osservabile G , a cui corrisponde l'operatore \hat{G} con autovalori e autovettori:

$$\hat{G}\phi_{rs} = \gamma_r \phi_{rs} \quad (2.79)$$

con s che varia sulla degenerazione (potenzialmente infinita). L'operatore di proiezione su un autospazio di \hat{G} associato a γ_r è dato da:

$$\hat{P}_r^{(G)} = \sum_s |\phi_{rs}\rangle \langle \phi_{rs}| \quad (2.80)$$

Allora la probabilità di osservare γ_r al tempo t è data da:

$$P(G = \gamma_r | t) = \langle \psi(t) | \hat{P}_r^{(G)} | \psi(t) \rangle \quad (2.81)$$

Si trova che questo implica che i momenti di questa distribuzione sono definiti in maniera banale come elementi di matrice di polinomi di \hat{G} .

Vogliamo adesso però riscrivere la probabilità e i momenti della distribuzione si possono scrivere usando la traccia:

$$P(G = \gamma_r | t) = \text{Tr} \left(\hat{P}_r^{(G)} | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \right) \quad \langle G \rangle_t = \text{Tr} \left(\hat{G} | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \right) \quad (2.82)$$

Esplicitiamo dunque i membri destri:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\hat{P}_r^{(G)} | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \right) &= \sum_n \langle \phi_n | \hat{P}_r^{(G)} | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \phi_n \rangle = \sum_n \langle \psi(t) | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \hat{P}_r^{(G)} | \psi(t) \rangle = \\ &= \langle \psi(t) | \hat{P}_r^{(G)} | \psi(t) \rangle = P(G = \gamma_r | t) \end{aligned} \quad (2.83)$$

2.3.2 Esempi in cui l'informazione è incompleta

Misura di Osservabili

Un caso in cui possiamo avere solo informazione parziale sullo stato iniziale di un sistema è il seguente. Immaginiamo di fare una misura di un osservabile L sul sistema, nel caso in cui questo ha autovalori non degeneri:

$$\hat{L}\psi_j = \lambda_j \psi_j \quad (2.84)$$

Immaginiamo di avere un ensemble di particelle nello stato $|\psi_0\rangle$. Dopo aver fatto la misura di L su questo ensemble saranno note le probabilità p_j che lo stato del sistema sia descritto da $|\psi_j\rangle$ (che coincidono con i moduli quadri dei coefficienti di Fourier in questa base). Indichiamo con t_1 il tempo della misura.

Facciamo adesso una misura di G al tempo $t_2 > t_1$ sull'ensemble. La probabilità di misurare un certo valore di G sull'ensemble sarà data dalla media pesata sulle probabilità dei singoli stati $|\psi_j\rangle$:

$$P(G = \gamma_r | t) = \sum_j p_j P_j(G = \gamma_r | t) \quad (2.85)$$

e analogamente il suo valore medio sarà dato da:

$$\langle G \rangle_t = \sum_j p_j \langle G \rangle_{j,t} \quad (2.86)$$

Scattering di un fascio su un bersaglio

Ricordiamo adesso una situazione discussa nella teoria dello scattering. Abbiamo considerato un fascio di particelle di momento approssimativo \vec{p} che attraversa una superficie Σ perpendicolare a \vec{p} . Dato lo stato ben definito $|\phi_{in}\rangle$ con parametro di impatto nullo, allora gli stati di tutte le altre particelle sono dati per traslazione lungo il piano Σ e si indicano con $|\phi_{\vec{\rho}}\rangle$.

Nel caso di distribuzione uniforme allora la probabilità che una particella attraversi un elemento di superficie di Σ è data da:

$$dp = \frac{d^2\rho}{\mu(\Sigma)} \quad (2.87)$$

dove abbiamo supposto che la superficie è finita. Nel caso particolare di una circonferenza di raggio R allora risulta $|\vec{\rho}| < R$ e $\mu(\Sigma) = \pi R^2$. Questo è un caso in cui non abbiamo informazione completa sullo stato iniziale di una singola particella. Possiamo comunque assegnare la probabilità classica che lo stato del sistema sia $|\phi_{\vec{\rho}}\rangle$.

Notiamo che ha certamente senso considerare un sistema che può occupare stati tra loro non ortogonali, diversamente da prima, ossia che la condizione di ortonormalizzazione non va richiesta in generale.

In questo caso poi possiamo scrivere:

$$\langle G \rangle_t = \frac{1}{\mu(\Sigma)} \int_{\Sigma} d^2\rho \langle \psi_{\vec{\rho}}^{out}(t) | \hat{G} | \psi_{\vec{\rho}}^{out}(t) \rangle \quad (2.88)$$

dove stavolta la media va fatta su una distribuzione di probabilità continua piuttosto che discreta, ossia tramite un integrale.

2.3.3 Operatore Densità

Torniamo al caso della misura di osservabili. Notiamo che per le relazioni dimostrate prima e le proprietà della traccia possiamo definire in maniera naturale un operatore lineare che racchiude le probabilità p_j e i possibili stati $|\psi_j(t)\rangle$ nell'evoluzione temporale:

$$\begin{aligned} P(G = \gamma_r | t) &= \sum_j p_j P_j(G = \gamma_r | t) = \sum_j p_j \text{Tr} \left(\hat{P}_r^{(G)} |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \right) = \\ &= \text{Tr} \left(\hat{P}_r^{(G)} \sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \right) = \text{Tr} \left(\hat{P}_r^{(G)} \hat{\rho}(t) \right) \\ \langle G \rangle_t &= \text{Tr} \left(\hat{G} \hat{\rho}(t) \right) \end{aligned} \quad (2.89)$$

L'operatore $\hat{\rho}$ è detto **operatore statistico** e la matrice associata in una data base è detta **matrice densità**:

$$\rho_{rs}(t) = \langle \phi_r | \hat{\rho}(t) | \phi_s \rangle \quad (2.90)$$

Notiamo che $\hat{\rho}$ è l'analogo quantistico della funzione densità, in quanto generalizza quanto visto in meccanica classica statistica al caso quantistico per un sistema di cui si ha solo informazione parziale.

Nel caso dello scattering poi possiamo scrivere l'operatore statistico come integrale:

$$\hat{\rho} = \int \frac{d^2\rho}{\mu(\Sigma)} |\phi_{\vec{\rho}}\rangle \langle \phi_{\vec{\rho}}| \quad (2.91)$$

Nel caso in cui lo stato è completamente specificato, l'operatore statistico è l'operatore di proiezione sullo questo stato:

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \quad (2.92)$$

Tramite le relazioni:

$$\langle G \rangle_t = \int dq dp \rho(q, p, t) G(q, p) \iff \langle G \rangle_t = \text{Tr}(\hat{G} \hat{\rho}(t)) \quad (2.93)$$

troviamo anche l'analogo quantistico dell'integrale sullo spazio delle fasi:

$$\int dq dp \iff \text{Tr} \quad (2.94)$$

Notiamo tuttavia che nel caso quantistico vi è l'ulteriore elemento statistico dovuto alla natura delle misurazioni su un dato stato, oltre all'incertezza sul preciso stato occupato dal sistema. Nel caso quantistico l'operatore statistico descrive entrambi gli aspetti statistici.

Questo ci conduce a generalizzare la definizione di stato ad uno qualunque descritto operatore statistico $\hat{\rho}(t)$. Distinguiamo però tra **stati puri**, che possono essere scritto come proiettore su un singolo vettore $|\psi(t)\rangle$, e **stati miscela**, che invece non possono essere scritti come proiettore su un singolo vettore.

2.3.4 Proprietà Generali dell'Operatore Statistico

Caratterizzazione

Vediamo adesso le proprietà generali e caratterizzanti dell'operatore statistico.

Per semplicità supponiamo si possa scrivere come serie discreta (piuttosto che integrale) di proiettori relativi a certi stati che si evolvono con un dato evolvente temporale:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \quad \begin{cases} \sum_j p_j = 1 \\ p_j \geq 0 \\ \langle \psi_j(t) | \psi_j(t) \rangle = 1 \end{cases} \quad (2.95)$$

Con queste proprietà troviamo che:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}(t)) = \sum_j p_j \text{Tr}(|\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)|) = \sum_j p_j \text{Tr}(|\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)|) = \sum_j p_j = 1 \quad (2.96)$$

Pertanto un operatore statistico ha traccia 1:

$$\boxed{\text{Tr} \hat{\rho}(t) = 1} \quad (2.97)$$

L'operatore statistico è poi anche autoaggiunto, in quanto i p_j sono reali e i proiettori ortogonali sono autoaggiunti:

$$p_j^* = p_j \Rightarrow \hat{\rho}^\dagger(t) = \hat{\rho}(t) \quad (2.98)$$

L'operatore statistico è poi definito positivo, ossia che il suo valore di aspettazione su un qualunque stato è non negativo:

$$\hat{\rho}(t) \geq 0 \iff \forall |f\rangle \in \mathcal{H} \quad \langle f | \hat{\rho}(t) | f \rangle \geq 0 \quad (2.99)$$

Infatti siccome $p_j \geq 0$:

$$\langle f | \hat{\rho}(t) | f \rangle = \sum_j p_j \langle f | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) | f \rangle = \sum_j p_j |\langle f | \psi_j(t) \rangle|^2 \geq 0 \quad (2.100)$$

Verifichiamo adesso che queste tre proprietà caratterizzano gli operatori statistici:

$$\text{Tr} \hat{\rho}(t) = 1 \quad \hat{\rho}^\dagger(t) = \hat{\rho}(t) \quad \hat{\rho}(t) \geq 0 \quad (2.101)$$

Se $\hat{\rho}$ è hermitiano allora ammette una decomposizione spettrale:

$$\hat{\rho} = \sum_j \pi_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| + \sum_s \int_{\sigma_c} d\pi \pi |\phi_{\pi s}\rangle \langle \phi_{\pi s}| \quad (2.102)$$

con:

$$\langle \phi_{j'} | \phi_j \rangle = \delta_{jj'} \quad \langle \phi_{\pi' s'} | \phi_{\pi s} \rangle = \delta_{ss'} \delta(\pi - \pi') \quad \langle \phi_{\pi s} | \phi_j \rangle = 0 \quad (2.103)$$

Troviamo in realtà che la condizione che $\hat{\rho}$ sia di classe traccia implica che non ammette spettro continuo. Infatti calcoliamo la sua traccia in una base ortonormale propria:

$$\begin{aligned}\text{Tr } \hat{\rho} &= \sum_r \langle \chi_r | \hat{\rho} | \chi_r \rangle = \sum_{rj} \pi_j |\langle \phi_j | \chi_r \rangle|^2 + \sum_{rs} \int d\pi \pi |\langle \phi_{\pi s} | \chi_r \rangle|^2 = \\ &= \sum_j \pi_j \langle \phi_j | \phi_j \rangle + \sum_s \int d\pi \pi \langle \phi_{\pi s} | \phi_{\pi s} \rangle = \\ &= \sum_j \pi_j + \infty\end{aligned}\quad (2.104)$$

In quanto la norma di vettori impropri è infinita (ossia diremmo che $\delta(0) = +\infty$) e dunque la sua traccia non può essere mai finita e in particolare 1. Questo implica poi anche che:

$$\sum_j \pi_j = \text{Tr } \rho = 1 \quad (2.105)$$

Per verificare poi che le π_j sono probabilità classiche, ossia che sono anche $\pi_j \geq 0$, usiamo che l'operatore statistico è definito positivo.

Infatti se consideriamo il valore di aspettazione sugli autovettori:

$$\langle \phi_k | \hat{\rho} | \phi_k \rangle = \sum_j \pi_j \langle \phi_k | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \phi_k \rangle = \pi_j \geq 0 \quad (2.106)$$

come volevasi dimostrare.

Non Unicità della Rappresentazione

Verifichiamo a questo punto che l'operatore definito nel caso dello scattering è effettivamente un operatore di scattering. Siccome è chiaramente hermitiano a vista, bisogna verificare solo che ha traccia unitaria ed è definito positivo:

$$\begin{aligned}\text{Tr } \hat{\rho} &= \sum_r \int \frac{d^2 \rho}{\mu(\Sigma)} \langle \chi_r | \phi_{\bar{\rho}} \rangle \langle \phi_{\bar{\rho}} | \chi_r \rangle = \int \frac{d^2 \rho}{\mu(\Sigma)} \langle \phi_{\bar{\rho}} | \phi_{\bar{\rho}} \rangle = \\ &= \int \frac{d^2 \rho}{\mu(\Sigma)} = 1 \\ \langle f | \hat{\rho} | f \rangle &= \int \frac{d^2 \rho}{\mu(\Sigma)} |\langle f | \phi_{\bar{\rho}} \rangle|^2 \geq 0\end{aligned}\quad (2.107)$$

Questo prova che l'operatore statistico non ha ammette una rappresentazione univoca, in quanto in tal caso addirittura si scrive come integrale e non come serie discreta.

Caratterizzazione di Stati Puri e Misti

Vogliamo adesso trovare delle proprietà che caratterizzano gli operatori statistici che rappresentano stati puri e quelli che rappresentano stati misti/miscela.

Questa proprietà è in realtà molto semplice da dimostrare. Questo è infatti vero se e solo se è anche un operatore di proiezione ortogonale, e dunque che (essendo le altre proprietà già soddisfatte):

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \quad (2.108)$$

Usiamo la decomposizione spettrale:

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{jk} \pi_j \pi_k |\phi_j\rangle \langle \phi_j | \phi_k\rangle \langle \phi_k| = \sum_j \pi_j^2 |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \quad (2.109)$$

Ma questo coincide con $\hat{\rho}$ se e solo se:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^2 &= \hat{\rho} \\ \sum_j \pi_j^2 |\phi_j\rangle \langle \phi_j| &= \sum_j \pi_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \\ \pi_j^2 &= \pi_j\end{aligned}\quad (2.110)$$

che è verificato se e solo se $\pi_j = 0$ oppure se $\pi_j = 1$ (essendo altre soluzioni non reali positive). Ma siccome $\sum_j \pi_j = 1$ allora al più un solo π_k potrà valere 1, ossia $\pi_j = \delta_{jk}$ per un certo k , e dunque che è uno stato puro:

$$\hat{\rho} = |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (2.111)$$

Lo Spazio degli Operatori Statistici è Convesso

Possiamo dimostrare anche che gli operatori statistici formano uno spazio convesso. Altrimenti detto, dati due operatori statistici $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2$ allora l'operatore $\hat{\rho}(\lambda)$ definito da:

$$\forall \lambda \in [0, 1] \quad \hat{\rho}(\lambda) = \lambda \hat{\rho}_1 + (1 - \lambda) \hat{\rho}_2 \quad (2.112)$$

è ancora un operatore statistico. Verifichiamolo:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^2 \dagger(\lambda) &= \lambda^* \hat{\rho}_1^\dagger + (1 - \lambda^*) \hat{\rho}_2^\dagger = \lambda \hat{\rho}_1 + (1 - \lambda) \hat{\rho}_2 = \hat{\rho}(\lambda) \\ \text{Tr}(\hat{\rho}(\lambda)) &= \lambda \text{Tr} \hat{\rho}_1 + (1 - \lambda) \text{Tr} \hat{\rho}_2 = \lambda + (1 - \lambda) = 1 \\ \langle \lambda | \hat{\rho}(\lambda) | f \rangle &= \lambda \langle f | \hat{\rho}_1 | f \rangle + (1 - \lambda) \langle f | \hat{\rho}_2 | f \rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (2.113)$$

Evoluzione Temporale

Cerchiamo adesso quale equazione regola l'evoluzione temporale di $\hat{\rho}$, a partire dall'evoluzione temporale dei singoli stati in cui si può decomporre.

Usiamo una rappresentazione generica:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \quad (2.114)$$

Sappiamo che questi stati si evolvono come segue:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t)| = \langle \psi(t)| \hat{\mathcal{H}} \quad (2.115)$$

da cui:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} &= i\hbar \sum_j p_j \frac{\partial}{\partial t} (|\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)|) = i\hbar \sum_j p_j \left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| + |\psi_j(t)\rangle \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_j(t)| \right) = \\ &= \sum_j p_j \left(\hat{\mathcal{H}} |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| - |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \hat{\mathcal{H}} \right) = \\ &= \hat{\mathcal{H}} \left(\sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \right) - \left(\sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \right) \hat{\mathcal{H}} = \\ &= \hat{\mathcal{H}} \hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t) \hat{\mathcal{H}} \end{aligned} \quad (2.116)$$

e infine, l'equazione di Liouville quantistica (equazione di Liouville-von Neumann):

$$\boxed{\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}]} \quad (2.117)$$

che è assolutamente analoga all'equazione di Liouville (classica) sostituendo il commutatore con le parentesi di Poisson, l'operatore statistico con la funzione statistica e l'operatore hamiltoniano con l'hamiltoniana. Notiamo inoltre che quest'equazione vale anche quando $\hat{\mathcal{H}}$ dipende dal tempo. Nel caso di $\hat{\mathcal{H}}$ indipendente dal tempo allora, data la condizione iniziale, possiamo integrare l'equazione:

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_0 \Rightarrow \hat{\rho}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t} \hat{\rho}_0 e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t} = U(t) \hat{\rho}_0 U^\dagger(t) \quad (2.118)$$

Notiamo che questo non coincide con l'operatore statistico nella rappresentazione di Heisenberg:

$$\hat{\rho}_H(t) = U^\dagger(t) \hat{\rho}_0 U(t) = \hat{\rho}(-t) \quad (2.119)$$

2.3.5 Operatore Statistico Ridotto

Introduciamo adesso il concetto di operatore statistico ridotto. Sia un sistema \mathcal{C} formato da due sottosistemi C_1, C_2 , tale che lo spazio di Hilbert si può scrivere:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (2.120)$$

Sia $\{\phi_{1r}\}, \{\phi_{2s}\}$ rispettivamente una base ortonormale per $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$, da cui $\{\phi_{rs}\}$ con $\phi_{rs} = \phi_{1r} \phi_{2s}$ base ortonormale per \mathcal{H} .

Sia $\hat{\rho} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ un operatore statistico. Sia poi G_1 un osservabile relativo a C_1 . Il corrispondente operatore agisce dunque come segue sulla base $\{\phi_{rs}\}$:

$$\hat{G}\phi_{rs} = (\hat{G}\phi_{1r})\phi_{2s} = \sum_{r'} \langle \phi_{1r'} | \hat{G} | \phi_{1r} \rangle \phi_{1r'} \phi_{2s} \quad (2.121)$$

da cui il valore atteso sull'operatore $\hat{\rho}$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{G}_1 \rangle &= \text{Tr}(\hat{G}_1 \hat{\rho}) = \sum_{rs} \langle \phi_{1r} \phi_{2s} | \hat{G}_1 \hat{\rho} | \phi_{1r} \phi_{2s} \rangle = \sum_{rs} \langle \phi_{1r} \phi_{2s} | \hat{G}_1 (\mathbb{1}_1 \otimes \mathbb{1}_2) \hat{\rho} | \phi_{1r} \phi_{2s} \rangle \\ &= \sum_{rr' s} \langle \phi_{1r} | \hat{G}_1 | \phi_{1r'} \rangle \langle \phi_{1r'} \phi_{2s} | \hat{\rho} | \phi_{1r} \phi_{2s} \rangle = \sum_{rr'} \langle \phi_{1r} | \hat{G}_1 | \phi_{1r'} \rangle \sum_s \langle \phi_{1r'} \phi_{2s} | \hat{\rho} | \phi_{1r} \phi_{2s} \rangle \\ &= \sum_{rr'} \langle \phi_{1r} | \hat{G}_1 | \phi_{1r'} \rangle \langle \phi_{1r'} | \hat{\rho}_1 | \phi_{1r} \rangle = \sum_r \langle \phi_{1r} | \hat{G}_1 \hat{\rho}_1 | \phi_{1r} \rangle = \text{Tr}(\hat{G}_1 \hat{\rho}_1) \end{aligned} \quad (2.122)$$

Dove abbiamo definito l'operatore statistico ridotto allo spazio \mathcal{H}_1 :

$$\hat{\rho}_1 = \sum_s \langle \phi_{2s} | \hat{\rho} | \phi_{2s} \rangle \equiv \text{Tr}_2 \hat{\rho} \quad (2.123)$$

e Tr_2 è detta traccia parziale rispetto allo spazio \mathcal{H}_2 , che ha come risultato un operatore lineare su \mathcal{H}_1 piuttosto che un semplice scalare. Possiamo verificare che questo è poi a sua volta un operatore statistico su \mathcal{H}_1 :

$$\hat{\rho}_1^\dagger = \hat{\rho}_1 \quad \text{Tr} \hat{\rho}_1^\dagger = 1 \quad \hat{\rho}_1 \geq 0 \quad (2.124)$$

2.3.6 Esempio

Ritorniamo al caso di un sistema di due particelle a spin 1/2 e supponiamo che questo si trovi nello stato puro dato dallo stato di Bell con $\mu = 0$:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= |\phi_0\rangle \langle \phi_0| \frac{1}{2} [(|+, +\rangle + |-, -\rangle)(\langle +, +| + \langle -, -|)] = \\ &= \frac{1}{2} (|+, +\rangle \langle +, +| + |+, +\rangle \langle -, -| + |-, -\rangle \langle +, +| + |-, -\rangle \langle -, -|) = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.125)$$

Chiaramente questo è uno stato puro, che si verifica a vista dalla sua rappresentazione nella base degli stati di Bell.

Calcoliamo poi la matrice ridotta rispetto alla prima particella, che sarà uno scalare:

$$\hat{\rho}_1 = \text{Tr}_2(\hat{\rho}) = \langle + | \hat{\rho} | + \rangle + \langle - | \hat{\rho} | - \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \mathbb{1} \quad (2.126)$$

Notiamo però che stavolta lo stato non è più puro, ma è miscela:

$$\rho_1^2 = \frac{1}{4} \mathbb{1} = \frac{1}{2} \hat{\rho} \neq \hat{\rho} \quad (2.127)$$

Come in realtà già ci aspettavamo, non possiamo infatti esprimere il sottosistema in uno stato puro. Per simmetria rispetto al sottosistema due ci aspettiamo che valga lo stesso.

2.4 Lezione 19

Siano $\{u_i\}, \{v_k\}$ basi ortonormali per $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ rispettivamente. Il sistema che ha per spazio $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ha dunque una base ortonormale data da:

$$|i, k\rangle = u_i \otimes v_k \quad (2.128)$$

Lo stato del sistema è rappresentato da un operatore statistico, che ha rappresentazione generica come segue:

$$\hat{\rho} = \sum_{ik} \sum_{i'k'} \rho_{ik, i'k'} |i'k'\rangle \langle ik| \quad (2.129)$$

I coefficienti godono delle seguenti proprietà, come conseguenza diretta delle proprietà dell'operatore statistico:

$$\rho_{i'k', ik}^* = \rho_{ik, i'k'} \quad \sum_{ik} \rho_{ik, ik} = 1 \quad \sum_{ik, i'k'} f_{i'k'}^* \rho_{i'k', ik} f_{ij} \geq 0 \quad \forall f_{ik} \quad (2.130)$$

Sia poi un generico osservabile su \mathcal{H}_1 :

$$\hat{G}_1 = \sum_{i'i} G_{i'i}^1 |i'\rangle_1 \langle i|_1 \rightarrow \hat{G}_1 = \sum_{i'i,k} G_{i'i}^1 |i',k\rangle \langle i,k| \Rightarrow G_{i'k',ik}^1 = G_{i'i}^1 \delta_{k'k} \quad (2.131)$$

Esplicitiamo il suo valore atteso:

$$\langle G_1 \rangle_\rho = \text{Tr}_{\mathcal{H}}(\hat{G}_1 \hat{\rho}) = \sum_{ik,i'k'} G_{ik,i'k'}^1 \rho_{i'k',ik} = \sum_{ik,i'k'} G_{i'i}^1 \delta_{kk'} \rho_{i'k',ik} = \sum_{ii'} G_{i'i}^1 \sum_k \rho_{i'k,ik} = \sum_{ii'} G_{i'i}^1 \rho_{i'i}^1 \quad (2.132)$$

con:

$$\rho_{i'i}^1 = \sum_k \rho_{i'k,ik} \quad (2.133)$$

coefficienti dell'operatore statistico ridotto. Questo ci permette di semplificare il calcolo di valori di aspettazione e probabilità di grandezze relative ad uno solo sottosistema. Chiaramente se consideriamo grandezze relative ad entrambi i sottosistemi allora dovremo usare l'operatore statistico completo.

2.4.1 Stati Puri di un Sistema e dei Sottosistemi

Abbiamo visto la lezione scorsa che se lo stato del sistema è puro e dato da uno stato di Bell allora i sottosistemi non si trovano in uno stato puro.

Possiamo dimostrare in particolare se il sistema si trova in uno stato puro non entangled allora i sottosistemi stanno ancora in stati puri (e viceversa, banalmente). Infatti se:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi| \quad |\psi\rangle = |\phi\rangle_1 |\xi\rangle_2 \quad (2.134)$$

allora:

$$\hat{\rho}_1 = |\phi\rangle_1 \langle \phi|_1 \quad \hat{\rho}_2 = |\xi\rangle_2 \langle \xi|_2 \quad (2.135)$$

Pertanto entrambi i sottosistemi stanno in uno stato puro se e solo se il sistema si trova in uno stato puro non entangled.

2.4.2 Entropia di von Neumann

Ci chiediamo adesso se è possibile quantificare l'informazione che si conosce sullo stato di un sistema a partire dal solo operatore statistico $\hat{\rho}$.

Questo si può fare introducendo l'Entropia di von-Neumann, che misura propriamente la mancanza di informazione:

$$S[\hat{\rho}] \equiv -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}) \quad (2.136)$$

Questo è un funzionale sul sottoinsieme degli operatori statistici ed ha dunque valore in \mathbb{R} , come la traccia (totale) Tr .

Notiamo prima di tutto che possiamo scrivere l'operatore $\hat{\rho} \log \hat{\rho}$ nella base degli autovettori di $\hat{\rho}$, per definizione di funzione di un operatore:

$$\begin{aligned} \langle \phi_i | \hat{\rho} \log \hat{\rho} | \phi_j \rangle &= \pi_i \log \pi_i \delta_{ij} \\ \hat{\rho} \log \hat{\rho} &= \sum_i \pi_i \log \pi_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \end{aligned} \quad (2.137)$$

che ci permette di esplicitare la traccia sempre in questa base:

$$S = -k_B \sum_i \pi_i \log \pi_i \quad (2.138)$$

Questo ci permette di dire a vista che per uno stato puro:

$$S = -k_B \log 1 = 0 \quad (2.139)$$

Usando $\rho \geq 0 \iff 0 \leq \pi_i \leq 1$ possiamo dimostrare che l'entropia è non-negativa:

$$\pi_i \leq 1 \Rightarrow \log \pi_i \leq 0 \Rightarrow \sum_i \pi_i \log \pi_i \leq \sum_i \log \pi_i \leq 0 \Rightarrow S = -k_B \sum_i \pi_i \log \pi_i \geq 0 \quad (2.140)$$

Notiamo che l'entropia di uno stato miscela è sempre positiva, in quanto vale $0 \leq \pi_i < 1$ per ogni i , e dunque la somma $\sum_i \pi_i \log \pi_i$ è strettamente negativa.

Pertanto l'entropia è minima quanto lo stato è puro, ossia quando l'informazione è massima, come ci aspettavamo.

2.4.3 Proprietà dell'Entropia di von-Neumann

Consideriamo due sottosistemi con spazi $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ e operatori statistici $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2$. Il prodotto tensoriale $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$ è ancora un operatore statistico ed è in particolare uno stato del sistema (che ha per spazio $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$) dove i due sottosistemi non stanno interagendo - chiaramente al variare di t se l'hamiltoniana ha dei termini di interazione allora l'operatore poi non rimarrà in questa forma. Questo è la generalizzazione di "stato puro" per un sistema composto da altri sottosistemi in stati generici (non necessariamente puri).

Verifichiamo che $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$ è effettivamente un operatore statistico. Questo è chiaramente hermitiano e definito positivo (l'elemento di matrice si può espandere in una base fattorizzata dove ciascuno $\hat{\rho}_i$ è definito positivo). Verifichiamo che ha traccia unitaria in una base ortonormale fattorizzata (generica) del sistema $|i, k\rangle = |\phi_i\rangle \otimes |\phi_k\rangle$:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2) = \sum_{ik} \langle ik | \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 | ik \rangle = \sum_i \langle i | \hat{\rho}_1 | i \rangle \sum_k \langle k | \hat{\rho}_2 | k \rangle = \text{Tr}_1(\hat{\rho}_1) \text{Tr}_2(\hat{\rho}_2) = 1 \quad (2.141)$$

L'entropia di Gode della proprietà di additività, ossia l'entropia di un sistema composto da sistemi non interagenti è data dalla somma delle entropie. Ci poniamo nella base fattorizzata data dal prodotto tensoriale degli autovettori di $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2$, che coincide con una base di autovettori di $\hat{\rho}$:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_1 |\phi_i^1\rangle &= \pi_i^1 |\phi_i^1\rangle \\ \hat{\rho}_2 |\phi_k^2\rangle &= \pi_k^2 |\phi_k^2\rangle \\ |i, k\rangle &\equiv |\phi_i^1\rangle \otimes |\phi_k^2\rangle \\ \hat{\rho} |i, k\rangle &= \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 |i, k\rangle = \pi_i^1 \pi_k^2 |i, k\rangle = \pi_{ik} |i, k\rangle \end{aligned} \quad (2.142)$$

Notiamo che gli autovalori dell'operatore statistico totale sono i prodotti degli autovalori degli operatori statistici parziali.

Dimostriamo quanto detto:

$$\begin{aligned} S[\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2] &= -k_B \text{Tr}((\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2) \log(\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2)) = -k_B \sum_{ik} \langle i, k | (\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2) \log(\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2) | i, k \rangle = -k_B \sum_{ik} \pi_i^1 \pi_k^2 \log(\pi_i^1 \pi_k^2) = \\ &= -k_B \sum_i \pi_i^1 \log \pi_i^1 \sum_k \pi_k^2 - k_B \sum_k \pi_k^2 \log \pi_k^2 \sum_i \pi_i^1 = -k_B \sum_i \pi_i^1 \log \pi_i^1 - k_B \sum_k \pi_k^2 \log \pi_k^2 = \\ &= -k_B \text{Tr}_1(\hat{\rho}_1 \log \hat{\rho}_1) - k_B \text{Tr}_2(\hat{\rho}_2 \log \hat{\rho}_2) = S_1 + S_2 \end{aligned} \quad (2.143)$$

2.4.4 Massima Entropia

Avendo visto che l'entropia è minima quando lo stato è puro, ossia quando l'informazione sullo stato è massima, ci chiediamo adesso per quale stato l'entropia è massima.

Consideriamo il caso di uno spazio di Hilbert finito dimensionale $\dim \mathcal{H} < \infty$, per cui possiamo scrivere l'entropia in un dato stato come segue:

$$S = -k_B \sum_{i=1}^N \pi_i \log \pi_i \quad \pi_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^N \pi_i = 1 \quad (2.144)$$

Per massimizzare la S usiamo il metodo dei moltiplicatori di Lagrange a causa del vincolo sui π_i (raccolti nel vettore $\vec{\pi}$), ossia vogliamo massimizzare $F(\lambda)$ definita da:

$$F(\lambda) = S(\vec{\pi}) - \lambda \phi(\vec{\pi}) \quad \phi(\vec{\pi}) = \sum_{i=1}^N \pi_i - 1 \quad (2.145)$$

rispetto a $\vec{\pi}$.

EsPLICITIAMO la $F(\lambda)$:

$$F(\lambda) = \sum_{i=1}^N (-k_B \pi_i \log \pi_i - \lambda \pi_i) + \lambda \quad (2.146)$$

Cerchiamo dunque i punti stazionari:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \pi_k} &= 0 \\ -k_B \log \pi_k - k_B - \lambda &= 0 \\ \log \pi_k &= -1 - \frac{\lambda}{k_B} \end{aligned} \quad (2.147)$$

Ma questo implica che:

$$\pi_1 = \pi_2 = \dots = \pi_N = \pi \quad (2.148)$$

Ma per il vincolo di normalizzazione:

$$1 = \sum_{i=1}^N \pi_i = N\pi \Rightarrow \pi = \frac{1}{N} \quad (2.149)$$

Lo stato per cui l'entropia di uno sistema a dimensione finita è massima è dunque dato da:

$$\hat{\rho} = \sum_i \pi_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \frac{1}{N} \quad (2.150)$$

che è l'identità normalizzata rispetto alla traccia. Questo significa anche che ogni base è una base di autovettori e dunque che lo stato che massimizza l'entropia/minimizza l'informazione è quello che sta con uguale probabilità in ogni possibile stato (puro) del sistema.

Ricordiamo a questo punto l'esempio del sistema di due particella a spin 1/2 che sta in uno stato di Bell. In questo caso abbiamo visto che i sottosistemi stanno in stati miscela i cui operatori statistici sono proporzionali all'identità, ossia stanno proprio in stati che minimizzano l'informazione nota sul (sotto)sistema.

2.4.5 Distribuzione di Boltzmann

Vogliamo adesso dimostrare che un sistema di particelle all'equilibrio termodinamico alla temperatura T è descritto dalla distribuzione (quantistica) di Boltzmann:

$$\hat{\rho}_T = \frac{e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}}{Z} \quad (2.151)$$

con Z costante di normalizzazione detta funzione di partizione:

$$\text{Tr } \hat{\rho} = 1 \iff Z = \text{Tr } e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \quad (2.152)$$

Prima di tutto chiarifichiamo cosa intendiamo per sistema di particelle all'equilibrio termodinamico. Richiediamo prima di tutto che $\hat{\rho}_T$ sia indipendente dal tempo, che implica che commuta con l'hamiltoniana per l'equazione di Liouville:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_T}{\partial t} = 0 \iff [\hat{\rho}_T, \hat{\mathcal{H}}] = 0 \quad (2.153)$$

Per un sistema isolato le costanti del moto sono $\hat{\mathcal{H}}, \vec{\mathbf{P}}_{tot}, \vec{\mathbf{M}}_{tot}$ (energia, momento, momento angolare). Tuttavia un sistema termodinamico a temperatura T (ensemble canonico), non è effettivamente isolato. In particolare richiediamo infatti che $\vec{\mathbf{P}}_{tot} = 0, \vec{\mathbf{M}}_{tot} = 0$.

Facciamo a questo punto uso dell'ipotesi ergodica: per un sistema macroscopico all'equilibrio termodinamico, $\hat{\mathcal{H}}$ e le sue funzioni sono le soli costanti del moto del sistema. Pertanto l'ipotesi ergodica implica che l'operatore statistico è funzione dell'hamiltoniana:

$$\hat{\rho}_T = f(\hat{\mathcal{H}}) \quad (2.154)$$

Notiamo poi che la condizione di equilibrio termodinamico implica che l'energia media del sistema è fissata.

A questo punto consideriamo il problema agli autovalori per l'hamiltoniana, notando che per un sistema di particelle finito chiuso in una scatola l'hamiltoniana non ammette spettro continuo.

$$\hat{\mathcal{H}} |\phi_{ru}\rangle = E_r |\phi_{ru}\rangle \quad (2.155)$$

con u indice di degenerazione.

Questi sono anche autovettori per l'operatore statistico, che ci forniscono gli autovalori:

$$\hat{\rho}_T |\phi_{ru}\rangle = f(\hat{\mathcal{H}}) |\phi_{ru}\rangle = f(E_r) |\phi_{ru}\rangle = \pi_r |\phi_{ru}\rangle \quad \pi_r \equiv f(E_r) \quad (2.156)$$

da cui la decomposizione spettrale:

$$\hat{\rho}_T = \sum_{r,u} \pi_r |\phi_{ru}\rangle \langle \phi_{ru}| \quad (2.157)$$

e l'entropia del sistema:

$$S_T = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho}_T \log \hat{\rho}_T) = -k_B \sum_{ru} \pi_r \log \pi_r = -k_B \sum_r g(r) \pi_r \log \pi_r \quad (2.158)$$

con $g(r)$ degenerazione di E_r/π_r .

Calcoliamo poi l'energia media per questo stato:

$$E = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_T = \text{Tr}(\hat{\rho}_T \hat{\mathcal{H}}) = \sum_{ru} \langle \phi_{ru} | \hat{\rho}_T \hat{\mathcal{H}} | \phi_{ru} \rangle = \sum_{ru} \pi_r E_r = \sum_r g(r) \pi_r E_r \quad (2.159)$$

Siccome per un sistema termodinamico l'informazione è minima, lo stato del sistema è quello che massimizza l'entropia, con il vincolo di normalizzazione ed energia media fissata. Avendo espresso entropia ed energia media rispetto ai π_r , questo equivale a cercare i π_r che massimizzano S con i due vincoli:

$$\phi = \sum_r g(r) \pi_r - 1 = 0 \quad h = \sum_r g(r) \pi_r E_r - E = 0 \quad (2.160)$$

Vogliamo dunque massimizzare la funzione:

$$F(\lambda, \mu) = S_B - \lambda \phi - \mu h = - \sum_r g_r (k_B \pi_r \log \pi_r + \lambda \pi_r + \mu \pi_r E_r) + \lambda - \mu E \quad (2.161)$$

I punti stazionari si trovano per:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \pi_k} &= 0 \\ -g_k (k_B \log \pi_k + k_B + \lambda + \mu E_k) &= 0 \\ \log \pi_k &= -\mu E_k + c \\ \pi_k &= \kappa e^{-\mu E_k} \end{aligned} \quad (2.162)$$

La costante κ si può portare fuori dalle somme come la costante di normalizzazione, equivalente alla funzione di partizione Z inizialmente data. Pertanto questa definisce effettivamente la distribuzione di Boltzmann:

$$\hat{\rho}_T = \frac{e^{-\mu \hat{\mathcal{H}}}}{Z} \quad (2.163)$$

con $\mu = \beta$. Per definizione di temperatura si trova poi $\beta = 1/kT$.

Notiamo adesso che l'entropia di von-Neumann è un concetto più generale dell'entropia termodinamica in quanto è ben definita anche fuori dall'equilibrio, ossia in situazioni dipendenti dal tempo e per stati/operatori statistici generici (che non rappresentano alcun sistema all'equilibrio termodinamico).

2.5 Lezione 20

I think I can safely say that nobody understands Quantum Mechanics (Richard Feynman, 1965).
I was born not understanding Q.M: and I still don't understand Q.M.

Articolo di Einstein-Podolsky-Rosen (EPR) del 1935: *Can Quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?* <https://journals.aps.org/pr/pdf/10.1103/PhysRev.47.777>.

Shut up and calculate (David Mermin)

2.5.1 Impostazione del Problema

Vogliamo adesso fare alcune considerazioni su un sistema di due particelle a spin 1/2.

Probabilità di Overlap per Singola Particella

Iniziamo da una singola particella a spin 1/2. Indichiamo con $\pi_+(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}})$ la probabilità che una misura nella direzione $\hat{\mathbf{b}}$ dello spin $\vec{\mathbf{S}}$ di una particella a spin 1/2 abbia come risultato $\hbar/2$ immediatamente dopo che una misura dello spin nella direzione $\hat{\mathbf{a}}$ abbia dato il risultato $\hbar/2$.

Scegliamo $\hat{\mathbf{a}}$ come l'asse z e indichiamo con θ l'angolo tra $\hat{\mathbf{a}}$ e $\hat{\mathbf{b}}$. Pertanto poniamo:

$$|\pm\rangle \equiv |\hat{\mathbf{a}}, \pm\rangle \quad \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{a}} |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \quad \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{b}} |\hat{\mathbf{b}}, \pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\hat{\mathbf{b}}, \pm\rangle \quad (2.164)$$

Possiamo poi scrivere:

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\hat{\mathbf{b}}, \pm\rangle = c_1 |+\rangle + c_2 |-\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{b}} = \frac{\hbar}{2} [\sin \theta \sigma_x + \cos \theta \sigma_z] = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.165)$$

con certi coefficienti c_1, c_2 . Troviamo la loro espressione:

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} c_1(1 - \cos \theta) = c_2 \sin \theta \\ c_1 \sin \theta = c_2(1 + \cos \theta) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_1 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} = c_2 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \\ c_1 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} = c_2 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_1 = \cos \frac{\theta}{2} \\ c_2 = \sin \frac{\theta}{2} \end{cases} \quad (2.166)$$

da cui:

$$|\hat{\mathbf{b}}, \pm\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle \pm \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \quad (2.167)$$

e infine la probabilità cercata:

$$\pi_+(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \left| \langle \hat{\mathbf{b}}, + | \hat{\mathbf{a}}, + \rangle \right|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad \pi_-(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (2.168)$$

dove notiamo che vale:

$$\pi_-(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \pi_+(\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}) \quad (2.169)$$

Probabilità di Overlap per Stato Entangled

Consideriamo adesso un sistema di due particelle a spin 1/2 con $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Indichiamo con $P(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}})$ la probabilità che le misure di $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \vec{\mathbf{a}}$ e di $\hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}}$ abbiano entrambe come risultato $\hbar/2$.

Consideriamo lo stato iniziale di singoletto di spin lungo una data direzione $\hat{\mathbf{n}}$ (autostato di S^2, S_n), che è proporzionale allo stato di Bell $|\phi_2\rangle$:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{\mathbf{n}}, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}, -\rangle_2 - |\hat{\mathbf{n}}, -\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}, +\rangle_2) \quad (2.170)$$

Questo è infatti uno stato entangled in quanto la matrice dei suoi coefficienti ha determinante non nullo:

$$\det \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = 1 \neq 0 \quad (2.171)$$

La misura equivale a verificare che il sistema si trovi nello stato:

$$|\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}\rangle = |\vec{\mathbf{a}}, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{b}}, +\rangle_2 \quad (2.172)$$

con proiettore:

$$\hat{\Pi}(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = |\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}\rangle \langle \vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}| \quad (2.173)$$

e la probabilità di osservare questo stato:

$$P(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \langle \psi | \hat{\Pi}(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) | \psi \rangle \quad (2.174)$$

Notiamo adesso che lo stato di singoletto è lo stesso indipendente dalla direzione $\hat{\mathbf{n}}$, come conseguenza del fatto che è uno stato di singoletto. Altrimenti detto, siccome $S^2 |\psi\rangle = 0$ allora siccome l'autovalore $S^2 = 0$ non ha degenerazioni allora $|\psi\rangle$ è determinato univocamente (a meno di normalizzazione e una fase). Possiamo dunque scrivere:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{\mathbf{n}}_1, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}_1, -\rangle_2 - |\hat{\mathbf{n}}_1, -\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}_1, +\rangle_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{\mathbf{n}}_2, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}_2, -\rangle_2 - |\hat{\mathbf{n}}_2, -\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}_2, +\rangle_2) \quad (2.175)$$

In particolare possiamo porre $\hat{\mathbf{n}} = \vec{\mathbf{a}}$ in modo da semplificare i conti:

$$\begin{aligned} P(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) &= \langle \psi | \hat{\Pi}(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) | \psi \rangle = \frac{1}{2} [\langle \vec{\mathbf{a}}, + |_1 \langle \vec{\mathbf{a}}, - |_2 - \langle \vec{\mathbf{a}}, - |_2 \langle \vec{\mathbf{a}}, + |_1] |\vec{\mathbf{a}}, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{b}}, +\rangle_2 \langle \vec{\mathbf{a}}, + |_1 \langle \hat{\mathbf{b}}, + |_2 [|\vec{\mathbf{a}}, +\rangle_1 |\vec{\mathbf{a}}, -\rangle_2 - |\vec{\mathbf{a}}, -\rangle_2 |\vec{\mathbf{a}}, +\rangle_2] = \\ &= \frac{1}{2} \langle \vec{\mathbf{a}}, - |_2 |\hat{\mathbf{b}}, +\rangle_2 \langle \hat{\mathbf{b}}, + |_2 |\vec{\mathbf{a}}, -\rangle_2 = \frac{1}{2} |\langle \vec{\mathbf{a}}, - |_2 |\hat{\mathbf{b}}, +\rangle_2|^2 = \frac{1}{2} \pi_-(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{aligned} \quad (2.176)$$

con θ angolo tra le due direzioni.

Troviamo infine:

$$\boxed{P(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2}} \quad (2.177)$$

2.5.2 Problemi della Meccanica Quantistica

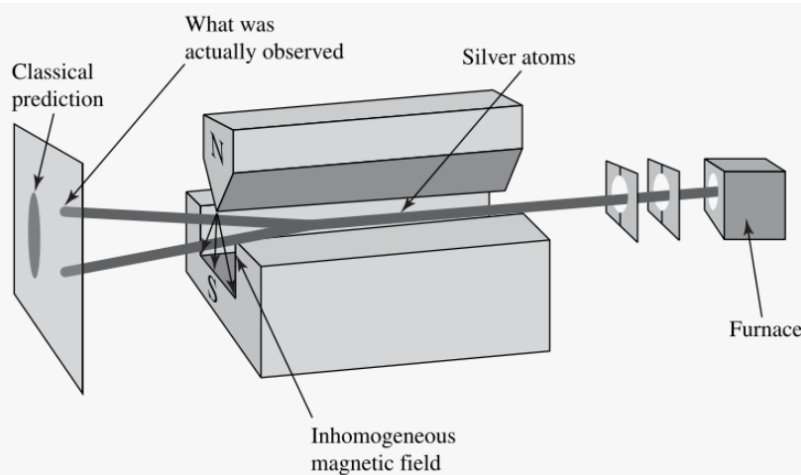
Discutiamo adesso degli aspetti concettuali, trattati nell'articolo EPR. In meccanica quantistica è noto che esistono osservabili incompatibili, ossia che non commutano (ad esempio momento e posizione lungo una stessa direzione, componenti del momento angolare, componenti dello spin). Questo implica che (per i postulati di MQ) non esistono in generale stati che abbiano valori ben definiti di entrambe queste grandezze, a meno di effettuare due misure. Non solo, in generale uno stato non ammette un valore ben definito di una generica grandezza fisica, a meno di effettuare una misura.

Queste due caratteristiche della Meccanica Quantistica pongono il problema di poter stabilire quale sia la realtà oggettiva dei sistemi quantistici, che sia indipendente dall'aver effettuato o meno una misura.

In fisica classica infatti ad ogni istante è sempre possibile trovare un valore di una qualunque grandezza invece esistono sempre valori ben definiti di due grandezze, e dunque esiste una realtà oggettiva del sistema considerato.

In meccanica quantistica sembra tuttavia che non esistono proprietà oggettive di un sistema quantistico.

Immaginiamo adesso di voler dimostrare questo punto di vista, a cui si oppongono Einstein, Podolski e Rosen. Potremmo ad esempio considerare l'apparato di misura di Stern e Gerlach (figura 1.1 di [Sak]). Ricordiamo che in questo una sorgente lancia un fascio collimato di particelle (atomi di argento) lungo una certa direzione z , tra i due poli di un magnete. Questo magnete genera un campo magnetico fortemente disomogeneo, che è diretto perpendicolarmente all'asse dell'apparato (direzione \vec{a}). Il campo ha dunque una forte dipendenza dalla coordinata x lungo \vec{a} . È inoltre sufficientemente forte da deviare significativamente le particelle che lo attraversano. Essendo queste a spin $1/2$ allora sul rivelatore si formeranno due fasci, uno con componente di spin proiettata lungo \vec{a} positiva e un altro con componente negativa.



Possiamo dunque pensare l'apparato di Stern e Gerlach come un apparato capace di misurare la proiezione dello spin in una certa direzione. In realtà ruotando l'apparato rispetto al proprio asse questo è in grado di misurare la proiezione dello spin lungo una qualunque direzione giacente nel piano perpendicolare al suo asse.

Immaginiamo adesso di fare il seguente esperimento. Consideriamo una particella diretta lungo z . Vogliamo fare una misura della componente di spin prima lungo $\vec{a} = \hat{x}$ e poi lungo $\vec{b} = \hat{y}$. Possiamo dunque applicare il risultato trovato nella precedente sezione.

Facciamo prima la misura lungo x facendo passare la particella attraverso un primo apparato di Stern e Gerlach, e troviamo $S_x = \frac{\hbar}{2}$. Facciamo poi una misura lungo y con un altro apparato ruotato di $\pi/2$ e troviamo $S_y = \hbar/2$.

Un fisico classico a questo punto direbbe che la particella possedeva queste componenti anche prima di fare la misura.

Il fisico quantistico direbbe invece che questo non è vero. Infatti potremmo disporre di un terzo apparato di Stern-Gerlach diretto nuovamente lungo x , con il quale effettuare una seconda misura di S_x . Facendo questa misura su un numero sufficiente di particelle troveremmo che S_x non assume sempre valore $\hbar/2$, ma anche $-\hbar/2$, con una probabilità di $1/2$ di entrambi. Il fisico quantistico interpreta questo risultato affermando che non è possibile attribuire contemporaneamente un valore di S_x e di S_y ad una particella. Direbbe poi che dopo aver eseguito la prima misura, il

sistema collassa in uno stato che è dato dalla sovrapposizione di spin lungo S_y con versi opposti:

$$|\hat{\mathbf{x}}, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{\mathbf{y}}, +\rangle + |\hat{\mathbf{y}}, -\rangle) \quad (2.178)$$

e dopo aver effettuato la seconda misura:

$$|\hat{\mathbf{y}}, +\rangle = \frac{1}{2}(|\hat{\mathbf{x}}, +\rangle + |\hat{\mathbf{x}}, -\rangle) \quad (2.179)$$

Il fisico classico a questo punto potrebbe però notare che il fisico quantistico non ha dimostrato che non esiste uno stato con S_x, S_y ben definite:

$$\nexists |\hat{\mathbf{x}}, +; \hat{\mathbf{y}}, +\rangle? \quad (2.180)$$

Aggiungerebbe poi che quando l'apparato di misura agisce sulla particella ne modifica lo stato. Il fisico classico direbbe dunque che l'apparato potrebbe aver perturbato lo stato iniziale quanto interagisce con la particella. Quindi il fatto che la terza misura (la seconda misura di S_x) non ha come risultato $\hbar/2$ non è detto che sia impossibile che la particella abbia inizialmente valori determinati di S_x, S_y , ma dipende banalmente dal fatto che l'apparato ha perturbato il sistema. Il fisico quantistico ha dunque dimostrato solo che esiste un inevitabile perturbazione introdotta da una qualunque apparato di misura che è causa di queste osservazioni paradossali.

Il fisico classico direbbe poi che l'impossibilità di realizzare uno stato in cui le due componenti di spin (e in generale due grandezze generiche) sono ben definite è in realtà una conseguenza del fatto che la descrizione della realtà dovuta alla meccanica quantistica è incompleta. Questo sarebbe analogo a quanto avviene in meccanica statistica classica con l'uso della funzione densità $\rho(q, p)$, che fornisce solo una descrizione incompleta del sistema.

2.5.3 Esperimento Ideale di EPR

Descriviamo adesso un esperimento ideale elaborato nell'articolo EPR, in un approccio dovuto a Bell. In questo approccio vengono usate come grandezze non commutabili due componenti di spin, invece che le componenti di posizione e momento lungo una data direzione considerate nell'articolo originale EPR. Questo semplifica la trattazione tecnica (in quanto lo spazio di Hilbert è finito dimensionale) mantenendo il significato concettuale.

