

Meccanica Quantistica

Roberto Gargiulo

27 febbraio 2021

Indice

I	Scattering	10
1	Scattering Classico	12
1.1	Orbite di Scattering	12
1.1.1	Tipi di Orbite	12
1.2	Vantaggi del Potenziale Centrale	13
1.2.1	Simmetrie in un Potenziale Centrale	13
1.2.2	Traiettoria	15
1.2.3	Angolo di Deflessione	16
1.3	Legame tra Orbite e Potenziali	17
1.3.1	Potenziale Asintoticamente Completo	17
1.3.2	Potenziale Non Asintoticamente Completo	18
1.4	Condizioni Necessarie al Moto Libero Asintotico	18
1.5	Sezione d'Urto	20
1.5.1	Definizione	20
1.5.2	Sezione d'Urto di Rutherford	22
1.5.3	Potenziale Repulsivo a range finito	23
2	Preliminari allo Scattering Quantistico	24
2.1	Operatori Unitari	24
2.1.1	Invertibilità	24
2.1.2	Aggiunto Hermitiano	24
2.2	Operatori Isometrici	25
2.2.1	Inverso Sinistro	26
2.3	Limiti di Vettori	26
2.3.1	Convergenza Forte e Debole	26
2.3.2	Andamento Asintotico	27
2.3.3	Condizione Sufficiente alla Convergenza Forte	27
2.4	Limiti di Operatori	28
2.5	Integrale Gaussiano	28
2.5.1	Caso Reale	28
2.5.2	Caso Complesso	29
2.6	Evoluzione Libera di un Pacchetto Gaussiano	30
3	Primi Risultati per lo Scattering Quantistico	32
3.1	Scattering da Potenziale	32
3.2	Condizioni Sufficienti alla Completezza Asintotica	33
3.3	Condizione Asintotica	33
3.3.1	Dimostrazione	34
3.4	Operatori di Moeller	35
3.4.1	Ortogonalità di Stati Asintotici e Legati	35
3.4.2	Legame alla Completezza Asintotica	36
3.5	Operatore di Scattering	36
3.5.1	Definizione	36
3.5.2	Contenuto Fisico dell'Operatore di Scattering	37
3.5.3	Proprietà	37
3.5.4	Conservazione dell'Energia	37

4	Ampiezza di Scattering	39
4.1	Definizione	39
4.1.1	Matrice t on shell	39
4.1.2	Definizione di Ampiezza di Scattering	40
4.2	Sezione d'Urto nello Scattering Quantistico	40
4.3	Sezione d'Urto Differenziale ed Ampiezza di Scattering	41
4.3.1	Distribuzione degli Stati Asintotici Passati	42
4.3.2	Media Classica nello Scattering di Particelle	42
4.3.3	Dimostrazione	43
4.4	Forward Scattering	46
4.5	Teorema Ottico	46
4.6	Matrice di Scattering per un dato potenziale	47
4.7	Condizione Asintotica sulle Autofunzioni Improprie di Scattering	48
4.7.1	Legame tra Asintoto Entrante e Uscente	50
5	Equazione di Schrodinger in Potenziali Centrali	51
5.1	Equazione di Schrodinger Radiale Stazionaria	51
5.2	Equazione Angolare	51
5.3	Equazione Radiale	51
5.4	Particella Libera	51
6	Metodo delle Onde Parziali	52
6.1	Condizione Asintotica sulle Autofunzioni Improprie Radiali	52
6.1.1	Autofunzioni Improprie Radiali di una Particella Libera	54
6.2	Decomposizione delle Autofunzioni di Scattering nelle Autofunzioni Radiali	54
6.2.1	Coefficienti per Autofunzioni di Scattering Uscenti	56
6.2.2	Cambiamento di Base	56
6.3	Ampiezza di Scattering con il Metodo delle Onde Parziali	57
6.3.1	Sezione d'Urto Differenziale e Totale	58
6.4	Buca Quadrata Sferica	58
6.4.1	Formula Generale per gli Sfasamenti	59
6.4.2	Casi Limite	60
6.5	Approssimazione in Onde Parziali	61
6.5.1	Teorema di Levinson	61
6.5.2	Troncamento della Serie	62
6.5.3	Calcolo Generale degli Sfasamenti	63
6.6	Scattering da Sfera Dura	63
6.7	Potenziale di Yukawa	63
6.8	Potenziale a Delta	63
7	Risonanze	64
7.1	Effetto Ramsauer-Townsend	64
7.2	Generalità delle Risonanze	64
7.3	Formula di Breit-Wigner	65
7.3.1	Caso di un Picco	65
7.3.2	Risonanza attorno ad una Fase Generica	67
7.4	Limiti sulla Variazione dello Sfasamento	68
7.5	Stati Metastabili	71
7.5.1	Condizioni sul Pacchetto	71
7.5.2	Andamento Asintotico del Pacchetto	71
7.5.3	Contributo dell'Onda Incidente	72
7.5.4	Contributo dell'Onda di Scattering	73
7.5.5	Durata degli Stati Metastabili	74
7.5.6	Legge di Decadimento degli Stati Metastabili	76
7.5.7	Evoluzione degli Stati Metastabili in prossimità del Centro di Diffusione	77
7.5.8	Condizioni per la Risonanza sul Potenziale	78