Consideriamo una coppia di particelle di spin $1/2$ che si trovano in uno stato di singoletto di spin poste a grande distanza spaziale. Questo si ottiene ad esempio nel decadimento $\eta_0 \rightarrow \mu^+ + \mu^-$, dove la η_0 non ha spin $S = 0$ mentre i muoni hanno spin $1/2$. Supponiamo che η_0 sia a riposo nel sistema del laboratorio $\vec{\mathbf{L}} = 0, \vec{\mathbf{p}} = 0$. Ma siccome anche $S_{\eta_0} = 0$ allora il momento angolare totale del sistema è nullo inizialmente:

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{S}}_{\eta_0} + \vec{\mathbf{L}}_{\eta_0} = 0 \quad (2.181)$$

Ma siccome il sistema è isolato allora il momento angolare totale $\vec{\mathbf{J}}$ è una costante del moto. In particolare dopo il decadimento:

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{S}}_+ + \vec{\mathbf{S}}_- + \vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{S}} + \vec{\mathbf{L}} \quad (2.182)$$

Ma per le regole di somma del momento angolare, fissati i valori di momento angolare orbitale e di spin, ossia i numeri quantici L, S :

$$|L - S| \leq J \leq L + S \quad (2.183)$$

Allora per $J = 0$:

$$|L - S| = 0 \iff L = S \quad (2.184)$$

Siccome S può assumere solo valori $0, 1$ allora a sua volta L potrà assumere solo valore $0, 1$, con:

$$L = 0 \iff S = 0 \quad L = 1 \iff S = 1 \quad (2.185)$$

Limitiamoci a studiare il caso $L = 0$, che comunque a basse energie sarà quello prevalente, come ci aspettiamo dallo sviluppo in onde parziali.

Inoltre per la conservazione del momento $\vec{\mathbf{p}}_1 = -\vec{\mathbf{p}}_2$ e dunque i due muoni viaggiano in direzioni opposte.

Abbiamo dunque trovato una situazione fisica in cui una coppia di particelle a spin $1/2$ si trovano in uno stato entangled e sono a grande distanza tra loro (aspettando un tempo sufficientemente grande).

Scriviamo la parte della funzione d'onda relativo allo stato di spin, che ricordiamo è di singoletto e si può scrivere per ogni $\hat{\mathbf{n}}$ come segue:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{\mathbf{n}}, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}, -\rangle_2 - |\hat{\mathbf{n}}, -\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}, +\rangle_2) \quad (2.186)$$

Siccome stanno in uno stato entangled possiamo ottenere informazioni sulla direzione dello spin della particella 2 a misurando lo spin della particella 1.

Misuriamo $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}$ e troviamo $\hbar/2$. Il sistema può dunque collassare solo nello stato:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\hat{\mathbf{n}}, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}, -\rangle \quad (2.187)$$

Perciò sappiamo con certezza che una misura di $\hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}}$ avrà come risultato $-\hbar/2$. Abbiamo dunque modificato lo stato della seconda particella, che sarà a grande distanza dalla prima, facendo una misura sulla prima. A questo punto incorriamo nel problema di non-località, ossia risulta possibile modificare lo stato di una particella anche se questa è a grande distanza dall'apparato di misura usato.

Notiamo poi che lo stato di spin della seconda particella sarà orientato lungo una direzione arbitraria decisa dall'orientazione in cui abbiamo messo l'apparato di misura (ad esempio di Stern e Gerlach).

Gli autori dicono dunque quanto segue: se, senza in nessun modo disturbare il sistema, noi possiamo predire con certezza il valore di una quantità fisica allora deve esistere un elemento di realtà fisica che corrisponde a questa quantità fisica. Altrimenti detto, gli autori suggeriscono che essendo impossibile la non-località allora in realtà doveva essere possibile prevedere lo stato del sistema già prima di effettuare la misura. Einstein suppose infatti la validità del **principio di località** [Sak, p. 241], inteso come la proprietà per cui due sistemi fisici non possono comunicare tra loro ad una velocità maggiore di quella della luce. Mettendo i corpi ad una distanza superiore a questa l'esperimento continuerebbe a funzionare in linea di principio e addirittura indipendentemente dalla distanza la misura dello stato di una particella cambierebbe lo stato dell'altra in maniera *istantanea*. In particolare siccome $\hat{\mathbf{n}}$ è variabile allora dovrebbe essere ben definite le componenti di spin lungo ogni $\hat{\mathbf{n}}$ prima di effettuare la misura.

Questo conduce gli autori a concludere che la descrizione della meccanica quantistica è incompleta, in quanto non permette neppure in linea di principio di assegnare valori completamente determinati alle due grandezze non commutabili e viola il principio di località.

2.5.4 Disuguaglianza di Bell

Negli anni '60 Bell riuscì però a dimostrare che Einstein, Podolski e Rosen si sbagliavano, ossia è possibile dimostrare che l'esistenza di uno stato in cui le componenti di spin lungo diverse direzioni sono ben definite porta a contraddizione con l'evidenza sperimentale.

Einstein, Podolski e Rosen immaginavano di effettuare due misure, prima di $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$, con risultato $\frac{\hbar}{2}$, che ci porta a dire, per la forma dello stato di singoletto, che certamente una misura di $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ produrrebbe $-\frac{\hbar}{2}$, che però non effettuiamo. Eseguiamo poi una misura di $\hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}}$, con un risultato $\frac{\hbar}{2}$. Con questa seconda misura, EPR dicevano che nuovamente una misura di $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{b}}$ avrebbe avuto come risultato $-\frac{\hbar}{2}$.

Possiamo dunque indicare con $(\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}})$ lo stato della particella 1 e con $(-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}})$ lo stato della particella 2.

Chiaramente, seguendo la linea di EPR, dovrebbe essere possibile estendere questo ragionamento a tre direzioni generiche. Infatti EPR sostenevano che le componenti fossero ben definite lungo ogni direzione.

Seguendo EPR ha dunque senso valutare lo stato $(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}})$ della particella 1, che implica lo stato $(-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}})$ per la seconda particella. In generale sono possibili $2^3 = 8$ casi (continuiamo a supporre la quantizzazione dello spin). Pertanto se avessimo un ensemble di queste coppie di particelle sarebbe possibile dividere questo in 8 classi, costituite da un numero $N_i, i = 1, \dots, 8$ di particelle.

N_1	$(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}})$	$(-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}})$
N_2	$(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}})$	$(-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}})$
N_3	$(\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}})$	$(-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}})$
N_4	$(\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}})$	$(-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}})$
N_5	$(-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}})$	$(\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}})$
N_6	$(-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}})$	$(\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}})$
N_7	$(-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}})$	$(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}})$
N_8	$(-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}})$	$(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}})$

Bell a questo propone di calcolare la probabilità $P(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}})$ di ottenere $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}} = \hbar/2$. Questo significa che gli unici stati della particella 1 in cui ciò può accadere sono $(\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \pm\hat{\mathbf{c}})_1$ e $(-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \mp\hat{\mathbf{c}})$ per la particella 2, ossia due possibili

stati, che hanno popolazione N_3, N_4 . Pertanto la probabilità $P(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}})$ di osservare $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \vec{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}} = \frac{\hbar}{2}$ è data da:

$$P(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \frac{N_3 + N_4}{N} \quad N = \sum_i N_i \quad (2.188)$$

Analogamente:

$$\begin{aligned} P(\vec{\mathbf{a}}, \vec{\mathbf{c}}) &= \frac{N_2 + N_4}{N} \Rightarrow (\vec{\mathbf{a}}, \pm \hat{\mathbf{b}}, -\vec{\mathbf{c}}) \\ P(\vec{\mathbf{c}}, \hat{\mathbf{b}}) &= \frac{N_3 + N_7}{N} \Rightarrow (\pm \vec{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \vec{\mathbf{c}}) \end{aligned} \quad (2.189)$$

Ma siccome $N_i \geq 0$ allora:

$$N_3 + N_4 \leq N_3 + N_4 + N_7 + N_2 = (N_3 + N_7) + (N_2 + N_4) \quad (2.190)$$

Troviamo infine la seguente disuguaglianza, nota come **disuguaglianza di Bell**:

$$\boxed{P(\vec{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) \leq P(\vec{\mathbf{a}}, \vec{\mathbf{c}}) + P(\vec{\mathbf{c}}, \hat{\mathbf{b}})} \quad (2.191)$$

Ma se è vera la teoria quantistica, noi conosciamo le espressioni di queste probabilità che abbiamo calcolato:

$$\frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{b}}}}{2} \leq \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{c}}}}{2} + \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{\hat{\mathbf{b}}\hat{\mathbf{c}}}}{2} \quad (2.192)$$

Ma questa non è vera per tre generiche direzioni. Infatti basta scegliere tre direzioni complanari con $\vec{\mathbf{c}}$ bisettrice tra $\vec{\mathbf{a}}$ e $\hat{\mathbf{b}}$, ossia $\theta_{\hat{\mathbf{b}}\vec{\mathbf{c}}} = \theta_{\hat{\mathbf{a}}\vec{\mathbf{c}}} = \theta_{\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{b}}}/2 = \theta$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sin^2 \theta &\leq \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ \frac{1}{2} \sin^2 \theta &\leq \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{aligned} \quad (2.193)$$

Infatti per θ piccolo:

$$\frac{\theta^2}{2} \leq \frac{\theta^2}{4} \iff \theta^2 \leq \frac{\theta^2}{2} \quad (2.194)$$

che è chiaramente falso in meccanica quantistica.

Siccome queste probabilità possono essere trovate sperimentalmente (e sono state verificate) allora in realtà l'esperimento può confermare l'esistenza di stati in cui grandezze non commutabili hanno valori ben definite. La disuguaglianza di Bell fornisce dunque un metodo sperimentale per verificare se è vera questa predizione della meccanica quantistica "ordinaria" oppure l'argomento EPR. L'evidenza sperimentale ha infatti confermato che la disuguaglianza di Bell è in generale violata, dimostrando che l'argomento EPR non è vero.

Capitolo 3

Invarianza di Gauge

3.1 Lezione 21

3.1.1 Invarianza di Gauge in Meccanica Classica

Le equazioni del moto particella carica classica immersa in un campo elettromagnetico sono date (in unità gaussiane) da:

$$m\ddot{\mathbf{x}} = q\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{x}}, t) + \frac{q}{c}\dot{\mathbf{x}} \wedge \vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \quad (3.1)$$

Possiamo anche pensare di scrivere questo nel formalismo lagrangiano e dunque hamiltoniano. Per fare questo ricorriamo ai potenziali:

$$\vec{\mathbf{B}} = \nabla \times \vec{\mathbf{A}} \quad \vec{\mathbf{E}} = -\nabla V - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}}{\partial t} \quad (3.2)$$

da cui si trova:

$$\mathcal{L}(\vec{\mathbf{x}}, \dot{\mathbf{x}}, t) = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - qV(\vec{\mathbf{x}}, t) + \frac{q}{c}\dot{\mathbf{x}} \cdot \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \quad (3.3)$$

e le equazioni del moto si ricavano:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}^i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x^i} = 0 \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.4)$$

Notiamo che i potenziali sono definiti a meno di una trasformazione, cosiddetta di gauge:

$$\begin{cases} \vec{\mathbf{A}}'(\vec{\mathbf{x}}, t) = \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{x}}, t) + \nabla \Lambda(\vec{\mathbf{x}}, t) \\ V'(\vec{\mathbf{x}}, t) = V(\vec{\mathbf{x}}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \end{cases} \quad (3.5)$$

In questa trasformazione sono invarianti le equazioni del moto ma varia la Lagrangiana:

$$\mathcal{L}'(\vec{\mathbf{x}}, \dot{\mathbf{x}}, t) = \mathcal{L}(\vec{\mathbf{x}}, \dot{\mathbf{x}}, t) + \frac{q}{c} \left[\frac{\partial \Lambda}{\partial t}(\vec{\mathbf{x}}, t) + \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla \Lambda(\vec{\mathbf{x}}, t) \right] = \mathcal{L}(\vec{\mathbf{x}}, \dot{\mathbf{x}}, t) + \frac{q}{c} \frac{d}{dt} \Lambda(\vec{\mathbf{x}}, t) \quad (3.6)$$

Infatti aggiungere una derivata totale di una funzione scalare alla lagrangiana non modifica le equazioni del moto.

Possiamo dimostrare questo a partire dal principio di azione per un problema ad estremi fissati (piuttosto che di punto iniziale) $\vec{\mathbf{x}}(t_1) = \vec{\mathbf{x}}_1^0, \vec{\mathbf{x}}(t_2) = \vec{\mathbf{x}}_2^0$. Infatti:

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{S}}'[\vec{\mathbf{x}}(t)] &= \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}' = S[\vec{\mathbf{x}}(t)] + \frac{q}{c} \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d\Lambda}{dt} = \\ &= S[\vec{\mathbf{x}}(t)] + \frac{q}{c} [\Lambda(\vec{\mathbf{x}}_2, t) - \Lambda(\vec{\mathbf{x}}_1, t)] \end{aligned} \quad (3.7)$$

Ma siccome gli estremi sono fissati allora la variazione dell'azione è la stessa ($\delta S = \delta S'$).

Passiamo poi alla formulazione hamiltoniana. Definiamo il momento coniugato canonico, che deve sostituire $\dot{\mathbf{x}}$:

$$\vec{\mathbf{p}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{x}}} = m\dot{\mathbf{x}} + \frac{q}{c} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \Rightarrow m\dot{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \quad (3.8)$$

Facciamo la trasformata di Legendre della lagrangiana:

$$H = \vec{\mathbf{p}} \cdot \dot{\mathbf{x}} - \mathcal{L}(\vec{\mathbf{x}}, \dot{\mathbf{x}}, t) \Big|_{\dot{\mathbf{x}}(\vec{\mathbf{p}})} = \frac{1}{2m} \left[\vec{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \right]^2 + qV(\vec{\mathbf{x}}, t) \quad (3.9)$$

Notiamo che l'impulso canonico non è gauge invariante, come posizione e momento:

$$\vec{p}' = m\dot{\vec{x}} + \frac{q}{c}\vec{A}'(\vec{x}, t) = m\dot{\vec{x}} + \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x}, t) + \frac{q}{c}\nabla\Lambda(\vec{x}, t) = \vec{p} + \frac{q}{c}\nabla\Lambda(\vec{x}, t) \quad (3.10)$$

Siccome gli impulsi canonici non sono gauge invarianti allora non hanno un significato fisico diretto, come per i valori dei potenziali.

Notiamo tuttavia che la trasformazione di coordinate:

$$\begin{cases} \vec{x}' = \vec{x} \\ \vec{p}' = \vec{p} + \frac{q}{c}\nabla\Lambda \end{cases} \quad (3.11)$$

è canonica. Questo è equivalente a richiedere che conserva le parentesi di Poisson:

$$\begin{aligned} \{x'_i, x'_j\} &= \{x_i, x_j\} = 0 \\ \{x'_i, p'_j\} &= \left\{x_i, p_j + \frac{q}{c}\partial_j\Lambda\right\} = \{x_i, p_j\} = \delta_{ij} \\ \{p'_i, p'_j\} &= \left\{p_i + \frac{q}{c}\partial_i\Lambda, p_j + \frac{q}{c}\partial_j\Lambda\right\} = \frac{q}{c}[\{p_i, \partial_j\Lambda\} + \{\partial_i\Lambda, p_j\}] = \\ &= \frac{q}{c}[-\partial_i\partial_j\Lambda + \partial_i\partial_j\Lambda] = 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

Definiamo adesso il momento meccanico:

$$\vec{p}\dot{\vec{x}} = \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x}, t) \Rightarrow H = \frac{\pi^2}{2m} + qV(\vec{x}, t) \quad (3.13)$$

Questo momento è invariante per trasformazioni di gauge in quanto coincide anche con $\vec{p}\dot{\vec{x}} = m\dot{\vec{x}}^2$, da cui $\Rightarrow \vec{p}'\dot{\vec{x}}' = \vec{p}\dot{\vec{x}}$.

In questo modo è chiaro che la trasformazione di gauge sull'hamiltoniana è data da:

$$H' = \frac{\pi^2}{2m} + qV(\vec{x}, t) - \frac{q}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Lambda(\vec{x}, t) = H - \frac{q}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t} \quad (3.14)$$

Siccome l'hamiltoniana varia solo per una derivata parziale allora non è invariante per trasformazioni di gauge. Questo potevamo aspettarcelo dal fatto che il momento pure non è gauge invariante e dunque affinché le equazioni del moto siano gauge invarianti anche l'hamiltoniana non deve essere gauge invariante (e in particolare variare in modo tale da "semplificare" la variazione di \vec{p}).

Calcoliamo la parentesi di Poisson del momento meccanico:

$$\begin{aligned} \{\pi_i, \pi_j\} &= \left\{p_i \frac{q}{c}A_j - \frac{q}{c}A_j\right\} = -\frac{q}{c}[[p_i, A_j] + [A_i, p_j]] = \\ &= -\frac{q}{c}[-\partial_i A_j + \partial_j A_i] = \frac{q}{c}(\partial_i A_j - \partial_j A_i) = \frac{q}{c}\varepsilon_{ijk}B_k \end{aligned} \quad (3.15)$$

Pertanto, come ci potevamo aspettare, il cambiamento di coordinate al momento meccanico non è canonico e dunque non sono variabili comode. In particolare il commutatore (di Poisson) di due componenti è proporzionale al campo magnetico (che è gauge invariante, come le componenti stesse).

3.1.2 Invarianza di Gauge in Meccanica Quantistica

Per poter discutere l'invarianza di gauge in meccanica quantistica rivediamo il formalismo classico per dare significato ai valori dei commutatori di Poisson delle componenti di un punto nello spazio delle fasi. In questo modo applicando il principio di corrispondenza troveremo immediatamente la forma delle trasformazioni di gauge.

Lo stato di un punto materiale al tempo t è descritto da un punto γ_t appartenente allo spazio delle fasi Γ . Indichiamo con \vec{P}, \vec{X} le funzioni che dato uno stato γ_t forniscono il suo impulso e le sue coordinate rispettivamente.

$$\vec{P}: \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^3 \quad \vec{X}: \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^3 \quad (3.16)$$

Nel caso più semplice $\Gamma = \mathbb{R}^6$ e queste funzioni potrebbero essere semplicemente proiezioni sulle prime o le seconde tre componenti di γ_t . In generale però lo spazio delle fasi è definito in maniera astratta e dunque non sarà descritto da sei coordinate. Questa definizione astratta si pone bene per la generalizzazione al caso quantistico. In generale una qualunque funzione definita su Γ rappresenta un osservabile.

Ad ogni istante le coordinate e l'impulso del punto sono date da:

$$x_i(t) = X_i(\gamma_t) \quad p_i(t) = P_i(\gamma_t) \quad (3.17)$$

Una trasformazione di Gauge è invece una funzione invertibile sullo spazio delle fasi (con opportune condizioni di regolarità e differenziabilità):

$$G: \Gamma \rightarrow \Gamma \quad \gamma'_t = G(\gamma_t) \quad (3.18)$$

In realtà G potrebbe essere una famiglia di funzioni invertibili G_t al variare del tempo. In particolare per lasciare invariate le equazioni del moto devono essere trasformazioni canoniche.

Pertanto le nuove coordinate del punto in questa rappresentazione sono:

$$\begin{cases} x'_i(t) = X_i(\gamma'_t) \\ p'_i(t) = P_i(\gamma'_t) \end{cases} \quad (3.19)$$

Nel caso elettromagnetico:

$$\begin{cases} x'_i(t) = X_i(\gamma'_t) = x_i(t) = X_i(\gamma_t) \\ p'_i(t) = P_i(\gamma'_t) = p_i(t) + \frac{q}{c} \partial_i \Lambda(\vec{x}, t) = P_i(\gamma_t) + \frac{q}{c} \partial_i \Lambda(\vec{x}, t) \end{cases} \quad (3.20)$$

dove $\vec{x} = \vec{X}(\gamma_t)$.

Per il principio di corrispondenza tra meccanica classica e quantistica valgono le seguenti corrispondenze:

$$\gamma_t \in \Gamma \iff |\psi(t)\rangle \in \mathcal{H} \quad X_i, P_j \iff \hat{X}_i, \hat{P}_j \quad (3.21)$$

Questo ci permette di fare anche la corrispondenza di coordinate e impulso di uno stato ad elementi di matrice:

$$X_i(\gamma_t) \iff \langle \psi(t) | \hat{X}_i | \psi(t) \rangle \quad \langle \psi(t) | \hat{P}_i | \psi(t) \rangle \quad (3.22)$$

e delle trasformazioni di gauge classiche ad un operatore unitario:

$$\gamma_t \xrightarrow{G} \gamma'_t = G(\gamma_t) \iff |\psi(t)\rangle \xrightarrow{\hat{U}(t)} |\psi'(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(t)\rangle \quad (3.23)$$

Per determinare questo operatore usiamo le identità quantistiche corrispondenti a quelle classiche:

$$\begin{cases} x'_i(t) = x_i(t) \iff X_i(\gamma'_t) = X_i(\gamma_t) \\ p'_i(t) = p_i(t) + \frac{q}{c} \partial_i \Lambda(\vec{x}, t) \iff P_i(\gamma'_t) = P_i(\gamma_t) + \frac{q}{c} \partial_i \Lambda(\vec{x}, t) \end{cases} \iff \begin{cases} \langle \psi'(t) | \hat{X}_i | \psi'(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{X}_i | \psi(t) \rangle \\ \langle \psi'(t) | \hat{P}_i | \psi'(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{P}_i + \frac{q}{c} \partial_i \hat{\Lambda} | \psi(t) \rangle \end{cases} \quad (3.24)$$

dove abbiamo definito il seguente operatore come funzione di operatori:

$$\hat{\Lambda}(t) = \Lambda(\vec{x}, t) \Big|_{\vec{x}=\vec{X}} \quad (3.25)$$

Riscriviamo il problema esplicitando $|\psi'(t)\rangle$ rispetto a $|\psi(t)\rangle$:

$$\begin{cases} \langle \psi(t) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{X}_i \hat{U}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{X}_i | \psi(t) \rangle \\ \langle \psi(t) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{P}_i \hat{U}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{P}_i + \frac{q}{c} \partial_i \hat{\Lambda} | \psi(t) \rangle \end{cases} \quad (3.26)$$

Ma siccome $|\psi(t)\rangle$ è uno stato arbitrario (per un dato t) allora possiamo scegliere i due casi:

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_1(t)\rangle + |\psi_2(t)\rangle \quad |\psi(t)\rangle = |\psi_1(T)\rangle + i |\psi_2(t)\rangle \quad (3.27)$$

Facendo questo, come fatto per gli operatori unitari nelle prime lezioni, troviamo un'identità operatoriale piuttosto che scalare:

$$\begin{cases} \hat{U}^\dagger(t) \hat{X}_i \hat{U}(t) = \hat{X}_i \\ \hat{U}^\dagger(t) \hat{P}_i \hat{U}(t) = \hat{P}_i + \frac{q}{c} \partial_i \hat{\Lambda} \end{cases} \quad (3.28)$$

Notiamo che queste equazioni determinano $\hat{U}(t)$ a meno di una fase dipendente dal tempo $e^{i\phi(t)}$. Verifichiamolo. Siano $\hat{U}_1(t), \hat{U}_2(t)$ soluzioni di questa coppia di equazioni, allora:

$$\begin{cases} \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{X}_i \hat{U}_1(t) = \hat{U}_2^\dagger(t) \hat{X}_i \hat{U}_2(t) \\ \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{P}_i \hat{U}_1(t) = \hat{U}_2^\dagger(t) \hat{P}_i \hat{U}_2(t) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{X}_i = \hat{X}_i \hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t) \\ \hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{P}_i = \hat{P}_i \hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t) \end{cases} \Rightarrow [\hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t), \hat{X}_i] = [\hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t), \hat{P}_i] = 0 \quad (3.29)$$

Ma siccome le \hat{X}_i, \hat{P}_j formano un sistema irriducibile allora qualunque operatore che commuta con entrambi è proporzionale all'identità:

$$\hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t) = c(t) \mathbb{1} \Rightarrow \hat{U}_2(t) = c(t) \hat{U}_1(t) \Rightarrow \hat{U}_2^\dagger(t) \hat{U}_2(t) = |c(t)|^2 \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{U}_1(t) \Rightarrow 1 = |c(t)|^2 \quad (3.30)$$

e dunque $c(t)$ è una fase $e^{i\phi(t)}$. Verifichiamo che una soluzione di queste equazioni è la seguente:

$$\widehat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} \quad (3.31)$$

Questa soddisfa banalmente la prima in quanto $\widehat{U}(t)$ commuta con \widehat{X}_i . Verifichiamo la seconda:

$$\begin{aligned} \widehat{U}^\dagger(t) \widehat{P}_i \widehat{U}(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} \widehat{P}_i e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} \left[\widehat{P}_i e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} \right] = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} \widehat{P}_i - \left[e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)}, \widehat{P}_i \right] \right\} = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} \widehat{P}_i - i\hbar \frac{q}{\hbar c} \partial_i \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} \right\} = \\ &= \widehat{P}_i + \frac{q}{c} \partial_i \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t) \end{aligned} \quad (3.32)$$

come volevasi dimostrare. Abbiamo fatto uso della proprietà:

$$\frac{1}{i\hbar} \left[f(\widehat{\mathbf{X}}), \widehat{P}_i \right] = \left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{\vec{x}=\widehat{\mathbf{X}}} \iff \left[f(\widehat{\mathbf{X}}), \widehat{P}_i \right] = i\hbar \left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{\vec{x}=\widehat{\mathbf{X}}} \quad (3.33)$$

Questo ci conduce alla seguente, che corrisponde sostanzialmente alla trasformazione di gauge dell'operatore impulso:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar} f(\widehat{\mathbf{X}})} \widehat{P}_i e^{\frac{i}{\hbar} f(\widehat{\mathbf{X}})} &= e^{-\frac{i}{\hbar} f(\widehat{\mathbf{X}})} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} f(\widehat{\mathbf{X}})} \widehat{P}_i - \left[e^{\frac{i}{\hbar} f(\widehat{\mathbf{X}})}, \widehat{P}_i \right] \right\} = \\ &= \widehat{P}_i + \partial_i f(\widehat{\mathbf{X}}) \end{aligned} \quad (3.34)$$

La soluzione più generale è dunque:

$$\widehat{U}(t) = e^{i\phi(t)} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\widehat{\mathbf{X}}, t)} \quad (3.35)$$

In realtà possiamo dimostrare che $\phi(t) = \phi_0$, ossia la fase è costante e dunque può essere eliminata. Per fare questo chiaramente dobbiamo considerare l'evoluzione temporale del sistema e dunque l'hamiltoniana. Prima di fare questo dobbiamo dunque quantizzare l'hamiltoniana e trovare l'operatore hamiltoniano corrispondente. Notiamo che per fare questo con una semplice corrispondenza $\vec{x} \rightarrow \widehat{\mathbf{X}}, \vec{p} \rightarrow \widehat{\mathbf{P}}$ vi è ambiguità nel prodotto scalare $\vec{p} \cdot \vec{A}$, in quanto i corrispondenti operatori non commutano, mentre il prodotto scalare commuta in meccanica classica.

Certamente possiamo imporre che il prodotto scalare corrisponda ad una combinazione lineare delle componenti:

$$\vec{p} \cdot \vec{A} \rightarrow \sum_i c_i \widehat{P}_i \widehat{A}_i + \sum_i (1 - c_i) \widehat{A}_i \widehat{P}_i \quad (3.36)$$

Siccome l'hamiltoniana deve essere hermitiana allora questo operatore deve coincidere con il suo aggiunto:

$$\sum_i c_i \widehat{P}_i \widehat{A}_i + \sum_i (1 - c_i) \widehat{A}_i \widehat{P}_i = \sum_i c_i^* \widehat{P}_i \widehat{A}_i + \sum_i (1 - c_i^*) \widehat{A}_i \widehat{P}_i \iff c_i = 1 - c_i^* \Rightarrow c_i + c_i^* = 1 \Rightarrow \text{Re } c_i = \frac{1}{2} \quad (3.37)$$

Questo significa che questi coefficienti si possono scrivere nella forma:

$$c_i = \frac{1}{2} + i\kappa_i \quad (3.38)$$

da cui:

$$\begin{aligned} \vec{p} \cdot \vec{A} &\rightarrow \frac{1}{2} \sum_i (\widehat{P}_i \widehat{A}_i + \widehat{A}_i \widehat{P}_i) - i \sum_i \kappa_i (\widehat{A}_j \widehat{P}_j - \widehat{P}_j \widehat{A}_j) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_i (\widehat{P}_i \widehat{A}_i + \widehat{A}_i \widehat{P}_i) - i \sum_i \kappa_i \frac{\partial \widehat{A}_i}{\partial \widehat{X}_i} \end{aligned} \quad (3.39)$$

Pertanto non riusciamo a stabilire in questo modo in maniera unica l'hamiltoniana a causa dei coefficienti κ_i .

Per trovare una soluzione unica possiamo sfruttare il fatto che l'operatore momento meccanico è gauge invariante come in meccanica classica, così che la quantizzazione, ossia la definizione dell'operatore hamiltoniano, è in realtà fatta in maniera banale:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}} &= \frac{1}{2m} \widehat{\pi}^2 + qV(\widehat{\mathbf{X}}, t) = \frac{1}{2m} \widehat{\pi} \cdot \widehat{\pi} + qV(\widehat{\mathbf{X}}, t) = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\widehat{P} - \frac{q}{c} \widehat{\mathbf{A}} \right) \cdot \left(\widehat{P} - \frac{q}{c} \widehat{\mathbf{A}} \right) + qV(\widehat{\mathbf{X}}, t) = \\ &= \frac{1}{2m} \left[\widehat{P}^2 + \frac{q^2}{c^2} \widehat{\mathbf{A}}^2 - \frac{q}{c} (\widehat{\mathbf{A}} \cdot \widehat{\mathbf{P}} + \widehat{\mathbf{P}} \cdot \widehat{\mathbf{A}}) + qV(\widehat{\mathbf{X}}, t) \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

Notiamo che questa è una possibile scelta, in quanto una *qualunque* scelta della κ_i risulterebbe in una teoria autoconsistente.

Verifichiamo effettivamente che questo operatore è invariante per trasformazioni di gauge. La trasformazione di gauge su $\hat{\mathbf{p}}_i$ agisce come segue:

$$\hat{\pi}' = \hat{P} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}}' = \hat{P} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} - \frac{q}{c} \nabla \hat{\Lambda} \quad (3.41)$$

La condizione di invariante di gauge equivale poi a richiedere che:

$$\begin{aligned} \langle \psi'(t) | \hat{\pi}' | \psi'(t) \rangle &= \langle \psi(t) | \hat{\pi} | \psi(t) \rangle \\ \langle \psi(t) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{\pi}' \hat{U}(t) | \psi(t) \rangle &= \langle \psi(t) | \hat{\pi} | \psi(t) \rangle \\ \hat{U}^\dagger(t) \hat{\pi}' \hat{U}(t) &= \hat{\pi} \end{aligned} \quad (3.42)$$

Esplicitiamo il primo membro (sicuramente in questo caso la fase si semplifica), e facendo uso dell'identità 3.34:

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger(t) \hat{\pi}' \hat{U}(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\hat{\mathbf{X}}, t)} \left[\hat{P}_i - \frac{q}{c} \hat{A}_i' \right] e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\hat{\mathbf{X}}, t)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\hat{\mathbf{X}}, t)} \hat{P}_i e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\hat{\mathbf{X}}, t)} - \frac{q}{c} \hat{A}_i' = \\ &= \hat{P}_i + \frac{q}{c} \partial_i \Lambda(\hat{\mathbf{X}}, t) - \frac{q}{c} \hat{A}_i' = \hat{P}_i - \frac{q}{c} \hat{A}_i = \hat{\pi}_i \end{aligned} \quad (3.43)$$

come volevasi dimostrare. Notiamo che l'invarianza di gauge di un operatore (funzione degli operatori posizione e momento) implica l'invarianza di gauge per funzioni (analitiche) di quell'operatore. Questa è una semplice conseguenza dell'unitarietà della trasformazione. In realtà noi siamo solo interessati al quadrato:

$$\hat{U}^\dagger(t) \hat{\pi}_i'^2 \hat{U}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{\pi}_i' \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) \hat{\pi}_i' \hat{U}(t) = \hat{\pi}_i'^2 \quad (3.44)$$

Notiamo che in questa scelta l'hamiltoniana non è gauge invariante (in quanto V non è gauge invariante), esattamente come accadeva in fisica classica.

$$\hat{\mathcal{H}}' = \frac{1}{2m} \hat{\pi}'^2 + qV'(\vec{\mathbf{x}}, t) \neq \hat{\mathcal{H}} \quad (3.45)$$

Verifichiamo adesso che effettivamente $\frac{d\phi}{dt} = 0$ e dunque la fase aggiuntiva può essere eliminata. Per fare questo cerchiamo l'espressione di $\hat{\mathcal{H}}'$ facendo uso del fatto che l'equazione di Schrodinger deve essere invariante per trasformazioni di gauge:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle \iff i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}' |\psi'(t)\rangle \quad (3.46)$$

Troveremo che in questo modo $\hat{\mathcal{H}}'$ prende un termine aggiuntivo proporzionale a $\frac{\partial\phi}{\partial t}$, che però deve essere nullo in quanto non coincide con la forma di $\hat{\mathcal{H}}'$ trovata. Sapendo che $|\psi(t)\rangle$ risolve l'equazione di Schrodinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle \quad (3.47)$$

Allora possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{U}(t) |\psi(t)\rangle) = i\hbar \hat{U}(t) \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle + i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle + i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \\ &= \hat{U}(t) \hat{\mathcal{H}} \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) |\psi(t)\rangle + i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) |\psi(t)\rangle = \\ &= \left[\hat{U}(t) \hat{\mathcal{H}} \hat{U}^\dagger(t) + i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) \right] |\psi'(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}' |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (3.48)$$

Pertanto troviamo la seguente espressione per l'operatore hamiltoniano trasformato:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}' &= \hat{U}(t) \hat{\mathcal{H}} \hat{U}^\dagger(t) + i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) = \frac{1}{2m} \hat{U}(t) \hat{\pi}^2 \hat{U}^\dagger(t) + \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda} \right) \hat{U}^\dagger(t) = \\ &= \frac{1}{2m} \hat{\pi}'^2 + \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\phi(t)} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda} \right) \hat{U}^\dagger(t) = \\ &= \frac{1}{2m} \hat{\pi}'^2 + \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} - \frac{q}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \left(e^{i\phi(t)} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda} \right) \hat{U}^\dagger(t) - \hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} e^{i\phi(t)} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda} \hat{U}^\dagger(t) = \\ &= \frac{1}{2m} \hat{\pi}'^2 + \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} - \frac{q}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} - \hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.49)$$

Ma siccome questa deve coincidere con la 3.45 allora $\frac{\partial\phi}{\partial t} = 0$, come volevasi dimostrare.

3.1.3 Inclusione dello Spin

All'ordine più basso della correzione relativistica (e in generale per la piena hamiltoniana relativistica), lo spin influenza l'hamiltoniana accoppiandosi direttamente ai campi fisici e non ai potenziali elettromagnetici, come nel caso del momento:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}\hat{\pi}^2 + q\hat{V} - g_s \frac{q}{2mc} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{B}} + \frac{q}{2m^2 c^2} (g_s - 1) \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{P}} \times \hat{\mathbf{E}} \quad (3.50)$$

Pertanto possiamo postulare che lo spin è invariante per trasformazione di gauge:

$$\hat{U}^\dagger(t) \hat{\mathbf{S}} \hat{U}(t) = \hat{\mathbf{S}} \quad (3.51)$$

e dunque l'operatore corrispondente commuta con lo spin (come per la posizione) e agisce sugli stati di spin come l'identità.

3.2 Lezione 22

3.2.1 Recap Lezione Precedente

Abbiamo visto che sotto una trasformazione di gauge lo stato del sistema subisce la trasformazione seguente:

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi'(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(t)\rangle \quad (3.52)$$

Le osservabili di un tale sistema (particella carica in un campo elettromagnetico) sono le quantità gauge-invarianti:

$$\langle \psi'(t) | f(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{A}}', \hat{V}') | \psi'(t) \rangle = \langle \psi(t) | f(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{A}}, \hat{V}) | \psi(t) \rangle \quad \forall |\psi(t)\rangle \quad (3.53)$$

Questa condizione è equivalente all'identità operatoriale:

$$\hat{U}^\dagger(t) f(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{A}}', \hat{V}') \hat{U}(t) = f(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{A}}, \hat{V}) \quad (3.54)$$

Abbiamo visto che sono gauge invarianti le coordinate, gli impulsi meccanici e lo spin (e dunque anche le loro funzioni):

$$\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{S}}, f(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{S}}) \quad (3.55)$$

È interessante considerare la trasformazione di gauge dello stato nella rappresentazione delle posizioni, dove l'operatore unitario di trasformazione di gauge è diagonale e dunque è semplicemente una fase:

$$\langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \psi(\vec{x}, t) \quad \langle \vec{x} | \psi'(t) \rangle = \psi'(\vec{x}, t) \quad (3.56)$$

da cui:

$$\psi'(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \hat{U}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \vec{x} | e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\vec{x}, t)} | \psi(t) \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\vec{x}, t)} \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\vec{x}, t)} \psi(\vec{x}, t) \quad (3.57)$$

Notiamo dunque che una trasformazione di gauge equivale ad una trasformazione di fase arbitraria sulla funzione d'onda.

3.2.2 Monopolo Magnetico nelle Equazioni di Maxwell

Scriviamo adesso le equazioni di Maxwell microscopiche, e dunque in presenza solo di cariche e correnti puntiformi (sempre unità gaussiane):

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} = 4\pi \sum_i q_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \\ \nabla \times \vec{\mathbf{E}} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} = 0 \\ \nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0 \\ \nabla \times \vec{\mathbf{H}} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \sum_i q_i \vec{v}_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \end{cases} \quad \vec{\mathbf{B}} = \vec{\mathbf{H}} + 4\pi \sum_i \vec{m}_i(t) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \quad (3.58)$$

In questo modo il campo di induzione magnetica $\vec{\mathbf{B}}$ è solenoidale a causa della terza equazione di Maxwell. Seguendo Dirac, possiamo però includere in queste equazioni delle cariche magnetiche elementari g_i , modificando la terza equazione nel modo seguente:

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = \sum_i g_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \quad (3.59)$$

Notiamo tuttavia che questo richiede di modificare anche la seconda equazione. Infatti notiamo che il termine di sorgente della quarta equazione include un contributo di spostamento e delle cariche magnetiche:

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{1}{c} \vec{J}_{tot} \quad \vec{J}_{tot} = \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + 4\pi \sum_i q_i \vec{v}_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \quad (3.60)$$

Questo suggerisce di aggiungere alla seconda equazione un termine di corrente magnetica oltre a quello di spostamento $\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$, dato dalle cariche magnetiche:

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{1}{c} \vec{J}_{tot}^M \quad \vec{J}_{tot}^M = \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \sum_i g_i \vec{v}_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \quad (3.61)$$

Troviamo dunque:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{E} = 4\pi \sum_i q_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \\ \nabla \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = - \sum_i g_i \vec{v}_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \\ \nabla \cdot \vec{B} = \sum_i g_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \\ \nabla \times \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \sum_i q_i \vec{v}_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \end{array} \right. \quad \vec{B} = \vec{H} + 4\pi \sum_i \vec{m}_i(t) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \quad (3.62)$$

Pertanto le sorgenti del campo elettromagnetico sono caratterizzate dalla carica elettrica, carica magnetica e momento di dipolo magnetico.

Vediamo adesso come questa modifica influenza il moto di particelle cariche, continuando a supporre che la forza di Lorentz abbia la stessa forma (non ci sono termini aggiuntivi per la carica magnetica). Chiaramente la forma dell'equazione di Newton rimane la stessa:

$$m\ddot{x} = q \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right) \quad (3.63)$$

Tuttavia la presenza delle cariche magnetiche ha un importante influenza sui potenziali elettromagnetici e dunque sulla formulazione hamiltoniana (che comunque ci aspettiamo portare alle stesse equazioni del moto).

3.2.3 Potenziale Vettore di un Monopolo Magnetico

Per semplicità, ci limitiamo adesso a risolvere il problema di una particella carica che si muove nel campo generato da un monopolo magnetico fermo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{B} = g \delta(\vec{x}) \\ \nabla \times \vec{B} = 0 \end{array} \right. \Rightarrow \vec{B} = \frac{g}{4\pi r^2} \hat{r} \quad (3.64)$$

L'equazione del moto è dunque:

$$m\ddot{\vec{x}} = q \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \quad (3.65)$$

da cui l'hamiltoniana, con la gauge $V = 0$:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 \quad (3.66)$$

Sorge adesso un problema con la definizione di potenziale vettore, come conseguenza del fatto che il campo non è più solenoidale. Si può infatti dimostrare che non esiste un campo $\vec{A}(\vec{x})$ tale che:

$$\vec{B}(\vec{x}) = \nabla \times \vec{A}(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \neq 0 \quad (3.67)$$

soddisfa le equazioni di Maxwell. Enunciamo a proposito il seguente teorema:

Teorema 6. *Il campo magnetico $\vec{B}(\vec{x})$ ammette un potenziale vettore se e solo se è definito in una regione di \mathbb{R}^3 semplicemente connessa.*

Ricordiamo che una regione Ω di \mathbb{R}^3 è semplicemente connessa se ogni superficie chiusa Σ contenuta in essa può essere contratta in maniera continua ad un punto rimanendo in Ω . Pertanto l'assenza di un potenziale vettore ben definito è dovuta a motivi di carattere **topologico**.

Chiaramente questo non avviene nel caso del monopolo magnetico, in quanto $\vec{B}(\vec{x})$ è definito solo in $\Omega = \mathbb{R}^3 - \{0\}$ che non è semplicemente connesso. Infatti una superficie contenente l'origine O non si può contrarre ad un punto $P \in \Omega$

a meno di uscire da Ω . Ad un certo punto infatti una superficie Σ sarà contratta in modo da attraversare O , uscendo da Ω .

Possiamo fare una dimostrazione alternativa per l'impossibilità dell'esistenza di $\vec{A}(\vec{x})$ tramite il Teorema di Stokes.

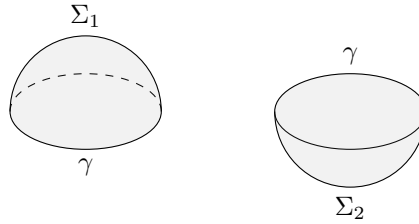
Supponiamo per assurdo che \vec{A} esista. Sia $\gamma \supset \Omega$ una curva chiusa (arbitraria) percorsa in un certo senso e Σ_γ una superficie aperta con $\partial\Sigma_\gamma = \gamma$, con normale \hat{n} definita tramite la regola della mano destra. Per il Teorema di Stokes:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \Rightarrow \oint_\gamma \vec{A} \cdot d\vec{x} = \int_{\Sigma_\gamma} \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma \quad (3.68)$$

Possiamo dimostrare che questo porta ad una contraddizione. Scegliamo come curva γ una circonferenza di raggio r centrata in O e percorsa in un certo senso. Pertanto $\oint_\gamma \vec{A} \cdot d\vec{x}$ ha un valore ben definito.

Scegliamo poi come superficie Σ_1 una semisfera che ha per bordo la semicirconferenza, in modo che la normale sia uscente:

$$\int_{\Sigma_1} \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma = \int_{2\pi} d\Omega r^2 \frac{g}{4\pi^2} \hat{n} \cdot \hat{n} = \frac{g}{4\pi} 2\pi = \frac{g}{2} \quad (3.69)$$



Possiamo scegliere un'altra superficie Σ_2 contenuta nel semispazio opposto, in modo che la normale sia entrante:

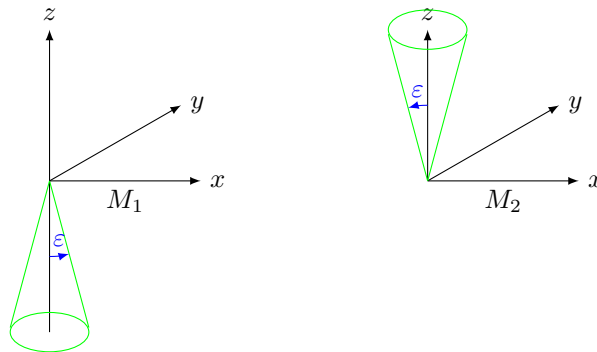
$$\int_{\Sigma_2} d\Sigma \vec{B} \cdot \hat{n} = -\frac{g}{2} \quad (3.70)$$

Questo è un assurdo, che dimostrare che \vec{A} non può esistere.

3.2.4 Potenziali Vettori in due carte

Per ovviare a questo problema possiamo definire invece due carte su cui definiamo \vec{B} , in modo che siano semplicemente connesse. Una possibile scelta è una carta M_1 dove si esclude in cui si esclude un cono C_1 di apertura ε ed asse $-z$, e una carta M_2 dove si esclude un cono C_2 di apertura ε ed asse z ($0 < \varepsilon < \pi/2$).

$$M_1 = \mathbb{R}^3 \setminus C_1 = \{\vec{x}: 0 \leq \theta \leq \pi - \varepsilon\} \quad M_2 = \mathbb{R}^3 \setminus C_2 = \{\vec{x}: \varepsilon \leq \theta \leq \pi\} \quad (3.71)$$



Queste sono chiaramente semplicemente connesse e la loro unione fornisce l'intero spazio:

$$\Omega = \mathbb{R}^3 - \{O\} = M_1 \cup M_2 \quad (3.72)$$

Questo ci permette di definire potenziali $\vec{A}_1(\vec{x}), \vec{A}_2(\vec{x})$ tali che:

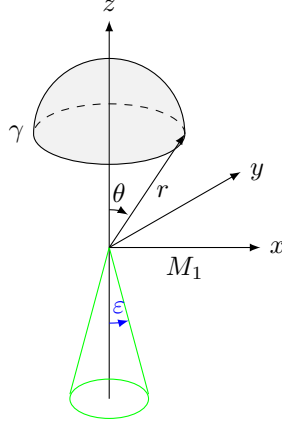
$$\begin{cases} \vec{B}(\vec{x}) = \nabla \times \vec{A}_1(\vec{x}) & \forall \vec{x} \in M_1 \\ \vec{B}(\vec{x}) = \nabla \times \vec{A}_2(\vec{x}) & \forall \vec{x} \in M_2 \end{cases} \quad (3.73)$$

Calcoliamo questi potenziali a partire da un'ansatz dovuta alla simmetria dei due domini:

$$\vec{A}_k(\vec{x}) = f_k(r, \theta) \hat{e}_\phi \quad (3.74)$$

Ci aspettiamo infatti che ad un campo magnetico radiale corrisponda un potenziale vettore "tangente"/azimutale, con simmetria rispetto a questo angolo.

Per calcolare f_k si usa il teorema di Stokes. Consideriamo prima f_1 . Consideriamo la circonferenza γ di asse z , apertura θ e distanza r dall'origine. Consideriamo la calotta sferica corrispondente, che giace sopra alla circonferenza (in modo che sia tutta contenuta in M_1).



Lungo questa curva \vec{A}_1 ha valore costante:

$$\oint_\gamma \vec{A} \cdot d\vec{x} = \int_0^{2\pi} d\phi r \sin \theta f_1 = 2\pi r \sin \theta f_1 \quad (3.75)$$

Mentre per il campo magnetico:

$$\int_\Sigma d\Sigma \vec{B} \cdot \hat{n} = r^2 \int_0^\theta d\theta' \sin \theta' \int_0^{2\pi} d\phi \frac{g}{4\pi r^2} = \frac{g}{2} (1 - \cos \theta) \quad (3.76)$$

da cui infine:

$$f_1(r, \theta) = \frac{g}{4\pi} \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \Rightarrow \vec{A}_1(\vec{x}) = \frac{g}{4\pi r} \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi \quad (3.77)$$

Notiamo che \vec{A}_1 è ben definito anche per $\theta \rightarrow 0$ per continuità, mentre per $\theta \rightarrow \pi$ (che non appartiene a π) il potenziale è singolare in quanto tende a $2/0$, in accordo con il fatto che non esiste \vec{A}_1 ben definito ovunque fuori l'origine.

Per \vec{A}_2 possiamo fare un simile procedimento, prendendo la calotta sferica che giace al di sotto della circonferenza. In questo modo per simmetria $\theta \rightarrow \pi - \theta \Rightarrow \cos \theta \rightarrow -\cos \theta$ ed $\hat{n} \rightarrow -\hat{n}$:

$$\vec{A}_2(\vec{x}) = -\frac{g}{4\pi r} \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi \quad (3.78)$$

Ritroviamo viceversa che \vec{A}_2 è singolare per $\theta \rightarrow 0$ e ben definita invece per $\theta \rightarrow \pi$.

Per verificare direttamente che questo è un potenziale opportuno calcolando il suo rotore in coordinate sferiche:

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{A} &= \hat{e}_r \left[\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (A_\phi \sin \theta) - \frac{\partial A_\theta}{\partial \phi} \right] + \hat{e}_\theta \frac{1}{r} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial A_r}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial r} (r A_\phi) \right] + \hat{e}_\phi \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r A_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial \theta} \right] = \\ &= \hat{e}_r \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (A_\phi \sin \theta) \end{aligned} \quad (3.79)$$

Ci chiediamo adesso cosa succede nell'intersezione:

$$M_1 \cup M_2 = \{\vec{x}: \varepsilon < \theta < \pi - \varepsilon\} \quad (3.80)$$

Chiaramente affinché corrispondano allo stesso campo allora devono differire di una trasformazione di gauge:

$$\nabla \Lambda = \vec{A}_1(\vec{x}) - \vec{A}_2(\vec{x}) = \frac{g}{2\pi r} \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi + \frac{g}{2\pi r} \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi = \frac{g}{2\pi r \sin \theta} \hat{e}_\phi \quad (3.81)$$

Scriviamo il gradiente di Λ in coordinate sferiche:

$$\nabla \Lambda = \hat{e}_r \frac{\partial \Lambda}{\partial r} + \hat{e}_\theta \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \Lambda}{\partial \phi} + \hat{e}_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial \Lambda}{\partial \theta} \quad (3.82)$$

da cui:

$$\frac{d\Lambda}{d\phi} = r \sin \theta \frac{g}{2\pi r} \frac{1}{\sin \theta} = \frac{g}{2\pi} \Rightarrow \Lambda = \frac{g}{2\pi} \phi \quad (3.83)$$

Notiamo che Λ è polidroma in $M_1 \cap M_2$ in quanto fa un salto $\Lambda(2\pi) - \Lambda(0) = -g$. Nella teoria classica questo non è problematico in quanto solo il suo gradiente influenza il potenziale vettore e dunque l'hamiltoniana.

3.2.5 Meccanica Classica

Notiamo adesso che siccome abbiamo due potenziali vettori in due carte, avremo anche due hamiltoniane nelle due carte:

$$H_k = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}_k(\vec{x}) \right)^2 \quad k = 1, 2 \quad (3.84)$$

Ci chiediamo dunque come studiare il moto di una particella la cui orbita interseca entrambi i domini M_1, M_2 . Supponiamo di aver risolto le equazioni di Hamilton e di conoscere γ_t . Troviamo:

$$\begin{cases} \gamma_t = (\vec{x}_1(t), \vec{p}_1(t)) & \vec{x}_1(t) \in M_1 \\ \gamma_t = (\vec{x}_2(t), \vec{p}_2(t)) & \vec{x}_2(t) \in M_2 \end{cases} \quad (3.85)$$

e in $M_1 \cap M_2$ valgono le leggi di trasformazione di gauge:

$$\begin{cases} \vec{x}_1(t) = \vec{x}_2(t) = \vec{x}(t) \\ \vec{p}_2(t) = \vec{p}_1(t) + \frac{q}{c} \nabla \Lambda(\vec{x}(t)) \end{cases} \quad (3.86)$$

Pertanto supponendo che $\vec{x}(0)$ giace in M_1 allora inizialmente l'evoluzione temporale è dovuta ad H_1 . Se poi a un certo istante t_0 l'orbita arriva al bordo di M_1 allora dobbiamo passare alla carta M_2 . Dall'istante t_0 l'evoluzione temporale segue H_2 e le condizioni iniziali sono date dalle trasformazioni di gauge per $t = t_0$. Pertanto dal punto di vista classico non vi è alcuna ambiguità e le coordinate e l'impulso hanno una ben definita legge temporale, da una ben definita evoluzione temporale di γ_t .

3.2.6 Quantizzazione della Carica Elettrica

In meccanica quantistica l'esistenza del monopolio magnetico risulta tuttavia in risultati straordinari, non presenti in meccanica classica.

L'esistenza di due hamiltoniane risulta dunque nell'esistenza di due operatori hamiltoniani e due equazioni di Schrodinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_k(t)\rangle = \hat{H}_k |\psi_k(t)\rangle \quad \psi_k(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi_k \rangle : M_k \rightarrow \mathbb{C} \quad k = 1, 2 \quad (3.87)$$

dove le hamiltoniane sono ben definite per dati potenziali:

$$\hat{H}_k = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}_k^2 = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \vec{A}_k(\vec{x}) \right)^2 \quad k = 1, 2 \quad (3.88)$$

Ci chiediamo stavolta quali condizioni di raccordo devono soddisfare $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$. Ci conviene sempre rimanere nella rappresentazione di Schrodinger (delle posizioni), così che vale semplicemente la trasformazione di gauge:

$$\psi_2(\vec{x}) = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\vec{x})} \psi_1(\vec{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{qg}{c} \frac{\phi}{2\pi}} \psi_1(\vec{x}) \quad \vec{x} \in M_1 \cap M_2 \quad (3.89)$$

Troviamo che sorge un problema, in quanto le ψ_k devono essere continue in M_k , e in particolare monodrome. Questo implica in particolare che il loro rapporto deve essere monodromo:

$$\frac{\psi_2(\vec{x})}{\psi_1(\vec{x})} = e^{-\frac{i}{\hbar c} gq \frac{\phi}{2\pi}} = \zeta(\vec{x}) \quad (3.90)$$

E dunque:

$$\zeta(2\pi) = \zeta(0) \iff e^{-i \frac{gq}{\hbar c}} = 1 \iff \frac{gq}{\hbar c} = 2\pi n \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.91)$$

Questo significa che affinché il problema quantistico sia ben definito allora il prodotto tra carica magnetica del monopolio e carica elettrica della particella deve essere quantizzato:

$$gq = 2\pi \hbar c n \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.92)$$

Questo implica un fatto straordinario. Supponiamo che esista un singolo monopolio magnetico nell'universo con un certo valore della carica g , che potremo anche non osservare mai. Tutte le cariche dell'universo si muovono dunque

nel suo campo magnetico. Ma questo significa che tutte le cariche elettriche esistenti dell'universo dovranno essere quantizzate:

$$\boxed{q = q_0 n} \quad q_0 = \frac{2\pi\hbar c}{g}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.93)$$

Dirac suppone dunque che questo argomento potesse giustificare la quantizzazione della carica osservata in tutte le particelle elementari note. Supponendo che $q_0 = e/3$ (la carica elementare è quella del quark down) allora questo ci fornisce una predizione della carica magnetica del monopolo magnetico, per qualche n :

$$\boxed{g = \frac{2\pi\hbar c}{q_0} n} \quad (3.94)$$

L'ipotesi di Dirac è tuttavia chiaramente difficile o addirittura impossibile da verificare, in quanto non richiede l'esistenza di un monopolo magnetico in laboratorio. Ciononostante l'articolo di Dirac ha comunque grande importanza storica per aver introdotto nella meccanica quantistica considerazioni di carattere topologico.

Capitolo 4

Integrale dei Commini di Feynman

4.1 Lezione 23

4.1.1 Ricapitolazione sull'Evolutore Temporale

Ricordiamo alcune proprietà dell'operatore di evoluzione temporale per un sistema con hamiltoniana indipendente dal tempo.

L'equazione di Schrodinger che regola l'evoluzione temporale è data da:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle \quad (4.1)$$

Siccome in generale $\hat{\mathcal{H}}$ è un operatore illimitato, allora dobbiamo richiedere che $|\psi(t)\rangle$ appartenga al suo dominio $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$. Questo è in generale un sottoinsieme di \mathcal{H} , ma è comunque denso in \mathcal{H} (ossia la sua chiusura coincide con \mathcal{H}).

L'equazione va poi accompagnata dalla condizione iniziale $|\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle$, sempre con $|\psi_0\rangle \in \mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$. Per la linearità dell'equazione di Schrodinger, allora sicuramente possiamo scrivere la soluzione generale nella forma:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi_0\rangle \quad (4.2)$$

Siccome $\hat{\mathcal{H}}^\dagger = \hat{\mathcal{H}}$ allora si trova che $\hat{U}(t)$ (che è ben definito solo su $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$ inizialmente) è isometrico. Scriviamo le equazioni di Schrodinger per il vettore e il funzionale associato:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle \\ -i\hbar \frac{d}{dt} \langle\psi(t)| = \langle\psi(t)| \hat{\mathcal{H}} \end{cases} \quad (4.3)$$

da cui ricaviamo:

$$\frac{d}{dt} (\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle) = \left[\langle\psi(t)| \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle - \frac{d}{dt} \langle\psi(t)| \psi(t)\rangle \right] = \frac{1}{i\hbar} \left[\langle\psi(t)| \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)| \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle \right] = 0 \quad (4.4)$$

Pertanto $\hat{U}(t)$ è effettivamente isometrico:

$$\|\psi(t)\| = \|\hat{U}(t)\psi_0\| = \|\psi_0\| \Rightarrow \hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t) = \mathbb{1} \quad (4.5)$$

Pertanto $\hat{U}(t)$ è anche limitato/continuo e definito su un insieme denso. Ammette dunque un'unica estensione per continuità su tutto \mathcal{H} :

$$\hat{U}(t): \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad (4.6)$$

Essendo poi $\hat{\mathcal{H}}$ hermitiano allora ammette spettro discreto con autovettori normalizzabili e spettro continuo con autovettori non normalizzabili, che formano una base ortonormale per \mathcal{H} e in particolare per $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$:

$$|\psi_0\rangle = \sum_{ns} c_{ns}^0 |u_{ns}\rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW c_{Ws}^0 |u_{Ws}\rangle \quad (4.7)$$

Per $|\psi_0\rangle \in \mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$ ci aspettiamo una soluzione del tipo:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{ns} c_{ns}(t) |u_{ns}\rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW c_{Ws}(t) |u_{Ws}\rangle \quad (4.8)$$

dove:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle \\ \sum_{ns} \frac{dc_{ns}}{dt} |u_{ns}\rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW \frac{dc_{Ws}}{dt} |u_{Ws}\rangle &= \sum_{ns} W_n c_{ns} |u_{ns}\rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW W c_{Ws} |u_{Ws}\rangle \end{aligned} \quad (4.9)$$

Siccome la base è ortonormale allora i coefficienti devono soddisfare le equazioni:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{dc_{ns}}{dt} = W_n c_{ns} & c_{ns}(0) = c_{ns}^0 \\ i\hbar \frac{dc_{Ws}}{dt} = W c_{Ws} & c_{Ws}(0) = c_{Ws}^0 \end{cases} \quad (4.10)$$

che ammettono come uniche soluzioni:

$$c_{ns}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} W_n t} c_{ns}^0 \quad c_{Ws}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} W t} c_{Ws}^0 \quad (4.11)$$

da cui:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{ns} e^{-\frac{i}{\hbar} W_n t} c_{ns}^0 |u_{ns}\rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW e^{-\frac{i}{\hbar} W t} c_{Ws}^0 |u_{Ws}\rangle \quad (4.12)$$

Questa espressione era a priori valida solo per $|\psi_0\rangle \in \mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$ ma in realtà, siccome $\hat{U}(t)$ è isometrico e ammette un'estensione per continuità, allora $|\psi_0\rangle$ può appartenere all'intero spazio di Hilbert \mathcal{H} , ossia per c_{ns}^0, c_{Ws}^0 generici (a quadrato sommabile). Esplicitando i coefficienti come prodotti scalari troviamo immediatamente l'evolutore temporale:

$$\hat{U}(t) = \sum_{ns} e^{-\frac{i}{\hbar} W_n t} |u_{ns}\rangle \langle u_{ns}| + \sum_s \int_{\sigma_c} dW e^{-\frac{i}{\hbar} W t} |u_{Ws}\rangle \langle u_{Ws}| \quad (4.13)$$

Da questa formula troviamo alcune proprietà dell'evolutore temporale. Ad esempio $\hat{U}(0) = \mathbb{1}$ (conseguenza della completezza degli autovettori di $\hat{\mathcal{H}}$). Gli $\hat{U}(t)$ formano un gruppo ad un parametro, come conseguenza delle proprietà dell'esponenziale (e ortogonalità degli autovettori):

$$\hat{U}(t_1 + t_2) = \hat{U}(t_1) \hat{U}(t_2) \quad (4.14)$$

Notiamo inoltre che chiaramente \hat{U} dipende solo dall'intervallo di tempo e non dal tempo assoluto, come conseguenza del fatto che l'hamiltoniana è indipendente dal tempo.

Troviamo inoltre che $\hat{U}(t)$ ammette anche inverso destro:

$$\mathbb{1} = \hat{U}(0) = \hat{U}(t) \hat{U}(-t) \Rightarrow \hat{U}(-t) = (\hat{U}(t))^{-1} \Rightarrow \mathcal{R}(\hat{U}(t)) = \mathcal{H} \quad (4.15)$$

Pertanto $\hat{U}(t)$ è anche unitario e dunque il suo aggiunto è il suo inverso ovunque.

In realtà queste proprietà sono ovvie se esprimiamo l'evolutore temporale in forma compatta. Ricordiamo che una funzione di un operatore analitica si può scrivere come serie di potenze o in decomposizione spettrale. Nel primo modo:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t} |u_{ns}\rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} \left(-\frac{i}{\hbar} t\right)^r \hat{\mathcal{H}}^r |u_{ns}\rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} \left(-\frac{i}{\hbar} t\right)^r W_n^r |u_{ns}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} W_n t} |u_{ns}\rangle \quad e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t} |u_{Ws}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} W t} |u_{Ws}\rangle \quad (4.16)$$

da cui:

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t} \equiv \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t\right)^r \quad (4.17)$$

Ancora, possiamo arrivare a questa direttamente dall'equazione di Schroedinger e definizione di operatore di evoluzione temporale:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t) |\psi_0\rangle = \hat{\mathcal{H}} \hat{U}(t) |\psi_0\rangle \Rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t) = \hat{\mathcal{H}} \hat{U}(t) \\ \hat{U}(0) = \mathbb{1} \end{cases} \Rightarrow \hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t} \quad (4.18)$$

4.1.2 Sviluppo di Dyson

Questo secondo approccio si generalizza bene ad Hamiltoniane dipendenti dal tempo. Ci aspettiamo stavolta che l'evolutore temporale dipenda da istante iniziale e finale:

$$|\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle \quad (4.19)$$

Troviamo:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{\mathcal{H}}(t)\hat{U}(t, t_0) \\ \hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1} \end{cases} \quad (4.20)$$

Integrando troviamo la seguente equazione integrale:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{\mathcal{H}}(t') \hat{U}(t', t_0) \quad (4.21)$$

Questa può essere risolta iterativamente, ossia facciamo l'ansatz:

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{U}_n(t, t_0) \quad O(\hat{U}_n) = \lambda^n, \lambda \rightarrow 0 \quad (4.22)$$

immaginando $\hat{\mathcal{H}}$ come dell'ordine di λ . Troviamo dunque:

$$\begin{aligned} \hat{U}_0(t, t_0) &= \mathbb{1} \Rightarrow \\ \Rightarrow \hat{U}_1(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{\mathcal{H}}(t') \\ \hat{U}_2(t, t_0) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{\mathcal{H}}(t_1) \hat{\mathcal{H}}(t_2) \\ &\dots = \dots \\ \hat{U}_n(t, t_0) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{\mathcal{H}}(t_1) \hat{\mathcal{H}}(t_2) \dots \hat{\mathcal{H}}(t_n) \end{aligned} \quad (4.23)$$

da cui:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{r=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^r \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{r-1}} dt_r \hat{\mathcal{H}}(t_1) \hat{\mathcal{H}}(t_2) \dots \hat{\mathcal{H}}(t_r) \quad (4.24)$$

Definiamo a questo punto la funzione seguente definita su famiglie di operatori ad un parametro, detto operatore di prodotto cronologicamente ordinato:

$$T[\hat{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\mathcal{H}}(t_2)] = \begin{cases} \hat{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\mathcal{H}}(t_2) & t_1 > t_2 \\ \hat{\mathcal{H}}(t_2)\hat{\mathcal{H}}(t_1) & t_2 > t_1 \end{cases} \quad (4.25)$$

che si estende in maniera ovvia al prodotto di un numero generico di operatori della famiglia.

Questo ci permette di scrivere in maniera compatta:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^r \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{r-1}} dt_r T[\hat{\mathcal{H}}(t_1) \dots \hat{\mathcal{H}}(t_r)] \quad (4.26)$$

Questo è detto **sviluppo di Dyson** dell'operatore di evoluzione temporale.

4.1.3 Funzione di Green

Definiamo adesso la funzione di Green dell'equazione di Schrodinger come la rappresentazione di Schrodinger dell'evolutore temporale:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) \equiv \langle \vec{x}' | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x} \rangle \quad (4.27)$$

Questo ci permette di scrivere l'evoluzione temporale della funzione d'onda come segue:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}', t') &= \langle \vec{x}' | \psi(t') \rangle = \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t) | \psi(t) \rangle = \int d^3x \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t) | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \\ &= \int d^3x G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (4.28)$$

4.1.4 Funzione di Green per la Particella Libera

Consideriamo adesso una rappresentazione integrale di G , nel caso di hamiltoniane indipendenti dal tempo, che è dovuta a Feynman. Possiamo dunque usare la seguente espressione:

$$\begin{aligned} G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) &= \langle \vec{x}' | \hat{U}(t' - t) | \vec{x} \rangle = \sum_{ns} e^{-\frac{i}{\hbar} W_n(t' - t)} \langle \vec{x}' | u_{ns} \rangle \langle u_{ns} | \vec{x} \rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW e^{-\frac{i}{\hbar} W(t' - t)} \langle \vec{x}' | u_{Ws} \rangle \langle u_{Ws} | \vec{x} \rangle = \\ &= \sum_{ns} e^{-\frac{i}{\hbar} W_n(t' - t)} u_{ns}(\vec{x}') u_{ns}^*(\vec{x}) + \sum_s \int_{\sigma_c} dW e^{-\frac{i}{\hbar} W(t' - t)} u_{Ws}(\vec{x}') u_{Ws}^*(\vec{x}) \end{aligned} \quad (4.29)$$

In realtà questa è solo un'espressione formale dalla funzione di Green, in quanto tipicamente lo spettro non è limitato e dunque le serie non convergenti. Possiamo però rendere convergente la serie introducendo una piccola parte immaginaria al tempo $t' - t \rightarrow t' - t + i0$.

Consideriamo il caso semplice di una particella libera in una dimensione spaziale, che facilmente si generalizza a tre dimensioni e poi a sistemi di particelle. L'hamiltoniana è data da:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Rightarrow \hat{U}(t' - t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} (t' - t)} \quad (4.30)$$

La funzione di Green sarà data da:

$$\begin{aligned} G_0(x', t'; x, t) &= \langle x' | \hat{U}(t' - t) | x \rangle = \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} (t' - t)} | x \rangle = \int dp' \int dp \langle x' | p' \rangle \langle p' | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} (t' - t)} | p \rangle \langle p | x \rangle = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dp' \int dp e^{\frac{i}{\hbar} p' x'} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p'^2}{2m} (t' - t)} \delta(p - p') e^{-\frac{i}{\hbar} p x} = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dp e^{\frac{i}{\hbar} p(x' - x)} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} (t' - t)} \end{aligned} \quad (4.31)$$

Chiaramente questo integrale non è convergente in quanto il coefficiente di p^2 è un numero immaginario. Possiamo risolvere questo problema facendo la sostituzione:

$$t' - t \rightarrow z, \text{Re}\{z\} = t' - t, \text{Im}\{z\} < 0 \iff z = t' - t - i\varepsilon, \varepsilon > 0 \quad (4.32)$$

Dopo aver calcolato l'integrale poi mandiamo $\varepsilon \rightarrow 0 \iff z \rightarrow t' - t$.

Facciamo dunque la sostituzione, riducendo l'integrale ad un integrale gaussiano:

$$\begin{aligned} G_0(x', t'; x, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dp e^{\frac{i}{\hbar} p(x' - x)} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} z} = \frac{1}{(2\pi\hbar)} I\left(\frac{i}{\hbar} \frac{z}{m}, \frac{i}{\hbar} (x' - x)\right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \sqrt{\frac{2\pi\hbar m}{iz}} \exp\left(\frac{-(x' - x)^2 m\hbar}{2iz}\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar z}} e^{\frac{im}{2\hbar z} (x' - x)^2} \end{aligned} \quad (4.33)$$

da cui, per $z \rightarrow t' - t$:

$$G_0(x', t'; x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t' - t)}} e^{\frac{im}{2\hbar(t' - t)} (x' - x)^2} \quad (4.34)$$

Facciamo adesso considerazioni sulla fase della G_0 espressa nell'esponenziale:

$$\phi = \frac{m(x' - x)^2}{2(t' - t)} \quad (4.35)$$

Iniziamo con il considerare una particella classica che compie un moto libero da x all'istante t ad x' all'istante t' .

$$x' - x = v(t' - t) \quad (4.36)$$

Ha dunque senso considerare l'azione classica tra questi due estremi lungo il percorso:

$$S_{cl}[x', t'; x, t] = \int_t^{t'} d\tilde{t} \mathcal{L}_{cl} = \int_t^{t'} d\tilde{t} \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m v^2 (t' - t) = \frac{1}{2} \frac{m(x' - x)^2}{t' - t} = \phi \quad (4.37)$$

che ci permette di scrivere la funzione di Green in questa maniera suggestiva:

$$G_0(x', t'; x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}} (t' - t) e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}[x', t'; x, t]} \quad (4.38)$$

Questo potrebbe suggerirci di supporre che per una particella in un potenziale:

$$G(x', t'; x, t) = \kappa e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}[x', t'; x, t]} \quad S_{cl} = \int_t^{t'} d\tilde{t} \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right] \Big|_{x(t)=x_{cl}(t)} \quad (4.39)$$

dove $x_{cl}(t)$ è la soluzione delle equazione del moto classiche che soddisfa le condizioni al contorno $x(t) = x, x(t') = x'$. In realtà questa espressione è falsa. È tuttavia possibile trovare la vera soluzione.

Ritorniamo alla funzione di Green per la particella libera. Iniziamo con vedere cosa succede quando $t' - t$ è piccolo, in modo da capire "quanto è grande il supporto" della funzione di Green. Notiamo che per supporto intendiamo in realtà il supporto come "nucleo integrale" (ossia nel senso delle distribuzioni) di $\psi(x, t)$, essendo poi G_0 puramente immaginaria. A priori la funzione è una gaussiana "complessa" (come funzione di $x' - x$) e dunque ci aspettiamo come risultato:

$$|x' - x| \approx \frac{\hbar(t' - t)}{m} = O(\sqrt{t' - t}) \quad (4.40)$$

ossia G_0 è non nulla solo all'interno di una deviazione standard σ .

Poniamo $t' - t = \delta$ e calcoliamo la funzione d'onda in x', t' :

$$\psi(x', t') = \int dx G_0(x', t'; x, t) \psi(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar(t' - t)}} \int dx e^{i \frac{m(x' - x)^2}{2(t' - t)}} \psi(x, t) \quad (4.41)$$

Notiamo che la fase che compare nell'esponenziale oscilla velocemente al variare di x per $t - t'$ piccoli, eccetto che nel caso x vicino ad x' (fissato). Questo significa che il contributo maggiore all'integrale per $t - t'$ piccolo è quello per x vicino ad x' (teorema di Lebesgue altrimenti). Per capire esattamente quanto devono essere vicini x, x' (ossia qual'è il supporto di G_0) facciamo un cambio di variabili:

$$z^2 = i \frac{m(x' - x)^2}{\hbar(t' - t)} \Rightarrow x = x' + z \sqrt{\frac{\hbar(t' - t)}{m}} \Rightarrow dx = dz \sqrt{\frac{\hbar(t' - t)}{m}} \quad (4.42)$$

Sostituiamo nell'integrale:

$$\psi(x', t') = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar(t' - t)}} \sqrt{\frac{\hbar(t' - t)}{m}} \int dz e^{i \frac{z^2}{2}} \psi(x(z), t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i}} \int dz e^{i \frac{z^2}{2}} \psi(x(z), t) \quad (4.43)$$

Ma questa è non nulla solo per:

$$z \approx 1 \iff |x - x'| \approx \sqrt{\frac{\hbar(t' - t)}{m}} = O(\sqrt{|t' - t|}) \quad (4.44)$$

come ci aspettavamo.

4.1.5 Integrale dei Cammini

Consideriamo adesso il caso di una particella in un potenziale e dividiamo l'intervallo in $N + 1$ intervalli, ossia $t' - t = (N + 1)\varepsilon$, con $N \gg 1$ e ε piccolo. Possiamo esplicitare la funzione di Green inserendo dividendo l'esponenziale in $N + 1$ fattori e inserendo N identità tra questi:

$$\begin{aligned} G(x', t'; x, t) &= \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)} | x \rangle = \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(N+1)\varepsilon} | x \rangle = \langle x' | \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon}}_{N+1 \text{ volte}} | x \rangle = \\ &= \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon} \int dx_N | x_N \rangle \langle x_N | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon} \int dx_1 | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon} | x \rangle = \\ &= \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon} | x_N \rangle \langle x_N | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon} | x_{N-1} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon} | x \rangle \end{aligned} \quad (4.45)$$

Possiamo poi porre per comodità di notazione $x = x_0, x' = x_{N+1}$:

$$G(x', t'; x, t) = \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \langle x_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon} | x_n \rangle \right) \quad (4.46)$$

La scrittura è ancora più compatta se calcoliamo direttamente la funzione d'onda al tempo t' in x'

$$\psi(x', t') = \int dx G(x', t'; x, t) \psi(x, t) = \int \left(\prod_{n=0}^N dx_n \langle x_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\varepsilon} | x_n \rangle \right) \psi(x_0, t) \quad (4.47)$$

4.1.6 Funzione di Green "Infinitesima" nello Spazio delle Configurazioni

Per valori di t, t' fissati, nel limite $N \rightarrow \infty$, o equivalentemente $\varepsilon \rightarrow 0$, possiamo espandere l'esponentiale dell'operatore al primo ordine in ε :

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon + o(\varepsilon^2) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 - \frac{i}{\hbar}\hat{V}\varepsilon + o(\varepsilon^2) = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{V}}{2}\varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{V}}{2}\varepsilon} + o(\varepsilon^2) \quad (4.48)$$

Questo ci conviene in quanto il potenziale è diagonale nella base delle posizioni e conosciamo la funzione di Green della particella libera. Troviamo:

$$\begin{aligned} \langle x_{i+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon} | x_i \rangle &= \langle x_{i+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{V}}{2}\varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{V}}{2}\varepsilon} | x_i \rangle + o(\varepsilon^2) = e^{-\frac{i}{2\hbar}(V(x_{i+1})+V(x_i))} \langle x_{i+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\varepsilon} | x_i \rangle + o(\varepsilon^2) = \\ &= e^{-\frac{i}{2\hbar}(V(x_{i+1})+V(x_i))} G_0(x_{i+1}, \varepsilon; x_i, 0) + o(\varepsilon^2) = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{V(x_{i+1}) + V(x_i)}{2} \right] + o(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (4.49)$$

Ricordiamo adesso che per $\varepsilon \rightarrow 0$ vale $|x_{i+1} - x_i| = o(\sqrt{\varepsilon})$. Possiamo dunque espandere il potenziale attorno al punto medio tra x_{i+1} ed x_i :

$$\bar{x}_i = \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \Rightarrow o(x_{i+1} - \bar{x}_i) = o(x_{i+1} - x_i) = o(\sqrt{\varepsilon}) \quad (4.50)$$

da cui:

$$\begin{aligned} V(x_{i+1}) &= V(\bar{x}_i) + V'(\bar{x}_i)(x_{i+1} - \bar{x}_i) + o(x_{i+1} - x_i)^2 = \\ &= V(\bar{x}_i) + V'(\bar{x}_i) \frac{x_{i+1} - x_i}{2} + o(\varepsilon) \\ V(x_i) &= V(\bar{x}_i) - V'(\bar{x}_i) \frac{x_{i+1} - x_i}{2} + o(\varepsilon) \\ \frac{V(x_{i+1}) + V(x_i)}{2} &= V(\bar{x}_i) + o(\varepsilon) \end{aligned} \quad (4.51)$$

Pertanto la media dei potenziali tra due punti vicini è uguale al potenziale nella media dei due punti. Possiamo dunque scrivere, usando $e^{o(x)} = 1 + o(x)$ per $x \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \langle x_{i+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon} | x_i \rangle &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{V(x_{i+1}) + V(x_i)}{2} \right] + o(\varepsilon^2) = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp \left[\frac{im}{\hbar} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\bar{x}_i) + o(\varepsilon)\varepsilon \right] + o(\varepsilon^2) = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp \left[\frac{im}{\hbar} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\bar{x}_i) \right] e^{o(\varepsilon^2)} + o(\varepsilon^2) = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp \left[\frac{im}{\hbar} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\bar{x}_i) \right] + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} o(\varepsilon^2) + o(\varepsilon^2) = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp \left[\frac{im}{\hbar} \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\bar{x}_i) \right] + o(\varepsilon^{3/2}) \end{aligned} \quad (4.52)$$

Siccome ε è piccolo allora ha senso definire la velocità come segue:

$$\dot{x}_n = \frac{x_{n+1} - x_n}{\varepsilon} \quad (4.53)$$

che ci permette di definire:

$$L_n = \frac{m}{2} \dot{x}_n^2 - V(\bar{x}_n) \quad (4.54)$$

E dunque l'elemento di matrice si semplifica notevolmente:

$$\langle x_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon} | x_n \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} e^{\frac{i}{\hbar} L_n \varepsilon} + o(\varepsilon^{3/2}) \quad (4.55)$$

Notiamo che d'altra parte questa è l'approssimazione all'ordine $o(\varepsilon^{3/2})$ della funzione di Green valutata per due posizioni generiche e due istanti vicini $t' - t = \varepsilon$:

$$G(x_{n+1}, t + \varepsilon; x_n, t) = \langle x_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon} | x_n \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} e^{\frac{i}{\hbar} L_n \varepsilon} + o(\varepsilon^{3/2}) \quad (4.56)$$

4.2 Lezione 24

Recap.

4.2.1 Integrale dei Cammini

Sostituiamo il risultato ottenuto a fine lezione nella produttoria 4.45, ricordando che $x_0 = x, x_{N+1} = x'$:

$$\begin{aligned} G(x', t'; x, t) &= \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \langle x_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \varepsilon} | x_n \rangle \right) = \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} e^{\frac{i}{\hbar} L_n \varepsilon} \right) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon \right) \end{aligned} \quad (4.57)$$

dove L_n dipende implicitamente da x_{n+1}, x_n tramite \bar{x}_n, \dot{x}_n , che sono la posizione media e la velocità media (classiche).

Definiamo ora, per ogni $n = 0, \dots, N+1$:

$$\begin{cases} t_n = t + n\varepsilon \\ x(t_n) \equiv x_n \end{cases} \quad (4.58)$$

Dove $x(\tau)$ è una curva curva, o cammino, che passa per i punti x_n , con la condizione al bordo $x(t) = x_0 = x, x(t') = x_{N+1} = x'$. Tipicamente si sceglie questa come la spezzata che passa per questi punti.

Questo ci fa capire che in realtà il dominio di integrazione è quello di tutti i possibili cammini di $N+1$ punti, con condizioni al bordo $x(t) = x, x(t') = x'$, ciascuno pesato con il seguente fattore di fase:

$$\exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon \right) \quad (4.59)$$

Per $N \rightarrow \infty$ questo fattore ha un'espressione particolarmente suggestiva. Infatti detta \mathcal{L} la lagrangiana della particella classica, e per definizione di azione (classica), vale:

$$L_n = \mathcal{L}(\bar{x}_n, \dot{x}_n) \quad S = \int_{t_1}^{t_2} d\tau \mathcal{L}(x(\tau), \dot{x}(\tau)) \quad (4.60)$$

Ma per $N \rightarrow \infty$ la somma approssima l'integrale, con $\varepsilon \rightarrow d\tau$ variabile di integrazione:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon = \int_t^{t'} d\tau \mathcal{L}(x(\tau), \dot{x}(\tau)) = S[x(\tau)] \quad (4.61)$$

dove $x(\tau)$ è un cammino (ossia una qualunque curva che rispetta le condizioni al bordo $x(t) = x, x(t') = x'$).

Scriviamo dunque in maniera compatta:

$$G(x', t'; x, t) = \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t'-t)} | x \rangle = \int_{x(t)=x}^{x(t')=x'} \mathcal{D}[x(\tau)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)] \right) \quad (4.62)$$

dove il dominio di integrazione è su tutti i cammini (curve) con le condizioni al bordo $x(t) = x, x(t') = x'$. La misura con cui stiamo integrando è data poi da ¹:

$$\mathcal{D}[x(\tau)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \prod_{n=1}^N dx_n \quad (4.63)$$

Siamo dunque arrivati all'**integrale dei cammini di Feynman**, ossia l'espressione della funzione di Green per l'equazione di Schrodinger come "integrale sui cammini" dell'esponenziale complesso dell'azione classica valutata sul corrispondente cammino. Questo è talvolta anche detto "integrale funzionale" sui cammini, in quanto la misura e la variabile di integrazione possono essere visti come funzionali dei cammini $x(\tau)$ (forse).

Verifichiamo che la misura $\mathcal{D}[x(\tau)]$ ha effettivamente le giuste dimensioni, ossia ha le stesse unità della funzione di Green, ossia l'inverso di una lunghezza, $[G] = [L]^{-1}$:

$$\begin{aligned} \left[\frac{m}{\hbar \varepsilon} \right] &= \frac{[M]}{[S][T]} = \frac{[M]}{[E][T]^2} = \frac{[M]}{[M][V]^2[T]^2} = \frac{1}{[L]^2} = [L]^{-2} \\ [\mathcal{D}[x(\tau)]] &= \left[\frac{m}{\hbar \varepsilon} \right]^{\frac{N+1}{2}} [L]^N = [L]^{-N-1} [L]^N = [L]^{-1} \end{aligned} \quad (4.64)$$

¹Non si trova con [Lee], ma si trova con [Sak, p.127], prima traslando gli indici $n \rightarrow n-1$ (solo in x_n , non nella potenza) e poi aumentando $N-1 \rightarrow N+1$.

Limite Classico

Consideriamo adesso la soluzione classica alle equazioni del moto con le date condizioni al contorno, ossia quella che minimizza l'azione:

$$x_{cl}(t): \delta S[x_{cl}(t)] = 0 \quad \begin{cases} x_{cl}(t) = x \\ x_{cl}(t') = x' \end{cases} \quad (4.65)$$

Chiaramente all'integrale contribuiscono tutti i possibili cammini, non solo quello con l'azione minima, ossia il moto effettivo.

L'integrale fornisce un metodo per arrivare al limite classico in una maniera naturale. Supponiamo che, fissati gli estremi, i cammini tipici che contribuiscono all'integrale hanno un valore dell'azione grande. Pertanto l'esponenziale è fortemente oscillante rispetto a piccole variazioni del cammino. Usando il principio della fase stazionaria i cammini che contribuiscono più significativamente sono quelli che sono vicini al cammino che rende stazionaria la fase. Ma questo è equivalente a richiedere che contribuiscono solo i cammini vicino al cammino che rende stazionaria l'azione, ossia il cammino classico $x_{cl}(t)$.

Importanza

Notiamo adesso come in realtà l'integrale di Feynman è usato piuttosto come **strumento euristico**, in quanto ancora oggi non è possibile darne una definizione matematica rigorosa, dovuta alla difficoltà dello scegliere la misura data dal limite espresso sopra.

Tuttavia anche come strumento euristico quest'espressione è risultata particolarmente utile praticamente, specialmente nella teoria quantistica dei campi, in quanto la sua generalizzazione ha condotto ad un metodo efficiente usato per dedurre le regole della teoria delle perturbazioni di una QFT, che sono molto difficili da ricavare con i metodi canonici (operatoriali).

Problemi e Soluzioni

Facciamo adesso alcune osservazioni di principio su questo integrale, basate su quelle volte allo stesso Feynman durante la sua presentazione in una conferenza internazionale. Bohr, partecipante a questa, mosse l'obiezione seguente. In meccanica quantistica risulta impossibile attribuire ad una particella valori ben definiti di coordinate e dell'impulso. Ma nell'integrale stiamo facendo una somma su cammini dove la particella ha ben definita posizione e velocità. Bohr chiese dunque come questo fosse possibile. Questa osservazione può essere giustificata notando la seguente proprietà:

$$|x_{n+1} - x_n| = o(\sqrt{\varepsilon}) \quad (4.66)$$

Questo significa che i cammini sono continui ma non derivabili, ossia non hanno una ben definita velocità. Infatti affinché $x(t)$ sia derivabile allora $|x_{n+1} - x_n| = o(\varepsilon)$. Questo è dunque compatibile con il principio di indeterminazione di Heisenberg, in quanto posizione e velocità non sono ben definiti contemporaneamente. Questo rende chiaro d'altra parte l'importanza di dare una definizione matematica rigorosa.

4.2.2 Formulazione dell'Integrale dei Cammini nello Spazio delle Fasi

Vogliamo adesso scrivere la funzione d'onda evoluta da t a t' nello spazio delle configurazioni nel seguente modo, ossia come integrale nello spazio dei cammini piuttosto che nello spazio delle configurazioni:

$$\psi(x', t') = \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)} | \psi(t) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^N \left(\frac{dx_n dp_n}{2\pi\hbar} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon \bar{L}_n} \psi(x_1, t) \quad (4.67)$$

dove:

$$\bar{L}_n = \bar{L}(\bar{x}_n, \dot{x}_n, p_n) \quad \bar{L}(x, \dot{x}, p) = p\dot{x} - H(x, p) \quad (4.68)$$

Notiamo che \bar{L}_n non è la lagrangiana ma coincide con questa facendo la sostituzione di p come funzione di x, \dot{x} :

$$\bar{L}(x, \dot{x}, p(x, \dot{x})) = \mathcal{L}(x, \dot{x}) \quad (4.69)$$

Per arrivare a questo risultato, partiamo nuovamente dalla 4.47:

$$\psi(x', t') = \int dx G(x', t'; x, t) \psi(x, t) = \int \left(\prod_{n=0}^N dx_n \langle x_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \varepsilon} | x_n \rangle \right) \psi(x_0, t) \quad (4.70)$$

Facciamo stavolta una diversa manipolazione degli elementi di matrice, ossia non facciamo l'integrazione su p :

$$\begin{aligned}
\langle x_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{\mathcal{H}} \varepsilon} | x_n \rangle &= \langle x_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(\bar{x})}{2} \varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\bar{p}^2}{2m} \varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(\bar{x})}{2} \varepsilon} | x_n \rangle + o(\varepsilon^2) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(x_{n+1}) + V(x_n)}{2} \varepsilon} \langle x_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\bar{p}^2}{2m} \varepsilon} | x_n \rangle + o(\varepsilon^{3/2}) = \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} V(\bar{x}_n) \varepsilon} \int dp_n e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m} \varepsilon + \frac{i}{\hbar} p_n (x_{n+1} - x_n)} + o(\varepsilon^{3/2}) = \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n e^{-\frac{i}{\hbar} \left[\frac{p_n^2}{2m} - p_n \frac{(x_{n+1} - x_n)}{\varepsilon} - V(\bar{x}_n) \right] \varepsilon} + o(\varepsilon^{3/2}) = \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n e^{\frac{i}{\hbar} \left[p_n \dot{x}_n - \frac{p_n^2}{2m} - V(\bar{x}_n) \right] \varepsilon} + o(\varepsilon^{3/2}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n e^{\frac{i}{\hbar} \bar{L}_n \varepsilon} + o(\varepsilon^{3/2})
\end{aligned} \tag{4.71}$$

Chiaramente la variabile muta di integrazione è indicata con p_n in modo da poter esprimere in maniera compatta l'integrale sullo spazio delle fasi.

Sostituiamo questa nell'espressione di $\psi(x', t')$, ottenendo il risultato atteso:

$$\psi(x', t') = \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{\mathcal{H}}(t' - t)} | \psi(t) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{n=0}^N \frac{dx_n dp_n}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{L}_n \varepsilon} \right) \psi(x_0, t) \tag{4.72}$$

Siccome le variabili sono mute ed $N \rightarrow \infty$ allora possiamo scrivere equivalentemente:

$$\psi(x', t') = \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{\mathcal{H}}(t' - t)} | \psi(t) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{n=1}^N \frac{dx_n dp_n}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{L}_n \varepsilon} \right) \psi(x_1, t) \tag{4.73}$$

Otteniamo dunque la versione dell'integrale dei cammini fatto nello spazio delle fasi, dove notiamo che i cammini sono sempre tutti quelli con condizioni al bordo $x(t) = x, x(t') = x'$.

Se siamo interessati all'espressione della sola funzione di Green, posto $x_0 = x, x_{N+1} = x'$ (ossia dividiamo in $N + 1$ intervalli):

$$G(x', t'; x, t) = \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{\mathcal{H}}(t' - t)} | x \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \frac{dp_n}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{L}_n \varepsilon} \right) \tag{4.74}$$

Possiamo poi nuovamente usare una notazione simbolica:

$$G(x', t'; x, t) = \langle x' | e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{\mathcal{H}}(t' - t)} | x \rangle = \int_{x(t)=x}^{x(t')=x'} \mathcal{D}[x(\tau)] \mathcal{D}[p(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(\tau), p(\tau)]} \tag{4.75}$$

con:

$$\mathcal{D}[x(\tau)] \mathcal{D}[p(\tau)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N+1}} \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N dp_n \right) \quad e^{\frac{i}{\hbar} S[x(\tau), p(\tau)]} = \lim_{N \rightarrow \infty} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N \bar{L}_n \varepsilon \right) \tag{4.76}$$

Ancora una volta ci troviamo dimensionalmente:

$$[\mathcal{D}[x(\tau)] \mathcal{D}[p(\tau)]] = \left[\frac{(dx)^N (dp_n)^{N+1}}{\hbar^{N+1}} \right] = \frac{[L]^N [P]^{N+1}}{[L]^{N+1} [P]^{N+1}} = [L]^{-1} \tag{4.77}$$

4.2.3 Caso di un Sistema di Particelle in Tre Dimensioni

Cerchiamo adesso di generalizzare l'integrale di Feynman al caso di N particelle in \mathbb{R}^3 , invece di una particella in \mathbb{R} . L'hamiltoniana diventa:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^N \frac{\widehat{p}_j^2}{2m_j} + V(\widehat{\mathbf{x}}_1, \dots, \widehat{\mathbf{x}}_N) \tag{4.78}$$

Per fare questo ci conviene usare la notazione più coicisa, indicando con $\vec{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{3N}$ un punto dello spazio delle configurazioni, che determina le posizioni delle N particelle (classiche). Definiamo poi l'indice per indicare le particelle $j = 1, \dots, N$, l'indice per indicare le componenti $k = 1, 2, 3$, da cui l'indice per distinguere le singole componenti dei vari operatori $l = j \cdot k = 1, \dots, 3N$. Poniamo poi $3N = M$. Scriviamo dunque:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{l=1}^M \frac{\widehat{p}_l^2}{2m_l} + V(\widehat{x}_1, \dots, \widehat{x}_M) \tag{4.79}$$

In questa notazione indichiamo come segue l'autostato della posizione, funzione di Green e funzione d'onda:

$$\begin{aligned} |\vec{x}\rangle &= |x_1\rangle \otimes \cdots |x_M\rangle = |x_1\rangle \cdots |x_M\rangle \\ G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) &= \langle \vec{x}' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t'-t)} | \vec{x} \rangle \\ \psi(\vec{x}', t') &= \langle \vec{x}' | \psi(t') \rangle = \int d^M x G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (4.80)$$

Ricordando l'espressione per una particella (non simbolica):

$$G(x', t'; x, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon \right) \quad (4.81)$$

Nel caso generale è ragionevole supporre che:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{l=1}^M \frac{m_l}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \int \left(\prod_{n=1}^N \prod_{l=1}^M dx_n^l \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon \right) \quad (4.82)$$

dove:

$$L_n = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^M m_l (\dot{x}_n^l)^2 - V(\bar{x}_n^1, \dots, \bar{x}_n^M) \quad \bar{x}_n^l = \frac{x_{n+1}^l + x_n^l}{2} \quad \dot{x}_n^l = \frac{x_{n+1}^l - x_n^l}{\varepsilon} \quad \vec{x}_{N+1} = \vec{x}' \quad (4.83)$$

A vista questo è ragionevole in quanto l'analisi dimensionale riproduce nuovamente le corrette dimensioni per G , ossia l'inverso di una lunghezza elevato ad M :

$$\left[\left(\prod_{l=1}^M \frac{m_l}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \right] \left[\left(\prod_{n=1}^N \prod_{l=1}^M dx_n^l \right) \right] = [L]^{-2 \cdot M \cdot \frac{N+1}{2}} [L]^{N \cdot M} = [L]^{-M(N+1)} [L]^{MN} = [L]^{-M} \quad (4.84)$$

Come prima possiamo poi usare la notazione seguente:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = \int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t')=\vec{x}'} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau)]} \quad (4.85)$$

dove:

$$\mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{l=1}^M \frac{m_l}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \left(\prod_{n=1}^N \prod_{l=1}^M dx_n^l \right) \quad (4.86)$$

Vediamo i passaggi principali. Nuo Prima di tutto possiamo nuovamente dividere l'intervallo $t' - t$ in $N + 1$ intervalli ε e approssimare l'evolvente temporale in questi piccoli intervalli:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \varepsilon} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{V} \frac{\varepsilon}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{K} \varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{V} \frac{\varepsilon}{2}} + o(\varepsilon^2) \quad (4.87)$$

Dividiamo poi l'elemento di matrice in $N + 1$ elementi di matrice inserendo N identità, in modo da dover calcolare gli elementi di matrice degli evolutori temporali "infinitesimi". Ma con l'approssimazione fatta nella base delle posizioni il termine del potenziale esce fuori e rimane l'elemento di matrice relativo alla parte cinetica. Ma questa può essere fattorizzata e ricondotta al caso già visto:

$$\langle \vec{x}_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{K} \varepsilon} | \vec{x}_n \rangle = \prod_{l=1}^M \langle x_{n+1}^l | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}_l^2}{2m_l} \varepsilon} | x_n^l \rangle = \prod_{l=1}^M \left(\frac{m_l}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} (\dot{x}_n^l)^2 \varepsilon} \quad (4.88)$$

Sostituendo questa troviamo poi la formula attesa.

4.2.4 Caso in presenza di Campo Elettromagnetico

Consideriamo adesso il caso della presenza del campo elettromagnetico, che presenta un'hamiltoniana più generale, con dipendenza dal tempo e la presenza di un termine lineare nell'impulso (non solo quadratico). La presenza dei campi *obbliga* in realtà a considerare almeno il problema di una particella che si muove nello spazio a tre dimensioni (invece che una).

Vogliamo arrivare alla seguente espressione simbolica:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t) | \vec{x} \rangle = \int \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau)]} = \int D[\vec{x}(\tau)] D[\vec{p}(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau), \vec{p}(\tau)]} \quad (4.89)$$

dove sempre:

$$\mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{3(N+1)/2} \prod_{n=1}^N d^3 \vec{x}_n \quad S[\vec{x}(\tau)] = \int_t^{t'} d\tau \mathcal{L}(\vec{x}(\tau), \dot{\vec{x}}(\tau)) \quad (4.90)$$

dove \mathcal{L} è la lagrangiana del nuovo sistema.

Ricordiamo che la Lagrangiana e l'Hamiltoniana classiche di una particella in un campo elettromagnetico in una data gauge sono date da:

$$\mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 + \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \cdot \dot{\vec{x}} - qV(\vec{x}, t) \quad \mathcal{H}(t) = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + qV(\vec{x}, t) \quad (4.91)$$

Inoltre la scelta dell'operatore hamiltoniana basata sull'invarianza di gauge di $\hat{\vec{p}}$ implica il seguente ordinamento per $\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{A}}$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}(t) &= \frac{1}{2m} \hat{\vec{p}}^2 + qV(\vec{x}, t) = \\ &= \frac{1}{2m} \left[\hat{\vec{p}}^2 - \frac{q}{c} \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{A}} - \frac{q}{c} \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{p}} + \frac{q^2}{c^2} \hat{\vec{A}}^2 \right] + q\hat{V} \end{aligned} \quad (4.92)$$

Notiamo tuttavia che la formula a cui vogliamo arrivare implica che l'elemento di matrice dell'evolvente temporale, in cui si presentano problemi di ordinamento, è uguale a una quantità data una somma di scalari, dove invece non vi sono problemi di ordinamento. Ci chiediamo dunque se questa formula sia valida nella nostra scelta di ordinamento oppure per un altro, o addirittura se sia valida indipendentemente dall'ordinamento. Possiamo dimostrare che l'integrale di Feynman corrisponde proprio alla scelta che abbiamo fatto (e non ad altre).

Per manipolare l'elemento di matrice possiamo dividere l'intervallo in $N + 1$ intervalli $t' - t = (N + 1)\varepsilon$ usando la proprietà di gruppo dell'evolvente temporale:

$$\hat{U}(t', t) = \hat{U}(t', t_N) \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \cdots \hat{U}(t_1, t) = \hat{U}(t_{N+1}, t_N) \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \cdots \hat{U}(t_1, t_0) \quad (4.93)$$

Ma all'ordine ε l'operatore "infinitesimo" è ancora della stessa forma:

$$\hat{U}(t_{n+1}, t_n) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t_n) \varepsilon} + o(\varepsilon^2) \quad t_n = t + n\varepsilon, \quad n = 0, \dots, N + 1 \quad (4.94)$$

Pertanto ci conviene nuovamente inserire N identità nell'elemento di matrice e scriverlo come integrale dei prodotti:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t) | \vec{x} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\int \prod_{n=1}^N d^3 \vec{x}_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \langle \vec{x}_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t_n) \varepsilon} | \vec{x}_n \rangle \right) \quad (4.95)$$

Riscriviamo poi l'hamiltoniana nella forma seguente, più compatta:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{K} + \frac{1}{2} \left[\vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}} \cdot \vec{f}(\vec{x}, t) \right] + \tilde{V}(\vec{x}, t) \quad (4.96)$$

dove:

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad \vec{f}(\vec{x}, t) = -\frac{q}{mc} \vec{A}(\vec{x}, t) \quad \tilde{V}(\vec{x}, t) = qV(\vec{x}, t) + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2(\vec{x}, t) = qV(\vec{x}, t) + \frac{m}{2} f^2(\vec{x}, t) \quad (4.97)$$

In questa notazione poi:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(t) &= \frac{p^2}{2m} + \vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \vec{p} + \tilde{V}(\vec{x}, t) \\ \mathcal{L}(t) &= \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - m \vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \vec{x} + \frac{m}{2} f^2(\vec{x}, t) - \tilde{V}(\vec{x}, t) = \\ &= \frac{1}{2} m (\dot{\vec{x}} - \vec{f}(\vec{x}, t))^2 - \tilde{V}(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (4.98)$$

Pertanto possiamo scrivere l'evolvente temporale infinitesimo come segue:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_{n+1}, t_n) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t_n) \varepsilon} + o(\varepsilon^2) = 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{K} \varepsilon - \frac{i}{2\hbar} \left[\hat{\vec{f}} \cdot \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{f}} \right] \varepsilon - \frac{i}{\hbar} \hat{\tilde{V}} \varepsilon + o(\varepsilon^2) = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2} \hat{\tilde{V}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2} \hat{\vec{f}} \cdot \hat{\vec{p}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{K} \varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2} \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{f}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2} \hat{\tilde{V}}} + o(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (4.99)$$

È sottinteso che le quantità dipendenti dal tempo sono valutate per $t = t_n$.

Esplicitiamo ora l'elemento di matrice, inserendo l'identità nello spazio dei momenti:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{x}_{n+1} | \widehat{U}(t_{n+1}, t_n) | \vec{x}_n \rangle &= \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{\tilde{V}(x_{n+1}) + \tilde{V}(x_n)}{2} \right) \langle \vec{x}_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \widehat{\vec{f}} \cdot \widehat{\vec{p}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{K} \varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \widehat{\vec{p}} \cdot \widehat{\vec{f}}} | \vec{x}_n \rangle + o(\varepsilon^2) = \\
&= \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{\tilde{V}(x_{n+1}) + \tilde{V}(x_n)}{2} \right) \int d^3 p_n e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m} \varepsilon} \langle \vec{x}_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \widehat{\vec{f}} \cdot \widehat{\vec{p}}} | \vec{p}_n \rangle \langle \vec{p}_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \widehat{\vec{p}} \cdot \widehat{\vec{f}}} | \vec{x}_n \rangle + o(\varepsilon^2)
\end{aligned} \tag{4.100}$$

Calcoliamo separatamente gli elementi di matrice da integrare, approssimando all'ordine ε :

$$\begin{aligned}
\langle \vec{x}_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \widehat{\vec{f}} \cdot \widehat{\vec{p}}} | \vec{p}_n \rangle &= \langle \vec{x}_{n+1} | \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2} \widehat{\vec{f}} \cdot \widehat{\vec{p}} | \vec{p}_n \rangle + o(\varepsilon^2) = \\
&= \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2} \vec{f}(\vec{x}_{n+1}) \cdot \vec{p}_n \right) \langle \vec{x}_{n+1} | \vec{p}_n \rangle + o(\varepsilon^2) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_n \cdot \vec{x}_{n+1} - \frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2} \vec{f}(\vec{x}_{n+1}) \cdot \vec{p}_n} + o(\varepsilon^2) \\
\langle \vec{p}_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \widehat{\vec{p}} \cdot \widehat{\vec{f}}} | \vec{x}_n \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_n \cdot \vec{x}_n - \frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2} \vec{f}(\vec{x}_n) \cdot \vec{p}_n} + o(\varepsilon^2)
\end{aligned} \tag{4.101}$$

Troviamo dunque:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{x}_{n+1} | \widehat{U}(t_{n+1}, t_n) | \vec{x}_n \rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{\tilde{V}(x_{n+1}) + \tilde{V}(x_n)}{2}} \int \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m} \varepsilon} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_n \cdot \vec{x}_{n+1} - \frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2} \vec{f}(\vec{x}_{n+1}) \cdot \vec{p}_n} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_n \cdot \vec{x}_n - \frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{2} \vec{f}(\vec{x}_n) \cdot \vec{p}_n} + o(\varepsilon^2) = \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \tilde{V}(\vec{x}_n)} \int \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m} \varepsilon} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_n \cdot \dot{\vec{x}}_n \varepsilon - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \vec{f}(\vec{x}_n) \cdot \vec{p}_n} + o(\varepsilon^2) = \\
&= \int \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \varepsilon \left(\vec{p}_n \cdot \dot{\vec{x}}_n - \frac{p_n^2}{2m} - \vec{f}(\vec{x}_n) \cdot \vec{p}_n - \tilde{V}(\vec{x}_n) \right) \right) + o(\varepsilon^2) = \\
&= \int \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \varepsilon \left(\vec{p}_n \cdot \dot{\vec{x}}_n - \mathcal{H}(\vec{x}_n, \dot{\vec{x}}_n) \right) \right) + o(\varepsilon^2) = \\
&= \int \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon \bar{L}_n} + o(\varepsilon^{3/2})
\end{aligned} \tag{4.102}$$

dove:

$$\bar{L}_n = \bar{L}(\vec{x}_n, \dot{\vec{x}}_n, \vec{p}_n) \quad \bar{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, \vec{p}) = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - \mathcal{H}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) \tag{4.103}$$

Questo ci fornisce l'espressione come integrale dei cammini nello spazio delle fasi:

$$\begin{aligned}
G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) &= \langle \vec{x}' | \widehat{U}(t', t) | \vec{x} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{n=1}^N d^3 \vec{x}_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N \varepsilon \bar{L}_n \right) = \\
&= \int \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] \mathcal{D}[\vec{p}(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau), \vec{p}(\tau)]}
\end{aligned} \tag{4.104}$$

Siccome in questo caso vi è anche un termine lineare in \vec{p}_n allora non possiamo usare il risultato della funzione di Green per la particella libera. Tuttavia la funzione \bar{L} è comunque quadratica nelle p allora (a meno di una trasformazione di Wick) è gaussiana e dunque possiamo effettuare l'integrale. Ricordando che:

$$I(A, B) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{A}{2} x^2 + Bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{A}} e^{B^2/2A} \tag{4.105}$$

troviamo:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{x}_{n+1} | \widehat{U}(t_{n+1}, t_n) | \vec{x}_n \rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \tilde{V}(\vec{x}_n)} \int \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \varepsilon \left[-\frac{p_n^2}{2m} + \left(\dot{\vec{x}}_n - \vec{f}(\vec{x}_n) \right) \cdot \vec{p}_n \right] \right\} + o(\varepsilon^2) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \tilde{V}(\vec{x}_n)} \prod_{k=1}^3 I \left(\frac{i\varepsilon}{m\hbar}, \frac{i\varepsilon}{\hbar} (\dot{x}_n^k - f^k(\vec{x}_n)) \right) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \tilde{V}(\vec{x}_n)} \left(\frac{2\pi\hbar m}{i\varepsilon} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} (\dot{\vec{x}}_n - \vec{f}(\vec{x}_n))^2 \frac{m\hbar}{2i\varepsilon} \right) = \\
&= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon} \right)^{3/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2} m (\dot{\vec{x}}_n - \vec{f}(\vec{x}_n))^2 - \tilde{V}(\vec{x}_n) \right] \varepsilon \right\} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon} \right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar} L_n \varepsilon}
\end{aligned} \tag{4.106}$$

dove ancora una volta:

$$L_n = \mathcal{L}(\vec{x}_n, \dot{\vec{x}}_n) \quad (4.107)$$

Inserendo questa nell'espressione della funzione di Green troviamo nuovamente:

$$\begin{aligned} G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) &= \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t) | \vec{x} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\int \prod_{n=1}^N d^3 \vec{x}_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \langle \vec{x}_{n+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_n) \varepsilon} | \vec{x}_n \rangle \right) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\int \prod_{n=1}^N d^3 \vec{x}_n \right) \left[\prod_{n=0}^N \left(\frac{m}{2\pi \hbar i \varepsilon} \right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar} L_n \varepsilon} \right] = \\ &= \int \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau)]} \end{aligned} \quad (4.108)$$

e la misura è data dalla solita:

$$\mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi \hbar i \varepsilon} \right)^{3(N+1)/2} \int \prod_{n=1}^N d^3 \vec{x}_n \quad (4.109)$$

come volevasi dimostrare.