8	Approssimazione di Born	79
8.1	Metodo Perturbativo per Autofunzioni Improprie	79
8.2	Funzione di Green per l'Equazione di Helmholtz	80
8.3	Ampiezza di Scattering al primo ordine in Approssimazione di Born	81
8.4	Potenziale Centrale Generico	82
8.4.1	Validità dell'Approssimazione di Born	82
8.5	Potenziale di Yukawa	83
8.5.1	Potenziale Coulombiano	83
9	Cenni ad Urti Anelastici	84
9.1	Generalità	84
9.2	Teoria delle Perturbazioni Dipendenti dal Tempo	84
9.3	Regola d'Oro di Fermi	85
9.4	Scattering Elastico	87
9.4.1	Sezione d'Urto	87
9.5	Urto di un Elettrone su un Atomo di Idrogeno	88
II	Questioni Fondamentali di Meccanica Quantistica	90
10	Entanglement	91
10.1	Sistemi di N Particelle	91
10.1.1	Fisica Classica	91
10.1.2	Fisica Quantistica	91
10.2	Prodotto Tensoriale di Spazi di Hilbert	91
10.2.1	Esistenza degli Stati Entangled	92
10.2.2	Prodotto Tensoriale di Operatori	93
10.3	Spazio di due Particelle a Spin 1/2	94
10.4	Base di Bell	94
10.4.1	Notazione	94
10.4.2	Definizione degli Stati	95
11	Teletrasporto	97
11.1	Generalità	97
11.1.1	Fisica Classica	97
11.1.2	Fisica Quantistica	97
11.2	Teorema No Cloning	98
11.3	Teletrasporto tramite Entanglement	99
12	Operatore Statistico	101
12.1	Informazione Incompleta su un Sistema Classico	101
12.2	Informazione Incompleta su un Sistema Quantistico	102
12.2.1	Traccia di un Operatore	102
12.2.2	Esempi di Informazione Incompleta	103
12.2.3	Operatore Statistico	103
12.3	Proprietà dell'Operatore Statistico	105
12.3.1	Caratterizzazione	105
12.3.2	Decomposizione non Unica	106
12.3.3	Caratterizzazione di Stati Puri e Misti	106
12.3.4	Spazio degli Operatori Statistici	107
12.4	Equazione di von Neumann	107
12.5	Operatore Statistico di Sistemi	107
12.5.1	Operatore Statistico Ridotto	107
12.5.2	Stati Puri Non Entangled	108
12.5.3	Sistemi Non Interagenti	108
12.5.4	Esempio	109