4.3 Lezione 25

Consideriamo adesso alcune applicazioni dell'integrale di Feynman. Le prime tre in particolare saranno l'analisi schematica di esperimenti particolarmente interessanti.

4.3.1 Effetto di Ahornov-Bohm

Esperimento

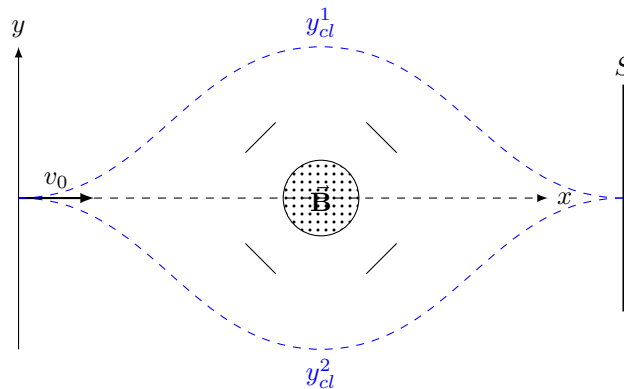
Sia un solenoide attraversato da corrente. Supponiamo che la lunghezza del solenoide sia molto maggiore del raggio in modo che il campo magnetico sia confinato all'interno del solenoide, ossia nullo al di fuori e diretto lungo l'asse, parallelo all'asse z , e uniforme al suo interno. Consideriamo il piano xy , perpendicolare all'asse z , con asse x che interseca l'asse del solenoide e con origine fuori dal solenoide.

Poniamo nell'origine del riferimento una sorgente che produce un fascio ben collimato di elettroni lanciati lungo l'asse x . Supponiamo in particolare che nella regione fuori dal solenoide sia presente un solo elettrone alla volta, in modo che non interagiscono tra loro. Il fascio, per quanto ben collimato, avrà poi un'estensione lungo y e lungo z , da un punto di vista classico.

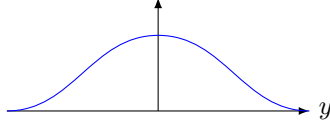
Attorno al solenoide poniamo delle cosiddette "lenti elettrostatiche", ossia conduttori di opportuna forma e posizione e posti ad un opportuno potenziale, il cui scopo è quello di impedire agli elettroni di penetrare all'interno del solenoide, nel senso classico.

A causa di queste lenti gli elettroni seguiranno traiettorie classiche che vanno da un lato o dall'altro del solenoide, a seconda della loro coordinata y iniziale, e che si incontrano in un punto P dove poniamo uno schermo rivelatore. Si misura la frequenza con cui gli elettroni collidono in un certo punto dello schermo S .

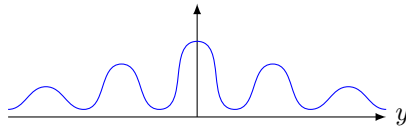
Tra la sorgente e lo schermo gli elettroni interagiscono solo con il campo elettrico delle lenti, e non il campo magnetico del solenoide.



Dal punto di vista classico ci aspettiamo dunque che la probabilità con la quale gli elettroni saranno rivelati sullo schermo S non dipende dal campo magnetico generato all'interno del solenoide. In particolare classicamente ci aspettiamo una distribuzione a picco intorno ad $y = 0$, il centro del fascio iniziale, e che questa non dipende dal campo.



Quantisticamente ci aspettiamo invece una figura di interferenza con massimi e minimi. Ma la cosa interessante che si osserva è che la figura d'interferenza dipende dal flusso $\phi_B = \pi R^2 B$ del campo magnetico attraverso il solenoide. In particolare troveremo che il centro della figura può essere spostata ed esibisce una periodicità in ϕ_B . Questo è il risultato davvero sorprendente, in quanto ci aspetteremmo che siccome gli elettroni non stanno in una regione dove è presente il campo magnetico allora il loro comportamento (e dunque la distribuzione dei conteggi) non dipende da questo.



Spiegazione

Facciamo adesso un modello del problema.

In prima approssimazione possiamo supporre che gli elettroni abbiano tutti origine nello stesso punto (in modo che mandando molti elettroni osserviamo quantisticamente un'unica figura di interferenza e non la sovrapposizione di più figure di interferenza).

Lo stato iniziale dell'elettrone è dato da un certo pacchetto, le cui caratteristiche non sono rilevanti alla nostra trattazione:

$$|\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \quad \psi_0(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi(t_0) \rangle \quad (4.110)$$

L'evoluzione temporale nella rappresentazione delle configurazioni è data da:

$$\psi(\vec{x}', t) = \int_{\vec{x}(t_0)=\vec{x}}^{\vec{x}'(t)=\vec{x}'} d^3x \langle \vec{x}' | \hat{U}(t, t_0) | \vec{x} \rangle \psi_0(\vec{x}) = \int d^3x G(\vec{x}', t; \vec{x}, t_0) \psi_0(\vec{x}) \quad (4.111)$$

Possiamo scrivere la funzione di Green tramite l'integrale dei cammini di Feynman, in notazione simbolica:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = \int \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau)]} \quad \mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 + \frac{q}{c} \vec{A} \cdot \dot{\vec{x}} - qV(\vec{x}) \quad \vec{E} = -\nabla V, \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad (4.112)$$

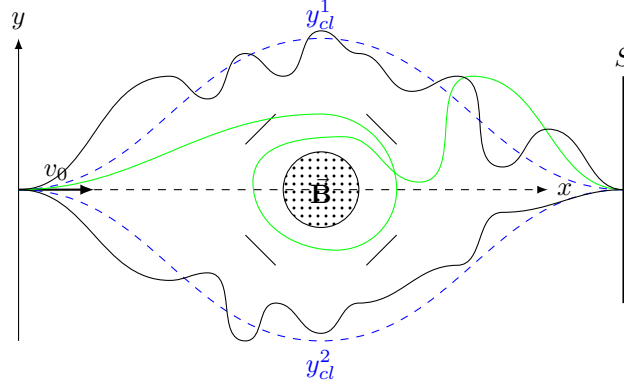
Iniziamo col notare che il potenziale vettore deve essere non nullo, in qualunque gauge, anche fuori dal solenoide. Consideriamo per semplicità la gauge che ha simmetria cilindrica come il campo $\vec{A} = \vec{A}(\rho)$ e in particolare ha direzione azimutale $\vec{A}(\vec{x}) = f(\rho) \hat{e}_\phi$. Per trovare questo usiamo il Teorema di Stokes. Consideriamo come curva C la circonferenza di raggio ρ che ha come asse l'asse del solenoide e come superficie $\Sigma(C)$ il cerchio corrispondente con normale diretta lungo l'asse. Al flusso del campo magnetico contribuirà solo parte del cerchio, in quanto il solenoide ha raggio R (minore di ρ , in quanto siamo interessati all'elettrone fuori dal solenoide):

$$\begin{aligned} \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{x} &= \int_{\Sigma(C)} \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma \\ 2\pi \rho f(\rho) &= \pi R^2 B = \Phi(\vec{B}) \\ f(\rho) &= \frac{\Phi(\vec{B})}{2\pi \rho} \\ \vec{A} &= \frac{\Phi(\vec{B})}{2\pi \rho} \hat{e}_\phi \end{aligned} \quad (4.113)$$

Questo dimostra che il potenziale vettore è non nullo anche al di fuori del solenoide e dunque ha un effetto anche sul comportamento delle funzioni d'onda, particolarmente legato all'interferenza.

Notiamo adesso come nella nostra situazione l'estensione del pacchetto $\psi_0(\vec{x})$ sarà molto piccola rispetto alle dimensioni dell'apparato. Ci aspettiamo dunque che l'azione di una traiettoria tipica sarà grande rispetto ad \hbar e quindi

ci aspettiamo che nell'integrale funzionale contribuiscano maggiormente i moti vicini a quelli classici, che sono quelli che vanno sopra o sotto il solenoide. In particolare, fissato il "punto di partenza", per ogni punto di arrivo \vec{x}' sul rivelatore esisteranno solo due moti classici, uno sopra il solenoide γ_{cl}^1 e uno sotto il solenoide γ_{cl}^2 . Il contributo di moti "irregolari" (che ad esempio si avvolgono attorno al solenoide) oppure che si allontanano parecchio dell'apparato sarà poi molto piccolo. Possiamo dunque usare un'approssimazione semiclassica nell'integrale di Feynman, ossia l'integrale sarà dominato dalle orbite γ vicine a quelle classiche γ_{cl}^k .



Poniamo adesso l'attenzione sul fatto che per osservare la figura d'interferenza è necessario **"bilanciare" il fascio** di elettroni, ossia fare in modo che in media metà degli elettroni passino sopra e metà sotto. Questo significa che posizioniamo preventivamente il cannone elettronico in modo che metà percorrano una traiettoria sotto il solenoide e metà sopra. Questo si può fare ad esempio posizionando prima dell'esperimento dei rivelatori sopra e sotto del solenoide in modo da confermare che il fascio prodotto dalla sorgente è simmetrica.

Possiamo ora scomporre il pacchetto d'onda iniziale in due parti, dove una parte è supportata superiormente e l'altra è supportata inferiormente al solenoide:

$$\psi_0(\vec{x}) = \psi_1^0(\vec{x}) + \psi_2^0(\vec{x}) \quad \begin{cases} \psi_1^0(\vec{x}) = 0 & y < 0 \\ \psi_2^0(\vec{x}) = 0 & y > 0 \end{cases} \quad (4.114)$$

Questo è simile a trattare il problema con l'operatore statistico ottenuto da stati traslati sopra e sotto del centro di simmetria. Indichiamo poi gli evoluti temporali di queste due parti come segue:

$$\psi(\vec{x}', t) = \psi_1(\vec{x}', t) + \psi_2(\vec{x}', t) \Rightarrow \psi_k(\vec{x}', t) = \int d^3x G(\vec{x}', t; \vec{x}, t_0) \psi_k^0(\vec{x}) \quad (4.115)$$

La probabilità di rivelare la particella in un certo punto (e in particolare dello schermo), sarà data da:

$$\begin{aligned} dP &= |\psi(\vec{x}', t)|^2 d^3\vec{x}' = |\psi_1(\vec{x}', t) + \psi_2(\vec{x}', t)|^2 d^3\vec{x}' = \\ &= \left[|\psi_1(\vec{x}', t)|^2 + |\psi_2(\vec{x}', t)|^2 + 2 \operatorname{Re}\{\psi_1(\vec{x}', t) \psi_2^*(\vec{x}', t)\} \right] d^3\vec{x}' \end{aligned} \quad (4.116)$$

Chiaramente il termine finale è quello responsabile dell'interferenza ed è quello che vogliamo valutare usando l'integrale funzionale.

Per fare questo dobbiamo dunque trovare l'evoluzione temporale dei due pacchetti:

$$\psi_k(\vec{x}', t) = \int_{I_k} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau)]} \psi_k^0(\vec{x}(\tau)) \quad (4.117)$$

dove I_k è l'insieme dei cammini vicino alle traiettorie classiche che hanno origine nel punto di partenza del fascio $\vec{x}(t_0) = \vec{x}_0$ e finiscono in $\vec{x}(t) = \vec{x}'$. Questo significa che I_k dipende da \vec{x}' , se fissiamo a priori il punto di partenza del fascio.

Esplicitiamo adesso l'azione, separando la parte dovuta al potenziale vettore (campo magnetico) dalla restante.

$$S[\vec{x}(\tau)] = S_0[\vec{x}(\tau)] + \frac{q}{c} \int_t^{t'} d\tau \vec{A}(\vec{x}(\tau)) \cdot \dot{\vec{x}}(\tau) = S_0[\vec{x}(\tau)] + \frac{q}{c} \int_\gamma \vec{A} \cdot d\vec{x} \quad (4.118)$$

dove γ è la curva determinata da $\vec{x}(\tau)$.

Ritorniamo adesso ai cammini contenuti in I_k . Per un dato pacchetto ψ_0 possiamo supporre che la traiettoria classica abbia inizio in un dato punto Q , che coincide con l'origine, e arriva in certo punto $P = \vec{x}'$ dello schermo. Sono poi possibili due sole traiettorie classiche $\gamma_{cl}^1, \gamma_{cl}^2$, una sopra e una sotto il solenoide, con stessi estremi. Pertanto i

cammini contenuti in I_k avranno gli stessi punti iniziali e finali Q, P . Pertanto una curva $\gamma \in I_k$ e una curva classica γ_{cl}^k formano una curva chiusa, ossia:

$$\int_{\gamma} \vec{A} \cdot d\vec{x} - \int_{\gamma_{cl}^k} \vec{A} \cdot d\vec{x} = \oint_C \vec{A} \cdot \vec{x} \quad C = \gamma \cup (-\gamma_{cl}^k) \quad (4.119)$$

Questi ci permette di applicare il Teorema di Stokes, trovando che i due integrali coincidono in quanto fuori dal solenoide il campo è nullo e dunque il potenziale vettore è conservativo:

$$\int_{\gamma} \vec{A} \cdot d\vec{x} - \int_{\gamma_{cl}^1} \vec{A} \cdot d\vec{x} = \oint_C \vec{A} \cdot \vec{x} \quad C = \gamma \cup (-\gamma_{cl}^1) = \int_{\Sigma(C)} \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma = 0 \quad (4.120)$$

Questo significa che:

$$\int_{\gamma} \vec{A} \cdot d\vec{x} = \int_{\gamma_{cl}^k} \vec{A} \cdot d\vec{x} \quad \forall \gamma \in I_k \quad (4.121)$$

Notiamo che questo risultato è valido solo per le curve appartenenti ad I_k , in quanto ad esempio per una curva che si avvolge attorno al solenoide o che comunque va dal lato opposto questo non sarebbe valido.

Pertanto per $\vec{x}(\tau) \in I_k$ vale:

$$S[\vec{x}(\tau)] = S_0[\vec{x}(\tau)] + \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^l} \vec{A} \cdot d\vec{x} \quad (4.122)$$

Questo significa che il fattore di esponenziale relativo al potenziale vettore è lo stesso per ogni curva appartenente ad I_k e può essere portato fuori dall'integrale:

$$\psi_k(\vec{x}', t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^l} \vec{A} \cdot d\vec{x}\right) \int_{I_k} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S_0[\vec{x}(\tau)]} \psi_k^0(\vec{x}(\tau)) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^l} \vec{A} \cdot d\vec{x}\right) \psi_k^0(\vec{x}', t) \quad (4.123)$$

Ritorniamo adesso all'espressione della probabilità di trovare la particella nella posizione \vec{x}' all'istante t :

$$\begin{aligned} \frac{dp}{d^3\vec{x}} &= |\psi_1(\vec{x}', t)|^2 + |\psi_2(\vec{x}', t)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^l} \vec{A} \cdot d\vec{x}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^2} \vec{A} \cdot d\vec{x}\right) \psi_1^0(\vec{x}', t) \psi_2^0(\vec{x}', t)^* \right\} = \\ &= |\psi_1(\vec{x}', t)|^2 + |\psi_2(\vec{x}', t)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{x}\right) \psi_1^0(\vec{x}', t) \psi_2^0(\vec{x}', t)^* \right\} \end{aligned} \quad (4.124)$$

dove $C = \gamma_{cl}^1 \cup (-\gamma_{cl}^2)$ è una curva chiusa che va attorno al solenoide e dunque permette di applicare il Teorema di Stokes:

$$\frac{dp}{d^3\vec{x}} = |\psi_1(\vec{x}', t)|^2 + |\psi_2(\vec{x}', t)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Phi_B\right) \psi_1^0(\vec{x}', t) \psi_2^0(\vec{x}', t)^* \right\} \quad (4.125)$$

Vediamo dunque che il campo magnetico B , e in particolare il suo flusso, influenza la figura di interferenza. In particolare nei punti di interferenza costruttiva in assenza di campo magnetico $B = 0$ (ossia nei punti in cui le funzioni d'onda hanno la stessa fase) troviamo:

$$2 \operatorname{Re} \left\{ \psi_1^0 \psi_2^0 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Phi_B\right) \right\} = 2 |\psi_1^0 \psi_2^0| \cos \left[\frac{q \Phi(B)}{\hbar c} \right] \quad (4.126)$$

Pertanto questo termine modula la probabilità con un certo periodo, con massimi per $\frac{q\Phi}{\hbar c} = 2n\pi$ e minimi in $\frac{q\Phi}{\hbar c} = (2n+1)\pi$ con n intero.

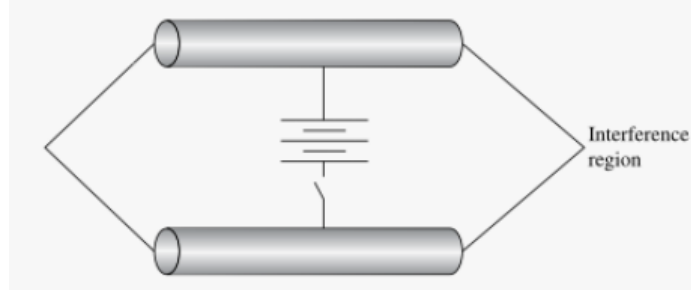
Questo fenomeno, che prende il nome di Effetto di Aharonov-Bohm, implica dunque che la particella interagisce con il campo magnetico anche quando viaggia in regioni dove questo è assente.

4.3.2 Variante Elettrostatica dell'Effetto AB

Consideriamo una variante dell'effetto di Aharonov-Bohm. Consideriamo nuovamente un cannone elettronico che produce un fascio che viene separato in due da un sistema di lenti elettrostatiche. Questi due fasci in particolare attraversano due griglie metalliche cilindriche, collegate ai poli di una batteria, tramite un certo interruttore I . I fasci uscenti vengono poi fatti ricongiungere nello schermo.

Supponiamo di sapere che un dato elettrone esce al tempo t dal cannone, con velocità \vec{v} . Supponiamo di sapere poi che arriva ad una delle due griglie ad un tempo t_1 , e ne esce ad un tempo $t_2 = t_1 + T'$. L'interruttore I viene chiuso ad un istante di tempo successivo all'ingresso dell'elettrone in uno dei due buchi e rimane chiuso per un intervallo di tempo $T < T'$, ossia è chiuso solo quando l'elettrone si trova all'interno del buco. Questo significa che prima di entrare nel buco interagisce solo con le lenti elettrostatiche, e non è influenzato dai buchi. Classicamente tuttavia siccome i

buchi sono conduttori allora all'interno il potenziale è costante e il campo elettrico è nullo, ossia l'elettrone attraversa il buco senza interagire con esso. Nell'intervallo di tempo in cui I è chiuso comunque vi è un potenziale ai conduttori che provoca un campo elettrico esterno tra i due conduttori, il quale è diretto dal buco a potenziale maggiore V_1 a quello a potenziale minore V_2 (con $\Delta V = V_1 - V_2 = \mathcal{E} > 0$ forza elettromotrice della batteria).



Classicamente la presenza di questo campo è ininfluenza sul moto degli elettroni. Nuovamente allo schermo ci aspetteremmo una distribuzione a picco centrata in 0.

Dal punto di vista quantistico la sola presenza del potenziale, anche se costante, influenza il moto. Nuovamente per ogni \vec{x}' dello schermo possiamo considerare due traiettorie classiche e ci aspettiamo che solo i cammini vicini a queste contribuiscano all'integrale. In particolare possiamo nuovamente dividere il pacchetto in due e fare l'integrale dei cammini sui domini I_k costituiti dai cammini vicini a γ_{cl}^k .

$$\psi(\vec{x}', t') = \psi_1(\vec{x}', t') + \psi_2(\vec{x}', t') \quad \psi_k(\vec{x}', t') = \int_{I_k} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S} \psi_k^0(\vec{x}) \quad (4.127)$$

La lagrangiana è data poi da:

$$\mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - qV(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - qV_l(\vec{x}) - qV_t(\vec{x}, t) = \mathcal{L}_0 - qV_t(\vec{x}, t) \Rightarrow S[\vec{x}(\tau)] = S_0[\vec{x}(\tau)] - q \int_t^{t'} V_t(\vec{x}(t), t) dt \quad (4.128)$$

con V_l potenziale delle lenti e V_t potenziale all'interno dei tubi. Supponiamo infatti che l'elettrone sia nel tubo e in particolare possiamo considerare la funzione d'onda "racchiusa" nel tubo (che comunque consideriamo uno spazio infinito rispetto alle dimensioni del pacchetto dell'elettrone). In particolare a seconda della particella considerata:

$$V_t(\vec{x}, t) = V_k(t) \quad k = 1, 2 \quad (4.129)$$

dove $V_k(t)$ è nullo fuori da un certo intervallo $[t'_1, t'_2]$ (di lunghezza T) compreso in $[t_1, t_2]$ ed è costante al suo interno:

$$V_1(t) = V_1 \theta(t - t'_1) \theta(t'_2 - t) \quad V_2(t) = V_2 \theta(t - t'_1) \theta(t'_2 - t) \quad (4.130)$$

Un modello più realistico sarebbe quello di una salita e discesa continua, piuttosto che quella discontinua della θ di Heaviside, ma questo è semplice per calcolare l'integrale di $V_k(t)$ nel tempo.

Con questo modello l'azione si può scrivere come segue:

$$S[\vec{x}(\tau)] = S_0[\vec{x}(\tau)] - qV_k T \quad (4.131)$$

Il contributo del potenziale all'azione è costante e indipendente dalla curva $\gamma \in I_k$ e dunque si può portare fuori dall'integrale sui cammini:

$$\psi_k(\vec{x}', t') = e^{-\frac{i}{\hbar} qV_k T} \psi_k^0(\vec{x}, t) \quad (4.132)$$

Stavolta troviamo:

$$dP \propto |\psi_1^0(\vec{x}', t')|^2 + |\psi_2^0(\vec{x}', t')|^2 + 2 \text{Re} \left\{ \psi_1^0(\vec{x}', t') \psi_2^0(\vec{x}', t')^* e^{-\frac{i}{\hbar} q\mathcal{E}T} \right\} \quad (4.133)$$

Pertanto ritroviamo che la figura di interferenza è modulata dalla differenza di potenziale \mathcal{E} tra i due conduttori, analogamente all'effetto AB. In particolare troviamo la corrispondenza:

$$\frac{q\Phi}{\hbar c} \Longleftrightarrow \frac{q\mathcal{E}T}{\hbar} \quad (4.134)$$

4.3.3 Variante Gravitazionale dell'Effetto AB

Consideriamo nuovamente un esperimento che richiama i concetti dell'Effetto AB, ma dove interviene l'effetto gravitazionale. Consideriamo stavolta un fascio di elettroni a velocità \vec{v} che vengono separati tramite un cristallo di silicio, come in figura. I neutroni vengono fatti incontrare in un punto P e dunque consideriamo nuovamente due cammini classici possibili. Questi giacciono in un piano Σ , che può ruotare attorno all'asse x dove inizialmente sono diretti i neutroni, con un angolo δ con il piano orizzontale, perpendicolare alla verticella z . Il piano Σ è individuato dall'asse x fisso e dall'asse y che invece ruota attorno ad x , cambiando l'angolo formato con il piano orizzontale/asse z . Pertanto se gli elettroni si muovono nel piano Σ allora:

$$z = y \sin \delta \quad (4.135)$$

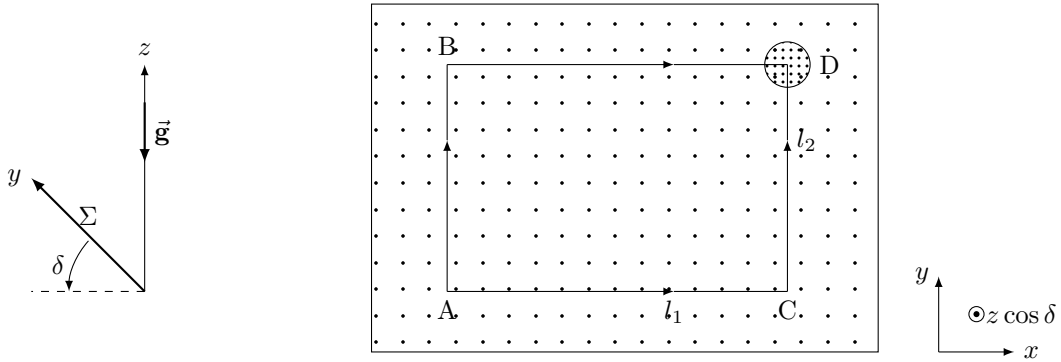
Possiamo dunque esprimere la Lagrangiana come segue:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}mv^2 - V_g = \frac{1}{2}mv^2 - mgy \sin \delta \quad (4.136)$$

da cui l'azione lungo un percorso:

$$S[\vec{x}(\tau)] = S_0[\vec{x}(\tau)] - mg \sin \delta \int_t^{t'} d\tau y(\tau) \quad (4.137)$$

Per calcolare questo integrale diamo nomi ai vertici di queste curve γ_{cl}^k .



All'ordine più basso i cammini che maggiormente contribuiscono all'integrale sono quelli vicino a quelli classici e dunque facciamo l'approssimazione (non esatta come negli altri casi):

$$\int_t^{t'} d\tau y(\tau) = \int_t^{t'} d\tau y_{cl}^k(\tau) \quad \forall \gamma \in I_k \quad (4.138)$$

Troviamo dunque:

$$S[\vec{x}(\tau)] = S_0[\vec{x}(\tau)] - mg \sin \delta \int_t^{t'} d\tau y_{cl}^k(\tau) \quad (4.139)$$

Notiamo i tratti AB e CD nei due moti contribuiscono un uguale azione in quanto la y_{cl}^k varia allo stesso modo e si cancella nella differenza, così che non è rilevante e indichiamo con \bar{S} . Nei tratti BD e AC invece il contributo è differente (se prendiamo $y_A = y_D = 0$) e inoltre sono percorsi ad y costante:

$$\begin{aligned} \int_t^{t'} d\tau y_{cl}^1(\tau) &= \bar{S} + l_2 \int_0^{l_1/v} dy = \bar{S} + \frac{l_2 l_1}{v} \\ \int_t^{t'} d\tau y_{cl}^2(\tau) &= \bar{S} \end{aligned} \quad (4.140)$$

Come prima possiamo dividere la funzione d'onda in due parti, stavolta supportate nelle due regioni che stanno sopra la diagonale del rettangolo e sotto questa.

$$\psi_0(\vec{x}) = \psi_1^0(\vec{x}) + \psi_2^0(\vec{x}) \Rightarrow \psi_k(\vec{x}', t') = \int_{I_k} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] e^{\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau)]} \psi_k^0(\vec{x}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} mg \sin \delta \int_t^{t'} d\tau y_{cl}^k(\tau)\right) \psi_k^0(\vec{x}', t') \quad (4.141)$$

Calcolando la probabilità di osservare la particella in P troviamo:

$$\begin{aligned} dP &\propto |\psi_1^0(\vec{x}', t')|^2 + |\psi_2^0(\vec{x}', t')|^2 + 2 \operatorname{Re} \left\{ \psi_1^0(\vec{x}', t') \psi_2^0(\vec{x}', t')^* \exp\left(\frac{i}{\hbar} mg \sin \delta \int_t^{t'} d\tau [y_{cl}^2(\tau) - y_{cl}^1(\tau)]\right) \right\} = \\ &= |\psi_1^0(\vec{x}', t')|^2 + |\psi_2^0(\vec{x}', t')|^2 + 2 \operatorname{Re} \left\{ \psi_1^0(\vec{x}', t') \psi_2^0(\vec{x}', t')^* \exp\left(\frac{i}{\hbar} mg \sin \delta \frac{l_1 l_2}{v}\right) \right\} \end{aligned} \quad (4.142)$$

Pertanto $g \sin \delta$ è il fattore che regola l'interferenza (fissati l_1, l_2, v).

Nell'esperimento si sono usati neutroni termici, con velocità (media) data da:

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}k_B T \quad (4.143)$$

e si usava un apparato tale che:

$$\frac{mgl_1 l_2}{\hbar v} \approx 50 \quad (4.144)$$

Pertanto l'escursione della fase tra piano orizzontale e verticale è dell'ordine di:

$$\Delta\phi \approx 100 \Rightarrow \frac{\Delta\phi}{2\pi} \approx 9 \quad (4.145)$$

ossia ci aspettiamo una decina di massimi al variare di δ tra $-\pi/2$ e $\pi/2$.

4.4 Lezione 26a

4.4.1 Integrale sui Cammini con lo Spin

Ci chiediamo adesso se è possibile considerare un'estensione dell'integrale sui cammini di Feynman a sistemi di particelle dotate di spin. Si trova che una formulazione dell'integrale sui cammini per un sistema di particelle con spin a numero fissato non esiste. È tuttavia possibile estenderlo facendo ricorso al formalismo della seconda quantizzazione, ossia descrivendo il sistema di particelle tramite campi quantistici, distinguibili o meno. Non discuteremo questo in quanto parte della trattazione relativistica della meccanica quantistica, tramite QFT.

4.4.2 Funzione di Partizione con Integrale sui Cammini

Consideriamo un sistema di \mathcal{N} particelle (prive di spin, distinguibili, come al solito) che si trovano ad una certa temperatura T . Lo stato del sistema è descritto dall'operatore quantistico che massimizza l'entropia:

$$\hat{\rho}_T = e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (4.146)$$

dove $\hat{\mathcal{H}}$ è l'hamiltoniana del sistema:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{K} + V(\vec{\mathbf{x}}_1, \dots, \vec{\mathbf{x}}_{\mathcal{N}}) \quad \hat{K} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} \quad V(\vec{\mathbf{x}}_1, \dots, \vec{\mathbf{x}}_{\mathcal{N}}) = \sum_i U_0(\vec{\mathbf{x}}_i) + \hat{U}_{int}(\vec{\mathbf{x}}_1, \dots, \vec{\mathbf{x}}_{\mathcal{N}}) \quad (4.147)$$

Ricordiamo la funzione di partizione e il suo legame all'energia libera:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \quad F = -k_B T \log Z \quad (4.148)$$

Vogliamo adesso scrivere Z sotto forma di integrale sui cammini di Feynman. Per fare questo iniziamo col definire il "tempo euclideo":

$$\frac{t_E}{\hbar} \equiv \beta \Rightarrow t_E = \frac{\hbar}{k_B T} \quad (4.149)$$

che ci permette di riscrivere l'operatore statistico come l'evolvente temporale del sistema dopo un tempo immaginario $\tau = -it_E$:

$$e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} = e^{-\frac{t_E}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}} = e^{-\frac{i}{\hbar} (-it_E) \hat{\mathcal{H}}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \tau \hat{\mathcal{H}}} \quad \tau = -it_E \quad (4.150)$$

Dividiamo l'intervallo in $\mathcal{N} + 1$ intervalli uniformi e scriviamo l'operatore statistico come prodotto:

$$t_E = (N + 1)\varepsilon \Rightarrow e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} = \prod_{n=0}^N e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}} \quad (4.151)$$

Posto $M = 3^{\mathcal{N}}$ allora nuovamente possiamo esplicitare l'operatore statistico nella rappresentazione delle configurazioni come segue:

$$\langle \vec{\mathbf{x}}' | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | \vec{\mathbf{x}} \rangle = \int \left(\prod_{n=1}^N d^M x_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \langle \vec{\mathbf{x}}_{n+1} | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}} | \vec{\mathbf{x}}_n \rangle \right) \quad \vec{\mathbf{x}}_0 = \vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{x}}_{N+1} = \vec{\mathbf{x}}' \quad (4.152)$$

Possiamo dunque valutare i singoli elementi di matrice approssimando all'ordine ε :

$$e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} \approx e^{-\frac{\varepsilon}{2\hbar}\hat{V}} e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{K}} e^{-\frac{\varepsilon}{2\hbar}\hat{V}} \Rightarrow \langle \vec{x}_{n+1} | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}} | \vec{x}_n \rangle \approx e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}U(\vec{x}_n)} \langle \vec{x}_{n+1} | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{K}} | \vec{x}_n \rangle \quad (4.153)$$

Ma l'elemento di matrice dell'energia può essere fattorizzato, riconducendoci ad un effettivo integrale convergente *rigorosamente*:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_{n+1} | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{K}} | \vec{x}_n \rangle &= \prod_{k=1}^M \langle x_{n+1}^k | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\frac{\hat{p}_k^2}{2m_k}} | x_n^k \rangle \\ \langle x_{n+1}^k | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\frac{\hat{p}_k^2}{2m_k}} | x_n^k \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n^k \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar}\frac{p_n^k}{2m_k} + \frac{i}{\hbar}p_n^k(x_{n+1}^k - x_n^k)\right) = I\left(\frac{\varepsilon}{m_k\hbar}, \frac{i}{\hbar}(x_{n+1}^k - x_n^k)\right) = \\ &= \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left(-\frac{(x_{n+1}^k - x_n^k)^2}{\hbar^2} \frac{m_k\hbar}{2\varepsilon}\right) = \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left(-\frac{m_k(\dot{x}_n^k)^2}{2\hbar}\varepsilon\right) \end{aligned} \quad (4.154)$$

dove abbiamo definito la velocità "immaginaria":

$$\dot{x}_n^k = \frac{x_{n+1}^k - x_n^k}{\varepsilon} \quad (4.155)$$

Sostituiamo:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}U(\vec{x}_n)} \langle \vec{x}_{n+1} | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}\hat{K}} | \vec{x}_n \rangle &= e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar}U(\vec{x}_n)} \prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left(-\frac{m_k(\dot{x}_n^k)^2}{2\hbar}\varepsilon\right) = \\ &= \left(\prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}}\right) \exp\left[-\frac{\varepsilon}{\hbar}\left(\sum_k \frac{1}{2}m_k(\dot{x}_n^k)^2 + U(\vec{x}_n)\right)\right] = \\ &= \left(\prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}}\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar}L_n\right) \end{aligned} \quad (4.156)$$

e definiamo la **lagrangiana euclidea**:

$$\mathcal{L}^E(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) = \sum_k \frac{1}{2}m_k\dot{x}_k^2 + U(\vec{x}) \Rightarrow L_n = \mathcal{L}^E(\vec{x}_n, \dot{\vec{x}}_n) \quad (4.157)$$

da cui l'azione euclidea:

$$S_E[\vec{x}(\tau_E)] = \int_0^{\tau_E} d\tau_E \mathcal{L}^E(\vec{x}(\tau_E), \dot{\vec{x}}(\tau_E)) \quad (4.158)$$

Inseriamo questo nell'espressione dell'elemento di matrice:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}' | e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} | \vec{x} \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{n=1}^N d^M x_n\right) \left(\prod_{n=0}^N \left(\prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}}\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar}L_n\right)\right) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{k=1}^M \frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}\right)^{(N+1)/2} \int \left(\prod_{n=1}^N d^M x_n\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon\right) = \\ &= \int \mathcal{D}[\vec{x}_E(\tau)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E[\vec{x}_E(\tau)]\right) \end{aligned} \quad (4.159)$$

dove l'integrale è fatto sui "cammini" con condizioni al bordo $\vec{x}(0) = \vec{x}$, $\vec{x}(t_E) = \vec{x}'$.

Possiamo ora calcolare la traccia dell'operatore nella rappresentazione di Schrodinger, che consiste nell'integrale su tutti i cammini chiusi:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} = \int d\vec{x} \langle \vec{x} | e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} | \vec{x} \rangle = \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}(t_E)} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau_E)] e^{-\frac{i}{\hbar} S_E[\vec{x}(\tau_E)]} \quad (4.160)$$

L'integrale euclideo così scritto può essere reso matematicamente rigoroso in termini dell'integrale sui cammini di Wiener, definito per processi stocastici.

Vedendo $\vec{x}(\tau_E)$ come una funzione periodica di periodo t_E allora possiamo espanderla in serie di Fourier:

$$\vec{x}(\tau_E) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \vec{c}_j e^{\frac{2\pi i}{t_E} j \tau_E} = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \vec{c}_j e^{i\omega_j \tau_E} \quad (4.161)$$

dove abbiamo definito le **frequenza di Matsubara**, che sono determinate dalla temperatura del sistema:

$$\omega_j = \frac{2\pi}{t_E} j = \frac{2\pi k_B T}{\hbar} j \quad (4.162)$$

Capitolo 5

Struttura Iperfine

5.1 Lezione 26b

5.1.1 Struttura Iperfine degli Spettri Atomici

La struttura iperfine di atomi/molecole è dovuta all'interazione degli elettroni con il momento magnetico dei nuclei degli atomi/molecole. Questo modello estende dunque quello in cui il nucleo è descritto unicamente dalla massa, dalla carica e la sua posizione. In realtà i nuclei sono formati da neutroni e protoni e dunque ad essi è associati uno spin e dunque un momento magnetico totale. Per un elettrone il momento magnetico associato è dato da:

$$\vec{\mu} = g_S \frac{q}{2m_e c} \vec{S} \quad (5.1)$$

mentre per i nucleoni vale qualcosa di simile, ma non uguale in quanto i neutroni sono hanno carica nulla ma ancora possiedono un momento magnetico:

$$\vec{\mu}_N = g_N \frac{e_0}{2m_p c} \vec{S} \quad m_p \approx m_n \quad (5.2)$$

Questo permette di definire il magnetone di Bohr e il magnetone nucleare:

$$\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_e c}, \quad \mu_N = \frac{e_0 \hbar}{2m_p c} \Rightarrow \vec{\mu} = g_S \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar}, \quad \mu_N = g_N \mu_N \frac{\vec{S}}{\hbar} \quad (5.3)$$

ma questo significa che il momento magnetico nucleare è 2000 volte più piccole di quello elettronico:

$$\frac{\mu_N}{\mu_B} = \frac{m_p}{m_e} = 2000 \quad (5.4)$$

In realtà i nuclei non sono singoli protoni o neutroni e dunque in realtà il momento magnetico nucleare sarà la somma dei singoli momenti magnetici dei nucleoni. In particolare lo stato di un nucleo può essere caratterizzato tramite certi numeri quantici, come il momento angolare totale I del nucleo:

$$\vec{I} = \sum_i \vec{S}_i + \vec{L}_i \quad (5.5)$$

Per un nucleo possiamo sempre definire il fattore giromagnetico in modo tale che:

$$\vec{\mu} = g \frac{e_0}{2m_p c} \vec{I} = g \mu_N \frac{\vec{I}}{\hbar} \quad (5.6)$$

Facciamo alcuni esempi: per il ^{87}Rb si trova $I = 3/2$ e $g = 1.833$; per ^{85}Rb si trova $I = 5/2$ e $g = 0.54$; per ^{133}Cs si trova $I = 7/2$ e $g = 0.73$.

Noi ci limiteremo a considerare solo transizioni ottiche, ossia il nucleo rimane fisso nello stato fondamentale, con un dato valore del momento angolare e fattore giromagnetico. Il campo magnetico generato dal momento magnetico influenza il moto degli elettroni e dunque lo spettro degli elettroni, cambiandone i valori e le degenerazioni. Siccome questo effetto è molto piccolo, il suo effetto è detto "struttura iperfine degli spettri atomici". Noi ci limiteremo agli atomi (ioni) "ad un elettrone", ossia che hanno un solo elettrone nella shell di valenza. Questi includono gli atomi idrogenoidi (un solo elettrone) e gli atomi di metalli alcalini. Questo implica che l'energia di prima ionizzazione è molto maggiore dell'energia di (eventuale) seconda ionizzazione. L'elettrone di valenza è dunque debolmente legato rispetto a quelli interni, i quali hanno come effetto lo schermaggio del potenziale e i cui stati rimangono sostanzialmente invariati in un eventuale transizione dell'elettrone esterno.

Possiamo vedere dunque l'elettrone in prima approssimazione come immerso nel potenziale nucleare coulombiano e un potenziale repulsivo di schermaggio dovuto ai rimanenti elettroni, che sono entrambi centrali:

$$U(r) = \frac{Ze_0^2}{r} + U_{Z-1}(r) \quad (5.7)$$

L'hamiltoniana dell'elettrone efficace, integrando l'interazione di spin-orbita, sarà data dunque da:

$$\hat{\mathcal{H}}_e = \frac{\hat{p}^2}{2m} + qV(\vec{x}) - \frac{q}{2m_e^2 c^2} (g_s - 1) \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{E}} \times \hat{\vec{p}} \quad \vec{E} = -\nabla V \quad (5.8)$$

dove \vec{E} è il campo elettrico generato dal nucleo più i $Z - 1$ elettroni interni, che è ancora centrale. Con questa hamiltoniana possiamo usare i seguenti numeri quantici:

$$\hat{\mathcal{H}}_e |n, l, j, m_j\rangle = W_{nlj} |n, l, j, m_j\rangle \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, l = 0, \dots, n-1, j = l \pm \frac{1}{2}, m_j = -j, \dots, j \quad (5.9)$$

Pertanto gli autovalori W_{nlj} hanno degenerazione $2j + 1$, come conseguenza del fatto che l'hamiltoniana commuta con il momento angolare totale. Tenendo conto dello spin pertanto lo spazio di Hilbert dell'elettrone nella rappresentazione delle configurazioni è dato da $\mathcal{H}_e = \mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$. Se poi vogliamo tenere conto anche dello spin del nucleo allora $\mathcal{H}_N = \mathbb{C}^{2I+1}$; possiamo poi considerare una certa hamiltoniana del nucleo isolato e i relativi autostati, che sono identificati da $|I, m_I\rangle$ (anche se I si considera fissato) e hanno degenerazione $2I + 1$:

$$\hat{\mathcal{H}}_N |I, m_I\rangle = E_0 |I, m_I\rangle \quad (5.10)$$

Lo spazio di Hilbert del sistema è dato dunque da $\mathcal{H} = \mathcal{H}_e \otimes \hat{\mathcal{H}}_N$. L'hamiltoniana a livello non interagente è poi data da:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_e + E_0 \quad (5.11)$$

da cui una base di autovettori fattorizzata:

$$(\hat{\mathcal{H}}_e + E_0) |n, l, j, m_j; I, m_I\rangle = (W_{nlj} + E_0) |n, l, j, m_j; I, m_I\rangle \quad (5.12)$$

Pertanto i livelli $W_{nlj} (+E_0)$ del sistema hanno una degenerazione $(2j + 1)(2I + 1)$. Includendo l'hamiltoniana iperfine e del termine di contatto troveremo che i livelli cambiano valore, numeri quantici e degenerazione.

In particolare non potremo più usare m_j, m_I come numeri quantici (in quanto i rispettivi operatori non commutano più con l'hamiltoniana totale), ma dovremo usare i numeri quantici relativi al momento angolare totale dell'atomo e la sua componente z :

$$\vec{F} = \vec{I} + \vec{J} = \vec{I} + \vec{L} + \vec{S} \quad F_z = I_z + J_z \quad (5.13)$$

Infatti essendo il sistema isolato:

$$\left[\hat{\mathcal{H}}, \vec{F} \right] = \left[\hat{\mathcal{H}}, F_z \right] = 0 \quad (5.14)$$

Pertanto gli stati saranno caratterizzati dai numeri quantici:

$$\hat{\mathcal{H}} |n, l, j, I, F, m_F\rangle = W_{nljIF} |n, l, j, I, F, m_F\rangle \quad |I - j| \leq F \leq I + j \quad (5.15)$$

Per comodità possiamo ritenere I fissato:

$$\hat{\mathcal{H}} |n, l, j, F, m_F\rangle = W_{nljF} |n, l, j, F, m_F\rangle \quad (5.16)$$

Troveremo poi che gli autovalori sono dati (a livello della teoria delle perturbazioni) da quelli dell'hamiltoniana non-interagente più una correzione relativa alla struttura iperfine, che dipende da F :

$$W_{nljF} = W_{nlj} + W_{nlj,F}^{iperfine} \quad (5.17)$$

Ad esempio per l'idrogeno $I = 1/2$ e dunque $F = j \pm 1/2$. Pertanto i livelli W_{nlj} hanno degenerazione iniziale $2(2j + 1)$ e subiranno uno splitting in due livelli a seconda di F , con una piccola separazione. Per il deuterio $I = 1$ e dunque $F = j, j \pm 1$, con un conseguente splitting di W_{nlj} (che ha degenerazione $3(2j + 1)$) in tre livelli a seconda di F .

Notiamo infine che essendo il nucleo non una particella allora in generale questo possiede non solo momento magnetico di dipolo intrinseco ma anche un momento magnetico di quadrupolo, che può comunque dar vita alla struttura iperfine. Non solo, sarà possibile anche un momento elettrico di dipolo o quadrupolo, dovuto alla distribuzione di carica.

5.2 Lezione 27

In questa lezione rivediamo lo scattering da potenziale e risolviamo alcuni semplici esercizi.

5.2.1 Recap sullo Scattering

Un'equazione fondamentale per un urto elastico è quella di Lippmann-Schwinger. Nel caso elastico l'energia è conservata e lo stato libero (entrante) e quello interagente sono legati da:

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{H}}_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle \\ (\hat{\mathcal{H}}_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \end{cases} \Rightarrow |\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - \hat{\mathcal{H}}_0 + i\varepsilon} V |\psi\rangle \quad (5.18)$$

dove ε è una quantità infinitesima e abbiamo definito l'operatore di Green, corrispondente alla seguente funzione di Green:

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = \langle \vec{x} | \frac{1}{E - \hat{\mathcal{H}}_0 + i\varepsilon} | \vec{x}' \rangle = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(i\mathbf{k}|\vec{x} - \vec{x}'|)}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{p}{\hbar} \quad (5.19)$$

Da cui la seguente equazione integrale

$$\psi(\vec{x}) = \phi(\vec{x}) - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{i\mathbf{k}|\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|} \langle \vec{x}' | V | \psi \rangle \quad (5.20)$$

Talvolta si definisce anche un operatore T tale che $V|\psi\rangle = T|\phi\rangle$. Supponiamo poi che il potenziale sia locale e che sia a corto range:

$$\psi(\vec{x}) = \phi(\vec{x}) - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{i\mathbf{k}|\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|} V(\vec{x}') \psi(\vec{x}') \quad (5.21)$$

Vogliamo studiare l'andamento di $\psi(\vec{x})$ a grande distanza, ossia per un punto di osservazione \vec{x} lontano dalla regione dove è definito il potenziale, a cui appartiene \vec{x}' . Questo significa che:

$$|\vec{x}| \gg |\vec{x}'| \Rightarrow \begin{cases} |\vec{x} - \vec{x}'| \approx |\vec{x}| - \hat{\mathbf{x}} \cdot \vec{x}' = r - \hat{\mathbf{x}} \cdot \vec{x}' \\ e^{i\mathbf{k}|\vec{x} - \vec{x}'|} = e^{i\mathbf{k}r} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} \end{cases} \quad \vec{k}' = k\hat{\mathbf{x}} \quad (5.22)$$

Abbiamo definito \vec{k}' come l'impulso della particella nel punto di osservazione, ricordando che l'energia è conservata e dunque anche il modulo dell'impulso. Nel caso $|\phi\rangle = |\vec{k}\rangle$ si dimostra che:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r} \int d^3x' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \psi(\vec{x}') = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r} f(\vec{k}', \vec{k}) \right] \end{aligned} \quad (5.23)$$

dove abbiamo definito l'ampiezza di scattering, definita on-shell, per $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3x' \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\vec{x}') \psi(\vec{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar} (2\pi)^3 \langle \vec{k}' | V | \psi \rangle \quad (5.24)$$

La dipendenza da \vec{k} è implicita in $|\psi\rangle$, in quanto dipende da $|\phi\rangle$ e dunque da \vec{k} .

Nota l'ampiezza di scattering possiamo calcolare la sezione d'urto differenziale, che è la quantità di maggiore interesse sperimentale. Ricordiamo che questa è definita come la superficie trasversale attraversata dalle particelle incidenti che sono diffuse nell'angolo solido $d\Omega$. Si può dimostrare che (in assenza di risonanza) vale:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k}, \vec{k}')|^2 \quad (5.25)$$

da cui anche la sezione d'urto totale:

$$\sigma_{tot} = \int_{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (5.26)$$

Per calcolare l'ampiezza di scattering possiamo usare ad esempio l'approssimazione di Born, che è un metodo perturbativo che equivale a trovare l'ampiezza di scattering iterativamente. Possiamo infatti fare la sostituzione $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$ in modo da ottenere l'ampiezza di scattering all'ordine più basso, in modo che la dipendenza da \vec{k}, \vec{k}' sia evidente:

$$f^1(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar} \int d^3x' e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \propto \tilde{V}(\vec{k} - \vec{k}') \quad (5.27)$$

con \tilde{V} trasformata di Fourier del potenziale V . Nel caso di un campo centrale la sua trasformata dipende dal modulo della corrispondente variabile e dunque:

$$f^1(\vec{k}, \vec{k}') = f(|\vec{k} - \vec{k}'|) = f(q) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int dr r V(r) \sin(qr) \quad q = |\vec{k} - \vec{k}'| = 2k \sin \frac{\theta}{2} \Rightarrow f(q) = f(k, \theta) \quad (5.28)$$

Un'altra possibilità è lo sviluppo in onde parziali, sempre per potenziali centrali e stato iniziale $|\phi\rangle = |\vec{k}\rangle$. Usando l'operatore T troviamo:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar} (2\pi)^3 \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle = -\frac{4\pi^2}{k} \sum_{lm} T_l(k) Y_{lm}(\hat{k}') Y_{lm}^*(\hat{k}) \quad (5.29)$$

Se poi scegliamo $\vec{k} \parallel \hat{z}$ e ricordando che $k \iff E$ allora, usando il teorema di addizione delle armoniche sferiche:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2}{k} \sum_{lm} T_l(E) Y_{lm}(\hat{k}') \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi^2}} \delta_{m0} \sum_l T_l(E) \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta) = \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta) \quad (5.30)$$

L'uso della notazione $f_l(k)$ è motivata dal fatto che in questo modo le $f_l(k)$ sono i contributi all'ampiezza di scattering. Si trova inoltre che a basse energie contribuiscono solo i valori più piccoli.

Per trovare le loro espressioni inseriamo questa espressione nella condizione asintotica su $\psi(\vec{x})$. Usiamo poi la decomposizione dell'onda piana in polinomi di Legendre ($\vec{k} \parallel \hat{z}$):

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (5.31)$$

e la condizione asintotica sulle funzioni di Bessel di prima specie:

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\exp(i(kr - \frac{l\pi}{2})) - \exp(-i(kr - \frac{l\pi}{2}))}{2ikr} \quad (5.32)$$

Inserendo questo troviamo:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) \left[\frac{\exp(i(kr - \frac{l\pi}{2})) - \exp(-i(kr - \frac{l\pi}{2}))}{2ikr} \right] + \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right\} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) \frac{P_l(\cos \theta)}{2ikr} \left[(1 + 2ik f_l(k)) e^{ikr} - e^{-i(kr - l\pi)} \right] \end{aligned} \quad (5.33)$$

La conservazione della corrente di probabilità ci permette di fare un'utile posizione:

$$|1 + 2ik f_l(k)| = 1 \Rightarrow 1 + 2ik f_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} \quad (5.34)$$

dove i $\delta_l(k)$ sono i cosiddetti sfasamenti dell'onda uscente rispetto a quella entrante. Ci permettono di scrivere anche:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) &\xrightarrow{r > R \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) \frac{P_l(\cos \theta)}{2ikr} \left[e^{2i\delta_l} e^{ikr} - e^{-i(kr - l\pi)} \right] \\ f(\theta) &= \sum_l (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos \theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (5.35)$$

da cui la sezione d'urto totale:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (5.36)$$

Per calcolare gli sfasamenti bisogna dunque risolvere l'equazione di Schrodinger all'interno del potenziale, l'equazione di Schrodinger per la particella libera (fuori dal potenziale) e richiedere che le soluzioni trovate soddisfino condizioni di continuità. In particolare se il potenziale è centrale ed è sempre nullo oltre una certa distanza R allora le condizioni di continuità vanno imposte in R (altrimenti dovremmo usare condizioni asintotiche in $R \rightarrow \infty$).

La soluzione fuori dal potenziale (ossia per $r > R$, tale che $V(r) = 0$) è data dunque da:

$$\psi(\vec{x}) = \frac{u_l}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l = -k^2 u_l \quad (5.37)$$

Si trova dunque che le soluzioni sono combinazioni lineari delle funzioni di Bessel di prima o seconda specie, o equivalentemente delle funzioni di Hankel:

$$j_l(kr), n_l(kr) \iff \begin{cases} h_l^1 = j_l + i n_l \\ h_l^2 = j_l - i n_l \end{cases} \Rightarrow A_l(r) = \frac{u_l(r)}{r} = a_l j_l(kr) + b_l n_l(kr) = c_l^1 h_l^1(kr) + c_l^2 h_l^2(kr) \quad \begin{cases} a_l = c_l^1 + c_l^2 \\ b_l = i(c_l^1 - c_l^2) \end{cases} \quad (5.38)$$

da cui:

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l i^l (2l+1) [c_l^1 h_l^1(kr) + c_l^2 h_l^2(kr)] P_l(\cos \theta) \quad (5.39)$$

Confrontiamo questa soluzione con quella ottenuta per grandi r per l'onda interagente, dentro la regione del potenziale:

$$\psi(\vec{x}) \stackrel{r \gg R \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) \frac{P_l(\cos \theta)}{2i k r} [e^{2i\delta_l} e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi/2)}] \quad (5.40)$$

Per uguagliare i coefficienti usiamo la condizione asintotica soddisfatta delle funzioni di Hankel:

$$h_l^1 \rightarrow \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{i k r} \quad h_l^2 \rightarrow \frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{i k r} \quad (5.41)$$

Passiamo poi da queste alle base delle funzioni di Bessel e compariamo i nuovi coefficienti a_l, b_l , trovando:

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l i^l (2l+1) e^{i\delta_l} [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)] P_l \quad (5.42)$$

dove:

$$A_l(r) = \frac{u_l}{r} = e^{i\delta_l} [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)] \quad (5.43)$$

è la parte radiale delle funzione d'onda libera.

Dovremmo poi risolvere per il problema interno trovando le parte radiali interne $A_l^i(r)$. Questi devono dunque soddisfare le seguenti condizioni di continuità:

$$\begin{cases} A_l^i(R) = A_l(R) \\ \partial_r A_l^i(R) = \partial_r A_l(R) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_l^i(R) = a_l j_l(kR) + b_l n_l(kR) \\ \partial_r A_l^i(R) = kR [a_l j_l' + b_l n_l'] \end{cases} \quad (5.44)$$

Facendo il rapporto tra la seconda e la prima equazione troviamo:

$$\beta_l = \frac{\partial_r A_l^i(R)}{A_l^i(R)} = kR \frac{j_l' + \frac{b_l}{a_l} n_l'}{j_l + \frac{b_l}{a_l} n_l} = kR \frac{j_l + \tan \delta_l n_l'}{j_l + \tan \delta_l n_l} \quad (5.45)$$

Pertanto se troviamo $A_l^i(r)$ troviamo anche β_l ed invertendo rispetto a $\tan \delta_l$ riusciamo a trovare gli sfasamenti.

5.2.2 Scattering da Sfera Dura

Consideriamo un potenziale "da sfera dura", ossia infinito entro una certa distanza e nullo fuori essa:

$$V = \begin{cases} +\infty & r < R \\ 0 & r > R \end{cases} \quad (5.46)$$

Vogliamo dunque calcolare gli sfasamenti δ_l implicitamente, esplicitando δ_0 . Vogliamo calcolare poi la sezione d'urto totale nel limite di bassa energia $kR \ll 1$, usando l'approssimazione di onda s , e nel limite di alta energia $kR \gg 1$, dove si trova una particolare espressione per gli sfasamenti.

La condizione al contorno fornisce dunque automaticamente gli sfasamenti:

$$\begin{aligned} A_l(R) &= 0 \\ \cos \delta_l j_l(kR) - \sin \delta_l n_l(kR) &= 0 \\ \tan \delta_l &= \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)} \end{aligned} \quad (5.47)$$

Possiamo calcolare esplicitamente lo sfasamento δ_0 , sapendo che:

$$j_0(kr) = \frac{\sin(kr)}{kr} \quad n_0(kr) = -\frac{\cos(kr)}{kr} \Rightarrow \tan \delta_0 = -\tan(kR) = \tan(-kR) \iff \delta_0 = -kR \quad (5.48)$$

Troviamo dunque:

$$A_0(r) \propto \frac{\cos \delta_0 \sin(kr) - \sin \delta_0 \cos(kr)}{kr} = \frac{1}{kr} \sin(kr + \delta_0) = \frac{1}{kr} \sin(k(r - R)) = \quad (5.49)$$

Calcoliamo la sezione d'urto in onda s :

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(kR) \approx \frac{4\pi}{k^2} k^2 R^2 = 4\pi R^2 \quad (5.50)$$

Pertanto troviamo che questa coincide con l'intera superficie della sfera di raggio R . Classicamente ci saremmo aspettati invece $\sigma_{cl} = \pi R^2$, pari all'area del cerchio massimo.

Nel caso $kR \gg 1$ possiamo usare ci conviene manipolare direttamente $\sin^2 \delta_l$:

$$\begin{aligned} j_l &\approx \frac{1}{kR} \sin\left(kR - \frac{l\pi}{2}\right) \\ n_l &\approx \frac{1}{kR} \cos\left(kR - \frac{l\pi}{2}\right) \\ \sin^2 \delta_l &= \frac{\tan^2 \delta_l}{1 + \tan^2 \delta_l} = \frac{j_l(kR)^2}{j_l(kR)^2 + n_l(kR)^2} \approx \sin^2\left(kR - \frac{l\pi}{2}\right) \end{aligned} \quad (5.51)$$

da cui:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2\left(kR - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (5.52)$$

Notiamo adesso che nel limite di alta energia $kR \gg 1$, come prima non contribuiscono tutti i valori di l , ma troviamo che gli sfasamenti sono non trascurabili solo fino a $l \lesssim kR$:

$$\sigma_{tot} \approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) \sin^2(kR - l\pi/2) \quad (5.53)$$

Notiamo adesso che in media $2l+1$ vale kR^2 nel limite $kR \gg 1$:

$$\langle 2l+1 \rangle = \frac{\sum_0^{kR} (2l+1)}{2kR+1} = \frac{(kR+1)^2}{2kR+1} \approx kR^2 \quad (5.54)$$

Notiamo poi che:

$$\sin^2 \delta_l + \sin^2 \delta_{l+1} = \sin^2 \delta_l + \cos^2 \delta_l = 1 \quad (5.55)$$

Pertanto la media di $\sin^2 \delta_l$ vale $1/2$:

$$\sigma_{tot} \approx \frac{4\pi}{k^2} \frac{1}{2} k^2 R^2 = 2\pi R^2 \quad (5.56)$$

che è la metà della sezione d'urto di bassa energia e il doppio della sezione d'urto classica.

5.2.3 Potenziale di Yukawa

Consideriamo adesso il potenziale di Yukawa, che è coulombiano a piccole distanze ($r \lesssim 1/\mu$) ed esponenziale a grandi distanze:

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r} \quad (5.57)$$

Vogliamo nuovamente calcolare la sezione d'urto differenziale e totale facendo uso però dell'approssimazione di Born, e in quale limiti è valida.

In questo caso troviamo direttamente l'ampiezza di scattering:

$$\begin{aligned} f^1(k, \theta) &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty V(r) \sin(qr) dr = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty e^{-\mu r} \sin(qr) dr = \\ &= -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{q} \operatorname{Im} \left\{ \int_0^\infty e^{-\mu r} e^{iqr} dr \right\} = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{q} \operatorname{Im} \left\{ \left. \frac{e^{(-\mu+iq)r}}{-\mu+iq} \right|_0^\infty \right\} = \\ &= -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{q} \frac{q}{\mu^2 + q^2} = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{\mu^2 + q^2} \end{aligned} \quad (5.58)$$

da cui, usando $q^2 = 4k^2 \sin^2(\theta/2)$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx |f^1(k, \theta)|^2 = \left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(\mu^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^2} \quad (5.59)$$

Troviamo dunque che nel limite di bassa energia $k \gg \mu$ allora la sezione d'urto differenziale è costante:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f^1(k, \theta)|^2 = \left(\frac{2mV_0}{\mu^3 \hbar^2} \right)^2 \quad (5.60)$$

Per verificare che sia valida l'approssimazione di Born dobbiamo controllare che la correzione di $\psi(\vec{x})$ rispetto a $\phi(\vec{x})$ è piccola (a grandi distanze):

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ikr'}}{r'} V(r') \right| \ll 1 \quad (5.61)$$

Possiamo verificare questo esattamente nei limiti di bassa energia $k \ll \mu$ e di alta energia $k \gg \mu$. Nel primo caso l'esponenziale è trascurabile nella regione dove $V(x')$ è non nullo:

$$\begin{aligned} \left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ikr'}}{r'} \frac{V_0 e^{-\mu r'}}{\mu r'} \right| &= \left| \frac{2m V_0}{\mu \hbar^2} \int dr' e^{ikr'} e^{-\mu r'} \right| \approx \\ &\approx \left| \frac{2m V_0}{\mu \hbar^2} \int dr' e^{-\mu r'} \right| \approx \frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu^2} \ll 1 \end{aligned} \quad (5.62)$$

Troviamo ad esempio che questa condizione non è compatibile con la condizione di formazione di stati legati per il potenziale di Yukawa, che possiamo ricavare dalla relazione di indeterminazione:

$$\begin{cases} \Delta p \Delta x \approx \frac{\hbar}{2} \\ \Delta x \sim \frac{1}{\mu} \\ E_k \sim E_p \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \Delta p \sim \hbar \mu \\ |V_0| \sim \frac{p^2}{2m} \end{cases} \Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2 \mu^2} |V_0| \sim 1 \quad (5.63)$$

Consideriamo ora il limite di alta energia $k \gg \mu$. In questo modo è trascurabile il potenziale di Yukawa rispetto all'onda piana:

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ikr'}}{r'} V_0 \frac{e^{-\mu r'}}{\mu r'} \right| \approx \frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu k} \ll 1 \quad (5.64)$$

Notiamo dunque che in questo caso la condizione dipende sia dalle proprietà del potenziale che dall'energia dell'onda entrante. In particolare indipendentemente dal potenziale è soddisfatta la condizione e dunque ad alte energie ci aspettiamo che sia sempre valida l'approssimazione di Born. Troveremmo poi in questo caso che la sezione d'urto all'ordine più basso coincide con la sezione d'urto classica.

5.2.4 Potenziale a Delta

Consideriamo un potenziale di questo tipo:

$$V(r) = \frac{\hbar}{2m} \gamma \delta(r - R) \quad (5.65)$$

Vogliamo calcolare lo sfasamento in onda s , la sezione d'urto a basse energie e in approssimazione di Born.

Per r grandi possiamo usare la funzione d'onda libera:

$$\psi_{ext}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) \frac{P_l(\cos \theta)}{2ik} \left[(1 + 2ik f_l) (e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}) \right] \quad (5.66)$$

Pertanto in onda s , la parte radiale interna è data da:

$$A_0^{int}(r) = \frac{1}{2ikr} [(1 + 2ik f_0) e^{ikr} - e^{-ikr}] = \frac{\sin(kr)}{kr} + f_0 \frac{e^{ikr}}{r} \quad (5.67)$$

Per quella interna, siccome il potenziale è nullo:

$$A_0^{int}(r) = B \frac{\sin(kr)}{r} \quad (5.68)$$

dove abbiamo imposto $A_0^{int}(0) = 0$.

Imponiamo le condizioni di raccordo in R , ricordando $A_l(r) = u_l(r)/r$:

$$\begin{cases} A_0^{ext}(R) = A_0^{int}(R) \\ \left. \frac{du^{ext}}{dr} \right|_R - \left. \frac{du^{int}}{dr} \right|_R = \gamma u(R) \end{cases} \quad (5.69)$$

Calcoliamo le derivate:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \left(\frac{\sin(kr)}{k} + f_0 e^{ikr} \right) &= \cos(kr) + ik f_0 e^{ikr} \\ \frac{d}{dr} (B \sin(kr)) &= B k \cos(kr) \end{aligned} \quad (5.70)$$

Troviamo dunque:

$$\begin{cases} \frac{\sin(kR)}{kR} + f_0 \frac{e^{ikR}}{R} = \frac{B}{R} \sin(kR) \\ \cos(kR) + ikf_0 e^{ikR} - Bk \cos(kR) = \gamma B \sin(kR) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B = \frac{\sin(kR) + kf_0 e^{ikR}}{k \sin(kR)} \\ f_0 = \frac{\gamma \sin^2(kR) e^{-ikR}}{ik^2 \sin(kR) - k^2 \cos(kR) - \gamma k \sin(kR)} \end{cases} \quad (5.71)$$

Vediamo cosa succede nel limite di bassa energia $kR \ll 1$:

$$f_0 \approx \frac{\gamma(kR)^2}{ik^3 R - k^2 - \gamma k^2 R} \approx -\frac{R^2 \gamma}{1 + \gamma R} \quad (5.72)$$

da cui la sezione d'urto totale:

$$\sigma_{tot} = 4\pi \frac{R^4 \gamma^2}{(1 + \gamma R)^2} \quad (5.73)$$

Pertanto per $\gamma \rightarrow \infty$ ritroviamo esattamente la sezione d'urto per la sfera dura $\sigma \approx 4\pi R^2$, ossia in realtà per lo scattering è rilevante solo che vi sia un guscio sferico infinito, non che il potenziale sia infinito anche all'interno.

5.3 Lezione 28

5.3.1 Forma Implicita dell'Hamiltoniana Iperfine

Vogliamo adesso scrivere esplicitamente l'hamiltoniana per un elettrone ottico di un metallo alcalino/atomo idrogenoide:

$$\hat{\mathcal{H}}_e = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \hat{\vec{A}} \right)^2 + qV(r) - \frac{q}{2m_e^2 c^2} (g_s - 1) \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{E}} \times \hat{\vec{p}} - \hat{\vec{\mu}} \cdot \hat{\vec{B}} + \hat{\mathcal{H}}_c \quad \vec{\mu} = g_s \frac{q}{2m_e c} \vec{S} \quad (5.74)$$

dove $\hat{\mathcal{H}}_c$ è l'hamiltoniana di contatto iperfine, V è il potenziale elettrostatico efficace del nucleo e degli altri elettroni e $\hat{\vec{A}}$ è il potenziale vettore dovuto al campo magnetico generato dal momento magnetico del nucleo:

$$\vec{E} = -\nabla V(r) = -\frac{\vec{x}}{r} \frac{dV}{dr} \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad (5.75)$$

Accoppiamento al Campo Magnetico di Impulso e Momento Magnetico dell'Elettrone

Si può dimostrare che nella gauge trasversale $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ il potenziale vettore dovuto ad un momento di dipolo magnetico è dato da:

$$\vec{A} = \frac{\vec{\mu}_N \times \vec{x}}{r^3} \quad \vec{\mu} = g_N \frac{e_0}{2m_p c} \vec{I} \quad (5.76)$$

Possiamo poi calcolare il campo magnetico associato tramite il rotore:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \frac{1}{r^3} \left[\frac{3}{r^2} (\vec{\mu}_N \times \vec{x}) \vec{x} - \vec{\mu}_N \right] \quad (5.77)$$

Calcoleremo l'hamiltoniana all'ordine $\alpha^{-2} \iff c^{-2}$. Trascuriamo per comodità i segni di operatori, che sono ovvi, stando attenti a non scambiare l'ordine di prodotti scalari e vettoriali. Iniziamo con esprimere il termine cinetico:

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{2m_e} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{q}{2m_e c} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{q^2}{2m_e c^2} \vec{A}^2 = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{q}{2m_e c} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + o(c^{-4}) = \\ &= \frac{p^2}{2m_e} - \frac{q}{m_e c} \vec{A} \cdot \vec{p} - \frac{q}{2m_e c} i\hbar \nabla \cdot \vec{A} = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{q}{m_e c} \vec{A} \cdot \vec{p} + o(c^{-4}) = \\ &= \frac{p^2}{2m_e} - \frac{q}{m_e c} \frac{(\vec{\mu}_N \times \vec{x}) \cdot \vec{p}}{r^3} + o(c^{-4}) = \\ &= \frac{p^2}{2m_e} - \frac{q}{m_e c} \frac{\vec{\mu}_N \cdot (\vec{x} \times \vec{p})}{r^3} + o(c^{-4}) = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{q}{m_e c} \frac{\vec{\mu}_N \cdot \vec{L}}{r^3} + o(c^{-4}) \end{aligned} \quad (5.78)$$

Consideriamo poi il termine di accoppiamento tra il momento magnetico dell'elettrone e il campo magnetico del nucleare:

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{1}{r^3} \left[\vec{\mu} \cdot \vec{\mu}_N - \frac{3}{r^2} (\vec{\mu}_N \cdot \vec{x})(\vec{\mu} \cdot \vec{x}) \right] \quad (5.79)$$

Termine di Contatto

Vediamo adesso che forma ha il termine di contatto. Cerchiamo adesso di motivarlo fisicamente per dargli una precisa forma matematica. Partiamo dal considerare il nucleo come una sfera di raggio $\rho_0 \approx 1\text{fm} = 10^{-13}\text{cm} \ll a_0 \approx 0.5 \cdot 10^{-8}\text{cm}$. Notiamo che gli unici stati elettronici che hanno ampiezza non nulla nell'origine $r = 0$ sono gli stati di tipo s , e dunque elettroni in questi stati ammettono una probabilità non nulla di trovarsi all'interno del nucleo. Stati con momenti angolari superiori hanno invece probabilità trascurabili, in quanto si annullano in $r = 0$.

Supponiamo che l'espressione del campo magnetico dovuto ad un momento di dipolo magnetica sia valida fino alla superficie del nucleo. Avremo dunque linee di campo che escono da un polo ed entrano nell'altro. Cerchiamo di capire come il campo si comporta al suo interno. Una prima approssimazione potrebbe essere quella di campo magnetico uniforme, parallelo al momento magnetico nucleare:

$$\vec{\mathbf{B}} = B_0 \frac{\vec{\mu}_N}{|\vec{\mu}_N|} \quad (5.80)$$

dove il fattore B_0 deve essere tale che $\vec{\mathbf{B}}$ sia un campo solenoidale, ossia sia ancora soddisfatta $\nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0$ in tutto lo spazio e che abbia componente normale nulla alla superficie:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0 & \forall \vec{\mathbf{x}} \\ \vec{\mathbf{B}}_n^+ - \vec{\mathbf{B}}_n^- = 0 & \forall \vec{\mathbf{x}}: |\vec{\mathbf{x}}| = \rho_0 \end{cases} \quad (5.81)$$

La prima è chiaramente nulla fuori e anche dentro, essendo il campo costante. Nel sistema di riferimento del nucleo chiaramente la componente normale coincide con quella radiale:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \rho_0^+} B_r &= \lim_{r \rightarrow \rho_0^+} \frac{1}{r^3} \left[\frac{3}{r^2} (\vec{\mu}_N \times \vec{\mathbf{x}}) r - \frac{1}{r} \vec{\mu}_N \cdot \vec{\mathbf{x}} \right] = \lim_{r \rightarrow \rho_0^+} \frac{1}{r^3} \frac{2}{r} (\vec{\mu}_N \times \vec{\mathbf{x}}) = \frac{2\mu_N \cos \theta}{\rho_0^3} \\ \lim_{r \rightarrow \rho_0^-} B_r &= B_0 \cos \theta \end{aligned} \quad (5.82)$$

da cui:

$$B_0 = \frac{2\mu_N}{\rho_0^3} \Rightarrow \vec{\mathbf{B}}(r < \rho_0) = \frac{2\vec{\mu}_N}{\rho_0^3} \quad (5.83)$$

L'hamiltoniana di contatto è data da:

$$\hat{\mathcal{H}}_c = -\vec{\mu} \cdot \vec{\mathbf{B}}_{int} = -2 \frac{\vec{\mu} \cdot \vec{\mu}_N}{\rho_0^3} \chi_{\rho_0}(r) \quad (5.84)$$

con χ_{ρ_0} funzione caratteristica della sfera di raggio ρ_0 . Siccome ρ_0 è molto piccolo allora possiamo approssimare questa ad una δ :

$$\frac{1}{\rho_0^3} \chi_{\rho_0}(r) \approx A \delta^3(\vec{\mathbf{x}}) \quad (5.85)$$

con A una certa costante di normalizzazione:

$$\int d^3\vec{\mathbf{x}} \frac{1}{\rho_0^3} \chi_{\rho_0}(r) = \frac{4}{3}\pi \Rightarrow \frac{1}{\rho_0^3} \chi_{\rho_0}(r) \approx \frac{4}{3}\pi \delta^3(\vec{\mathbf{x}}) \quad (5.86)$$

Hamiltoniana Totale

Troviamo dunque:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}^{fine} + \hat{\mathcal{H}}^{ipperf} + \hat{\mathcal{H}}_C^{ipperf} \quad (5.87)$$

con $\hat{\mathcal{H}}_e$ termine cinetico e di interazione elettrostatica, $\hat{\mathcal{H}}^{fine}$ interazione di spin-orbita, $\hat{\mathcal{H}}^{ipperf}$ interazione tra il momento magnetico dell'elettrone e il campo magnetico esterno dovuto al momento magnetico del nucleo, $\hat{\mathcal{H}}_C^{ipperf}$ interazione tra il momento magnetico dell'elettrone e il campo magnetico interno al nucleo:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_e &= \frac{p^2}{2m_e} + qV(r) \\ \hat{\mathcal{H}}^{fine} &= \frac{g_s - 1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{L}} \\ \hat{\mathcal{H}}^{ipperf} &= g_N g_S \frac{e}{2m_p c} \frac{e}{2m_e c} \frac{1}{r^3} \left\{ \vec{\mathbf{I}} \cdot \vec{\mathbf{L}} + \left[3 \frac{(\vec{\mathbf{I}} \cdot \vec{\mathbf{x}})(\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{x}})}{r^2} - \vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{I}} \right] \right\} \\ \hat{\mathcal{H}}_C^{ipperf} &= \frac{8\pi}{3} g_N g_S \frac{e}{2m_p c} \frac{e}{2m_e c} \vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{I}} \delta^3(\vec{\mathbf{x}}) \end{aligned} \quad (5.88)$$

In realtà abbiamo trascurato nell'hamiltoniana di struttura fine il cosiddetto termine di variazione di massa, dovuto allo sviluppo dell'energia cinetica relativistica, e il termine di Darwin, un altro termine di contatto rispetto alla carica elettrica, che però si possono giustificare solo a partire dall'equazione di Dirac:

$$\hat{\mathcal{H}}^3 = -\frac{p^4}{8m_e^3c^2} + \frac{\hbar^2}{8m_e^2c^2}\nabla^2 U_N(r) \quad U_N(r) = \frac{Ze^2}{r} \quad (5.89)$$

Questi termini possono essere ignorati per il nostro studio in quanto non includono accoppiamenti con gli spin e quindi non implicano splitting dei livelli energetici, ma solo la loro variazione assoluta (e la variazione degli autostati).

5.3.2 Numeri Quantici e Ordini di Grandezza

Facciamo una ricapitolazione sugli autostati, autovalori e numeri quantici per le varie approssimazioni dell'hamiltoniana elettronica. Per l'hamiltoniana elettrostatica un CSCO è dato da:

$$[\hat{\mathcal{H}}_e, L^2] = [\hat{\mathcal{H}}, L_z] = [\hat{\mathcal{H}}, S^2] = [\hat{\mathcal{H}}, S_z] = 0 \quad (5.90)$$

da cui:

$$\hat{\mathcal{H}}_e |n, l, m\rangle |S, m_S\rangle = W_{nl}^0 |nlm\rangle |S, m_S\rangle \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, l = 0, \dots, n-1, m = -l, \dots, l \quad (5.91)$$

Nel caso particolare di atomi idrogenoidi (un solo elettrone) sappiamo l'espressione esatta degli autovalori e degli autostati:

$$W_{nl}^0 = W_n^0 = -w_0 \frac{Z^2}{n^2} \quad w_0 = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{e^4 m_e}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ eV} \quad (5.92)$$

I livelli W_{nl}^0 hanno dunque una degenerazione $2(2l+1)$.

Aggiungendo l'hamiltoniana iperfine troviamo che non commuta più con L_z, S_z , ma continua a commutare con J^2, J_z (con $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$):

$$[\hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}^{fine}, L^2] = [\hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}^{fine}, S^2] = [\hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}^{fine}, J^2] = [\hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}^{fine}, J_z] = 0 \quad (5.93)$$

da cui, siccome S è fisso:

$$(\hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}^{fine}) |n, l, j, m_j\rangle = (W_{nl}^0 + W_{nlj}^1) |n, l, j, m_j\rangle \quad \left|l - \frac{1}{2}\right| \leq j \leq l + \frac{1}{2}, m_j = -j, \dots, j \quad (5.94)$$

Per usare la teoria delle perturbazioni al primo ordine possiamo passare dalla base iniziale alla base nuova tramite i coefficienti di Clebsch-Gordan:

$$|nlm\rangle |S, m_S\rangle \rightarrow |nljm_j\rangle = \sum_{m, m_S} \langle l, m; S, m_S | j, m_j \rangle |nlm\rangle |S, m_S\rangle \quad (5.95)$$

Gli autovalori hanno poi degenerazione $2j+1$, in modo tale che, per $l > 0$:

$$2\left(l - \frac{1}{2}\right) + 1 + 2\left(l + \frac{1}{2}\right) + 1 = 4l + 2 = 2(2l+1) \quad (5.96)$$

Usando la teoria delle perturbazioni al primo ordine troviamo anche l'ordine di grandezza delle correzioni:

$$\begin{aligned} \langle nljm_j | \vec{L} \cdot \vec{S} | nljm_j \rangle &= \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \\ \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle &\approx \frac{1}{a_0^2} \langle V \rangle \approx \frac{w_0}{a_0^2} \\ W_{nlj}^1 &\approx \langle \hat{\mathcal{H}}^{fine} \rangle = \frac{g_S - 1}{2m_e^2 c^2} \langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle = \frac{g_S - 1}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle \approx \\ &\approx \frac{g_S - 1}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \frac{w_0}{a_0^2} \approx \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2} \frac{w_0}{a_0^2} \approx w_0 \alpha^2 = o(\alpha^2) \end{aligned} \quad (5.97)$$

Pertanto la correzione di struttura fine è dell'ordine di 10^{-4} rispetto ai livelli imperturbati.

Per includere la struttura iperfine dobbiamo tenere conto dell'effetto dello spin nucleare, che abbiamo potuto ignorare in quanto non appariva nell'hamiltoniana.

$$[\hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{H}}_e, I^2] = [\hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{H}}_e, I_z] = 0 \quad (5.98)$$

Tenendo però conto dello spin allora a livello di struttura fine:

$$|n, l, j, m_j\rangle \rightarrow |n, l, j, m_j\rangle |I, m_I\rangle \quad 2j+1 \rightarrow (2I+1)(2j+1) \quad m_I = -I, \dots, I \quad (5.99)$$

Possiamo estendere l'hamiltoniana elettrostatica e fine a questo spazio di stati in maniera naturale, ottenendo gli stessi autovalori ma con maggiore degenerazione, dovuta ad m_j ed m_I .

Passiamo infine all'hamiltoniana con la struttura fine $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}^{fine} + \hat{\mathcal{H}}^{iperf} + \hat{\mathcal{H}}_C^{iperf}$. Non commuta più con J_z, I_z , ma commuta con F^2, F_z :

$$[\hat{\mathcal{H}}, L^2] = [\hat{\mathcal{H}}, S^2] = [\hat{\mathcal{H}}, I^2] = [\hat{\mathcal{H}}, F^2] = [\hat{\mathcal{H}}, F_z] = 0 \quad (5.100)$$

e dunque sempre tramite i coefficienti di Clebsch-Gordan troviamo la nuova base:

$$|nljm_j\rangle |I, m_I\rangle \rightarrow |nljI, Fm_F\rangle = \sum_{m_j, m_I} |nljm_j\rangle \langle j m_j; I, m_I | F, m_F\rangle \quad |j-I| \leq F \leq j+I, \quad m_F = -F, \dots, F \quad (5.101)$$

Possiamo dunque nuovamente applicare la teoria delle perturbazioni non degeneri per ottenere le correzioni al primo ordine dovute alla struttura iperfine.

$$W_{nljF}^{iperf} = \langle nljI, Fm_F | \hat{\mathcal{H}}^{iperf} + \hat{\mathcal{H}}_C^{iperf} | nljI, Fm_F\rangle \quad (5.102)$$

Vogliamo confrontare questa con la correzione di spin-orbita.

Notiamo che la correzione iperfine è composta da termini tutti dello stesso ordine di grandezza (proporzionali al prodotto di due momenti angolari):

$$W_{nljF}^{iperf} \approx \left\langle g_{NGS} \frac{e}{2m_p c} \frac{e}{2m_e c} \frac{1}{r^3} \vec{S} \cdot \vec{I} \right\rangle \approx \frac{e^2}{m_e m_p c^2} \hbar^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \approx \left(\frac{e^2}{m_e c} \right)^2 \frac{m_e}{m_p} \frac{\hbar^2}{a_0^3} \approx \frac{m_e}{m_p} \alpha^2 w_0 = \frac{m_e}{m_p} W_{nlj}^{fine} \quad (5.103)$$

Pertanto la correzione di struttura iperfine è più piccola di circa 2000 volte della correzione di struttura fine, indicando che può essere osservata solo con spettrometri di alta risoluzione.

5.3.3 Struttura Iperfine degli Stati s

Studiamo adesso più in dettaglio gli stati di tipo s ($l = 0$). Questo implica anche che:

$$l = 0 \Rightarrow j = \frac{1}{2} \Rightarrow F = I + S \equiv K \quad (5.104)$$

Questo significa che possiamo fattorizzare lo stato in una parte relativa allo spazio delle configurazioni e in una parte relativa puramente dallo spin $\vec{K} = \vec{I} + \vec{S}$:

$$|nljFm_F\rangle = |n, 0, 0\rangle |K, m_K\rangle \quad (5.105)$$

Siccome lo spin dell'elettrone può assumere il solo valore $S = 1/2$ allora questo implica che (per gli stati s) vi saranno sempre al più due valori di $F = K = I - 1/2, I + 1/2$ (solo per $I = 0$ vi è un solo valore $F = K = 1/2$). Questo significa che per un dato stato s ha sempre senso parlare di una sola vita media (una sola frequenza di transizione, lunghezza d'onda, ecc...).

Notiamo poi che rappresentazione delle configurazioni, la funzione d'onda è puramente radiale:

$$\langle \vec{x} | n, l = 0, m = 0 \rangle = \psi_{n00}(r) \quad (5.106)$$

Possiamo verificare immediatamente che la correzione iperfine su questi stati, esclusa la parte di contatto, è nulla:

$$\langle n0, jFm_F | \hat{\mathcal{H}}^{iperf} | n0, jFm_F \rangle = \langle n00 | \langle Km_K | \hat{\mathcal{H}}^{iperf} | n00 \rangle | Km_K \rangle = 0 \quad (5.107)$$

Scriviamo l'hamiltoniana in maniera compatta:

$$\hat{\mathcal{H}}^{iperf} = \frac{A}{r^3} \left[\vec{L} - \vec{S} + \frac{3(\vec{S} \cdot \vec{x})\vec{x}}{r^2} \right] \cdot \vec{I} \quad (5.108)$$

Siccome gli stati sono di tipo s allora il termine con \vec{L} non contribuisce. Inoltre siccome sono fattorizzati in una parte di configurazionale e una parte di spin allora possono essere valutati in maniera indipendente questi due valori di aspettazione:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{H}}^{iperf} \rangle_{l=0} &= \langle n00 | \langle Km_K | \frac{A}{r^3} \left[\vec{L} - \vec{S} + \frac{3(\vec{S} \cdot \vec{x})\vec{x}}{r^2} \right] \cdot \vec{I} | n00 \rangle | Km_K \rangle = \langle n00 | \langle Km_K | \frac{A}{r^3} \left[-\vec{S} + \frac{3(\vec{S} \cdot \vec{x})\vec{x}}{r^2} \right] \cdot \vec{I} | n00 \rangle | Km_K \rangle = \\ &= -\langle n00 | \frac{A}{r^3} | n00 \rangle \langle Km_K | \vec{S} \cdot \vec{I} | Km_K \rangle + 3A \sum_{pq} \langle n00 | \frac{x_p x_q}{r^5} | n00 \rangle \langle Km_K | S_p I_q | Km_K \rangle \end{aligned} \quad (5.109)$$

Siccome le autofunzioni s sono radiali allora si può dimostrare in coordinate radiali:

$$\langle n00 | \frac{x_p x_q}{r^5} | n00 \rangle = \int d^3x |\psi_{n00}(r)|^2 \frac{x_p x_q}{r^5} = \frac{\delta_{pq}}{3} \int d^3x |\psi_{n00}(r)|^2 \frac{1}{r^3} = \frac{\delta_{pq}}{3} \langle n00 | \frac{1}{r^3} | n00 \rangle \quad (5.110)$$

Questo semplifica notevolmente il calcolo:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{H}}^{iparf} \rangle_{l=0} &= - \langle n00 | \frac{A}{r^3} | n00 \rangle \langle Km_K | \vec{S} \cdot \vec{I} | Km_K \rangle + \sum_p \langle n00 | \frac{A}{r^3} | n00 \rangle \langle Km_K | S_p I_p | Km_K \rangle = \\ &= - \langle n00 | \frac{A}{r^3} | n00 \rangle \langle Km_K | \vec{S} \cdot \vec{I} | Km_K \rangle + \langle Km_K | \vec{S} \cdot \vec{I} | Km_K \rangle \langle n00 | \frac{A}{r^3} | n00 \rangle = 0 \end{aligned} \quad (5.111)$$

come pre-annunciato.

Possiamo adesso calcolare la correzione dovuta al termine di contatto, che vediamo effettivamente contribuire solo per stati di tipo s , gli unici non nulli in $r = 0$:

$$\langle \hat{\mathcal{H}}_c^{iparf} \rangle = \langle Km_K | \vec{S} \cdot \vec{I} | Km_K \rangle \langle n00 | B \delta^3(\vec{x}) | n00 \rangle = B |\psi_{n00}(0)|^2 \frac{\hbar^2}{2} \left[K(K+1) - I(I+1) - \frac{3}{4} \right] \quad (5.112)$$

Questo ci fornisce anche la forma degli autovalori per $l = 0$ e l'effetti degenerazione dei livelli:

$$W_{nljF} \Big|_{l=0} = W_{n0}^0 + W_{n01/2}^{fine} + H_{nIK}^c \quad (5.113)$$

Troviamo dunque che in generale le transizioni iperfini dipendono dalle proprietà atomiche e dunque l'osservazione di questo spettro fornisce informazioni sugli stati atomici.

Notiamo inoltre che la correzione iperfine per gli stati s è crescente in $F(K)$, ossia è più energeticamente favorevole che gli spin dell'elettrone e del nucleo siano paralleli piuttosto che antiparalleli.

Ad esempio per l'idrogeno $I = 1/2 \Rightarrow F = K = 0, 1$ e dunque vi è un splitting di $nl^j = 1s^{1/2}$ in $F = 0$ ed $F = 1$.

In questo caso conosciamo anche l'espressione esatta delle autofunzioni:

$$\psi_{n00}(0) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(\frac{2Z}{a_0 n} \right)^{3/2} \quad (5.114)$$

Si trova infine che la separazione tra i due livelli è data da:

$$\Delta W_{iparf} = \frac{8}{3} g_N \frac{m_e}{m_p} \alpha^2 w_0 = 5.88 \cdot 10^{-6} \text{eV} \Rightarrow \begin{cases} \lambda = 21.1 \text{cm} \\ \nu = 1.42 \text{GHz} \end{cases} \quad (5.115)$$

Pertanto la radiazione emessa in una transizione tra livelli di struttura iperfine sta nelle onde radio.

Nella prossima lezione studieremo la probabilità di transizione tra stati iperfini usando la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo, trovando che è molto piccola, risultando in una piccola larghezza (naturale) della riga spettrale e una lunga vita media.

5.4 Lezione 29

Come pre-annunciato, vogliamo adesso calcolare la probabilità di transizione di uno stato eccitato iperfine ad uno meno eccitato/fondamentale, ossia con nlj fissati. Ci limiteremo al caso $n = 1, l = 0$ in quanto il più semplice e il più utile, in quanto passando a valori di n, l superiori le transizioni $nl \rightarrow n'l'$ sono molto più probabili e hanno vite medie molto più piccole, che rendono transizioni meno rilevanti le transizioni tra stati iperfini con $n > 1, l > 0$.

5.4.1 Emissione Spontanea

Usando gli argomenti statistici di Einstein vogliamo adesso dimostrare l'esistenza e le proprietà dell'emissione spontanea. Siano $W_m > W_n$ due livelli energetici di un atomo. Se questo è posto in un campo di radiazione incoerente caratterizzata da una densità di energia spettrale $u(\nu)$ allora la probabilità di transizione da W_n a W_m è data da:

$$\pi_{n \rightarrow m} = B_{n \rightarrow m} u(\nu_{m\nu}) \quad \pi_{m \rightarrow n} = B_{m \rightarrow n} u(\nu_{m\nu}) + A_{m \rightarrow n} \quad (5.116)$$

Il coefficiente $B_{n \rightarrow m}$ è detto di assorbimento, $B_{m \rightarrow n}$ di emissione stimolata e $A_{m \rightarrow n}$ di emissione spontanea, in quanto indipendente dal campo in cui è posto l'atomo.

All'equilibrio termico i numeri di occupazioni dei livelli W_m, W_n sono dati dalla distribuzione di Boltzmann:

$$N_m = \frac{e^{-\beta W_m}}{Z} \quad N_n = \frac{e^{-\beta W_n}}{Z} \quad (5.117)$$

Inoltre la densità spettrale di radiazione è data dalla formula di Planck:

$$u(\nu) = u_T(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1} \quad (5.118)$$

Einstein dimostrò che per preservare la distribuzione di Boltzmann rispetto ai processi di emissione e assorbimento è necessario che:

$$B_{n \rightarrow m} = B_{m \rightarrow n} \quad A_{m \rightarrow n} = \frac{16\pi^2 \hbar \nu_{mn}^3}{c^3} B_{m \rightarrow n} \quad (5.119)$$

e dunque in particolare che $A_{m \rightarrow n} \neq 0$.

Questi coefficienti permettono di stimare anche la vita media di uno stato eccitato:

$$\frac{1}{\tau_m} = \sum_{n < m} A_{m \rightarrow n} \quad (5.120)$$

dove la somma è fatta su tutti i livelli atomici ad energia minore di W_m .

Per calcolare questi coefficienti noi useremo l'approssimazione semiclassica motivata da una densità del campo elettromagnetico sufficientemente alta da potere essere considerata continua, ossia un campo classico e non quantizzato. Usando la teoria delle perturbazioni al primo ordine dipendenti dal tempo potremo poi calcolare i coefficienti di emissione stimolata e dunque i coefficienti di emissione spontanea.

5.4.2 Campo Elettromagnetico Incoerente

Per fare il calcolo perturbativo ci poniamo nella gauge di Coulomb:

$$\nabla \cdot \vec{A}_{rad} = 0 \quad V_{rad} = 0 \quad (5.121)$$

Si trova dunque che il potenziale vettoriale relativo ad un campo di radiazione incoerente è dato da:

$$\vec{A}_{rad}(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha=1}^2 a_{\alpha}(\vec{k}) \hat{e}_{\alpha}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + c.c. \quad (5.122)$$

dove α è l'indice di polarizzazione:

$$\omega = c|\vec{k}| \quad \hat{e}_{\alpha}(\vec{k}) \cdot \vec{k} = 0, \quad \hat{e}_{\alpha} \cdot \hat{e}_{\beta} = \delta_{\alpha\beta} \quad (5.123)$$

e $a_{\alpha}(\vec{k}) = |a_{\alpha}(\vec{k})| e^{i\phi(\vec{k})}$ certi coefficienti complessi. Il campo di radiazione incoerente può essere dunque pensato come un ensemble di onde piane con certi coefficienti. In particolare il campo sarà caratterizzato da certe proprietà di correlazione di questi coefficienti. Richiediamo che le fasi siano scorrelate e dunque che:

$$\langle a_{\alpha}(\vec{k}) a_{\beta}(\vec{k}') \rangle = \langle a_{\alpha}^*(\vec{k}) a_{\beta}^*(\vec{k}') \rangle = 0 \quad \forall \vec{k}, \vec{k}' \quad (5.124)$$

dove la media è fatta sull'ensemble. Vi saranno però correlazioni dei coefficienti con i complessi coniugati:

$$\langle a_{\alpha}(\vec{k}) a_{\beta}^*(\vec{k}') \rangle = g(\omega) \delta_{\alpha\beta} (2\pi)^3 \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \quad (5.125)$$

Pertanto la funzione $g(\omega)$ caratterizza univocamente un campo di radiazione incoerente, che troviamo essere legata alla densità spettrale (?).

Calcoliamo il campo elettrico e magnetico:

$$\begin{aligned} \vec{E}_{rad} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} i \frac{\omega}{c} a_{\alpha}(\vec{k}) \hat{e}_{\alpha}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + c.c. \\ \vec{B}_{rad} &= \nabla \times \vec{A} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k \sum_{\alpha} i \frac{\omega}{c} a_{\alpha}(\vec{k}) (\vec{k} \times \hat{e}_{\alpha}(\vec{k})) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + c.c. = \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k \sum_{\alpha} i \frac{\omega}{c} a_{\alpha}(\vec{k}) \tilde{e}_{\alpha}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + c.c. \end{aligned} \quad (5.126)$$

dove abbiamo definito il versore:

$$\tilde{e}_{\alpha}(\vec{k}) = (\hat{k} \times \hat{e}_{\alpha}(\vec{k})) \quad (5.127)$$

Ricaviamo dai campi la densità di energia elettromagnetica mediata sull'ensemble:

$$\begin{aligned}
\langle u \rangle &= \frac{1}{8\pi} (\langle E^2 \rangle + \langle B^2 \rangle) = \dots = \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2}{c^2} g(\omega) = \\
&= \frac{1}{2\pi} 4\pi \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2}{c^2} g(\omega) = \frac{1}{2\pi} 4\pi \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{\omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} \frac{\omega^2}{c^2} g(\omega) = \\
&= 16\pi^2 \int_0^{\infty} d\nu \frac{\nu^4}{c^5} g(\omega)
\end{aligned} \tag{5.128}$$

Dal confronto con la formula di Planck troviamo:

$$16\pi^2 \frac{\nu^4}{c^5} g(\omega) = u(\nu) \tag{5.129}$$

5.4.3 Rate di Transizione al Primo Ordine Perturbativo

Scriviamo ora l'hamiltoniana all'ordine di $1/c$, trovando che si scrive nella forma di un'hamiltoniana imperturbata più una perturbazione dipendente dal tempo:

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m_e} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 - g_S \frac{q}{2m_e c} \vec{S} \cdot \vec{B}(\vec{x}, t) + \dots = \\
&= H_{atomo} - \frac{q}{m_e c} \vec{A}_{rad}(\vec{x}, t) \cdot \vec{p} - g_S \frac{q}{2m_e c} \vec{S} \cdot \vec{B}_{rad}(\vec{x}, t) + o(c^{-2}) = \\
&= H_{atomo} + H_I(t)
\end{aligned} \tag{5.130}$$

dove:

$$H_I(t) = -\frac{q}{m_e c} \vec{A}_{rad}(\vec{x}, t) \cdot \vec{p} - g_S \frac{q}{2m_e c} \vec{S} \cdot \vec{B}_{rad}(\vec{x}, t) \tag{5.131}$$

Ricordiamo di aver fatto uso della gauge di Coulomb $\nabla \cdot \vec{A}_{rad} = 0$. Esplicitiamo l'hamiltoniana rispetto ai coefficienti $a_{\alpha}(\vec{k})$:

$$\hat{H}_I(t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \left[a_{\alpha}(\vec{k}) \hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{k}) e^{-i\omega t} + a_{\alpha}^{*}(\vec{k}) \hat{T}_{-}^{\alpha}(\vec{k}) e^{i\omega t} \right] \tag{5.132}$$

dove:

$$\hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{k}) = -\frac{q}{m_e c} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{\mathbf{e}}_{\alpha}(\vec{k}) \cdot \vec{p} - g_S \frac{q}{2m_e c} i \frac{\omega}{c} \vec{S} \cdot \vec{\mathbf{e}}_{\alpha}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad \hat{T}_{-}^{\alpha}(\vec{k}) = (\hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{k}))^{\dagger} \tag{5.133}$$

Applichiamo adesso la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo. Dati gli autostati $|m\rangle$ dell'hamiltoniana imperturbata allora, con la condizione iniziale $c_r(0) = \delta_{rn}$ sullo stato dell'elettrone ottico, il coefficiente rispetto allo stato m -esimo è dato al primo ordine da:

$$c_m(t) = -\frac{2i}{\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \left\{ a_{\alpha}(\vec{k}) [\hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{k})]_{mn} e^{i(\omega_{mn}-\omega)t/2} \frac{\sin[(\omega_{mn}-\omega)t/2]}{\omega_{mn}-\omega} + a_{\alpha}^{*}(\vec{k}) [\hat{T}_{-}^{\alpha}(\vec{k})]_{mn} e^{i(\omega_{mn}+\omega)t/2} \frac{\sin[(\omega_{mn}+\omega)t/2]}{\omega_{mn}+\omega} \right\} \tag{5.134}$$

La media di ensemble della probabilità di transizione dallo stato n allo stato m si ottiene facendo il modulo quadro di $c_m(t)$ (con $c_r(0) = \delta_{rn}$) e poi facendone la media sull'ensemble del campo di radiazione.

Si trova facilmente che questo è dato da:

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \langle |c_m(t)|^2 \rangle = \frac{4}{\hbar^2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} g(\omega) \sum_{\alpha} \left\{ \left| [\hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{k})]_{mn} \right|^2 \frac{\sin^2[(\omega_{mn}-\omega)t/2]}{(\omega_{mn}-\omega)^2} + \left| [\hat{T}_{-}^{\alpha}(\vec{k})]_{mn} \right|^2 \frac{\sin^2[(\omega_{mn}+\omega)t/2]}{(\omega_{mn}+\omega)^2} \right\} \tag{5.135}$$

Siamo adesso interessati al limite per $t \rightarrow \infty$. Per fare questo usiamo il limite:

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin^2[\pi(\nu_{mn} \pm \nu)t]}{\pi t (\nu_{mn} \pm \nu)} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \delta(\nu \pm \nu_{mn}) \tag{5.136}$$

In realtà non vogliamo effettivamente fare il limite $\rightarrow \infty$, in quanto l'approssimazione al primo ordine implica un andamento lineare della probabilità di transizione e dunque eventualmente una violazione dell'unitarietà.