12.6	Entropia di von Neumann	109
12.6.1	Entropia di Sistemi Non Interagenti	110
12.7	Principio di Massima Entropia	110
12.7.1	Equilibrio Termodinamico	111
12.7.2	Ensemble Microcanonico	111
12.7.3	Ensemble Canonico e Distribuzione di Boltzmann	112
12.8	Operatore Statistico di una Particella a Spin $1/2$	113
12.8.1	Stato Puro	113
12.8.2	Stato Miscela	113
13	Paradosso EPR	114
13.1	Probabilità di Overlap tra Autostati di Singola Particella	114
13.2	Probabilità di Overlap tra Autostati Entangled	115
13.3	Problemi della Meccanica Quantistica	115
13.4	Esperimento Ideale di EPR	117
13.5	Disuguaglianza di Bell	118
III	Invarianza di Gauge	120
14	Trasformazioni di Gauge	121
14.1	Trasformazioni di Gauge in Meccanica Classica	121
14.2	Trasformazioni di Gauge in Meccanica Quantistica	122
14.2.1	Principio di Corrispondenza	122
14.3	Operatore di Trasformazione di Gauge	123
14.4	Quantizzazione dell'Hamiltoniana di una Particella in un Campo Elettromagnetico	125
14.5	Scelta della Fase negli Operatori di Trasformazione di Gauge	126
14.5.1	Inclusione dello Spin	127
14.6	Monopolo Magnetico nelle Equazioni di Maxwell	127
14.7	Potenziale Vettore di un Monopolo Magnetico	128
14.7.1	Problema del Potenziale Vettore	128
14.7.2	Divisione in Carte	129
14.7.3	Calcolo dei Potenziali Vettori	129
14.7.4	Intersezione delle Carte	130
14.8	Monopolo Magnetico in Meccanica Classica	130
14.9	Monopolo Magnetico in Meccanica Quantistica	131
IV	Integrale dei Cammini di Feynman	132
15	Formulazione della Meccanica Quantistica con Integrale dei Cammini	133
15.1	Proprietà dell'Evolutore Temporale	133
15.1.1	Definizione	133
15.1.2	Funzione di Green	133
15.2	Soluzione per l'Equazione di Schrodinger indipendente dal Tempo	134
15.3	Sviluppo di Dyson	135
15.4	Funzione di Green per la Particella Libera	136
15.4.1	Espressione con Azione Classica	137
15.4.2	Supporto	137
15.5	Integrale dei Cammini	138
15.5.1	Suddivisione dell'intervallo	138
15.5.2	Funzione di Green per un intervallo infinitesimo	139
15.5.3	Definizione dell'Integrale dei Cammini di Feynman	140
15.6	Considerazioni sull'Integrale di Feynman	141
15.6.1	Limite Classico	141
15.6.2	Importanza in Fisica	141
15.6.3	Problematiche e Soluzioni	141
15.6.4	Inclusione dello Spin	141
15.7	Integrale dei Cammini nello Spazio delle Fasi	141
15.8	Caso di un Sistema di Particelle in Tre Dimensioni	142
15.9	Caso in Presenza di un Campo Elettromagnetico	144

16 Applicazioni dell'Integrale dei Cammini	147
16.1 Effetto di Ahornov-Bohm	147
16.1.1 Esperimento	147
16.1.2 Forma della Funzione d'Onda	148
16.1.3 Potenziale Vettore	149
16.1.4 Calcolo dell'Azione	149
16.1.5 Spettro di Interferenza	151
16.2 Variante Elettrostatica dell'Effetto AB	151
16.2.1 Descrizione del Sistema	151
16.2.2 Spettro di Interferenza	152
16.3 Variante Gravitazionale dell'Effetto AB	153
16.3.1 Descrizione del Sistema	153
16.3.2 Spettro di Interferenza	153
16.4 Funzione di Partizione con Integrale dei Cammini	154

V Struttura Iperfine 157

17 Struttura Iperfine	158
17.1 Momento Magnetico Nucleare	158
17.2 Hamiltoniana Imperturbata e Fine	159
17.2.1 Hamiltoniana Imperturbata	159
17.2.2 Hamiltoniana Fine	159
17.2.3 Inclusione dello Spin Nucleare	160
17.3 Forma Esplicita dell'Hamiltoniana Iperfine	160
17.3.1 Accoppiamento al Campo Magnetico e Potenziale Vettore	161
17.3.2 Termine di Contatto	162
17.3.3 Hamiltoniana Risultante	163
17.4 Struttura Iperfine degli Stati s	164
17.4.1 Scelta della Base	164
17.4.2 Calcolo della Correzione Iperfine al Primo Ordine	164
17.5 Emissione Spontanea	165
17.6 Campo Elettromagnetico Incoerente	165
17.7 Rate di Transizione con Perturbazione Elettromagnetica	166
17.7.1 Forma dell'Hamiltoniana	166
17.7.2 Espressione Generale dei Rate di Transizione	167
17.7.3 Approssimazione di Dipolo	168
17.8 Vite Medie di Stati Eccitati Iperfini	169
17.8.1 Formula per Stati s	169
17.8.2 Calcolo Esplicito	169