Pertanto se $\omega_{mn} > 0 \iff W_m > W_n$ allora il secondo termine (relativo all'emissione) è trascurabile e contribuisce solo il primo:

$$\begin{aligned}
P_{n \rightarrow m}(t) &= \frac{t}{\hbar^2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} g(\omega) \sum_{\alpha} \left| [\hat{T}_+^{\alpha}(\vec{k})]_{mn} \right|^2 \delta(\nu - \nu_{mn}) = \frac{t}{\hbar^2} \int \nu^2 d\nu g(\omega) \delta(\nu - \nu_{mn}) \sum_{\alpha} \int d\Omega \left| [\hat{T}_+^{\alpha}(\vec{k})]_{mn} \right|^2 \\
&= \frac{t}{\hbar^2} \frac{\nu_{mn}^2}{c^3} g(\omega_{mn}) \sum_{\alpha} \int d\Omega \left| [\hat{T}_+^{\alpha} \left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}} \right)]_{mn} \right|^2 = \\
&= t \frac{c^2}{16\pi^2 \hbar^2} \frac{u(\nu_{mn})}{\nu_{mn}^2} \sum_{\alpha} \int d\Omega \left| [\hat{T}_+^{\alpha} \left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}} \right)]_{mn} \right|^2 = t \pi_{n \rightarrow m}
\end{aligned} \tag{5.137}$$

Troviamo dunque l'espressione dei coefficienti $B_{n \rightarrow m}$:

$$B_{n \rightarrow m} = \frac{c^2}{16\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{\nu_{mn}^2} \sum_{\alpha} \int d\Omega \left| [\hat{T}_+^{\alpha} \left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}} \right)]_{mn} \right|^2 \tag{5.138}$$

Ritroviamo inoltre il principio di equilibrio bilanciato:

$$P_{n \rightarrow m}(t) = P_{m \rightarrow n}(t) \tag{5.139}$$

Questa effettivamente è compatibile con le relazioni di Einstein in quanto $\nu_{mn}^2 = \nu_{nm}^2$ e $\hat{T}_+^{\alpha} = (\hat{T}_-^{\alpha})^{\dagger}$, e dunque $B_{n \rightarrow m} = B_{m \rightarrow n}$. Troviamo poi anche i coefficienti $A_{m \rightarrow n}$:

$$A_{m \rightarrow n} = \frac{\nu_{mn}}{\hbar c} \sum_{\alpha} \int d\Omega \left| [\hat{T}_+^{\alpha} \left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}} \right)]_{mn} \right|^2 \tag{5.140}$$

Approssimazione di Dipolo

Consideriamo la riga H_{α} dell'idrogeno, che ha una lunghezza d'onda $\lambda = 0.656 \mu\text{m}$. Questa si osserva ad esempio in una transizione $n = 3 \rightarrow n = 2$. Notiamo che $\lambda \gg a_0$. Questo ci permette di fare l'approssimazione di dipolo, ossia approssimare l'esponenziale in \hat{T}_+^{α} ad 1. Inoltre il termine dipendente dallo spin è tipicamente trascurabile. Questo ci conduce alla seguente espressione:

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \approx 1 + o(\lambda^{-1}) \Rightarrow \hat{T}_+^{\alpha}(\vec{k}) \approx -\frac{q}{m_e c} \hat{\mathbf{e}}_{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} \tag{5.141}$$

Siccome l'hamiltoniana dell'atomo ha un solo termine quadratico in \vec{p} allora:

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{\vec{x}}, \hat{\mathcal{H}}] = \nabla_{\vec{p}} \hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\vec{p}}}{m} \tag{5.142}$$

da cui:

$$[\hat{T}_+^{\alpha}]_{mn} = i \frac{q}{\hbar c} \hat{\mathbf{e}}_{\alpha} \cdot \langle m | [\hat{\vec{x}}, \hat{\mathcal{H}}] | n \rangle = i \frac{q}{\hbar c} (W_n - W_m) \langle m | \hat{\mathbf{e}}_{\alpha} \cdot \hat{\vec{x}} | n \rangle = i \frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{e}}_{\alpha} \cdot \vec{\mathbf{D}}_{mn} \tag{5.143}$$

con $\vec{\mathbf{D}} = e\vec{x}$ momento di dipolo dell'elettrone rispetto al nucleo. Notiamo adesso che in realtà gli indici m, n sono *multi-indici*. Nel caso di stati atomici in cui teniamo conto della struttura iperfine:

$$|n\rangle \rightarrow |n, l, j, I, F, m_F\rangle \tag{5.144}$$

Chiaramente troviamo che in approssimazione di dipolo le uniche transizioni possibili sono quelle per $\Delta l = \pm 1$. Nelle transizioni con $\Delta l = \pm 1$ il termine dominante nei rate di transizioni è quello di dipolo, ma in generale sono possibili anche ordini superiori. Se sono possibili solo ordini superiori allora la transizione sarà fortemente soppressa.

Se volessimo calcolare la vita media di un dato stato eccitato n , dovremmo sommare i coefficienti di emissione spontanea da quel livello ai livelli inferiori $m < n$. Il tipico ordine di grandezza è $A \approx 10^8 \text{s}^{-1}$ da cui una vita media dell'ordine di $\tau \approx 10^{-8} \text{s}$.

5.4.4 Vite Medie di Stati Eccitati Iperfini

Come annunciato, ci aspettiamo che per i livelli iperfini queste transizioni siano invece fortemente sopprese e la vita media molto lunga. In particolare vogliamo considerare la probabilità di trasmissione per il primo stato eccitato iperfine allo stato fondamentale per un atomo idrogenoide/metallo alcalino con spin nucleare $I = 1/2$ e in stati s :

$$n, l = 0, j = 1/2, I = 1/2 \quad F = 1 \rightarrow F = 0 \tag{5.145}$$

Ricordiamo che in questo caso:

$$|n, l = 0, j = 1/2, I = 1/2, F, m_F\rangle = |n00\rangle |K, m_K\rangle \quad F = K = 0, 1 \quad (5.146)$$

Per calcolare i coefficienti $A_{m \rightarrow n}$ dobbiamo prima calcolare gli elementi di matrice di \hat{T}_+^α , di cui ricordiamo l'espressione:

$$\hat{T}_+^\alpha(\vec{k}) = -\frac{q}{m_e c} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{k}) \cdot \hat{\vec{p}} - g_S \frac{q}{2m_e c} i \frac{\omega}{c} k \hat{\vec{S}} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad (5.147)$$

Più precisamente vogliamo calcolare:

$$\langle n00 | \langle 1, m_F | \hat{T}_+^\alpha | n00 \rangle | 0, 0 \rangle = T_1 + T_2 \quad (5.148)$$

Abbiamo diviso questo in due elementi di matrice relative ai due termini di \hat{T}_+^α , di cui il primo è nullo in quanto non contiene termini relativi allo spin, ma solo la parte configurazionale:

$$T_1 = \langle n00 | \langle 1, m_F | \left(-\frac{q}{m_e c} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{\mathbf{e}}_\alpha \cdot \hat{\vec{p}} \right) | n00 \rangle | 0, 0 \rangle = \langle n00 | \left(-\frac{q}{m_e c} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{\mathbf{e}}_\alpha \cdot \hat{\vec{p}} \right) | n00 \rangle \langle 1, m_F | 0, 0 \rangle = 0 \quad (5.149)$$

Notiamo che è questo a valido ad ogni ordine di dipolo.

Il secondo invece dipende solo dallo spin e dunque in generale è non nullo.

$$T_2 = \langle n00 | \langle 1, m_F | \left(-i \frac{g_S q}{2m_e c} k \hat{\vec{S}} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k}) \right) | n00 \rangle | 0, 0 \rangle = \langle 1, m_F | \left(-i \frac{g_S q}{2m_e c} k \hat{\vec{S}} \cdot \vec{e}_\alpha(\vec{k}) \right) | 0, 0 \rangle \quad (5.150)$$

Siccome per calcolare $A_{m \rightarrow n}$ dobbiamo fare l'integrale sulle possibili direzioni del versore $\hat{\mathbf{k}}$, possiamo usare la corrispondenza biunivoca con $\vec{e}_\alpha(\vec{k})$ e fare un cambio di variabile $\hat{\mathbf{k}} \rightarrow \vec{e}_\alpha \equiv \hat{\mathbf{k}}$ (rinominiamo la variabile di integrazione a quella iniziale). Siamo dunque interessati ad esplicitare l'elemento di matrice:

$$T_2 = \left(-i \frac{g_S q}{2m_e c} k \right) \langle 1, m_F | \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | 0, 0 \rangle \quad (5.151)$$

Esplicitiamo il prodotto scalare in coordinate sferiche e calcoliamone l'elemento di matrice, esplicitando gli stati di singoletto/tripletto nella base di autostati di I_z, S_z , in quanto l'operatore non agisce sullo spin nucleare. Usiamo poi i valori attesi di \hat{S}_x, \hat{S}_y su questa base:

$$\begin{aligned} \langle 1, m_F | \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | 0, 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle +, + | \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} (|+, -\rangle - |-, +\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | - \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | \hat{S}_x \sin \theta \cos \phi + \hat{S}_y \sin \theta \sin \phi | - \rangle = -\frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\phi} \end{aligned} \quad (5.152)$$

Detta $\lambda = \frac{c}{\nu_{mn}}$ la lunghezza d'onda di emissione, troviamo infine:

$$\begin{aligned} A &= \frac{\nu_{mn}}{\hbar c} \sum_\alpha \int d\Omega \left| [\hat{T}_+^\alpha \left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}} \right)]_{mn} \right|^2 = \frac{\nu_{mn}}{\hbar c} \sum_\alpha \int d\Omega |T_2|^2 = \frac{\nu_{mn}}{\hbar c} \left(\frac{g_S q}{2m_e c} \right)^2 k^2 \int d\Omega \frac{\hbar^2}{8} \sin^2 \theta = \\ &= \frac{\nu_{mn}}{\hbar c} \frac{g_S^2 e^2}{4m_e^2 c^2} \frac{4\pi^2 \nu_{mn}^2}{c^2} \frac{\hbar^2}{8} 2\pi \int_{-1}^1 (1-x^2) dx = \frac{\pi^3}{4} \frac{g_S^2 e^2 \hbar \nu_{mn}^3}{m_e^2 c^5} \frac{4}{3} = \frac{1}{48\pi} \frac{g_S^2 e^2 \hbar}{m_e^2 c^2 \lambda^3} \end{aligned} \quad (5.153)$$

Per un atomo di idrogeno osserveremo:

$$\tau = \frac{1}{A} = 1.09 \cdot 10^7 \text{ anni} \quad (5.154)$$

Questo significa che la riga spettrale iperfine sarà in realtà molto rara da osservare. Nel 1944 fu infatti fatta la predizione basata sugli atomi di idrogeno dell'universo (ordinariamente nello stato iperfine fondamentale a causa della bassa temperatura) potessero collidere in modo da eccitarsi allo stato iperfine eccitato, emettendo con la vita media data le onde radio a 21cm. Sulla base di modelli astrofisici fu previsto che questa frequenza potesse essere rivelabile grazie al grande numero di atomi di idrogeno. In particolare ha permesso di fare una mappa della distribuzione di idrogeno nella nostra galassia. Al giorno d'oggi rappresenta infatti un potente strumento per rivelare le concentrazioni di idrogeno nello spazio interstellare, favorito dal fatto che le nubi di polveri non sono molto sensibili (non assorbono) questa radiazione.

La vita media o il coefficiente A fornisce anche la larghezza naturale delle righe spettrali iperfini, che sono dunque molto nette:

$$\Gamma = A\hbar \quad (5.155)$$

Queste righe sono alla base del funzionamento del MASER a idrogeno, che ha fornito una stima molto precisa della frequenza di transizione:

$$\nu = 1420.4057517667(28) \text{ MHz} \quad (5.156)$$

Capitolo 6

Invarianza e Simmetrie in Meccanica Quantistica

6.1 Lezione 30

6.1.1 Premesse

Consideriamo due osservatori O, O' che dispongono degli stessi strumenti, che si trovano in quiete relativa in un dato riferimento inerziale e i cui assi coordinati sono ruotati e traslati gli uni rispetto agli altri.

Il sistema O è determinato da tre assi ortogonali $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3$, mentre il sistema O' è individuato da $\hat{\mathbf{e}}'_1, \hat{\mathbf{e}}'_2, \hat{\mathbf{e}}'_3$. Usiamo la notazione di Einstein per comodità. Indichiamo con $\vec{\mathbf{a}} = a^i \hat{\mathbf{e}}_i$ il vettore distanza tra le due origini e indichiamo con R_{ji} la matrice ortogonale che determina la rotazione:

$$\hat{\mathbf{e}}'_i = \hat{\mathbf{e}}_j R_{ji} \quad R^T R = R R^T \quad (6.1)$$

Richiediamo che nello spazio fisico sia valida omogeneità e isotropia¹, in modo che i due osservatori siano *equivalenti*. Cerchiamo di chiarire il significato e le conseguenze di questa proprietà.

Consideriamo due qualsiasi grandezze fisiche A, B misurate da O per un dato sistema. Indichiamo con A', B' le corrispondenti grandezze dello stesso sistema misurate da O' . Indichiamo poi con \mathcal{H} lo spazio di Hilbert del sistema fisico considerato (che è indipendente dall'osservatore), \hat{A}, \hat{B} gli operatori corrispondenti alle grandezze fisiche A, B e con \hat{A}', \hat{B}' gli operatori corrispondenti ad A', B' .

Scriviamo le equazioni agli autovalori per $\hat{A}, \hat{B}, \hat{A}', \hat{B}'$, i cui spettri supponiamo discreti non degeneri per semplicità:

$$\begin{cases} \hat{A} |\phi_r\rangle = \alpha_r |\phi_r\rangle \\ \hat{B} |\chi_s\rangle = \beta_s |\chi_s\rangle \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{A}' |\phi'_r\rangle = \alpha'_r |\phi'_r\rangle \\ \hat{B}' |\chi'_s\rangle = \beta'_s |\chi'_s\rangle \end{cases} \quad (6.2)$$

I valori $\alpha_r, \beta_s, \alpha'_r, \beta'_s$ sono rispettivamente possibili risultati delle misure di A, B, A', B' . L'equivalenza tra i sistemi O, O' implica che lo spettro di \hat{A}, \hat{B} è rispettivamente lo stesso spettro di \hat{A}', \hat{B}' (i risultati delle misure in O', O' sono gli stessi). Ma l'equivalenza implica anche altro.

Supponiamo ad un dato istante t il sistema O abbia misurato A ed abbia ottenuto come risultato α_r e il sistema O' abbia misurato A' e ottenuto lo stesso valore α_r . Supponiamo inoltre che subito dopo l'istante t (in cui O ha misurato A , O' ha misurato A') l'osservatore O compia una misura su B e l'osservatore O' compia una misura B' .

Per i postulati della meccanica quantistica la probabilità che una misura su B abbia risultato β_s e che una misura su B' abbia risultato β_s sono date da:

$$|\langle \chi_s | \phi_r \rangle|^2 \quad |\langle \chi'_s | \phi'_r \rangle|^2 \quad (6.3)$$

L'equivalenza di O, O' implica anche che queste probabilità devono coincidere:

$$|\langle \chi_s | \phi_r \rangle|^2 = |\langle \chi'_s | \phi'_r \rangle|^2 \quad (6.4)$$

Siccome A, B sono generici allora l'equivalenza dei sistemi, e dunque l'isotropia ed omogeneità dello spazio, implica che per ogni stato $|f\rangle \in \mathcal{H}$ esiste ed è unico lo stato $|f'\rangle \in \mathcal{H}$ che è "visto" da O' allo stesso modo che $|f\rangle$ è "visto" da O .

$$|f\rangle \rightarrow |f'\rangle \quad (6.5)$$

¹In realtà supponiamo che anche le riflessioni lascino invariato lo spazio, ma per semplicità possiamo limitarci ad escluderle per il momento. Le discussioni fatte adesso in realtà includono tutte le trasformazioni che conservano le distanze nello spazio (euclideo), non solo quelle che conservano l'orientamento degli assi.

Questo significa che dati due stati $|f\rangle, |g\rangle$ esistono due stati $|f'\rangle, |g'\rangle$ la cui probabilità di overlap è invariata:

$$|\langle f|g\rangle| = |\langle f'|g'\rangle| \quad (6.6)$$

Chiaramente siccome stiamo parlando di stati e non vettori in realtà $|f'\rangle$ è determinato a meno di una fase. Pertanto la condizione di equivalenza in realtà fissa una corrispondenza tra **raggi** dello spazio di Hilbert \mathcal{H} . Chiamiamo raggio di \mathcal{H} una classe di equivalenza di vettori normalizzati (escludiamo i vettori non normalizzabili e il vettore nullo) tra loro proporzionali, ossia differiscono per un fattore di fase arbitrario:

$$\{|f\rangle\} = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \exists \phi \in \mathbb{R} \quad |\psi\rangle = e^{i\phi} |f\rangle\} \quad |f\rangle \in \mathcal{H} \setminus \{0\} \quad (6.7)$$

Pertanto scriviamo più propriamente la corrispondenza è tra raggi (ossia una funzione tra raggi di \mathcal{H} , non tra suoi vettori):

$$\{|f\rangle\} \rightarrow \{|f'\rangle\} \quad (6.8)$$

6.1.2 Enunciato del Teorema di Wigner

Vogliamo adesso dimostrare che la legge di trasformazione può assumere solo due forme molto particolari. In particolare dimostreremo che, per ogni $|f\rangle \in \mathcal{H}$, il fattore di fase a meno del quale $|f'\rangle$ è determinato può essere scelto in modo tale che esiste un operatore $\hat{\Omega}$ unitario o antiunitario tale che:

$$|f'\rangle = \hat{\Omega} |f\rangle \quad (6.9)$$

Questo teorema, detto **Teorema di Wigner**, afferma dunque che è possibile fare una corrispondenza tra vettori per sistemi di riferimento distinti, e non solo tra raggi, come implicato *immediatamente* dalla condizione di equivalenza.

Ricordiamo che un operatore unitario è un operatore lineare invertibile che conserva il prodotto scalare:

$$\hat{\Omega}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad \hat{\Omega}(c_1 |f_1\rangle + c_2 |f_2\rangle) = c_1 \hat{\Omega} |f_1\rangle + c_2 \hat{\Omega} |f_2\rangle \quad \mathcal{R}(\hat{\Omega}) = \mathcal{H} \quad \langle \hat{\Omega} f | \hat{\Omega} g \rangle = \langle f | g \rangle \quad (6.10)$$

Un operatore antiunitario invece è un operatore antilineare invertibile che fa il coniugato del prodotto scalare:

$$\hat{\Omega}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad \hat{\Omega}(c_1 |f_1\rangle + c_2 |f_2\rangle) = c_1^* \hat{\Omega} |f_1\rangle + c_2^* \hat{\Omega} |f_2\rangle \quad \mathcal{R}(\hat{\Omega}) = \mathcal{H} \quad \langle \hat{\Omega} f | \hat{\Omega} g \rangle = \langle f | g \rangle^* \quad (6.11)$$

Un esempio semplice di operatore antilineare può essere fatto su $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$. Possiamo definire $\hat{\Omega}$ antilineare in maniera puntuale come l'operatore di coniugazione complessa:

$$(\hat{\Omega}\psi)(x_1, \dots, x_n) = \psi^*(x_1, \dots, x_n) \quad (6.12)$$

Infatti:

$$\begin{aligned} (\hat{\Omega}(c_1 \phi + c_2 \phi_2))(x_1, \dots, \phi_n) &= (c_1 \phi + c_2 \phi_2)^*(x_1, \dots, \phi_n) = c_1^* \phi_1^*(x_1, \dots, x_n) + c_2^* \phi_2^*(x_1, \dots, x_n) = \\ &= c_1^* (\hat{\Omega}\phi_1)(x_1, \dots, x_n) + c_2^* (\hat{\Omega}\phi_2)(x_1, \dots, x_n) \end{aligned} \quad (6.13)$$

Questo è poi anche antiunitario:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Omega} f | \hat{\Omega} g \rangle &= \int_{\mathbb{R}^n} dx_1 \cdots dx_n (\hat{\Omega} f)^*(x_1, \dots, x_n) (\hat{\Omega} g)(x_1, \dots, x_n) = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} dx_1 \cdots dx_n (f^*)^*(x_1, \dots, x_n) g^*(x_1, \dots, x_n) = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} dx_1 \cdots dx_n f(x_1, \dots, x_n) g^*(x_1, \dots, x_n) = \langle f | g \rangle^* \end{aligned} \quad (6.14)$$

In realtà possiamo definire un operatore di coniugazione in una qualunque base "astratta" tramite:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle \Rightarrow \hat{\Omega} |\psi\rangle = \sum_n c_n^* |\phi_n\rangle \quad (6.15)$$

Come prima possiamo verificare che questo è un operatore antiunitario.

6.1.3 Dimostrazione del Teorema di Wigner

Teorema 7 (Teorema di Wigner). *Sia data una corrispondenza \mathcal{F} uno-ad-uno e suriettiva tra i raggi di uno spazio di Hilbert, che preserva il modulo del prodotto scalare dai raggi.*

$$\mathcal{F}(\{|u\rangle\}) = \{|u'\rangle\} \quad |\langle u|v\rangle| = |\langle u'|v'\rangle| \quad (6.16)$$

È sempre possibile scegliere rappresentanti $|u\rangle, |u'\rangle$ rispettivamente in $\{|u\rangle\}, \{|u'\rangle\}$ tale che esiste un operatore unitario o antiunitario tale che $|u'\rangle = \hat{\Omega}|u\rangle$.

Notiamo che il modulo del prodotto scalare tra due raggi è un'operazione ben definita (ossia il modulo del prodotto scalare tra due vettori rappresentanti), in quanto due vettori appartenenti allo stesso raggio differiscono di una fase, che non è influente sul modulo.

Notiamo inoltre che il teorema vale per trasformazioni ben più generali di semplici spostamenti rigidi dello spazio, ossia include le cosiddette "trasformazioni di simmetria", tutte le trasformazioni che conservano le probabilità di overlap.

Dimostrazione. Sia $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ una base ortonormale per \mathcal{H} . Per ogni $n \in \mathbb{N}$ possiamo scegliere un qualunque rappresentativo $|n'\rangle \in \mathcal{F}(\{|n\rangle\}) = \{|n'\rangle\}$. Il sistema $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ è ancora una base ortonormale per \mathcal{H} . Facilmente dimostriamo che sono ortonormali. Se $i' \neq j'$ allora gli stati sono ortogonali, e se $i' = j'$ gli stati sono normalizzati:

$$|\langle i'|j'\rangle| = |\langle i|j\rangle| = 0 \quad |\langle i'|j'\rangle| = |\langle i|i\rangle| = 1 \quad (6.17)$$

Nel caso in cui \mathcal{H} è finito dimensionale allora il sistema è automaticamente una base in quanto è costituito da un numero pari alla dimensione di \mathcal{H} . Se invece è infinito dimensionale allora dobbiamo dimostrare la completezza. Dimostriamo per assurdo. Supponiamo che $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ sia un sistema ortonormale non completo. Allora esiste un $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ normalizzabile tale che:

$$\langle \psi'|i'\rangle = 0 \quad \forall i \quad (6.18)$$

Ma poi che \mathcal{F} è suriettiva, allora esiste un $|\psi\rangle$ non nullo tale che:

$$\{|\psi'\rangle\} = \mathcal{F}(\{|\psi\rangle\}) \quad (6.19)$$

Tuttavia, per le proprietà di \mathcal{F} :

$$|\langle \psi|i\rangle| = |\langle \psi'|i'\rangle| = 0 \quad \forall i \quad (6.20)$$

Ma questo implica che $|\psi\rangle$ è il vettore nullo in quanto è ortogonale a tutti i vettori della base. Questo è un assurdo in quanto un raggio non può includere il vettore nullo, e dunque $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ è una base ortonormale per \mathcal{H} .

Sia ora un vettore $|u\rangle$ e $|u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\})$. Definiamo:

$$u_n = \langle n|u\rangle \quad u'_n = \langle n'|u'\rangle \quad (6.21)$$

Dimostriamo che possiamo scegliere $|u'\rangle$ (ossia possiamo scegliere una fase) tale che siano verificate una delle seguenti due proposizioni:

$$u'_n = u_n \quad \forall |u\rangle \in \mathcal{H}, \forall n \quad u'_n = u_n^* \quad \forall |u\rangle \in \mathcal{H}, \forall n \quad (6.22)$$

Notiamo che i coefficienti hanno banalmente gli stessi moduli:

$$|u_n| = |\langle n|u\rangle| = |\langle n'|u'\rangle| = |u'_n| \quad \forall n \quad (6.23)$$

Consideriamo i vettori del tipo $(|1\rangle + |n\rangle)/\sqrt{2}$ con $n = 2, 3, \dots$. Vogliamo verificare che:

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |n\rangle)' \right\} \equiv \mathcal{F}\left(\left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |n\rangle) \right\} \right) = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(|1'\rangle + |n'\rangle) \right\} \quad (6.24)$$

Usiamo l'apice fuori la parentesi per indicare che è il raggio associato al vettore dentro la parentesi tramite \mathcal{F} . Dove è comodo ignoriamo il fattore di normalizzazione, che è scontato. Iniziamo col notare che un vettore rappresentativo della classe con apice è perpendicolare a tutti i vettori $|m'\rangle$ con $m \neq 1, n$:

$$\forall m \neq 1, n \quad 0 = |\langle m|(|1\rangle + |n\rangle)| = |\langle m'|(|1'\rangle + |n'\rangle)'| \quad (6.25)$$

Questo indica che il vettore $(|1\rangle + |n\rangle)'$ appartiene al sottospazio generato da $|1'\rangle, |n'\rangle$ ed è dunque una loro combinazione lineare:

$$(|1\rangle + |n\rangle)' = c_1 |1'\rangle + c_n |n'\rangle \quad (6.26)$$

Ma per la normalizzazione questi coefficienti hanno modulo 1:

$$1 = |\langle 1|(|1\rangle + |n\rangle)| = |\langle 1'|(|1\rangle + |n\rangle)'| = |c_1| \quad 1 = |\langle n|(|1\rangle + |n\rangle)| = |\langle n'|(|1\rangle + |n\rangle)'| = |c_n| \quad (6.27)$$

Questo significa che:

$$(|1\rangle + |n\rangle)' = e^{i\phi_1} |1'\rangle + e^{i\phi_n} |n'\rangle \quad (6.28)$$

ossia:

$$\mathcal{F}\left(\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |n\rangle)\right\}\right) = \left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\phi_1} |1'\rangle + e^{i\phi_n} |n'\rangle)\right\} = \left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|1'\rangle + e^{i(\phi_n - \phi_1)} |n'\rangle)\right\} \quad (6.29)$$

Ma per ogni n possiamo fare la scelta:

$$|n'\rangle \rightarrow e^{i(\phi_n - \phi_1)} |n'\rangle \quad (6.30)$$

e dunque troviamo sempre un $|n'\rangle \in \mathcal{F}(\{|n\rangle\})$, per ogni n , tale che:

$$\mathcal{F}\left(\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |n\rangle)\right\}\right) = \left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|1'\rangle + |n'\rangle)\right\} \quad (6.31)$$

come cercavamo. Ricordiamo che questo è valido per ogni $n = 2, 3, \dots$. In notazione alternativa, possiamo sempre fare una scelta di fasi della base $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ associata a $\{|n\rangle\}$ tramite \mathcal{F} in modo tale che:

$$(|1\rangle + |n\rangle)' = |1'\rangle + |n'\rangle \quad (6.32)$$

Consideriamo adesso un vettore "reale" (normalizzato) nella base $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$:

$$|u\rangle = \sum_n u_n |n\rangle \quad u_n^* = u_n \quad (6.33)$$

Sappiamo per la 6.23 che, dato $|u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\})$ allora:

$$|u'\rangle = \sum_n u'_n |n'\rangle \Rightarrow |u'_n| = |u_n| \quad (6.34)$$

Consideriamo i prodotti scalari di $|u\rangle$ con i vettori $|1\rangle + |n\rangle$:

$$|u_1 + u_n| = |\langle 1| + \langle n| |u\rangle| = |\langle 1'| + \langle n'| |u'\rangle| = \left| \langle 1'| + \langle n'| \left(\sum_m u'_m |m'\rangle \right) \right| = |u'_1 + u'_n| \quad (6.35)$$

Possiamo ora scegliere il rappresentante $|u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\})$ in modo tale che u'_1 abbia la stessa fase di u_1 , e in particolare in modo che coincidano:

$$u'_1 = u_1 \quad (6.36)$$

Pertanto l'identità precedente diventa:

$$\begin{aligned} |u_1 + u_n| &= |u_1 + u'_n| \\ u_1^2 + u_n^2 + 2u_1 u_n &= u_1^2 + |u'_n|^2 + u_1 u_n'^* + u_1 u'_n \\ 2u_1 u_n &= 2u_1 \operatorname{Re}\{u'_n\} \\ u_n &= \operatorname{Re}\{u'_n\} \end{aligned} \quad (6.37)$$

Ma questo significa che tutti i coefficienti del vettore "reale" e di un suo opportuno rappresentante coincidono:

$$\operatorname{Im}\{u'_n\} = 0 \Rightarrow u'_n = u_n \quad (6.38)$$

Notiamo inoltre che questo è valido solo se $u_1 \neq 0$ (altrimenti l'identità $2u_1 u_n = 2u_1 \operatorname{Re}\{u'_n\}$ è banalmente verificata). In tal caso possiamo scegliere il primo coefficiente p-esimo non nullo e porre $u'_p = u_p$ e considerare i vettori $|p\rangle + |n\rangle$, ripetendo la dimostrazione.

Dobbiamo adesso generalizzare la dimostrazione ad un vettore qualunque, non solo ad uno "reale". Costruiamo i vettori $\psi^{j,k}$ come segue:

$$|\psi^{j,k}\rangle = |j\rangle + |j+1\rangle + \dots + |j+k\rangle = \sum_{s=0}^k |j+s\rangle \quad (6.39)$$

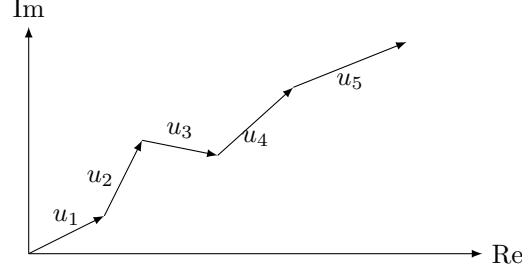
I coefficienti di questi vettori sono reali e dunque vale ancora l'identità precedente, ossia si può scegliere una base associata a quella data tramite \mathcal{F} in modo tale che i coefficienti di un vettore rappresentativo immagine opportuno siano gli stessi:

$$|\psi^{j,k}\rangle = |j\rangle + \dots + |j+k\rangle \xrightarrow{\mathcal{F}} |(\psi^{j,k})'\rangle = |j'\rangle + \dots + |j+k'\rangle \quad (6.40)$$

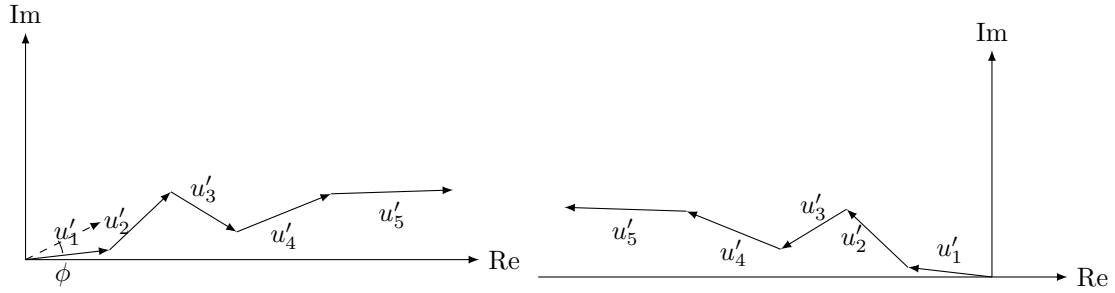
Dato un $|u\rangle$ generico, allora $\forall j, k$:

$$\begin{aligned} |\langle \psi^{j,k} | u \rangle| &= |(\psi^{j,k})'| \\ \left| \sum_{s=0}^k u_{j+s} \right| &= \left| \sum_{s=0}^k u'_{j+s} \right| \end{aligned} \quad (6.41)$$

Questa identità ha un semplice interpretazione geometrica. Consideriamo infatti la poligonale Γ nel piano complesso costituita dai coefficienti u_1, u_2, \dots e la poligonale Γ' costituita da u'_1, u'_2, \dots , entrambe uscenti dall'origine. L'identità appena scritta afferma che la distanza di due vertici generici corrispondenti di queste due poligoni è la stessa.



Siccome questo è vero per ogni tratto delle due curve, allora sono possibili solo due casi: Γ' è distinta da Γ per una rotazione nel piano complesso $u'_n = e^{i\phi} u_n$; Γ' si ottiene da Γ applicando prima una riflessione rispetto all'asse reale e poi una rotazione $u'_n = e^{i\phi} u_n^*$.



Nel primo caso possiamo scegliere il rappresentante $|u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\})$ tale che $u'_1 = u_1$, che implica $\phi = 0$ e dunque $u'_n = u_n, \forall n$. Nel secondo caso possiamo scegliere il rappresentante con $u'_1 = u_1^*$, da cui $\phi = 0$ e $u'_n = u_n^*, \forall n$. Abbiamo dunque dimostrato che per un certo $|u\rangle$ possiamo scegliere $|u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\})$ tale che:

$$u'_n = u_n, \forall n \quad \vee \quad u'_n = u_n^*, \forall n \quad (6.42)$$

Dobbiamo adesso dimostrare che se questo è valido per un certo $|u\rangle$ allora è valido anche per ogni $|u\rangle \in \mathcal{H}$. □

6.2 Lezione 31

6.2.1 Fine dimostrazione Teorema di Wigner

Continuiamo la dimostrazione del Teorema di Wigner.

Dimostrazione. Ricordiamo che finora abbiamo dimostrato che data una base ortonormale $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ e un vettore $|u\rangle = \sum_n u_n |n\rangle$ normalizzato, allora è possibile scegliere una base $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ di rappresentanti dei raggi $\mathcal{F}(\{|n\rangle\})$ e un rappresentante $|u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\})$ tale che valga una delle seguenti:

$$u'_n = u_n \quad \vee \quad u'_n = u_n^* \quad (6.43)$$

Vogliamo adesso dimostrare che se questo è valido per un dato $|u\rangle$ allora è valido anche per ogni altro vettore (normalizzabile).

Siano ora j, k due indici, consideriamo il seguente vettore:

$$|v\rangle = |j\rangle + e^{i\alpha} |k\rangle \quad \alpha \neq 0, k \quad (6.44)$$

Possiamo dunque scegliere un rappresentante $|v'\rangle$ del raggio ottenuto tramite \mathcal{F} del raggio di $|v\rangle$ come segue:

$$|v'\rangle = |j'\rangle + e^{i\alpha} |k'\rangle \quad (6.45)$$

Consideriamo poi un vettore $|u\rangle$ tale che $u_j, u_k \neq 0$ ed hanno una fase relativa γ diversa da 0 e π , ossia:

$$u_j \neq 0 \quad u_k \neq 0 \quad u_j u_k^* = |u_j u_k| e^{i\gamma} \quad \gamma \neq 0, \pi \quad (6.46)$$

Vogliamo dimostrare che se $|v\rangle$ sta nel primo caso, anche $|u\rangle$ starà nel primo caso. Supponiamo per assurdo che stia nel secondo caso:

$$u'_n = u_n^* \quad (6.47)$$

Consideriamo i prodotti scalari tra $|u\rangle$ e $|v\rangle$ e i loro corrispondenti tramite \mathcal{F} opportunamente scelti:

$$\langle v|u\rangle = u_j + e^{-i\alpha} u_k \quad \langle v'|v'\rangle = u_j^* + e^{-i\alpha} u_k^* \quad (6.48)$$

Per le proprietà di \mathcal{F} deve valere:

$$\begin{aligned} |\langle v|u\rangle|^2 &= |\langle v'|u'\rangle| \\ |u_j + e^{-i\alpha} u_k|^2 &= |u_j^* + e^{-i\alpha} u_k^*| \\ u_j u_k^* e^{i\alpha} + u_j^* u_k e^{-i\alpha} &= u_j^* u_k e^{i\alpha} + u_j u_k^* e^{-i\alpha} \\ |u_j u_k| e^{i(\alpha+\gamma)} + |u_j u_k| e^{-i(\alpha+\gamma)} &= |u_j u_k| e^{i(\alpha-\gamma)} + |u_j u_k| e^{-i(\alpha-\gamma)} \\ \cos(\alpha + \gamma) &= \cos(\alpha - \gamma) \end{aligned} \quad (6.49)$$

Ma questa condizione è soddisfatta se e solo se sono soddisfatti uno dei seguenti casi:

$$\begin{cases} \alpha + \gamma = \alpha - \gamma + 2m\pi \\ \alpha + \gamma = -\alpha + \gamma + 2m\pi \end{cases} \iff \begin{cases} \gamma = m\pi \\ \alpha = m\pi \end{cases} \quad (6.50)$$

Ma questi sono entrambi falsi per ipotesi e dunque abbiamo raggiunto l'assurdo.

Per dimostrare che questo sia valido per ogni vettore $|u\rangle$ allora dobbiamo considerare anche i seguenti casi speciali:

1. $u_j = u_k = 0$;
2. $u_j = 0, u_k \neq 0$;
3. $u_n \neq 0, u_k = 0$;
4. $u_j = \pm u_k$.

Escludiamo poi i casi in cui solo un coefficiente è non nullo in quanto è poi equivalente ad un elemento della base.

Per brevità, ci limitiamo a considerare il primo caso. Esistono dunque $p, q \neq j, k$ tali che $u_p \neq 0, u_q \neq 0$ con fase relativa γ diversa da 0, π .

Consideriamo dunque il vettore $|w\rangle = \sum_n w_n |n\rangle$ tale che:

$$w_n = \begin{cases} w_j = w_p = 1 \\ w_k = e^{i\beta} w_q = e^{i\alpha} \\ 0 \end{cases} \quad \beta, \alpha \neq 0, \pi \quad n \leq j, k, q, p \quad (6.51)$$

Pertanto $|w\rangle$ rientra nel caso appena dimostrato e dunque rientra anche nel caso (a), ossia possiamo trovare $|w'\rangle$ tale che:

$$|w'\rangle = \sum_n w_n |n'\rangle \quad (6.52)$$

Questo vettore ricopre il ruolo di $|v\rangle$ per il caso precedente, in quanto lo usiamo per dimostrare che l'attuale $|u\rangle$ rientra ancora nel caso (a). Supponiamo per assurdo che siamo nel caso (b).

Calcoliamo i prodotti scalari seguenti:

$$\begin{aligned} \langle w|u\rangle &= u_p + e^{-i\alpha} u_q \\ \langle w'|u'\rangle &= u_p^* + e^{-i\alpha} u_q^* \end{aligned} \quad (6.53)$$

Per le proprietà di \mathcal{F} i moduli devono coincidere e come prima questo porta ad un assurdo, come cercavamo.

Dimostrando anche gli altri casi avremmo dimostrato che se il caso (a) vale per un vettore allora vale anche per tutti gli altri. Analogamente poi si può dimostrare il caso (b) supponendo che $|v\rangle$ sia in questo caso.

Abbiamo trovato dunque che è possibile definire un operatore invertibile tra vettori e rappresentanti dei raggi ottenuti da questi vettori tramite \mathcal{F} .

$$\forall |u\rangle \in \mathcal{H} \quad \hat{\Omega}|u\rangle \equiv |u'\rangle \quad (6.54)$$

Il caso (a) equivale a richiedere che questo operatore sia unitario, che si verifica banalmente:

$$\hat{\Omega}|u\rangle = \sum_n u_n |n'\rangle \Rightarrow \langle v|u\rangle = \langle v'|v'\rangle = \langle \hat{\Omega}v|\hat{\Omega}u\rangle \quad (6.55)$$

Nel caso (b) invece questo operatore è antiunitario:

$$\hat{\Omega}|u\rangle = \sum_n u_n^* |n'\rangle \Rightarrow \langle v|u\rangle^* = \langle v'|u'\rangle = \langle \hat{\Omega}v|\hat{\Omega}u\rangle \quad (6.56)$$

Come volevasi dimostrare. □

Notiamo che l'operatore $\hat{\Omega}$ è definito a meno di un fattore di fase.

6.2.2 Isometrie dello Spazio Euclideo

Ci chiediamo adesso da un punto di vista pratico come stabilire se l'operatore corrispondente ad una trasformazione di rototraslazione è unitario o antiunitario e in tal caso come trovare la sua espressione. Chiaramente i dettagli di questo operatore dovremo esplicitare la trasformazione dello spazio. Discutiamo di queste trasformazioni, che chiamiamo anche spostamenti rigidi, più in dettaglio.

Ricordiamo che un sistema di riferimento è definito da un punto O e una terna di vettori ortonormali. Una rototraslazione sul sistema consiste in una traslazione \vec{a} di $O \rightarrow O'$ e una rotazione degli assi, che è descritta da una matrice ortogonale:

$$e'_j = e_i R_{ji} \quad RR^T = R^T R = 1 \quad (6.57)$$

Possiamo dunque identificare le matrici di rotazioni con le matrici ortogonali $R_{\vec{\omega}} = R$ con $0 \leq |\vec{\omega}| \leq \pi$.

Ci conviene associare allo spostamento una trasformazione lineare non omogenea. Sia un punto $P = x^i e_i$ nel sistema di riferimento O . La rototraslazione associa a P un punto $P' = x'^i e'_i$ nel sistema O' tramite una certa trasformazione, le cui coordinate sono date da una trasformazione lineare non omogenea:

$$x'^i = R_{ij}x^j + a^i \quad (6.58)$$

Ci conviene dunque considerare il problema lo spazio affine, analogo ad uno spazio vettoriale:

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \vec{y}' = \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.59)$$

dove:

$$y'^i = A_{ij}y^j \quad A = \begin{pmatrix} R & \vec{a} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.60)$$

Gli spostamenti rigidi formano un gruppo di Lie, che chiamiamo $E(3)$ ². Ricordiamo la definizione di gruppo G come un insieme su cui è definita un operazione associativa, ammette l'identità e rispetto a cui ogni elemento ammette inverso:

$$G \times G \mapsto G \quad g'' \cdot (g' \cdot g) = (g'' \cdot g') \cdot g \quad \exists e \in G: ge = eg \quad \forall g \in G \exists g^{-1} \in G: gg^{-1} = g^{-1}g = e \quad (6.61)$$

Un gruppo si dice gruppo di Lie se è una varietà differenziabile rispetto al cui l'operazione di prodotto è differenziabile.

Verifichiamo che $E(3)$ è effettivamente un gruppo. Indichiamo in maniera astratta un elemento di questo insieme come la coppia $g = (R, \vec{a})$. Costruiamo adesso l'operazione di prodotto, che troviamo in maniera naturale. Siano infatti due spostamento rigido g_1, g_2 , l'applicazione successive di queste trasformazioni è ancora uno spostamento rigido:

$$\begin{aligned} \vec{x} &\xrightarrow{g_1} \vec{x}' = R_1 \cdot \vec{x} + \vec{a}_1 \\ \vec{x}' &\xrightarrow{g_2} \vec{x}'' = R_2 \cdot \vec{x}' + \vec{a}_2 = R_2 \cdot (R_1 \cdot \vec{x} + \vec{a}_1) + \vec{a}_2 = R_2 \cdot R_1 \cdot \vec{x} + R_2 \cdot \vec{a}_1 + \vec{a}_2 = R_3 \cdot \vec{x} + \vec{a}_3 \end{aligned} \quad (6.62)$$

²In realtà $E(3)$ include anche le riflessioni, ma la discussione continua a valere in quanto escludendo le riflessioni le trasformazioni rimanenti sono ancora un gruppo e in particolare un sottogruppo di $E(3)$, detto gruppo euclideo speciale $SE(3)$, che è effettivamente quello che stiamo considerando.

da cui:

$$g_3 = (R_3, \vec{a}_3) = (R_2 \cdot R_1, \vec{a}_2 + R_2 \cdot \vec{a}_1) \equiv g_2 \cdot g_1 \quad (6.63)$$

Definito in questo modo in realtà è banale stabilire che con questa operazione gli spostamenti rigidi formano un gruppo in quanto le matrici formano un gruppo con il prodotto riga per colonna e i vettori formano un gruppo con l'addizione.

Quest'operazione è associativa:

$$\begin{aligned} g_3 \cdot (g_2 \cdot g_1) &= (R_3, \vec{a}_3) \cdot (R_2 \cdot R_1, \vec{a}_2 + R_2 \cdot \vec{a}_1) = (R_3 \cdot (R_2 \cdot R_1), \vec{a}_3 + R_3 \cdot (\vec{a}_2 + R_2 \cdot \vec{a}_1)) = \\ &= ((R_3 \cdot R_2) \cdot R_1, (\vec{a}_3 + R_3 \cdot \vec{a}_2) + (R_3 \cdot R_2) \cdot \vec{a}_1) = (g_3 \cdot g_2) \cdot g_1 \end{aligned} \quad (6.64)$$

L'elemento identità è dato banalmente dallo spostamento che ha per rotazione la matrice identità e traslazione nulla $e = (1, 0)$:

$$\begin{cases} g \cdot e = (R, \vec{a}) \cdot (1, 0) = (R \cdot 1, \vec{a} + 0) = (R, \vec{a}) = g \\ e \cdot g = (1, 0) \cdot (R, \vec{a}) = (1 \cdot R, 0 + \vec{a}) = (R, \vec{a}) = g \end{cases} \quad (6.65)$$

Dimostriamo infine che ogni elemento ammette inverso. Infatti se lo definiamo come segue:

$$g^{-1} = (R^{-1}, -R^{-1} \cdot \vec{a}) \Rightarrow g^{-1}g = (R^{-1}R, -R^{-1} \cdot \vec{a} + R^{-1} \cdot \vec{a}) = (1, 0) = e \quad (6.66)$$

Notiamo poi che le rotazioni e le traslazioni formano un sottogruppo (sottoinsieme che forma un gruppo rispetto alla stessa operazione ristretta al sottoinsieme), che indichiamo come segue:

$$SO(3) = \{g \in E(3) : \vec{a} = 0\} = \{R \equiv (R, 0) : RR^T = R^T R = 1\} \quad T_3 = \{g \in E(3) : R = 1\} = \{t_{\vec{a}} \equiv (1, \vec{a}) : \vec{a} \in \mathbb{R}^3\} \quad (6.67)$$

Usando la notazione $t_{\vec{a}} \in T_3, R \in SO(3)$ allora possiamo dimostrare che ogni elemento di $E(3)$ si può scrivere come il prodotto di una traslazione per una rotazione:

$$t_{\vec{a}} \cdot R = (1, \vec{a}) \cdot (R, 0) = (1 \cdot R, \vec{a} - 1 \cdot 0) = (R, \vec{a}) \quad (6.68)$$

6.2.3 Unitarietà degli Operatori relativi a Rototraslazioni

Abbiamo adesso gli strumenti necessari a dimostrare che per un qualunque spostamento rigido l'operatore $\hat{\Omega}(g)$, $g \in E(3)$ che effettua lo spostamento dei vettori di stato è unitario. Notiamo che è ben definita l'operazione di "radice" sugli elementi del gruppo:

$$R_{\vec{\omega}} = R_{\vec{\omega}/2} \cdot R_{\vec{\omega}/2} \quad t_{\vec{a}} \cdot t_{\vec{a}/2} \quad \forall g = t_{\vec{a}} \cdot R_{\vec{\omega}} \quad (6.69)$$

Chiamiamo **rappresentazione** di un gruppo una mappa lineare invertibile S che manda nello spazio lineare di un spazio vettoriale e $\mathcal{L}(V)$ che conserva il prodotto (il prodotto in $\mathcal{L}(V)$ è definito come la composizione):

$$S: G \rightarrow \mathcal{L}(V) \quad S(g_1 \cdot g_2) = S(g_1) \cdot S(g_2) \quad (6.70)$$

Notiamo che per questa proprietà $G' = \mathcal{R}(S)$ è ancora un gruppo.

Una tale mappa lineare è detta invece una rappresentazione proiettiva se conserva il prodotto a meno di una fase:

$$S(g_1 \cdot g_2) = e^{i\phi(g_1, g_2)} S(g_1) \cdot S(g_2) \quad (6.71)$$

Vogliamo adesso dimostrare che la mappa $\hat{\Omega}: g \in E(3) \rightarrow \hat{\Omega}(g) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ è una rappresentazione proiettiva. Vedremo che per le proprietà di $E(3)$ questo implica che $\hat{\Omega}(g)$ è unitario.

Per l'associatività del prodotto, notiamo che da un punto di vista "pratico" se O' ha gli stessi strumenti di O a meno di una rototraslazione g e O'' ha gli stessi strumenti di O' a meno di una traslazione g' allora O'' ha gli stessi strumenti di O a meno di una rototraslazione $g'' = g' \cdot g$:

$$O \xrightarrow{g} O' \xrightarrow{g'} O'' \Rightarrow O \xrightarrow{g''=g' \cdot g} O'' \quad (6.72)$$

Questo implica che:

$$\{|u'\rangle\} = \{\hat{\Omega}(g) |u\rangle\} \quad \{|u''\rangle\} = \{\hat{\Omega}(g') |u'\rangle\} = \{\hat{\Omega}(g'') |u''\rangle\} \Rightarrow \hat{\Omega}(g'') = e^{i\phi(g'', g', g)} \hat{\Omega}(g') \hat{\Omega}(g) \quad (6.73)$$

o equivalentemente che $\hat{\Omega}$ è una rappresentazione proiettiva di $E(3)$ su \mathcal{H} :

$$\hat{\Omega}(g' \cdot g) = e^{i\phi(g', g)} \hat{\Omega}(g') \hat{\Omega}(g) \quad (6.74)$$

Consideriamo il caso di una pura rotazione:

$$\hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) = \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}/2} R_{\vec{\omega}/2}) = e^{i\phi} \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) = e^{i\phi} \hat{\Omega}^2(R_{\vec{\omega}/2}) \quad (6.75)$$

A questo punto basta dimostrare che $\widehat{\Omega}^2$ sulle rotazioni è unitario per dimostrare che anche $\widehat{\Omega}$ è unitario per le rotazioni. Questo è verificato sia che $\widehat{\Omega}$ sia in generale unitario che antiunitario. Nel caso unitario questo è banale. Verifichiamolo nel caso antiunitario:

$$\begin{aligned}\widehat{\Omega}^2(\alpha|u\rangle + \beta|v\rangle) &= \widehat{\Omega}(\alpha^*\widehat{\Omega}|u\rangle + \beta^*\widehat{\Omega}|v\rangle) = \alpha\widehat{\Omega}^2|u\rangle + \beta\widehat{\Omega}^2|v\rangle \\ \langle\widehat{\Omega}^2v|\widehat{\Omega}^2u\rangle &= \langle\widehat{\Omega}u|\widehat{\Omega}v\rangle = \langle v|u\rangle\end{aligned}\quad (6.76)$$

Pertanto per ogni $\vec{\omega}$ l'operatore $\widehat{\Omega}(R_{\vec{\omega}})$ è un operatore unitario. Vale lo stesso anche per le traslazioni.

$$\widehat{\Omega}(t_{\vec{a}}) = e^{i\phi}\widehat{\Omega}^2(t_{\vec{a}/2}) \quad (6.77)$$

Ma dunque, per ogni $g \in E(3)$, l'operatore è dato dal prodotto di operatori unitario ed è dunque ancora unitario:

$$\widehat{\Omega}(g) = \widehat{\Omega}(t_{\vec{a}}R_{\vec{\omega}}) = e^{i\phi}\widehat{\Omega}(t_{\vec{a}})\widehat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) \quad (6.78)$$

Questo dimostra che gli operatori associati alle rototraslazioni sono una rappresentazione unitaria proiettiva di $E(3)$.

6.2.4 Espressione degli Operatori di Rototraslazione

Per trovare esplicitamente le $\widehat{\Omega}(g)$ abbiamo bisogno di informazioni esplicite sul sistema considerato. Partiamo da considerazioni classiche, che ci conducono a quelle quantistiche tramite quantizzazione. Sia un sistema di N particelle il cui stato è descritto da un punto γ appartenente allo spazio delle fasi Γ . Questo è equivalentemente descritto dalle coordinate e dai momenti:

$$\vec{x}_{\alpha} = \vec{X}_{\alpha}(\gamma) \quad \vec{p}_{\alpha} = \vec{P}_{\alpha}(\gamma) \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (6.79)$$

Nel sistema O' lo stato γ corrisponde allo stato γ' tale che:

$$\begin{cases} \vec{X}_{\alpha}(\gamma') = R \cdot \vec{X}_{\alpha}(\gamma) + \vec{a} \\ \vec{P}_{\alpha}(\gamma') = R \cdot \vec{P}_{\alpha}(\gamma) \end{cases} \quad (6.80)$$

Per il principio di corrispondenza:

$$\begin{aligned}\gamma &\Longleftrightarrow |u\rangle \in \mathcal{H} \\ \vec{X}_{\alpha} &\Longleftrightarrow \widehat{\vec{X}}_{\alpha} \\ \vec{P}_{\alpha} &\Longleftrightarrow \widehat{\vec{P}}_{\alpha} \\ \vec{X}_{\alpha}(\gamma) &\Longleftrightarrow \langle u|\widehat{\vec{X}}_{\alpha}|u\rangle \\ \vec{P}_{\alpha}(\gamma) &\Longleftrightarrow \langle u|\widehat{\vec{P}}_{\alpha}|u\rangle \\ \gamma' &\Longleftrightarrow |u'\rangle = \widehat{\Omega}(g)|u\rangle\end{aligned} \quad (6.81)$$

Pertanto troviamo che gli operatori $\widehat{\Omega}(g)$ devono soddisfare $\forall u, \forall g$ le seguenti identità:

$$\begin{cases} \langle u'|\widehat{\vec{X}}_{\alpha}|u'\rangle = R \cdot \langle u|\widehat{\vec{X}}_{\alpha}|u\rangle + \vec{a} \\ \langle u'|\widehat{\vec{P}}_{\alpha}|u'\rangle = R \cdot \langle u|\widehat{\vec{P}}_{\alpha}|u\rangle \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} \langle u|\widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{\vec{X}}_{\alpha}\widehat{\Omega}(g)|u\rangle = R \cdot \langle u|\widehat{\vec{X}}_{\alpha}|u\rangle + \vec{a} \\ \langle u|\widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{\vec{P}}_{\alpha}\widehat{\Omega}(g)|u\rangle = R \cdot \langle u|\widehat{\vec{P}}_{\alpha}|u\rangle \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} \widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{\vec{X}}_{\alpha}\widehat{\Omega}(g) = R \cdot \widehat{\vec{X}}_{\alpha} + \vec{a} \\ \widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{\vec{P}}_{\alpha}\widehat{\Omega}(g) = R \cdot \widehat{\vec{P}}_{\alpha} \end{cases} \quad (6.82)$$

Se vogliamo tenere conto dello spin allora possiamo supporre che si trasformano come il momento:

$$\begin{cases} \widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{\vec{X}}_{\alpha}\widehat{\Omega}(g) = R \cdot \widehat{\vec{X}}_{\alpha} + \vec{a} \\ \widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{\vec{P}}_{\alpha}\widehat{\Omega}(g) = R \cdot \widehat{\vec{P}}_{\alpha} \\ \widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{\vec{S}}_{\alpha}\widehat{\Omega}(g) = R \cdot \widehat{\vec{S}}_{\alpha} \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} \widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{x}_{\alpha}^i\widehat{\Omega}(g) = R_{ij}\widehat{x}_{\alpha}^j + \vec{a} \\ \widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{p}_{\alpha}^i\widehat{\Omega}(g) = R_{ij}\widehat{p}_{\alpha}^j \\ \widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{S}_{\alpha}^i\widehat{\Omega}(g) = R_{ij}\widehat{S}_{\alpha}^j \end{cases} \quad \alpha = 1, \dots, N; i, j = 1, 2, 3 \quad (6.83)$$

Ma questi operatori formano un sistema irriducibile, ossia i soli operatori che commutano contemporaneamente con questi operatori sono l'identità o multipli dell'identità. Pertanto gli operatori $\widehat{\Omega}(g)$ sono determinati a meno di una fase (che in generale dipende da g). Infatti data una soluzione $\widehat{\Omega}(g)$ e un'altra soluzione $\widehat{\Omega}'(g)$ si trova facilmente che $\widehat{\Omega}'(g)\widehat{\Omega}^{\dagger}(g)$ commuta con tutti e tre e dunque è un multiplo dell'identità:

$$\widehat{\Omega}'(g)\widehat{\Omega}^{\dagger}(g) = c\mathbb{1} \quad (6.84)$$

Ma siccome il prodotto di operatori unitari è unitario allora $|c| = 1$ e dunque differiscono di una fase, come volevasi dimostrare:

$$\widehat{\Omega}'(g) = c\widehat{\Omega}(g) = e^{i\phi}\widehat{\Omega}(g) \quad (6.85)$$

6.3 Lezione 32

6.3.1 Gruppi e Algebre di Lie

Consideriamo ad un gruppo di Lie G come un insieme di matrici a coefficienti complessi definita da un certo numero di parametri reali tramite una certa funzione analitica invertibile A (le funzioni componenti A_{ij} sono analitiche):

$$A: (a^1, \dots, a^n) \in X \mapsto A(a^1, \dots, a^n) \in \mathbb{C}^{M \times M} G = \{g = A(a^1, \dots, a^n): (a^1, \dots, a^n) \in X\} \quad (6.86)$$

dove X è tipicamente un sottoinsieme di \mathbb{C}^n (ad esempio \mathbb{R}^n oppure un intervallo). Siccome A è invertibile allora le a^1, \dots, a^n formano un sistema di coordinate per gli elementi di G , ossia ogni n -upla identifica un elemento di G .

Affinchè G formi un gruppo rispetto all'operazione di prodotto riga per colonna allora è necessario che $\mathcal{R}(A)$ sia un sottogruppo di $\mathbb{C}^{M \times M}$ (ad esempio le matrici invertibili, le matrici reali ortogonali, le matrici hermitiane, e così via). È semplice poi verificare che la struttura differenziabile indotta da A su G è tale che il prodotto riga per colonna è differenziabile e dunque G è effettivamente un gruppo di Lie (le proprietà di gruppo sono permesse).

Non perdiamo generalità supponendo che:

$$A_{ij}(0, \dots, 0) = \delta_{ij} \quad (6.87)$$

Se consideriamo adesso una variazione infinitesima uniforme lungo una certa direzione $\delta a^i = \varepsilon v^i$ allora possiamo fare lo sviluppo di Taylor delle funzioni componenti:

$$A_{ij}(\varepsilon v^1, \dots, \varepsilon v^n) = \delta_{ij} + \varepsilon v^\alpha \left. \frac{\partial A_{ij}}{\partial v^\alpha} \right|_0 = \delta_{ij} + \varepsilon v^\alpha (T_\alpha)_{ij} \quad (6.88)$$

Chiamiamo le matrici T_α i generatori infinitesimali del gruppo di Lie. Se A è invertibile allora possiamo dimostrare che i $T_\alpha, \alpha = 1, \dots, n$ sono linearmente indipendenti. Supponiamo per assurdo che non lo siano, allora esistono coefficienti λ^α non tutti nulli tali che:

$$\lambda^\alpha T_\alpha = 0 \iff A_{ij}(\varepsilon \lambda^\alpha) = \delta_{ij} + \varepsilon \lambda^\alpha T_\alpha = \delta_{ij} = A_{ij}(0) \quad (6.89)$$

Ma siccome A è invertibile allora questo è un assurdo. Pertanto i T_α sono una base per un sottospazio dell'insieme delle matrici.

Notiamo adesso che essendo A una funzione invertibile allora è sempre possibile fare un cambio di coordinate $\vec{\mathbf{b}} = \vec{\mathbf{b}}(\vec{\mathbf{a}})$ (con $\vec{\mathbf{b}}(\vec{\mathbf{0}}) = \vec{\mathbf{0}}$) in modo tale che $A \circ \vec{\mathbf{b}}$ ha ancora le stesse proprietà. Il gruppo è infatti definito "astrattamente", anche se siamo partiti da una particolare espressione di A . Usiamo come al solito la notazione $A_{ij}(b^1, \dots, b^n)$ per indicare la nuova parametrizzazione del gruppo. In questi nuovi parametri i generatori infinitesimali saranno diversi, ma comunque una combinazione lineare dei precedenti:

$$(\tilde{T}_\alpha)_{ij} = \left. \frac{\partial A_{ij}}{\partial b^\alpha} \right|_{\vec{\mathbf{b}}=\vec{\mathbf{0}}} = \left. \frac{\partial A_{ij}}{\partial a^\beta} \right|_{\vec{\mathbf{a}}=\vec{\mathbf{0}}} \left. \frac{\partial a^\beta}{\partial b^\alpha} \right|_{\vec{\mathbf{b}}=\vec{\mathbf{0}}} = (T_\beta)_{ij} m_\alpha^\beta \quad (6.90)$$

Questo significa che ogni elemento dello spazio $\text{span}\{T_\alpha\}$ è ancora un generatore infinitesimale (dovremmo in realtà dimostrare che data una base di questo spazio esiste un corrispondente cambio di coordinate).

Vogliamo adesso dimostrare che il commutatore di due generatori infinitesimale è ancora un elemento dello spazio. Per fare questo dobbiamo sfruttare il legame tra le T_α e gli elementi del gruppo G . Sia $T \in \text{span}\{T_\alpha\}$ e A il corrispondente elemento "infinitesimo" di G :

$$A(\varepsilon \vec{\mathbf{v}}) = \mathbb{1} + \varepsilon T + o(\varepsilon^2) \quad (6.91)$$

L'elemento inverso di A è dato da:

$$A^{-1}(\varepsilon \vec{\mathbf{v}}) = A(-\varepsilon \vec{\mathbf{v}}) \Rightarrow A^{-1}A = (1 - \varepsilon T + o(\varepsilon^2))(1 + \varepsilon T + o(\varepsilon^2)) = 1 + o(\varepsilon^2) \quad (6.92)$$

Definiamo ora il seguente elemento di G (il prodotto è ben definito in G):

$$B(\varepsilon, \varepsilon') = A^{-1}(\varepsilon' \vec{\mathbf{v}}') A^{-1}(\varepsilon \vec{\mathbf{v}}) A(\varepsilon' \vec{\mathbf{v}}') A(\varepsilon \vec{\mathbf{v}}) \quad (6.93)$$

Notiamo che deve valere:

$$B(0, \varepsilon') = B(\varepsilon, 0) = \mathbb{1} \quad B(\varepsilon, \varepsilon') = o(\varepsilon \varepsilon') \quad (6.94)$$

L'ordine più basso di B deve essere infatti $\varepsilon \varepsilon'$ in quanto ogni elemento del prodotto che lo definisce è già di ordine ε o ε' e sono moltiplicati per altri termini di uguale ordine. Sapendo questo, espandiamo il prodotto a questo ordine, ignorando i termini di ordine ε o ε' che già sappiamo debbano semplificarsi:

$$B(\varepsilon, \varepsilon') = (1 - \varepsilon' T')(1 - \varepsilon T)(1 + \varepsilon' T')(1 + \varepsilon T) = 1 + \varepsilon \varepsilon' (T' T - T T') = 1 + \varepsilon \varepsilon' [T', T] \quad (6.95)$$

Ma siccome $B(\varepsilon, \varepsilon') \in G$ allora deve esistere $T'' \in \text{span}\{T_\alpha\}$ tale che:

$$B(\varepsilon, \varepsilon') = 1 + \varepsilon \varepsilon' T'' \quad (6.96)$$

Ma questo è verificato se e solo se:

$$T'' = [T', T] \in \text{span}\{T_\alpha\} \quad (6.97)$$

Questo significa che il commutatore è ancora un elemento dello spazio. Pertanto è ben definita l'operazione di commutatore su questo spazio, che prende il nome di **Algebra di Lie**:

$$\mathcal{L}_G = \text{span}\{T_\alpha\} \quad [,]: \mathcal{L}_G \times \mathcal{L}_G \rightarrow \mathcal{L}_G \quad (6.98)$$

Questa operazione è bilineare, antisimmetrico e soddisfa l'identità di Jacobi, che si verificano banalmente per il commutatore di matrici (definito banalmente).

$$[T + \alpha T', T''] = [T, T''] + \alpha [T', T''] \quad [T, T'] = -[T', T] \quad [[T, T'], T''] + [[T'', T], T'] + [[T', T''], T'] = 0 \quad (6.99)$$

Un'algebra di Lie non deve essere necessariamente un insieme di matrici con il solito commutatore $[T, T'] = TT' - T'T$, che si basa sul prodotto riga per colonna, ma può essere anche un insieme più astratto con un commutatore più astratto.

Questa operazione ci porta a definire anche le **costanti di struttura** come i coefficienti in cui si esprime il commutatore di elementi della base nella base stessa:

$$[T_\alpha, T_\beta] = c_{\alpha\beta}^\gamma T_\gamma \quad (6.100)$$

Chiaramente ci aspettiamo che le costanti di struttura siano dipendenti dalla base scelta e dunque dal sistema di coordinate. Notiamo però che le relazioni di commutazione (e dunque le costanti di struttura) individuano univocamente un'algebra di Lie e dunque diciamo che due gruppi di Lie ammettono la stessa algebra di Lie se i loro generatori soddisfano le stesse relazioni di commutazione.

6.3.2 Mappa Esponenziale

Per quanto detto precedentemente, i generatori infinitesimali (ossia gli elementi dell'algebra di Lie) identificano tutti gli elementi del gruppo di Lie corrispondente che sono vicini all'identità:

$$A(\delta \vec{a}) = A(\varepsilon \vec{v}) = 1 + \varepsilon T \quad T \in \mathcal{L}_G \quad (6.101)$$

Ci chiediamo a questo punto se i generatori infinitesimali "generano" anche ogni elemento del gruppo, non solo quelli vicini all'identità. Per fare questo sia $N \gg 1$ e $\varepsilon = 1/N$. L'elemento $(1 + \varepsilon T)$ è vicino all'identità. Siccome il gruppo è chiuso rispetto al prodotto allora la potenza N -esima di questo è ancora un elemento del gruppo:

$$\underbrace{(1 + \varepsilon T) \cdots (1 + \varepsilon T)}_N = \left(1 + \frac{1}{N} T\right)^N \in G \quad (6.102)$$

Per $N \rightarrow \infty$ vale il limite notevole (ben definito in quanto la mappa esponenziale è ben definita su insiemi di matrici):

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{N} T\right)^N = e^T = e^{v_\alpha T_\alpha} \in G \quad (6.103)$$

Pertanto è ben definita la mappa esponenziale dall'algebra di Lie al gruppo di Lie:

$$e^T: \mathcal{L}_G \rightarrow G \quad (6.104)$$

Si può dimostrare che questa è suriettiva e dunque che la mappa esponenziale permette di ricostruire il gruppo di Lie a partire dalla sua algebra.

Siano due elementi del gruppo, allora le coordinate del prodotto di questi due elementi sono funzione delle coordinate di questi elementi:

$$A(\vec{a})A(\vec{a}') = A(\vec{a}'') \Rightarrow \vec{a}'' = \phi(\vec{a}, \vec{a}') \quad (6.105)$$

Siccome A è analitica allora anche ϕ sarà analitica. Siccome anche la mappa esponenziale è analitica allora:

$$e^T e^{T'} = e^{T''} \quad T = v^\alpha T_\alpha, \quad T' = v'^\alpha T_\alpha, \quad T'' = v''^\alpha T_\alpha \quad (6.106)$$

e dunque $\vec{v}'' = \phi(\vec{v}, \vec{v}')$ è ancora una funzione analitica. Si può dimostrare che la funzione $\phi(\vec{v}, \vec{v}')$ è individuata dalle costanti di struttura del gruppo. Questo significa che in realtà le sole costanti di struttura del gruppo sono sufficienti a ricostruire l'intero gruppo di Lie.

6.3.3 Rappresentazioni

Sia S una certa rappresentazione di G :

$$S: g \in G \rightarrow \hat{L}_g \in \mathcal{L}(V) S(g_1 g_2) = S(g_1) S(g_2) \iff \hat{L}_{g_1 g_2} = \hat{L}_{g_1} \cdot \hat{L}_{g_2} \quad (6.107)$$

L'insieme $G' = \mathcal{R}(S)$ è ancora un gruppo e in particolare se S è differenziabile allora induce una struttura differenziabile su G' , che è dunque un gruppo di Lie, e ammette un'algebra di Lie $\mathcal{L}_{G'}$, i cui elementi indichiamo con \hat{T} (usiamo il cappuccio per indicare elementi della rappresentazione e della sua algebra).

Notiamo che una rappresentazione manda l'identità di un gruppo nell'identità di $\mathcal{L}(V)$:

$$S(\mathbb{1}) \cdot S(g) = S(\mathbb{1} \cdot g) = S(g) = S(g \cdot \mathbb{1}) = S(g) \cdot S(g) \Rightarrow S(\mathbb{1}) = \mathbb{1} \quad (6.108)$$

Siccome S è differenziabile allora dato un elemento g vicino all'identità di G , $S(g)$ è vicino all'identità di G' :

$$g = \mathbb{1} + \varepsilon T \in G, T \in \mathcal{L}_G \Rightarrow S(g) = \mathbb{1} + \varepsilon \hat{T}, \hat{T} \in \mathcal{L}_{G'} \quad (6.109)$$

Pertanto la rappresentazione S induce una corrispondenza tra T e \hat{T} , ossia tra \mathcal{L}_G e $\mathcal{L}_{G'}$. Si può dimostrare in particolare che questa è un omeomorfismo di algebre di Lie, ossia:

$$T \xrightarrow{S} \hat{T}, T' \xrightarrow{S} \hat{T}' \Rightarrow [T, T'] \xrightarrow{S} [\hat{T}, \hat{T}'] \quad (6.110)$$

Pertanto i generatori infinitesimali di una rappresentazione di un gruppo di Lie soddisfano la stessa algebra di Lie dei generatori infinitesimali del gruppo.

6.3.4 Algebra di Lie di $E(3)$

Troviamo adesso l'algebra di Lie del gruppo $E(3)$, dove:

$$g(R_{\vec{\omega}}, \vec{a}) = \begin{pmatrix} R_{\vec{\omega}} & \vec{a} \\ \vec{0} & 1 \end{pmatrix} \quad R R^T = R^T R = \mathbb{1} \quad (6.111)$$

Per trovare l'algebra di Lie dobbiamo dunque esplicitare una rotazione infinitesima (la traslazione è banale):

$$\hat{\mathbf{e}}'_i = \hat{\mathbf{e}}_i + \delta \vec{\omega} \wedge \hat{\mathbf{e}}_i = \hat{\mathbf{e}}_i + \delta \omega^k \hat{\mathbf{e}}_k \wedge \hat{\mathbf{e}}_i = \hat{\mathbf{e}}_i + \varepsilon_{kij} \delta \omega^k \hat{\mathbf{e}}_j = (\delta_{ij} + \delta \omega^k \varepsilon_{kij}) \hat{\mathbf{e}}_j \quad (6.112)$$

Ricaviamo dunque:

$$R_{\delta \vec{\omega}} = \mathbb{1} + \delta \omega^k I_k \quad (I_k)_{ij} = \varepsilon_{kij} \quad (6.113)$$

Infine troviamo il generico elemento di $E(3)$ vicino all'identità (usiamo la rappresentazione di g come matrice 4×4 , con le solite operazioni di addizione e prodotto esterno):

$$g(R_{\delta \vec{\omega}}, \delta \vec{a}) = \begin{pmatrix} \mathbb{1} + \delta \omega^k I_k & \delta \vec{a} \\ \vec{0} & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1} + \delta \omega^k \tilde{I}_k + \delta a^k \pi_k \quad (6.114)$$

dove:

$$\tilde{I}_k = \begin{pmatrix} I_k & \vec{0} \\ \vec{0} & 0 \end{pmatrix} \quad \pi_k = \begin{pmatrix} 0 & \delta_{kj} \hat{\mathbf{e}}_j \\ \vec{0} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.115)$$

Troviamo dunque che \tilde{I}_k, π_k con $k = 1, 2, 3$ sono una base per i generatori infinitesimali di $E(3)$. Si può verificare che questi soddisfano la seguente algebra:

$$[\tilde{I}_k, \tilde{I}_l] = \varepsilon_{klm} \tilde{I}_m \quad [\pi_\alpha, \pi_\beta] = 0 \quad [\tilde{I}_k, \pi_l] = \varepsilon_{klm} \pi_m \quad (6.116)$$

Questi sono sei in totale, come già ci potevamo aspettare dal fatto che un sistema di coordinate per $E(3)$ è dato da $(\vec{\omega}, \vec{a})$, che sono elementi di \mathbb{R}^6 .

Usando la mappa esponenziale possiamo adesso scrivere ogni elemento del gruppo $E(3)$ a partire da sei parametri e sei generatori trovati:

$$R_{\vec{\omega}} = e^{\vec{\omega} \cdot \tilde{I}} \quad t_{\vec{a}} = e^{\vec{a} \cdot \vec{\pi}} \Rightarrow g(R, \vec{a}) = t_{\vec{a}} R_{\vec{\omega}} = e^{\vec{a} \cdot \vec{\pi}} e^{\vec{\omega} \cdot \tilde{I}} \quad (6.117)$$

6.3.5 Generatori Infinitesimali degli Operatori di Rototraslazione

Ritorniamo adesso al problema di trovare l'espressione degli operatori di traslazione $\widehat{\Omega}(g)$, che ricordiamo sono una rappresentazione proiettiva unitaria di $E(3)$:

$$\widehat{\Omega}(g_1 g_2) = e^{i\phi(g_1, g_2)} \widehat{\Omega}(g_1) \widehat{\Omega}(g_2) \quad (6.118)$$

Sia una rototraslazione infinitesima:

$$g = t_{\delta\vec{a}} R_{\delta\vec{\omega}} = 1 + \delta\omega^k \tilde{I}_k + \delta a^k \pi_k = 1 + \delta\lambda^\lambda T_\lambda \quad (6.119)$$

Siccome $\widehat{\Omega}$ è una rappresentazione allora il corrispondente operatore è vicino all'unità. Scegliamo in particolare i generatori di una forma particolare:

$$\widehat{\Omega}(g) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k - \frac{i}{\hbar} \delta a^k \widehat{P}_k \quad (6.120)$$

dove $\widehat{J}_k, \widehat{P}_k$ sono operatori su \mathcal{H} . Affinchè l'operatore "infinitesimo" sia unitario deve risultare:

$$\begin{aligned} \widehat{\Omega}(g) \widehat{\Omega}^\dagger(g) &= \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k - \frac{i}{\hbar} \delta a^k \widehat{P}_k \right) \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k^\dagger + \frac{i}{\hbar} \delta a^k \widehat{P}_k^\dagger \right) = \\ &= \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k (\widehat{J}_k^\dagger - \widehat{J}_k) + \frac{i}{\hbar} \delta a^k (\widehat{P}_k^\dagger - \widehat{P}_k) + o(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (6.121)$$

Ma questo prodotto coincide con l'identità se e solo se:

$$\widehat{J}_k = \widehat{J}_k^\dagger \quad \widehat{P}_k = \widehat{P}_k^\dagger \quad (6.122)$$

Questo significa che i coefficienti $-i$ sono scelti in modo tale che i "nuovi generatori" siano autoaggiunti, mentre fattore \hbar è introdotto solo per ragioni dimensionali, che saranno chiare quando identifichiamo questi operatori con il momento angolare e l'impulso.

Siccome $\widehat{\Omega}$ è una rappresentazione di $E(3)$ allora i suoi generatori soddisfano la stessa algebra di Lie:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{i}{\hbar} \widehat{J}_k, -\frac{i}{\hbar} \widehat{J}_l \right] &= -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_{klm} \widehat{J}_m \iff [\widehat{J}_k, \widehat{J}_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} \widehat{J}_m \\ \left[-\frac{i}{\hbar} \widehat{P}_k, -\frac{i}{\hbar} \widehat{P}_l \right] &= 0 \iff [\widehat{P}_k, \widehat{P}_l] = 0 \\ \left[-\frac{i}{\hbar} \widehat{J}_k, -\frac{i}{\hbar} \widehat{P}_l \right] &= -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_{klm} \widehat{P}_m \iff [\widehat{J}_k, \widehat{P}_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} \widehat{P}_m \end{aligned} \quad (6.123)$$

Definiamo dunque le componenti del momento angolare di un sistema come le $(\widehat{J}_1, \widehat{J}_2, \widehat{J}_3)$, e le componenti dell'impulso del sistema come le $(\widehat{P}_1, \widehat{P}_2, \widehat{P}_3)$. Rispettivamente diciamo dunque che le componenti del momento angolare sono i generatori infinitesimali delle rotazioni del sistema attorno ai rispettivi assi, mentre le componenti dell'impulso sono i generatori infinitesimali delle traslazioni del sistema lungo i rispettivi assi.

6.3.6 Rototraslazioni finite di Sistemi Quantistici

Noti i generatori infinitesimali $\widehat{J}_k, \widehat{P}_k$ possiamo dunque scrivere le rototraslazioni finite degli stati quantistici:

$$\widehat{\Omega}(g) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \widehat{\vec{P}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \widehat{\vec{L}}} \quad (6.124)$$

In realtà ancora non sappiamo come questi operatori agiscono sul sistema specifico in considerazione, nel caso particolare di un sistema di N particelle con spin, in quanto non conosciamo le relazioni tra gli operatori momento angolare totale e impulso totale con gli operatori posizione, impulso e spin delle singole particelle. Ricordiamo che deve valere:

$$\begin{cases} \widehat{\Omega}^\dagger(g) \widehat{x}_\alpha^i \widehat{\Omega}(g) = R_{ij} \widehat{x}_\alpha^j + \vec{a} \\ \widehat{\Omega}^\dagger(g) \widehat{p}_\alpha^i \widehat{\Omega}(g) = R_{ij} \widehat{p}_\alpha^j \\ \widehat{\Omega}^\dagger(g) \widehat{S}_\alpha^i \widehat{\Omega}(g) = R_{ij} \widehat{S}_\alpha^j \end{cases} \quad \alpha = 1, \dots, N; i, j = 1, 2, 3 \quad (6.125)$$

Per trovare questa relazione ci conviene considerare trasformazioni infinitesime, e in particolare consideriamo rotazioni e traslazioni infinitesime separatamente:

$$\begin{aligned} (R_{\delta\vec{\omega}})_{ij} &= \delta_{ij} + \delta\omega^k \varepsilon_{kij} \\ \widehat{\Omega}(R_{\delta\vec{\omega}}) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k \\ \widehat{\Omega}(t_{\delta\vec{a}}) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta a^k \widehat{P}_k \end{aligned} \quad (6.126)$$

Consideriamo prima le rotazioni. Dobbiamo inserire l'espressione di $\widehat{\Omega}(R_{\delta\vec{\omega}})$ nelle identità che deve soddisfare con $\widehat{x}_i, \widehat{p}_i, \widehat{S}_i$:

$$\begin{cases} \widehat{\Omega}^\dagger(g)\widehat{x}_\alpha^i\widehat{\Omega}(g) = R_{ij}\widehat{x}_\alpha^j + \vec{a} \\ \widehat{\Omega}^\dagger(g)\widehat{p}_\alpha^i\widehat{\Omega}(g) = R_{ij}\widehat{p}_\alpha^j \\ \widehat{\Omega}^\dagger(g)\widehat{S}_\alpha^i\widehat{\Omega}(g) = R_{ij}\widehat{S}_\alpha^j \end{cases} \quad \alpha = 1, \dots, N; i, j = 1, 2, 3 \quad (6.127)$$

Per la prima:

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\omega^k\widehat{J}_k\right)\widehat{x}_\alpha^i\left(1 + \frac{i}{\hbar}\delta\omega^k\widehat{J}_k\right) &= \widehat{x}_\alpha^i + \delta\omega^k\varepsilon_{kij}\widehat{x}_\alpha^j \\ \widehat{x}_\alpha^i + \frac{i}{\hbar}\delta\omega^k\left[\widehat{J}_k, \widehat{x}_\alpha^i\right] &= \widehat{x}_\alpha^i + \delta\omega^k\varepsilon_{kij}\widehat{x}_\alpha^j \\ \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{J}_k, \widehat{x}_\alpha^i\right] &= \varepsilon_{kij}\widehat{x}_\alpha^j \end{aligned} \quad (6.128)$$

Per gli altri casi troviamo lo stesso:

$$\begin{cases} \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{J}_k, \widehat{x}_\alpha^i\right] &= \varepsilon_{kij}\widehat{x}_\alpha^j \\ \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{J}_k, \widehat{p}_\alpha^i\right] &= \varepsilon_{kij}\widehat{p}_\alpha^j \\ \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{J}_k, \widehat{S}_\alpha^i\right] &= \varepsilon_{kij}\widehat{S}_\alpha^j \end{cases} \quad (6.129)$$

Questo determina gli operatori \widehat{J}_k a meno di una costante, che può essere inserita nell'operatore unitario come una fase che può essere ignorata:

$$\widehat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega^k(\widehat{J}_k + c_k)} = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega^k\widehat{J}_k} e^{-\frac{i}{\hbar}\omega^k c_k} \cong e^{-\frac{i}{\hbar}\omega^k\widehat{J}_k} \quad (6.130)$$

Si può verificare che una soluzione, che è l'unica che non contiene termini proporzionali all'identità, è data dalla somma dei momenti angolari orbitali e dei momenti angolari di spin delle singole particelle:

$$\widehat{J}_k = \sum_\alpha \widehat{L}_k^\alpha + \widehat{S}_k^\alpha = \varepsilon_{kij} \sum_\alpha \widehat{x}_\alpha^i \widehat{x}_\alpha^j + \sum_\alpha \widehat{S}_k^\alpha \quad (6.131)$$

Consideriamo le traslazione infinitesima $\widehat{\Omega}(t_{\delta\vec{a}})$, che ci conduce invece a:

$$\begin{cases} \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{J}_k, \widehat{x}_\alpha^i\right] &= \delta_{ki} \\ \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{J}_k, \widehat{p}_\alpha^i\right] &= 0 \\ \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{J}_k, \widehat{S}_\alpha^i\right] &= 0 \end{cases} \quad (6.132)$$

La soluzione che scegliamo è la somma degli impulsi delle singole particelle:

$$\widehat{P}_k = \sum_\alpha \widehat{p}_k^\alpha \quad (6.133)$$

6.3.7 Natura della Rappresentazione di E(3) per una Singola Particella con Spin

Ci chiediamo adesso se la rappresentazione $\widehat{\Omega}(g)$ di $E(3)$ se è una vera e propria rappresentazione oppure è solo una rappresentazione proiettiva, e in tal caso qual'è la sua forma. Troveremo che in realtà questo dipende dal numero di particelle a spin semintero (fermioni) che appartengono al sistema.

Iniziamo a considerare il caso di una singola particella a spin s . Pertanto i generatori di traslazioni e rotazioni sono dati da:

$$\widehat{\vec{P}} = \widehat{\vec{p}} \quad \widehat{\vec{J}} = \widehat{\vec{L}} + \widehat{\vec{S}} \quad \left[\widehat{L}_k, \widehat{S}_l\right] = 0 \quad (6.134)$$

Possiamo dunque scrivere una rototraslazione come fattorizzata:

$$\widehat{\Omega}(t_{\vec{a}}R_{\vec{\omega}}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\widehat{\vec{P}}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\widehat{\vec{L}}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\widehat{\vec{S}}} \quad (6.135)$$

Ci poniamo nella rappresentazione delle configurazioni:

$$\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s+1} \quad (6.136)$$

da cui gli stati fattorizzabili (con stati di spin nella base di $\widehat{S}^2, \widehat{S}_z$) e gli stati più generali:

$$|\psi\rangle = \psi(\vec{x}) \otimes |m_s\rangle \quad |\psi\rangle = \sum_{m_s} \psi_{m_s}(\vec{x}) |m_s\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \vdots \\ \psi_{2s+1}(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad m_s = -s, \dots, s \quad (6.137)$$

Calcoliamo l'azione dell'operatore di rototraslazione su uno stato fattorizzabile:

$$\widehat{\Omega}(t_{\vec{a}} R_{\vec{\omega}}) = \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \widehat{\mathbf{p}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \widehat{\mathbf{L}}} \right) (\vec{x}) \otimes \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \widehat{\mathbf{S}}} |m_s\rangle \right) \quad (6.138)$$

In generale l'azione dell'operatore di rotazione di spin è data da:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \widehat{\mathbf{S}}} |m_s\rangle = \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}(\vec{\omega}) |m'_s\rangle \quad D_{m'_s m_s}(\vec{\omega}) = \langle m'_s | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \widehat{\mathbf{S}}} |m_s\rangle \quad (6.139)$$

Consideriamo il caso speciale di una rotazione attorno all'asse z , in modo che l'operatore di rotazione di spin è diagonale nella base scelta:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \omega_z \widehat{S}_z} |m_s\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \omega_z (\hbar m_s)} |m_s\rangle = e^{-i \omega_z m_s} |m_s\rangle \quad (6.140)$$

Chiaramente $R_{2\pi \hat{z}} = \mathbb{1}$ in quanto una rotazione dello spazio di 2π equivale ad una rotazione nulla. Notiamo tuttavia che se s è semintero allora m_s è semintero e $2\pi m_s$ è un multiplo di π , se invece s è intero allora $2\pi m_s$ è un multiplo di 2π e dunque:

$$e^{-i 2\pi m_s} = e^{-i \pi (2m_s)} = (-1)^{2m_s} = \begin{cases} (-1)^{2m_s} & s \text{ semintero} \\ 1 & s \text{ intero} \end{cases} \quad (6.141)$$

Pertanto se la particella ha spin intero allora una rotazione dello spin 2π effettivamente coincide con l'identità, mentre per una particella a spin semintero questo dipende dal preciso stato di spin in cui si trova. È comunque vero che in entrambi i casi una rotazione di 4π lascia lo stato invariato.

Questo significa che gli operatori di rotazione di spin $\widehat{\Omega}_{spin}(R_{\vec{\omega}}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \widehat{\mathbf{S}}}$ sono una rappresentazione di $SO(3)$ se s è intero, ma una rappresentazione proiettiva di $SO(3)$ se s è semintero.

Nella prossima lezione vedremo come gli operatori relativi alla parte configurazionale formano una rappresentazione effettiva e dunque solo la parte di spin detta la natura della rappresentazione

6.4 Lezione 33

6.4.1 Parte Configurazionale della Rappresentazione di $E(3)$ per una Particella con Spin

Come premesso, verifichiamo adesso che la parte configurazionale degli operatori di rototraslazione è una rappresentazione (non proiettiva). Affinchè questa sia una rappresentazione di $E(3)$ su $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ deve risultare:

$$\langle \vec{x} | \widehat{\Omega}(g'g) | \psi \rangle = \langle \vec{x} | \widehat{\Omega}(g') \widehat{\Omega}(g) | \psi \rangle \quad (6.142)$$

Pertanto dobbiamo prima trovare l'effetto di una rototraslazione nello spazio delle configurazioni.

Una rotazione infinitesima della parte configurazionale assume la seguente forma per un dato stato:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | 1 - \frac{i}{\hbar} \delta \vec{\omega} \cdot \widehat{\mathbf{L}} | \psi \rangle &= \langle \vec{x} | 1 - \delta \vec{\omega} \cdot (\vec{x} \wedge \nabla) | \psi \rangle = \psi(\vec{x}) - \delta \omega^k \varepsilon_{klm} x^l \frac{\partial}{\partial x^m} \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x} - \delta \omega^k I_k \cdot \vec{x}) = \\ &= \psi(R(-\delta \vec{\omega}) \cdot \vec{x}) = \psi(R^{-1}(\delta \vec{\omega}) \cdot \vec{x}) \end{aligned} \quad (6.143)$$

Pertanto per una rotazione finita:

$$\langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \widehat{\mathbf{L}}} | \psi \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \vec{x} | \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta \vec{\omega} \cdot \widehat{\mathbf{L}} \right)^N | \psi \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \psi(R^{-1}(\delta \vec{\omega})^N \cdot \vec{x}) = \psi(R^{-1}(\vec{\omega}) \cdot \vec{x}) \quad (6.144)$$

Analogamente per la traslazione:

$$\langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \widehat{\mathbf{p}}} | \psi \rangle = \psi(\vec{x} - \vec{a}) \quad (6.145)$$

Infine:

$$\langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \widehat{\mathbf{p}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \widehat{\mathbf{L}}} | \psi \rangle = \psi(R^{-1}(\vec{\omega})(\vec{x} - \vec{a})) \quad (6.146)$$

Usiamo questa per verificare quanto detto:

$$\begin{aligned}\langle \vec{x} | \widehat{\Omega}(g') | \psi \rangle &= \psi(R^{-1}(\vec{\omega})R^{-1}(\vec{\omega}')(\vec{x} - \vec{a}' - R(\vec{\omega}') \cdot \vec{a})) \\ \langle \vec{x} | \widehat{\Omega}(g') \widehat{\Omega}(g) | \psi \rangle &= \psi(R^{-1}(\vec{\omega})(R^{-1}(\vec{\omega}')(\vec{x} - \vec{a}) - \vec{a}')) = \psi(R^{-1}(\vec{\omega})R^{-1}(\vec{\omega}')((\vec{x} - R(\vec{\omega}')\vec{a} - \vec{a}')) = \\ &= \psi(R^{-1}(\vec{\omega})R^{-1}(\vec{\omega}')(\vec{x} - \vec{a}' - R(\vec{\omega}') \cdot \vec{a}))\end{aligned}\quad (6.147)$$

Siccome i due membri coincidono allora l'identità è verificata e dunque la parte configurazionale degli operatori di rototraslazione è una rappresentazione di $E(3)$ su $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, come pre-annunciato. Questo dimostra che gli operatori $\widehat{\Omega}(g)$ sono una rappresentazione di $E(3)$ per particelle con spin intero e sono una rappresentazione proiettiva per spin seminteri.

6.4.2 Caso di un Sistema di Particelle

L'estensione al caso con più particelle si trova in maniera naturale notando che le componenti di impulso e momento angolare di diverse particelle commutano tra loro e dunque possiamo scrivere l'operatore di rototraslazione del sistema come un prodotto (ad ordine generico) degli operatori di rototraslazione delle singole particelle:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\widehat{\mathbf{P}}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\widehat{\mathbf{J}}} = \prod_{\alpha=1}^N \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\cdot\widehat{\mathbf{P}}_{\alpha}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\widehat{\mathbf{L}}_{\alpha}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\widehat{\mathbf{S}}_{\alpha}} \right) \quad (6.148)$$

Scrivendo lo spazio di Hilbert totale come:

$$\mathcal{H} = \prod_{\alpha=1}^N \mathcal{H}_{\alpha} = \prod_{\alpha=1}^N (\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s_{\alpha}+1}) \quad (6.149)$$

Pertanto se il sistema possiede un numero pari di particelle a spin semintero allora la rappresentazione di $E(3)$ su $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ è "propria", mentre se contiene un numero dispari allora la rappresentazione è proiettiva.

6.4.3 Invarianza di Grandezze Fisiche

Diciamo che l'hamiltoniana è invariante per una trasformazione g se:

$$\langle \psi | \widehat{\mathcal{H}} | \psi \rangle = \langle \psi' | \widehat{\mathcal{H}} | \psi' \rangle \quad |\psi'\rangle = \widehat{\Omega}(g) |\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \quad (6.150)$$

Questa ci porta come al solito ad un'identità operatoriale:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\Omega}^{\dagger}(g)\widehat{\mathcal{H}}\widehat{\Omega}(g) \iff [\widehat{\mathcal{H}}, \widehat{\Omega}(g)] = 0 \quad \forall g \in E_3 \quad (6.151)$$

Pertanto un hamiltoniana è invariante sotto un gruppo di trasformazioni se commuta con tutti gli operatori della rappresentazione. Considerando una rototraslazione infinitesima troviamo particolare conseguenze.

$$[\widehat{\mathcal{H}}, \widehat{\Omega}(\delta g)] = \left[\widehat{\mathcal{H}}, \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a}\cdot\widehat{\mathbf{P}} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\omega}\cdot\widehat{\mathbf{J}} \right] = -\frac{i}{\hbar}\delta\vec{a}\cdot\left[\widehat{\mathcal{H}}, \widehat{\mathbf{P}}\right] - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\omega}\left[\widehat{\mathcal{H}}, \widehat{\mathbf{J}}\right] \quad (6.152)$$

Ma per l'arbitrarietà di $\delta\vec{a}, \delta\vec{\omega}$ allora una condizione necessaria e sufficiente che l'hamiltoniana sia invariante sotto $E(3)$ è quella per cui l'hamiltoniana commuta con l'impulso totale e il momento angolare totale:

$$[\widehat{\mathcal{H}}, \widehat{P}_i] = [\widehat{\mathcal{H}}, \widehat{J}_i] = 0 \quad (6.153)$$

Abbiamo dunque ricavato che l'impulso totale e il momento angolare totale sono quantità conservate nella dinamica di un sistema invariante per rototraslazioni.

6.4.4 Operatori Tensoriali Irriducibili

Definizione

Consideriamo adesso una classe di operatori che hanno proprietà particolari sotto le rotazioni. Consideriamo dunque gli operatori di rotazione, che sono una rappresentazione proiettiva di $SO(3)$ su \mathcal{H} :

$$\widehat{\Omega}(R_2 R_1) = e^{i\phi} \widehat{\Omega}(R_2) \widehat{\Omega}(R_1) \quad (6.154)$$

Sia un osservabile \hat{A} del sistema misurato dall'osservatore O ed \hat{A}' il corrispondente osservabile visto da O' ruotato rispetto ad O . Sappiamo che gli osservatori sono equivalenti, ossia:

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi' | \hat{A}' | \psi' \rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (6.155)$$

troviamo la legge di trasformazione per questo osservabile:

$$\hat{A} = \hat{\Omega}^\dagger(R) \hat{A}' \hat{\Omega}(R) \iff \hat{A}' = \hat{\Omega}(R) \hat{A} \hat{\Omega}^\dagger(R) \quad (6.156)$$

Sia una collezione di operatori linearmente indipendenti $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n$ tali che $\hat{A}'_1, \dots, \hat{A}'_n$ sono combinazioni lineari di $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n$:

$$\hat{\Omega}(R) \hat{A}_i \hat{\Omega}^\dagger(R) = M_{ji}(R) \hat{A}_j \quad (6.157)$$

Una tale collezione è detta **operatore tensoriale**.

Rappresentazione di $SO(3)$

Notiamo che le matrici $M(R)$ sono una rappresentazione di $SO(3)$ su $\mathcal{L}(\mathbb{C}^n) = \mathbb{C}^{n \times n}$. Infatti, sia $R_1, R_2 \in SO(3)$ e posto $R_3 = R_2 R_1$, allora:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}(R_3) \hat{A}_i \hat{\Omega}^\dagger(R_3) &= \sum_j M_{ji}(R_3) \hat{A}_j \\ e^{i\phi} \hat{\Omega}(R_2) \hat{\Omega}(R_1) \hat{A}_i e^{-i\phi} \hat{\Omega}^\dagger(R_1) \hat{\Omega}^\dagger(R_2) &= M_{ji}(R_2 R_1) \hat{A}_j \\ \hat{\Omega}(R_2) (\hat{\Omega}(R_1) \hat{A}_i \hat{\Omega}^\dagger(R_1)) \hat{\Omega}^\dagger(R_2) &= M_{ji}(R_2 R_1) \hat{A}_j \\ \hat{\Omega}(R_2) (M_{ki}(R_1) \hat{A}_k) \hat{\Omega}^\dagger(R_2) &= M_{ji}(R_2 R_1) \hat{A}_j \\ M_{ki}(R_1) \hat{\Omega}(R_2) \hat{A}_k \hat{\Omega}^\dagger(R_2) &= M_{ji}(R_2 R_1) \hat{A}_j \\ M_{kj}(R_2) M_{ji}(R_1) \hat{A}_j &= M_{ji}(R_2 R_1) \hat{A}_j \end{aligned} \quad (6.158)$$

Siccome gli \hat{A}_j sono linearmente indipendenti allora questo è soddisfatto se e solo se:

$$M_{kj}(R_2) M_{ji}(R_1) = M_{ji}(R_2 R_1) \iff M(R_2) \cdot M(R_1) = M(R_2 R_1) \quad (6.159)$$

Questo dimostra che $M(R)$ è una rappresentazione di $SO(3)$ su $\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$. Questo significa che dato un operatore tensoriale riusciamo a trovare una rappresentazione di $SO(3)$ propriamente detta anche se la rappresentazione iniziale è proiettiva.

Indichiamo adesso con V^n il sottospazio vettoriale di $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ generato dagli operatori \hat{A}_i :

$$V^n = \left\{ \hat{v} \in \mathcal{H} : \hat{v} = \sum_{i=1}^n c_i \hat{A}_i, \quad c_i \in \mathbb{C} \right\} \quad (6.160)$$

Possiamo dunque parlare di $M(R)$ come una rappresentazione su $V^n \subset \mathcal{L}(\mathcal{H})$, pensando la matrice $M(R)$ come agente su un "vettore" di operatori di dimensione n .

Notiamo che V^n è invariato sotto rotazioni, ossia ogni elemento di V^n è mandato in un altro elemento di V^n :

$$\hat{v}' = \hat{\Omega}(R) \hat{v} \hat{\Omega}^\dagger(R) = \sum_i c_i \hat{\Omega}(R) \hat{A}_i \hat{\Omega}^\dagger(R) = \sum_{ij} c_i \hat{A}_j M_{ji}(R) = \sum_i c'_i \hat{A}_i \in V^n \quad (6.161)$$

Definizione di Operatore Tensoriale Irreducibile

Definiamo ora una rappresentazione **irreducibile** $S: G \rightarrow \mathcal{L}(V)$ di un gruppo come una rappresentazione che non ammette sottospazi propri (non il sottospazio nullo e l'intero spazio) invarianti rispetto alle trasformazioni $S(g)$:

$$\exists X \subset \mathcal{R}(S): S(g)X \subseteq X \quad \forall g \in G \quad (6.162)$$

Nel nostro caso la rappresentazione $M(R)$ è irreducibile se:

$$\exists W \subset V^n: M(R)W \subseteq W \quad \forall R \in SO(3) \quad (6.163)$$

Diciamo in particolare che in tale caso gli operatori $(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n)$ determinano un **operatore tensoriale irreducibile**.

Un caso particolare è quello dei generatori infinitesimali delle traslazioni:

$$\hat{\Omega}(R) \hat{p}_i \hat{\Omega}^\dagger(R) = R_{ij}^{-1} \hat{p}_j = R_{ji} \hat{p}_j = M_{ji}(R) \hat{p}_j \quad (6.164)$$

Gli operatori $(\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3)$ formano anche un tensore irreducibile in quanto non esiste un sottospazio invariante proprio.

Posto $n = 2k + 1$ diciamo che questi formano un tensore irreducibile di rango $k = 1$. Analogamente anche gli operatori posizione, momento angolare di spin, momento angolare orbitale e momento angolare totale formano un tensore irreducibili di rango 1. Notiamo che in generale ha senso parlare di tensore di una qualunque dimensione n , indicando che k può essere sia intero che semintero, ma troveremo che in questo caso la rappresentazione non può essere irreducibile.

Caratterizzazione di Operatori Tensoriali

Come fatto per l'invarianza dell'hamiltoniana, possiamo caratterizzare gli operatori tensoriali in termini di rotazioni infinitesime, o equivalentemente le loro rappresentazioni (proiettive o meno):

$$\begin{aligned} R &= 1 + \delta\omega^a I_a & [I_a, I_b] &= \varepsilon_{abc} I_c \\ \hat{\Omega}(R) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^a \hat{J}_a & [\hat{J}_a, \hat{J}_b] &= \varepsilon_{abc} \hat{J}_c \\ M(R) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^a J_a^{(k)} & [J_a^{(k)}, J_b^{(k)}] &= \varepsilon_{abc} J_c^{(k)} \end{aligned}$$

dove in generale le matrici $M(R)$ e dunque i loro generatori infinitesimali dipendono dal rango k del tensore.

Applichiamo dunque l'identità che caratterizza le \hat{A}_i in termini di rotazioni infinitesime:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}(R) \hat{A}_i \hat{\Omega}^\dagger(R) &= M_{ji}(R) \hat{A}_j \\ \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^a \hat{J}_a\right) \hat{A}_i \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\omega^a \hat{J}_a\right) &= \left(\delta_{ji} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^a (J_a)_{ji}\right) \hat{A}_j \\ \hat{A}_i - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^a [\hat{J}_a, \hat{A}_i] &= \hat{A}_i - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^a (J_a)_{ji} \hat{A}_j \end{aligned} \quad (6.165)$$

Ma questo è vero se e solo se:

$$\boxed{[\hat{J}_a, \hat{A}_i] = (J_a^{(k)})_{ji} \hat{A}_j} \quad \forall i \quad (6.166)$$

Dimensione di Operatori Tensoriali Irreducibili

Affinchè la rappresentazione $M(R)$ sia irriducibile (e dunque l'operatore tensoriale sia irriducibile) è poi condizione necessaria e sufficiente che i generatori infinitesimali $J_a^{(k)}$ siano una rappresentazione irriducibile dell'algebra del momento angolare (ossia l'algebra di Lie di $SO(3)$).

In realtà noi già conosciamo tutte le rappresentazioni irriducibili del momento angolare, che sono i blocchi $(\hat{J}_x^{(j)}, \hat{J}_y^{(j)}, \hat{J}_z^{(j)})$ delle componenti del momento angolare per un dato $j = 0, 1/2, \dots$. Nella base $|j, m\rangle$ di \hat{J}^2, \hat{J}_z queste soddisfano:

$$\begin{aligned} \hat{J}_z^{(j)} |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle \\ \hat{J}_\pm^{(j)} |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle \\ \hat{J}_\pm^{(j)} &= \hat{J}_x^{(j)} \pm i \hat{J}_y^{(j)} \end{aligned} \quad (6.167)$$

Queste identità determinano univocamente le matrici $\hat{J}_a^{(j)}$ e la mappa esponenziale fornisce tutti gli elementi del gruppo:

$$M(R) = M(R_{\vec{\omega}}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{J}}^{(j)}\right) \quad (6.168)$$

Come visto per lo spin tuttavia queste costituiscono una rappresentazione solo per j intero. Questo significa che esistono soli operatori tensoriali di rango $k = j$ intero, ossia deve avere dimensione $n = 2j + 1$ dispari, come pre-annunciato.

Il caso $k = 0 \iff n = 1$ corrisponde ad esempio ad un operatore invariante per rotazioni, che è detto operatore scalare:

$$\hat{\Omega}(R) \hat{A} \hat{\Omega}^\dagger(R) = \hat{A} \iff [\hat{\Omega}(R), \hat{A}] = 0 \iff [\hat{J}_a, \hat{A}] = 0, \forall a \quad (6.169)$$

Una caratterizzazione di un tensore irriducibile $\hat{T}^{(k)}$ afferma che è sempre possibile trovare un nuovo tensore irriducibile $\hat{T}_q^{(k)}$ (con $q = -k, \dots, k$), di tensore sempre appartenenti a V^n , le cui componenti soddisfano la versione "standard" della relazioni di commutazione con il momento angolare:

$$(J_a^{(k)})_{q'q} = \langle k, q' | \hat{J}_a^{(k)} | k, q \rangle \Rightarrow [\hat{J}_a, \hat{T}_q^{(k)}] = \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \hat{J}_a^{(k)} | k, q \rangle \quad (6.170)$$

dove i $|k, q\rangle$ sono autovettori di \hat{J}^2, \hat{J}_z^2 etichettati dai numeri quantici $k, q \iff l, m$. Equivalentemente possiamo scrivere, rispetto agli operatori gradino:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_\pm, \hat{T}_q^{(k)}] &= \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \hat{T}_{q \pm 1}^{(k)} \\ [\hat{J}_z, \hat{T}_q^{(k)}] &= \hbar q \hat{T}_q^{(k)} \end{aligned} \quad (6.171)$$

Possiamo dunque prendere questa come definizione di operatori tensoriali irriducibili.

Ci chiediamo a questo punto se esistano tensori irriducibili di un qualunque rango (abbiamo già verificato per $k = 0, 1$). Chiaramente questo è vero e possiamo costruirli esplicitamente.

Per fare questo ci poniamo nella rappresentazione delle configurazioni $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, per una particella senza spin. Detta $g(r)$ una funzione radiale generica allora possiamo definire un operatore su \mathcal{H} in maniera puntuale in coordinate sferiche:

$$(\hat{T}_q^{(k)}\psi)(r, \theta, \phi) = g(r)Y_{kq}(\theta, \phi)\psi(r, \theta, \phi) \quad (6.172)$$

In questo caso $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}$ e dunque possiamo verificare esplicitamente che i $\hat{T}_q^{(k)}$ soddisfano le opportune relazioni di commutazione. Per fare questo usiamo la notazione compatta seguente, dove sottintendiamo i valori in cui sono calcolate le varie funzioni e la loro dipendenza funzionale dalle variabili:

$$\hat{T}_q^{(k)}\psi = g \cdot Y_{kq} \cdot \psi \quad (6.173)$$

Questi operatori chiaramente non ammettono alcuno sottospazio invariante propri, dobbiamo dunque solo verificare che definiscono un operatore tensoriale, e dunque soddisfano le opportune relazioni di commutazione.