VI Simmetrie in Meccanica Quantistica 171

18 Teorema di Wigner	172
18.1 Simmetrie in Meccanica Quantistica	172
18.2 Enunciato del Teorema di Wigner	173
18.2.1 Operatori Unitari e Antiunitari	174
18.3 Dimostrazione del Teorema di Wigner	174
18.3.1 Base dei Rappresentanti	174
18.3.2 Scelte dei Coefficienti Trasformati per un Vettore	175
18.3.3 Generalizzazione ad ogni Vettore	177
18.3.4 Definizione dell'Operatore di Simmetria	179

19	Isometrie dello Spazio Euclideo	180
19.1	Gruppo $E(3)$	180
19.2	Rappresentazione di $E(3)$ sugli Operatori su Spazio di Hilbert	181
19.3	Determinazione degli Operatori di Rototraslazione	183
19.4	Gruppi e Algebre di Lie	183
19.4.1	Definizione di Gruppo di Lie	184
19.4.2	Generatori Infinitesimali del Gruppo	184
19.4.3	Algebra di Lie	185
19.4.4	Mappa Esponenziale	186
19.4.5	Rappresentazioni di Gruppi di Lie	186
19.5	Algebra di Lie di $E(3)$	187
19.6	Espressione degli Operatori di Rototraslazione	187
19.6.1	Rototraslazioni Infinitesime	187
19.6.2	Significato Fisico dei Generatori delle Rototraslazioni	188
19.7	Rappresentazione di $E(3)$ per un Sistema di Particelle	189
19.7.1	Parte di Spin per una Particella	190
19.7.2	Parte Configurazionale per una Particella	190
19.7.3	Sistema di Particelle	191
19.8	Rotazioni di Spin $1/2$	191
19.8.1	Espressione Matriciale	191
19.8.2	Angoli di Eulero	191
19.8.3	Probabilità di Overlap per Stati Ruotati di un angolo infinitesimo	191
19.9	Rotazioni di Spin 1	191
20	Operatori Tensoriali Irriducibili	192
20.1	Invarianza di Grandezze Fisiche per Rototraslazioni	192
20.2	Definizione di Operatori Tensoriali	193
20.2.1	Rappresentazione di $SO(3)$	193
20.2.2	Caratterizzazione in termini dei Generatori Infinitesimali	193
20.3	Definizione di Operatore Tensoriale Irriducibile	194
20.3.1	Possibili Dimensioni di Operatori Tensoriali Irriducibili	194
20.3.2	Esistenza di Operatori Tensoriali Irriducibili di Qualunque Rango	195
20.4	Coefficienti di Clebsch-Gordan	196
20.4.1	Prime Proprietà	196
20.4.2	Ricorsività	196
20.5	Teorema di Wigner-Eckart	197
20.5.1	Enunciato	197
20.5.2	Dimostrazione	197
20.5.3	Operatori Scalari e Vettoriali	199
20.6	Teorema di Proiezione	199
VII	Sistemi a due Livelli	202
21	Esempi di Sistemi a due Livelli	203
21.1	Spin in un Campo Magnetico Costante	203
21.2	Generico Sistema a due Livelli	204
21.3	MASER	204
21.3.1	Molecola di Ammoniaca	204
21.3.2	Sistema a due Livelli con Dipolo Elettrico	205
21.4	Risonanza Magnetica Nucleare	207

Programma

Scattering

Scattering Classico 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).

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

Primi Risultati per lo Scattering Quantistico 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 (Taylor).

Ampiezza di Scattering Matrice T on shell. Ampiezza di scattering. Costruzione degli operatori di Moeller per lo scattering da potenziale centrale (Taylor). Teorema ottico. Matrice S (Caldirola).

Metodo delle Onde Parziali Sviluppo in onde parziali dell'ampiezza di scattering. (Caldirola).

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

Approssimazione di Born Approssimazione di Born. Derivazione dell'approssimazione di Born mediante la teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo (Caldirola).