Iniziamo con la relazione di commutazione con gli operatori gradino:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_\pm, \hat{T}_q^{(k)}]\psi &= \hat{L}_\pm(g \cdot Y_{kq} \cdot \psi) - g \cdot Y_{kq} \cdot (\hat{L}_\pm\psi) = g(\hat{L}_\pm(Y_{kq} \cdot \psi)) - g \cdot Y_{kq} \cdot (\hat{L}_\pm\psi) = \\ &= g(\hat{L}_\pm Y_{kq})\psi + \cancel{gY_{kq}(\hat{L}_\pm\psi)} - \cancel{g \cdot Y_{kq} \cdot (\hat{L}_\pm\psi)} = g(\hat{L}_\pm Y_{kq})\psi = \\ &= \hbar\sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)}gY_{k, q \pm 1}\psi = \hbar\sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)}(\hat{T}_{q \pm 1}^{(k)}\psi) \end{aligned} \quad (6.174)$$

Siccome questo è valido per ogni ψ allora l'identità è operatoriale. Analogamente si può dimostrare per il commutatore con \hat{L}_z e dunque è vero che gli operatori $\hat{T}_q^{(k)}$ sono un operatore tensoriale irriducibile di rango k .

6.4.5 Importanza degli Operatori Tensoriali Irriducibili

Gli operatori tensoriali irriducibili sono particolarmente interessanti perchè godono di proprietà generali che permettono di risolvere problemi per sistemi quantistici invarianti per rotazioni generiche. In questo gli stati stazionari sono autostati di \hat{J}^2, \hat{J}_z :

$$\hat{J}^2|\tau, j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|\tau, j, m\rangle \quad \hat{J}_z|\tau, j, m\rangle = \hbar m|\tau, j, m\rangle \quad (6.175)$$

Gli elementi di matrice degli operatori tensoriali irriducibili godono di un importantissima proprietà:

$$\langle \tau, j, m | \hat{T}_q^{(k)} | \tau', j', m' \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \tau, j | \hat{T}^{(k)} | \tau', j' \rangle \right) \langle j', m'; k, q | j, m \rangle \quad (6.176)$$

Nel primo termine è inserito il cosiddetto "elemento di matrice ridotto", che è una quantità che dipende solamente dagli indici τ, τ' e dal momento angolare totale j, j' , mentre il secondo termine sono i coefficienti di Clebsch-Gordan. Pertanto per uno specifico sistema quantistico e operatore tensoriale l'unica quantità da calcolare per trovare la sua espressione in questa base è l'elemento di matrice ridotto, che si può calcolare ad esempio valutando l'elemento di matrice di $\hat{T}_q^{(k)}$ per un q specifico dove il calcolo è semplice (tipicamente $q = 0$). Questa identità è affermata dal cosiddetto **Teorema di Wigner-Eckart**, che dimostreremo nella prossima lezione.

6.5 Lezione 34

6.5.1 Somme di Momenti Angulari

Siano due sistemi con momento angolare $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2$ rispettivamente. Una base di autostati relativi alla parte angolare dello stato del sistema è data ad esempio dalle base prodotto/fattorizzata di autostati dei singoli $\hat{J}_i^2, \hat{J}_{iz}$ dei due sistemi:

$$|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \Rightarrow \begin{cases} \hat{J}_1^2 |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1) |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \\ \hat{J}_2^2 |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = \hbar^2 j_2(j_2+1) |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \\ \hat{J}_{1z} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = \hbar m_1 |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \\ \hat{J}_{2z} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = \hbar m_2 |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \end{cases} \quad (6.177)$$

Un'altra possibilità è la base di autostati comune a $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2$, dove $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$:

$$\begin{cases} \hat{J}^2 |j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j_1, j_2; j, m\rangle \\ \hat{J}_z |j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar m |j_1, j_2; j, m\rangle \\ \hat{J}_1^2 |j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1) |j_1, j_2; j, m\rangle \\ \hat{J}_2^2 |j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar^2 j_2(j_2+1) |j_1, j_2; j, m\rangle \end{cases} \quad (6.178)$$

6.5.2 Coefficienti di Clebsch-Gordan

Definizione e Prime Proprietà

Per passare da una base all'altra sono necessari i cosiddetti **coefficienti di Clebsch-Gordan**, definiti come segue e a cui ci si riferisce con diverse notazioni:

$$c_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} = \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \equiv \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j_1, j_2; j, m \rangle \quad (6.179)$$

Questi permettono di passare dalla base fattorizzata alla base "entangled", per j_1, j_2 fissati:

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \quad (6.180)$$

Valgono inoltre le seguenti regole di selezioni per il momento angolare, ossia i coefficienti di Clebsch-Gordan a meno che:

$$m = m_1 + m_2 \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (6.181)$$

Possiamo poi scegliere questi coefficienti tutti reali e sono "ortogonali":

$$\begin{aligned} \sum_{j, m} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j, m \rangle &= \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \\ \sum_{m_1, m_2} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j', m' \rangle &= \delta_{j j'} \delta_{m m'} \end{aligned} \quad (6.182)$$

Ricorsività

Usando gli operatori gradino troviamo anche relazione di ricorsività:

$$\begin{aligned} &\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \pm 1 \rangle = \\ &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 \mp 1)(j_1 \pm m_1 \mp 1 + 1)} \langle j_1, m_1 \mp 1; j_2, m_2 | j, m \rangle + \sqrt{(j_2 \mp m_2 \mp 1)(j_2 \pm m_2 \mp 1 + 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 \mp 1 | j, m \rangle \end{aligned} \quad (6.183)$$

Per dimostrare questo ricordiamo l'azione degli operatori gradino sulle basi:

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle = \hbar C_{\pm}(j, m) |j, m \pm 1\rangle \quad (6.184)$$

Pertanto per trovare questi la relazione di ricorsività usiamo l'identità seguente:

$$\begin{aligned} J_{\pm} |j_1, j_2; j, m\rangle &= (J_{1\pm} + J_{2\pm}) |j_1, j_2; j, m\rangle \\ \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j_1, j_2; j, m \pm 1\rangle &= (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1 m_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \\ \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \sum_{m_1 m_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \pm 1\rangle &= (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1 m_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \end{aligned} \quad (6.185)$$

Sviluppiamo il secondo membro separatamente usando le proprietà elencate prima:

$$\begin{aligned} (J_{1\pm} + J_{2\pm}) |j_1, j_2; j, m\rangle &= (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1 m_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle = \\ &= \hbar \sum_{m_1 m_2} \left(\sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} |j_1, m_1 \pm 1; j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} |j_1, m_1; j_2, m_2 \pm 1\rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \right) \end{aligned} \quad (6.186)$$

Facciamo adesso il prodotto scalare di entrambi i membri con $\langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 |$ (e semplifichiamo \hbar):

$$\begin{aligned}
\sum_{m_1 m_2} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j_1, m_1; j_2, m_2 \rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \pm 1 \rangle &= \sum_{m_1 m_2} \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \pm 1 \rangle = \\
&= \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j, m \pm 1 \rangle \\
\sum_{m_1 m_2} \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j_1, m_1 \pm 1; j_2, m_2 \rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle &= \\
&= \sqrt{(j_1 \mp m'_1 \mp 1)(j_1 \pm m'_1 \mp 1 + 1)} \langle j_1, m'_1 \mp 1; j_2, m'_2 | j, m \rangle \\
\sum_{m_1 m_2} \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j_1, m_1; j_2, m_2 \pm 1 \rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle &= \\
&= \sqrt{(j_2 \mp m'_2 \mp 1)(j_2 \pm m'_2 \mp 1 + 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m'_2 \mp 1 | j, m \rangle
\end{aligned} \tag{6.187}$$

E infine, ritroviamo quanto atteso:

$$\begin{aligned}
&\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j, m \pm 1 \rangle = \\
&= \sqrt{(j_1 \mp m'_1 \mp 1)(j_1 \pm m'_1 \mp 1 + 1)} \langle j_1, m'_1 \mp 1; j_2, m'_2 | j, m \rangle + \sqrt{(j_2 \mp m'_2 \mp 1)(j_2 \pm m'_2 \mp 1 + 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m'_2 \mp 1 | j, m \rangle
\end{aligned} \tag{6.188}$$

In notazione compatta, facendo la sostituzione $m'_1 \rightarrow m_1, m'_2 \rightarrow m_2$:

$$C_{\pm}(j, m) \cdot c_{j_1, m_1, j_2, m_2}^{j, m \pm 1} = C_{\pm}(j_1, m_1 \mp 1) \cdot c_{j_1, m_1 \mp 1, j_2, m_2}^{j, m} + C_{\pm}(j_2, m_2 \mp 1) \cdot c_{j_1, m_1, j_2, m_2 \mp 1}^{j, m} \tag{6.189}$$

Partendo ad esempio da $m = \pm j$ possiamo trovare tutti gli altri coefficienti a meno di una normalizzazione e una fase. La prima è determinata dalla condizione di ortonormalizzazione della base mentre la seconda è scelta in maniera arbitraria. In particolare possiamo sceglierla reale per il primo coefficiente, in modo che anche tutti gli altri siano reali per ricorsività.

6.5.3 Teorema di Wigner-Eckart

Note le proprietà dei coefficienti di Clebsch-Gordan possiamo ora dimostrare un importante teorema sugli operatori tensoriali.

Teorema 8 (Teorema di Wigner-Eckart). *Sia $|\alpha, j, m\rangle$ una base di autostati di \mathcal{H} comuni a \hat{J}^2, \hat{J}_z e $\hat{T}_q^{(k)}$ un operatore tensoriale irriducibile di rango k , allora:*

$$\langle \alpha, j, m | \hat{T}_q^{(k)} | \alpha', j', m' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha, j | \hat{T}^{(k)} | \alpha', j' \rangle \langle j', m'; k, q | j, m \rangle \tag{6.190}$$

Pertanto gli elementi di matrice di un operatore tensoriale sono dati da un termine geometrico dipendente solo dall'orientamento del sistema e da un termine che dipende dalla dinamica e dal tensore, ma in maniera debole in quanto non dipende da m, m', q . Questo significa che il termine dipende dalla dinamica può essere trovato scegliendo l'orientazione del sistema più comodo al calcolo.

In particolare siccome gli elementi di matrice di T_q^k seguono i coefficienti di Clebsch-Gordan allora ammettono le stesse regole di selezione:

$$q = m - m' \quad |j - j'| \leq k \leq j + j' \tag{6.191}$$

Dimostrazione. Definiamo i seguenti vettori:

$$|\sigma, j'', m''\rangle = \sum_{m' q} T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \langle j', m'; k, q | j'', m'' \rangle \tag{6.192}$$

Moltiplichiamo questi vettori per certi coefficienti di Clebsch-Gordan e facciamo la somma su j'', m'' , usando le proprietà di questi coefficienti:

$$\begin{aligned}
\sum_{j'' m''} |\sigma, j'', m''\rangle \langle j', \bar{m}; k, \bar{q} | j'', m'' \rangle &= \sum_{j'' m''} \sum_{m' q} T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \langle j', m'; k, q | j'', m'' \rangle \langle j', \bar{m}; k, \bar{q} | j'', m'' \rangle = \\
&= \sum_{m' q} T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \sum_{j'' m''} \langle j', m'; k, q | j'', m'' \rangle \langle j', \bar{m}; k, \bar{q} | j'', m'' \rangle = \\
&= \sum_{m' q} T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \delta_{m' \bar{m}} \delta_{q \bar{q}} = \\
&= T_{\bar{q}}^{(k)} |\alpha', j', \bar{m}\rangle
\end{aligned} \tag{6.193}$$

Facendo la sostituzione $\bar{q} \rightarrow q, \bar{m} \rightarrow m'$, abbiamo ottenuto:

$$T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle = \sum_{j''m''} |\sigma, j'', m''\rangle \langle j', m'; k, q | j'', m'' \rangle \quad (6.194)$$

Facciamo il prodotto scalare con $\langle \alpha, j, m |$:

$$\langle \alpha, j, m | T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle = \sum_{j''m''} \langle \alpha, j, m | \sigma, j'', m'' \rangle \langle j', m'; k, q | j'', m'' \rangle \quad (6.195)$$

Come suggerisce la notazione, vogliamo verificare che gli stati $|\sigma, j, m\rangle$ sono effettivamente autostati di \hat{J}^2, \hat{J}_z . In questo modo sono ortogonali rispetto alla parte angolare, ossia:

$$\langle \alpha, j, m | \sigma, j'', m'' \rangle \propto \delta_{jj''} \delta_{mm''} \quad (6.196)$$

Questo permetterebbe di semplificare la somma e ottenere un risultato vicino a quello atteso (dobbiamo poi verificare che il primo termine è indipendente da m). Per verificare questo è sufficiente calcolare l'azione degli operatori \hat{J}_\pm ed \hat{J}_z su questi stati, verificando che siano le stesse di autostati di \hat{J}^2, \hat{J}_z . Per fare questo usiamo la caratterizzazione degli operatori tensoriali irriducibili e la definizione stessa di $|\sigma, j, m\rangle$:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_\pm, \hat{T}_q^{(k)}] &= \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \hat{T}_{q\pm 1}^{(k)} = \hbar C_\pm(k, q) \hat{T}_{q\pm 1}^{(k)} \\ [\hat{J}_z, \hat{T}_q^{(k)}] &= \hbar q \hat{T}_q^{(k)} \end{aligned} \quad (6.197)$$

Verifichiamo per \hat{J}_+ , mentre per gli altri operatori la dimostrazione è simile:

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ |\sigma, j'', m''\rangle &= \sum_{m'q} \hat{J}_+ T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \langle j', m'; k, q | j'', m'' \rangle = \\ &= \sum_{m'q} \left(T_q^{(k)} \hat{J}_+ |\alpha', j', m'\rangle \langle j', m'; k, q | j'', m'' \rangle + [\hat{J}_+, \hat{T}_q^{(k)}] |\alpha', j', m'\rangle \langle j', m'; k, q | j'', m'' \rangle \right) = \\ &= \sum_{m'q} \left(T_q^{(k)} \hbar C_+(j', m') |\alpha', j', m' + 1\rangle \langle j', m'; k, q | j'', m'' \rangle \right) + \sum_{m'q} \left(\hbar C_+(k, q) \hat{T}_{q+1}^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \langle j', m'; k, q | j'', m'' \rangle \right) = \\ &= \sum_{m'q} \left(T_q^{(k)} \hbar C_+(j', m' - 1) |\alpha', j', m'\rangle \langle j', m' - 1; k, q | j'', m'' \rangle \right) + \\ &+ \sum_{m'q} \left(\hbar C_+(k, q - 1) \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \langle j', m'; k, q - 1 | j'', m'' \rangle \right) = \\ &= \hbar \sum_{m'q} \left(C_+(j', m' - 1) \langle j', m' - 1; k, q | j'', m'' \rangle + C_+(k, q - 1) \langle j', m'; k, q - 1 | j'', m'' \rangle \right) T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle = \\ &= \hbar C_+(j'', m'') \sum_{m'q} T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \langle j', m'; k, q | j'', m'' + 1 \rangle = \hbar C_+(j'', m'') |\sigma, j'', m'' + 1 \rangle \end{aligned} \quad (6.198)$$

come ci aspettavamo.

Facendo la somma su j'', m'' con $\delta_{jj''} \delta_{mm''}$ troviamo dunque:

$$\langle \alpha, j, m | T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle = \langle \alpha, j, m | \sigma, j, m \rangle \langle j', m'; k, q | j, m \rangle \quad (6.199)$$

Per concludere il teorema dobbiamo dimostrare che il primo termine non dipende da m e in particolare coincide con il valore per $m = j$:

$$\langle \alpha, j, m | \sigma, j, m \rangle = \sum_{m'q} \langle \alpha, j, m | T_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \langle j', m'; k, q | j, m \rangle \quad (6.200)$$

Questo ci permette di definire l'elemento di matrice ridotto come segue:

$$\frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha, j | T_q^k | \alpha', j' \rangle = \langle \alpha, j, j | \sigma, j, j \rangle \quad (6.201)$$

Arriviamo dunque all'enunciato del teorema, come volevasi dimostrare. \square

6.5.4 Applicazioni del Teorema di Wigner-Eckart

Consideriamo adesso alcune applicazioni di questo importante teorema, che ha grande importanza pratica.

Operatore Scalare

Per un operatore scalare S , ossia un operatore tensoriale di rango 1, troviamo:

$$\langle \alpha, j, m | S | \alpha', j', m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j || S || \alpha', j' \rangle}{2j+1} \langle j', m'; 0, 0 | j, m \rangle \quad (6.202)$$

Ma per le regole di selezione:

$$m = m', j = j' \Rightarrow \langle \alpha, j, m | S | \alpha', j', m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j || S || \alpha', j' \rangle}{2j+1} \delta_{mm'} \delta_{jj'} \quad (6.203)$$

Questo significa che S può essere scritta a blocchi nella base del momento angolare, con i blocchi etichettati dagli indici α, α' .

Operatore Vettoriale

Consideriamo adesso un operatore vettoriale \vec{V} , le cui componenti V_q si trovano coincidere con le componenti sferiche:

$$V_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x \pm iV_y) \quad V_0 = V_z \quad (6.204)$$

In questo caso:

$$\langle \alpha, j, m | V_q | \alpha', j', m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j || V || \alpha', j' \rangle}{2j+1} \langle j', m'; 1, q | j, m \rangle \quad (6.205)$$

Per le regole di selezione:

$$\begin{cases} 0, \pm 1 = m' - m \\ |j - j'| \leq 1 \leq j + j' \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \Delta m = 0, \pm 1 \\ \Delta j = 0, \pm 1 \end{cases} \quad j + j' \geq 1 \quad (6.206)$$

Notiamo che la regola di selezione su j proibisce la transizione $j = 0 \rightarrow j' = 0$.

Teorema di Proiezione

Possiamo trovare una formula esplicita per l'elemento di matrice ridotto di un operatore vettoriale (nel caso $\Delta j = 0, j > 0$), come affermato dal **Teorema di Proiezione**.

Teorema 9 (Teorema di Proiezione). *Sia V_q un operatore vettoriale e $|\alpha, j, m\rangle$ una base comune a J^2, J_z , allora:*

$$\langle \alpha, j, m | V_q | \alpha', j, m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha', j, m' \rangle}{j(j+1)} \cdot \langle j, m | J_q | j, m' \rangle \iff \langle \alpha, j || V || \alpha', j \rangle = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2j+1}{j(j+1)}} \langle \alpha', j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha, j, m \rangle \quad (6.207)$$

Dimostrazione. La dimostrazione è basata sul Teorema di Wigner-Eckart e in particolare sul fatto che gli elementi di matrice dei due operatori scalari $\vec{J} \cdot \vec{V}, J^2$ hanno lo stesso termine geometrico (coefficienti di Clebsch-Gordan), e analogamente anche gli operatori J_q, V_q .

Iniziamo con l'esplicitare il prodotto scalare in componenti sferiche:

$$\vec{J} \cdot \vec{V} = J_z V_z + J_y V_y + J_x V_x = J_0 V_0 - J_{+1} V_{-1} - J_{-1} V_{+1} \quad (6.208)$$

Chiaramente in componenti sferiche gli operatori gradino coincidono con $J_{\pm} = \sqrt{2} J_{\pm 1}$ (e inoltre ricordiamo vale $J_{\pm}^\dagger = J_{\mp}$). Questo ci permette di ridurre immediatamente l'azione di questi operatori negli elementi di matrice:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha', j, m \rangle &= \langle \alpha, j, m | J_0 V_0 | \alpha', j, m \rangle - \langle \alpha, j, m | J_{+1} V_{-1} | \alpha', j, m \rangle - \langle \alpha, j, m | J_{-1} V_{+1} | \alpha', j, m \rangle = \\ &= m\hbar \langle \alpha, j, m | V_0 | \alpha', j, m \rangle - \hbar\sqrt{2} C_{-}(j, m) \langle \alpha, j, m-1 | V_{-1} | \alpha', j, m \rangle + \\ &\quad - \hbar\sqrt{2} C_{+}(j, m) \langle \alpha, j, m+1 | V_{+1} | \alpha', j, m \rangle = \\ &= \langle \alpha, j || \vec{V} || \alpha', j \rangle \cdot c_{jm} \end{aligned} \quad (6.209)$$

dove c_{jm} è la combinazione lineare di certi coefficienti di Clebsch-Gordan, che non dipendono da \vec{V} . Analogamente per J^2 (notare bene gli indici):

$$\langle \alpha, j, m | J^2 | \alpha, j, m \rangle = \langle \alpha, j | |\vec{J}| | \alpha, j \rangle \cdot c_{jm} \quad (6.210)$$

Mentre per le componenti degli operatori vettoriali:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, j, m | V_q | \alpha', j, m' \rangle &= \langle \alpha, j | |\vec{V}| | \alpha', j \rangle \cdot \bar{c}_{jmm'} \\ \langle \alpha, j, m | J_q | \alpha, j, m' \rangle &= \langle \alpha, j | |\vec{J}| | \alpha, j \rangle \cdot \bar{c}_{jmm'} \end{aligned} \quad (6.211)$$

dove i $\bar{c}_{jmm'}$ sono coefficienti di Clebsch-Gordan divisi per $\sqrt{2j+1}$.

Facciamo dunque il rapporto tra questi elementi di matrice in modo da semplificare la parte geometrica, notando che J_q non agisce sulla parte non angolare, indicata da α :

$$\frac{\langle \alpha, j, m | V_q | \alpha', j, m' \rangle}{\langle \alpha, j, m | J_q | \alpha, j, m' \rangle} = \frac{\langle \alpha, j | |\vec{V}| | \alpha', j \rangle}{\langle \alpha, j | |\vec{J}| | \alpha, j \rangle} = \frac{\langle \alpha, j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha', j, m \rangle}{\langle \alpha, j, m | J^2 | \alpha, j, m \rangle} = \frac{\langle \alpha, j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha', j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \quad (6.212)$$

Otteniamo infine quanto detto:

$$\langle \alpha, j, m | V_q | \alpha', j, m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha', j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle \alpha, j, m | J_q | \alpha, j, m' \rangle \quad (6.213)$$

Questo dimostra la prima parte (quella importante) del teorema.

Per trovare l'espressione dell'elemento di matrice ridotto di \vec{V} dobbiamo esplicitare l'elemento di matrice di J_q usando il Teorema di Wigner-Eckart:

$$\langle \alpha, j, m | J_q | \alpha, j, m' \rangle = \langle j, m | J_q | j, m' \rangle = \langle j | |\vec{J}| | j \rangle \langle j, m; 1, q | j, m' \rangle \quad (6.214)$$

Per fare questo dobbiamo trovare l'elemento di matrice ridotto per \vec{J} , che possiamo calcolare con $q = 0, m = m' = j$ (ricordiamo che \vec{J} non agisce su α):

$$\begin{aligned} \langle j, j | J_z | j, j \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j | |\vec{J}| | j \rangle \langle j, j; 1, 0 | j, j \rangle \\ \hbar j &= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j | |\vec{J}| | j \rangle \sqrt{\frac{j}{j+1}} \\ \langle j | |\vec{J}| | j \rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1)(2j+1)} \end{aligned} \quad (6.215)$$

Dove abbiamo usato³ l'espressione dei coefficienti di Clebsch-Gordon "massimali" (che si potrebbero trovare usando J_{\pm}). Troviamo infine:

$$\langle \alpha, j, m | V_q | \alpha', j, m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha', j, m \rangle}{\hbar} \sqrt{\frac{2j+1}{j(j+1)}} \langle j, m; 1, q | j, m' \rangle \quad (6.216)$$

come volevasi dimostrare. □

Una conseguenza immediata di questo teorema è che il valore atteso di $V_{\pm 1}$ in un dato stato con momento angolare ben definito $|\alpha, j, m\rangle$ è nullo, per le proprietà degli operatori gradino:

$$\langle \alpha, j, m | V_{\pm 1} | \alpha', j, m \rangle = \frac{\langle \alpha, j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha', j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle \alpha, j, m | J_{\pm 1} | \alpha, j, m \rangle \propto \langle \alpha, j, m | J_{\pm} | \alpha, j, m \rangle = 0 \quad (6.217)$$

Mentre lungo z l'espressione si semplifica in generale:

$$\langle \alpha, j, m | V_z | \alpha', j, m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha', j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle \alpha, j, m | J_z | \alpha, j, m' \rangle = \frac{m \delta_{mm'}}{\hbar j(j+1)} \langle \alpha, j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha', j, m \rangle \quad (6.218)$$

³Vedi <https://w.wiki/rEH>, caso $j_2 = 1, m_2 = 0$.

6.6 Lezione 35

6.6.1 Momento Magnetico come Operatore Vettoriale

Consideriamo una certa particella con spin, vogliamo calcolare il valore atteso del momento magnetico in un dato stato del momento angolare:

$$\vec{\mu} = \gamma_1 \vec{L} + \gamma_2 \vec{S} \quad |l, s; j, m\rangle \quad (6.219)$$

In questo caso $\alpha = l, s$, che notiamo essere comunque indipendenti da j, m .

Per il Teorema di Proiezione:

$$\begin{aligned} \langle l, s; j, m | L_q | l, s; j, m \rangle &= \frac{\langle l, s; j, m | \vec{J} \cdot \vec{L} | l, s; j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle l, s; j, m | J_q | l, s; j, m \rangle \\ \langle l, s; j, m | S_q | l, s; j, m \rangle &= \frac{\langle j, m | \vec{J} \cdot \vec{S} | l, s; j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle l, s; j, m | J_q | l, s; j, m \rangle \end{aligned} \quad (6.220)$$

Scriviamo i prodotti scalari in una maniera comoda al calcolo:

$$\vec{J} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2}(J^2 + L^2 - S^2) \quad \vec{J} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 + S^2) \quad (6.221)$$

Troviamo dunque:

$$\begin{aligned} \langle l, s; jm | \vec{J} \cdot \vec{L} | l, s; jm \rangle &= \frac{\hbar^2}{2}(j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)) \\ \langle l, s; jm | \vec{J} \cdot \vec{S} | l, s; jm \rangle &= \frac{\hbar^2}{2}(j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)) \end{aligned} \quad (6.222)$$

Possiamo ora calcolare il valore atteso del momento magnetico in coordinate sferiche. Per le componenti $q = \pm 1$ come prima il valore atteso è nullo per le proprietà degli operatori gradino. Lungo z invece:

$$\begin{aligned} \langle \mu_z \rangle &= \frac{m}{\hbar j(j+1)} \langle l, s; j, m | \vec{J} \cdot \vec{\mu} | l, s; j, m \rangle = \frac{m}{\hbar j(j+1)} \left[\gamma_1 \langle \vec{J} \cdot \vec{L} \rangle + \gamma_2 \langle \vec{J} \cdot \vec{S} \rangle \right] = \\ &= \frac{m}{\hbar j(j+1)} \frac{\hbar^2}{2} [\gamma_1(j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)) + \gamma_2(j(j+1) - l(l+1) + s(s+1))] = \\ &= \frac{\hbar m}{2j(j+1)} [j(j+1)(\gamma_1 + \gamma_2) + \gamma_1(l(l+1) - s(s+1)) - \gamma_2(l(l+1) - s(s+1))] = \\ &= \frac{\hbar m}{2} \left[\gamma_1 + \gamma_2 + (\gamma_1 - \gamma_2) \frac{l(l+1) - s(s+1)}{j(j+1)} \right] \end{aligned} \quad (6.223)$$

6.6.2 Rotazioni di Spin 1/2

Rappresentazione Matriciale

Guardiamo adesso più in dettaglio le rotazioni di uno spin. In questo caso $\vec{J} = \vec{S}$ e valgono le seguenti relazioni:

$$R_{\hat{n}}(d\phi) = R(\hat{n}, d\phi) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{S} \cdot \hat{n} d\phi \quad R_{\hat{n}}(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{S} \cdot \hat{n} \phi} \quad [S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k \quad (6.224)$$

Nella base $|\pm\rangle$ degli autostati di S_z troviamo (ad esempio usando gli operatori gradino):

$$\begin{aligned} S_z &= \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|) \\ S_x &= \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|) \\ S_y &= i \frac{\hbar}{2} (-|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|) \end{aligned} \quad (6.225)$$

La rappresentazione matriciale di questi operatori coincide poi con le matrici di Pauli (a meno di $\hbar/2$):

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (6.226)$$

Possiamo esplicitare l'operatore di rotazione generico usando la proprietà di idempotenza delle matrici di Pauli:

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^{2k} = \mathbb{1} \Rightarrow (\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^{2k+1} = \vec{\sigma} \cdot \hat{n} \quad k \in \mathbb{N} \quad (6.227)$$

Questo ci permette di dividere in due la serie di potenze che definisce l'esponenziale, trovando una sorta di generalizzazione matriciale dell'equazione di Eulero per i numeri complessi:

$$\begin{aligned}
e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{S} \cdot \hat{n} \phi} &= e^{-\frac{i}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{n} \phi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{2} \phi \right)^n (\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^n = \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \left(-\frac{i}{2} \phi \right)^{2k} (\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} \left(-\frac{i}{2} \phi \right)^{2k+1} (\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^{2k+1} = \\
&= \mathbb{1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} (-1)^k \left(\frac{\phi}{2} \right)^{2k} - i (\vec{\sigma} \cdot \hat{n}) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} (-1)^k \left(\frac{\phi}{2} \right)^{2k+1} = \\
&= \cos \frac{\phi}{2} \mathbb{1} - i \sin \frac{\phi}{2} (\vec{\sigma} \cdot \hat{n})
\end{aligned} \tag{6.228}$$

Notiamo che la presenza del fattore 2 è consistente con il fatto che gli operatori di rotazione di spin semintero è una rappresentazione proiettiva.

Esprimiamo questa in forma matriciale:

$$R(\hat{n}, \phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{S} \cdot \hat{n} \phi} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} - i n_z \sin \frac{\phi}{2} & (-i n_x - n_y) \sin \frac{\phi}{2} \\ (-i n_x + n_y) \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} + i n_z \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \tag{6.229}$$

Rotazioni con Angoli di Eulero

Notiamo adesso che siccome una rotazione dello spazio Euclideo può essere espressa in angoli di Eulero come composizione di rotazioni (ordinate) lungo z, y, x rispettivamente, allora ci aspettiamo questo sia possibile anche per gli operatori di rotazione:

$$R(\hat{n}, \phi) = R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma) \tag{6.230}$$

Per verificarlo possiamo trovare le espressioni di $R(\alpha, \beta, \gamma)$ e confrontare le componenti per trovare le relazioni tra i due set di parametri. Se effettivamente vi è una corrispondenza biunivoca allora questo è verificato e abbiamo trovato già le formule per il cambiamento dei parametri.

Esplicitiamo l'espressione in angoli di Eulero:

$$\begin{aligned}
R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} = \\
&= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} = \\
&= \begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{6.231}$$

Confrontiamo le due espressioni:

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} - i n_z \sin \frac{\phi}{2} & (-i n_x - n_y) \sin \frac{\phi}{2} \\ (-i n_x + n_y) \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} + i n_z \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \tag{6.232}$$

Dalla prima componente delle matrici troviamo ϕ ed n_z comparando parte reale e parte immaginaria:

$$\cos \frac{\phi}{2} - i n_z \sin \frac{\phi}{2} = e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} \Rightarrow \begin{cases} \cos \frac{\phi}{2} = \cos \left(\frac{\alpha+\gamma}{2} \right) \cos \frac{\beta}{2} \\ n_z \sin \frac{\phi}{2} = \sin \left(\frac{\alpha+\gamma}{2} \right) \cos \frac{\beta}{2} \end{cases} \tag{6.233}$$

Analogamente per n_x, n_y . Troviamo dunque che vi è effettivamente una corrispondenza biunivoca (che in realtà ci aspettavamo dalla meccanica classica) tra le rotazioni attorno ad un asse e le rotazioni "di Eulero". Si può dimostrare poi che vale per rotazioni generiche, non solo quelle relative a spin 1/2.

Questa parametrizzazione delle rotazioni risulta particolarmente utile per calcolare gli elementi di matrice in un dato sottospazio di J^2 , usando come base quella comune a J_z , in quanto si riducono agli elementi di matrice delle rotazioni attorno ad y :

$$R_{m'm}^{(j)} = \langle j, m' | e^{-\frac{i}{\hbar} J_z \alpha} e^{-\frac{i}{\hbar} J_y \beta} e^{-\frac{i}{\hbar} J_z \gamma} | j, m \rangle = e^{-i(m'\alpha + m\gamma)} \langle j, m' | e^{-\frac{i}{\hbar} J_y \beta} | j, m \rangle \quad (6.234)$$

Per un dato j possiamo poi usare le proprietà degli operatori momento angolare per esplicitare l'esponenziale in forma simile a quella trovata per $j = s = 1/2$.

"Vere" Trasformazioni di Eulero

Notiamo adesso come in realtà le rotazioni definite tramite gli angoli di Eulero sono basate attorno a diversi assi. Infatti gli angoli α, β, γ propriamente definiscono una rotazione ottenuta prima ruotando attorno all'asse z di α , poi ruotando attorno al nuove asse y' di β e infine ruotando attorno al nuovo asse z'' di γ :

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{z''}(\gamma) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} J_{z''} \gamma} e^{-\frac{i}{\hbar} J_{y'} \beta} e^{-\frac{i}{\hbar} J_z \alpha} \quad (6.235)$$

dove:

$$\begin{cases} J_{y'} = R_z(\alpha) J_y R_z^\dagger(\alpha) \\ J_{z''} = R_{y'}(\beta) J_{z'} R_{y'}^\dagger(\beta) = R_{y'}(\beta) R_z(\alpha) J_z R_z^\dagger(\alpha) R_{y'}^\dagger(\beta) \end{cases} \quad (6.236)$$

Come conseguenza delle definizioni di rotazioni e della proprietà seguente degli esponenziali rispetto a trasformazioni unitarie:

$$e^{UAU^\dagger} = U e^A U^\dagger \quad \begin{cases} R_{y'}(\beta) R_z(\alpha) = R_z(\alpha) R_y(\beta) \\ R_{z''}(\gamma) R_{y'}(\beta) = R_{y'}(\beta) R_{z'}(\gamma) \end{cases} \quad (6.237)$$

si può dimostrare che effettivamente queste rotazioni rispetto agli assi trasformati sono equivalenti a quelle data inizialmente rispetto agli assi del sistema stesso (tipicamente più convenienti):

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma) = R_{z''}(\gamma) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha) \quad (6.238)$$

6.6.3 Proiezione di Stati Ruotati su Stati non Ruotati

Vogliamo adesso calcolare la probabilità di overlap di uno stato di momento angolare ben definito $|j, m\rangle$ su uno stato ruotato $|j, m\rangle_R = R(\hat{\mathbf{n}}, \phi) |j, m\rangle$. Consideriamo stavolta momento angolare generico, non necessariamente di spin.

Consideriamo per semplicità una rotazione infinitesima lungo $\hat{\mathbf{n}}_y$ e approssimiamo al primo ordine in ε :

$$R(\hat{\mathbf{n}}_y, \varepsilon) = e^{-\frac{i}{\hbar} J_y \varepsilon} = 1 - \frac{i}{\hbar} J_y \varepsilon \quad (6.239)$$

In questo modo la probabilità di overlap è approssimata all'ordine ε^2 :

$$|\langle j, m | j, m \rangle_R|^2 = o(\varepsilon^2) \quad (6.240)$$

Inoltre sempre per semplicità possiamo considerare il caso $m = j$:

$$|\langle j, j | j, j \rangle_R|^2 = o(\varepsilon^2) \quad (6.241)$$

Esplicitiamo il vettore ruotato:

$$\begin{aligned} |j, j\rangle_R &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} J_y \varepsilon\right) |j, j\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{J_+ - J_-}{2i}\right) |j, j\rangle = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{J_-}{2}\right) |j, j\rangle = \\ &= |j, j\rangle + \frac{\varepsilon}{2} \sqrt{(j+j)(j-j+1)} |j, j-1\rangle = |j, j\rangle + \varepsilon \sqrt{\frac{j}{2}} |j, j-1\rangle \end{aligned} \quad (6.242)$$

Immediatamente notiamo che a questo ordine la probabilità di overlap vale 1 e dunque non è effettivamente all'ordine ε^2 . Per trovare questo dobbiamo andare dunque ad ordini superiori (in modo da trovare termini in J_+J_-):

$$\begin{aligned}
|j, j\rangle_R &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} J_y \varepsilon - \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} J_y^2\right) |j, j\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{J_+ - J_-}{2i} + \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2} \frac{(J_+ - J_-)^2}{4}\right) |j, j\rangle = \\
&= |j, j\rangle + \varepsilon \sqrt{\frac{j}{2}} |j, j-1\rangle - \frac{\varepsilon^2}{8\hbar^2} \sqrt{2j} (J_+ - J_-) |j, j-1\rangle = \\
&= |j, j\rangle + \varepsilon \sqrt{\frac{j}{2}} |j, j-1\rangle - \frac{\varepsilon^2}{8} \sqrt{2j} \left(\sqrt{(j-j+1)(j+j-1+1)} |j, j\rangle - \sqrt{(j+j-1)(j-j+1+1)} |j, j-2\rangle \right) = \\
&= |j, j\rangle + \varepsilon \sqrt{\frac{j}{2}} |j, j-1\rangle - \frac{\varepsilon^2}{8} \sqrt{2j} \left(\sqrt{2j} |j, j\rangle - \sqrt{2(2j-1)} |j, j-2\rangle \right) = \\
&= |j, j\rangle + \varepsilon \sqrt{\frac{j}{2}} |j, j-1\rangle - \frac{\varepsilon^2}{4} j |j, j\rangle + \frac{\varepsilon^2}{4} \sqrt{j(2j-1)} |j, j-2\rangle = \\
&= \left(1 - \frac{\varepsilon^2}{4}\right) |j, j\rangle + \varepsilon \sqrt{\frac{j}{2}} |j, j-1\rangle + \frac{\varepsilon^2}{4} \sqrt{j(2j-1)} |j, j-2\rangle
\end{aligned} \tag{6.243}$$

Pertanto la probabilità di overlap all'ordine ε^2 è data da:

$$|\langle j, j | j, j \rangle_R|^2 = 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \tag{6.244}$$

6.7 Lezione 36

6.7.1 Rotazioni per Particelle a Spin 1

Usando la parametrizzazione delle rotazioni in angoli di Eulero cerchiamo come prima di trovare una rappresentazione matriciale per gli operatori di rotazione, nel caso di uno spin 1, ossia nella base $|j, m\rangle$ di autostati di $J^2 = S^2$, $J_z = S_z$. In particolare siamo interessati solo alle rotazioni attorno all'asse y , in quanto in questa base:

$$R_{m'm}^{(1)} = e^{-i(m'\alpha + m\gamma)} \langle 1, m' | e^{-\frac{i}{\hbar} S_y \beta} | 1, m \rangle = e^{-i(m'\alpha + m\gamma)} \langle m' | e^{-\frac{i}{\hbar} S_y \beta} | m \rangle \tag{6.245}$$

Iniziamo col calcolare la rappresentazione matriciale di S_y e ricavare sue proprietà (simili a quelle di idempotenza delle matrici di Pauli) per poter calcolare esplicitamente la serie di potenze che definisce l'esponenziale. Per fare questo partiamo dagli operatori gradino, notando che non collegano stati con $\Delta m \neq \pm 1$, ossia sono entrambi nulli lungo entrambe le diagonali:

$$\begin{aligned}
\langle m | S_{\pm} | m \rangle &= \langle -1 | S_{\pm} | 1 \rangle = \langle 1 | S_{\pm} | -1 \rangle = 0 \\
\langle \pm 1 | S_{\pm} | 0 \rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1)} \langle \pm 1 | \pm 1 \rangle = \sqrt{2}\hbar = \langle 0 | S_{\pm} | \pm 1 \rangle \\
\langle \mp 1 | S_{\pm} | 0 \rangle &= 0 = \langle 0 | S_{\pm} | \mp 1 \rangle
\end{aligned} \tag{6.246}$$

Troviamo dunque:

$$S_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad S_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{6.247}$$

da cui la rappresentazione di S_y :

$$S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i} = -i \frac{S_+ - S_-}{2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \tag{6.248}$$

In questa rappresentazione troviamo facilmente che:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^2 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
\left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^3 &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -2i & 0 \\ 2i & 0 & -2i \\ 0 & 2i & 0 \end{pmatrix} = \frac{S_y}{\hbar}
\end{aligned} \tag{6.249}$$

da cui, per $k \in \mathbb{N}$:

$$\left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^{2k+1} = \left(\frac{S_y}{\hbar}\right) \quad \left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^{2k} = \left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^2 \quad (6.250)$$

Questo ci permette di separare la serie in somme su potenze pari e dispari, trovando l'espressione cercata:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar} S_y \beta} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i)^n \beta^n \left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^n = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i)^n \beta^n \left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^n = \\ &= 1 + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} (-i)^{2k+1} \beta^{2k+1} \left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^{2k+1} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} (-i)^{2k} \beta^{2k} \left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^{2k} = \\ &= 1 - i \frac{S_y}{\hbar} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \beta^{2k+1} + \left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \beta^{2k} = \\ &= 1 - i \frac{S_y}{\hbar} \sin \beta + \left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^2 (\cos \beta - 1) = 1 - \left(\frac{S_y}{\hbar}\right)^2 (1 - \cos \beta) - i \frac{S_y}{\hbar} \sin \beta \end{aligned} \quad (6.251)$$

Possiamo ora scrivere questa in forma matriciale:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar} S_y \beta} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1 - \cos \beta}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{i \sin \beta}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.252)$$

6.7.2 Recap sull'Operatore Statistico

Ricordiamo adesso che un sistema è in generale descritto da un operatore statistico se non si ha piena conoscenza dello stato del sistema. Un opportuno operatore statistico ρ ha traccia unitaria, è hermitiano e definito positivo.

$$\text{Tr}(\rho) = 1 \quad \rho = \rho^\dagger \quad \rho \geq 0 \quad (6.253)$$

Uno stato è puro se e solo se l'operatore statistico è idempotente:

$$\rho = |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \iff \rho^2 = \rho \quad (6.254)$$

dove lo stato $|\alpha\rangle$ è definito a meno di una fase. Inoltre i valori attesi degli osservabili sono dati da:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) \quad (6.255)$$

6.7.3 Stato Puro di una Particella a Spin 1/2

Vogliamo adesso dimostrare come sia possibile determinare lo stato puro di una particella a spin 1/2 a partire dai valori attesi delle componenti dello spin. Nella sua forma più generale è descritto da un vettore (un raggio), che possiamo scrivere nella base di S_z :

$$|\alpha\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \Rightarrow \rho = |\alpha\rangle \langle \alpha| = \begin{pmatrix} |c_+|^2 & c_+ c_-^* \\ c_- c_+^* & |c_-|^2 \end{pmatrix} \quad (6.256)$$

Notiamo che i parametri da determinare sono tre, i due moduli e la differenza di fase tra i coefficienti:

$$c_+ = a_+ e^{i\phi_+}, \quad c_- = a_- e^{i\phi_-} \Rightarrow \rho = \begin{pmatrix} a_+^2 & a_+ a_- e^{i(\phi_+ - \phi_-)} \\ a_+ a_- e^{-i(\phi_+ - \phi_-)} & a_-^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_+^2 & a_+ a_- e^{i\phi} \\ a_+ a_- e^{-i\phi} & a_-^2 \end{pmatrix} \quad (6.257)$$

dove ovviamente scegliamo:

$$a_+, a_- \geq 0, \quad \phi \in [-\pi, \pi] \quad (6.258)$$

Troviamo immediatamente una condizione sui coefficienti dalla normalizzazione:

$$1 = |c_+|^2 + |c_-|^2 = a_+^2 + a_-^2 \quad (6.259)$$

Questa condizione suggerisce che in realtà solo due dei valori attesi siano necessari per determinare il terzo, in quanto tre equazioni determinano univocamente i tre parametri.

Calcoliamo poi i valori attesi delle componenti dello spin \vec{S} , ponendoci nelle unità $\hbar = 1$:

$$\begin{aligned}\langle S_z \rangle &= \text{Tr}(\rho S_z) = \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} a_+^2 & a_+ a_- e^{i\phi} \\ a_+ a_- e^{-i\phi} & a_-^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \right\} = \text{Tr} \begin{pmatrix} \frac{a_+^2}{2} & \frac{a_+ a_-}{2} e^{-i\phi} \\ -\frac{a_+ a_-}{2} e^{i\phi} & -\frac{a_-^2}{2} \end{pmatrix} = \frac{a_+^2 - a_-^2}{2} \\ \langle S_y \rangle &= \text{Tr}(\rho S_y) = \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} a_+^2 & a_+ a_- e^{i\phi} \\ a_+ a_- e^{-i\phi} & a_-^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix} \right\} = \text{Tr} \begin{pmatrix} \frac{i}{2} a_+ a_- e^{i\phi} & \frac{i}{2} a_-^2 \\ -\frac{i}{2} a_+^2 & -\frac{i}{2} a_+ a_- e^{-i\phi} \end{pmatrix} = -a_+ a_- \sin \phi \\ \langle S_x \rangle &= \text{Tr}(\rho S_x) = \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} a_+^2 & a_+ a_- e^{i\phi} \\ a_+ a_- e^{-i\phi} & a_-^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} \right\} = \text{Tr} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} a_+ a_- e^{i\phi} & \frac{1}{2} a_-^2 \\ \frac{1}{2} a_+^2 & \frac{1}{2} a_+ a_- e^{-i\phi} \end{pmatrix} = a_+ a_- \cos \phi\end{aligned}\tag{6.260}$$

Pertanto il valore atteso lungo z insieme alla condizione di normalizzazione determinano i moduli dei coefficienti univocamente:

$$\begin{cases} a_+^2 + a_-^2 = 1 \\ a_+^2 - a_-^2 = 2 \langle S_z \rangle \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_+ = \sqrt{\frac{1 + 2 \langle S_z \rangle}{2}} \\ a_- = \sqrt{\frac{1 - 2 \langle S_z \rangle}{2}} \end{cases}\tag{6.261}$$

Notiamo infine come in realtà per determinare ϕ univocamente è necessario conoscere sia $\langle S_x \rangle$ che $\langle S_y \rangle$, o almeno uno dei due più il segno dell'altro. Questo è dovuto alle proprietà di \sin, \cos rispetto al cambiamento di segno:

$$\begin{cases} \langle S \rangle_x = a_+ a_- \cos \phi \\ \langle S \rangle_y = -a_+ a_- \sin \phi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \phi = \pm \arccos\left(\frac{\langle S \rangle_x}{a_+ a_-}\right) \\ \phi = k\pi + (-1)^k \arcsin\left(\frac{\langle S \rangle_y}{a_+ a_-}\right) \quad k = 0, 1 \end{cases}\tag{6.262}$$

6.7.4 Miscela Statistica di una Particella a Spin 1/2

Facciamo adesso l'analisi precedente per il più generale caso di una miscela statistica. Essendo hermitiano, la forma più generale dell'operatore statistico può essere scritta nella seguente parametrizzazione:

$$\rho = \begin{pmatrix} a + d & b - ic \\ b + ic & a - d \end{pmatrix} \quad a, b, c, d \in \mathbb{R}\tag{6.263}$$

Per la condizione di normalizzazione $\text{Tr} \rho = 1$ troviamo $a = 1/2$:

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + d & b - ic \\ b + ic & \frac{1}{2} - d \end{pmatrix}\tag{6.264}$$

Calcoliamo nuovamente i valori attesi dello spin:

$$\begin{aligned}\langle S_z \rangle &= \text{Tr}(\rho S_z) = \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + d & b - ic \\ b + ic & \frac{1}{2} - d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \right\} = \text{Tr} \begin{pmatrix} \frac{1+2d}{4} & \frac{b+ic}{4} \\ -\frac{b-ic}{4} & -\frac{1-2d}{4} \end{pmatrix} = d \\ \langle S_y \rangle &= \text{Tr}(\rho S_y) = \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + d & b - ic \\ b + ic & \frac{1}{2} - d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix} \right\} = \text{Tr} \begin{pmatrix} \frac{i(b-ic)}{4} & \frac{i(1-2d)}{4} \\ -\frac{i(1+2d)}{4} & -\frac{i(b+ic)}{4} \end{pmatrix} = c \\ \langle S_x \rangle &= \text{Tr}(\rho S_x) = \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + d & b - ic \\ b + ic & \frac{1}{2} - d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} \right\} = \text{Tr} \begin{pmatrix} \frac{b-ic}{4} & \frac{1-2d}{4} \\ \frac{1+2d}{4} & \frac{b+ic}{4} \end{pmatrix} = b\end{aligned}\tag{6.265}$$

Pertanto nella parametrizzazione scelta la relazione tra i parametri e i valori attesi è apparente, in modo che l'operatore statistico può essere sempre scritto in una maniera piuttosto suggestiva:

$$\begin{aligned}\rho &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \langle S_z \rangle & \langle S_x \rangle - i \langle S_y \rangle \\ \langle S_x \rangle + i \langle S_y \rangle & \frac{1}{2} - \langle S_z \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \mathbb{1} + \langle S_z \rangle \sigma_z + \langle S_y \rangle \sigma_y + \langle S_x \rangle \sigma_x = \\ &= \frac{1}{2} \mathbb{1} + \langle \vec{S} \rangle \cdot \vec{\sigma} = \frac{1}{2} \mathbb{1} + \frac{2}{\hbar^2} \langle \vec{S} \rangle \cdot \vec{S}\end{aligned}\tag{6.266}$$

Questo risultato non ci sorprende in quanto in realtà la parametrizzazione equivale ad essere partiti dall'operatore densità scritto come combinazione lineare delle matrici di Pauli o equivalentemente degli operatori di spin (che insieme all'identità formano una base per le matrici 2×2):

$$\rho = \frac{1}{2}\mathbb{1} + \vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\sigma} = \frac{1}{2}\mathbb{1} + \frac{2}{\hbar}\vec{\mathbf{c}} \cdot \vec{\mathbf{S}} \quad \vec{\mathbf{c}} \in \mathbb{R}^3 \quad (6.267)$$

Siccome le matrici di Pauli sono a traccia nulla allora il coefficiente sull'identità deve essere necessariamente $1/2$ affinché la traccia sia normalizzata. I coefficienti degli operatori di spin devono poi coincidere con i valori attesi per le proprietà delle matrici di Pauli (e dunque degli operatori di spin):

$$\text{Tr}(\sigma_a \sigma_b) = 2\delta_{ab} \iff \text{Tr}(S_a S_b) = \frac{\hbar^2}{2}\delta_{ab} \quad (6.268)$$

Usando queste infatti troviamo quanto atteso:

$$\langle S_a \rangle = \text{Tr}(\rho S_a) = \text{Tr}\left(\frac{1}{2}S_a + \frac{2}{\hbar}c_b S_a S_b\right) = \text{Tr}\left(\frac{1}{2}S_a\right) + \frac{2}{\hbar}c_b \text{Tr}(S_a S_b) = \frac{2}{\hbar}c_b \frac{\hbar^2}{2}\delta_{ab} = \hbar c_a \quad (6.269)$$

In generale troviamo che per identificare un operatore statistico ci servono tanti osservabili indipendenti quanti parametri liberi descrivono il sistema. Ad esempio se vogliamo determinare l'operatore statistico di un sistema che sta in momento angolare j allora i parametri da determinare sono $2j + 1$. Chiaramente la sola polarizzazione (ossia $\langle J_a \rangle$, $a = 1, 2, 3$) descrive il sistema solo per $j = 1/2$. Per valori di j superiori sono necessari ordini di multipolo superiori (combinazioni dei prodotti del tipo $J_a J_b$, $J_a J_b J_c$ e così via).

Bibliografia

- [Bal] Trahern Balachandran. *Lectures on Group Theory for Physicists*. Bibliopolis.
- [Cal] P. Caldirola. *Introduzione alla Fisica Teorica*. UTET.
- [Coh] Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics*. Wiley.
- [Lan] Lifshitz Landau. *Mechanics*. OPA.
- [Lee] T. D. Lee. *Particle Physics and Introduction to Field Theory*. OPA.
- [Mes] A. Messiah. *Quantum Mechanics*. Dover.
- [Sak] Napolitano Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press.
- [Tay] J. R. Taylor. *Scattering Theory: the quantum theory on non-relativistic collisions*. Wiley.