Cenni ad Urti Anelastici Diffusione anelastica di un elettrone da parte di un atomo di idrogeno (Caldirola).

Questioni Fondamentali di Meccanica Quantistica

Entanglement e Teletrasporto Stati di Bell, Teorema "no cloning", teletrasporto quantistico (Sakurai).

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

Paradosso EPR Articolo di Einstein-Podolsky-Rosen, disuguaglianza di Bell (Sakurai).

Invarianza di Gauge

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 dei Cammini di Feynman

Formulazione della Meccanica Quantistica con Integrale dei Cammini Integrale di Feynman sui cammini. L'integrale sui cammini di Feynman, nello spazio delle configurazioni e delle fasi (T.D. Lee).

Applicazioni dell'Integrale dei Cammini Esperimento di Bohm-Aharonov (Sakurai). La funzione di partizione di un sistema quantistico all'equilibrio, scritta come integrale sui cammini. Frequenze di Matsubara.

Struttura Iperfine

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 $1s_{F=1}^1$ dell'atomo di idrogeno. (Cohen-Tannoudji).

Simmetrie in Meccanica Quantistica

Teorema di Wigner Simmetria ed invarianza in Meccanica Quantistica. Teorema di Wigner (Caldirola-Sakurai).

Isometrie dello Spazio Euclideo Il gruppo euclideo $E(3)$ dei moti rigidi. Gruppi di Lie, omomorfismi tra algebre di Lie, rappresentazioni di algebre di Lie. 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). 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 particelle con spin qualsiasi. Forma esplicita delle matrici di rotazione per particelle con spin $1/2$ ed 1 (Caldirola-Sakurai).

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

Esempi di Sistemi a due Livelli

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

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.

Lezione 28 Calcolo della struttura iperfina del livello fondamentale dell'idrogeno e dei metalli alcalini. La riga iperfina a 21 cm dell'idrogeno.

Lezione 29 Calcolo della vita media dello stato iperfine $1S^1/F = 1$ dell'atomo di idrogeno.

Simmetrie

Lezione 30 Simmetrie ed invarianza in MQ. Teorema di Wigner.

Lezione 31 Teorema di Wigner. Gruppo euclideo dei moti rigidi. Rappresentazioni unitarie proiettive di un gruppo.

Lezione 32 Generatori infinitesimi di gruppi di Lie. Algebra di Lie del gruppo E(3) dei moti rigidi. La mappa esponenziale. Rotazione degli stati di un sistema quantistico, definizione generale del momento angolare di un sistema quantistico. Rotazioni finite dello stato di un sistema di particelle con spin qualsiasi.

Lezione 33 Dinamiche invarianti per rotazioni e traslazioni. Conservazione dell'impulso e del momento angolare. Operatori tensoriali irriducibili.

Lezione 34 Teorema di Wigner-Eckart.

Lezione 35 Esercitazione sul teorema di Wigner-Eckart.

Parte I

Scattering

Introduzione

Lo scattering, ossia la collisione tra particelle, è la **principale tecnica di misura e verifica della teoria quantistica**. Tra i più importanti esperimenti di scattering nella storia della fisica ricordiamo:

1. L'Esperimento di Rutherford con le particelle alfa, che rivelò più in dettaglio la natura dell'atomo;
2. L'Esperimento di Franck-Hertz, dove si osservò la diffusione di elettroni da un vapore di mercurio, dimostrando che l'atomo di Mercurio ha uno spettro discreto, in accordo con la predizione di Bohr;
3. Un altro esperimento di Rutherford, in cui si dimostrò che anche il nucleo aveva struttura interna.

Gli esperimenti di scattering permettono di capire ad esempio il potenziale di interazione tra due particelle e la struttura interna stessa delle particelle.

Rispetto alle energie e velocità coinvolte, possiamo dividere lo studio della fisica delle particelle in due macro-categorie: le collisioni non-relativistiche e le collisioni relativistiche. Noi ci limiteremo alle prime, in quanto uno studio delle seconde richiederebbe l'uso della Teoria Quantistica dei Campi.

Un'altra possibile suddivisione degli scattering dipende dai possibili prodotti: processi a canale singolo, in cui dati i reagenti vi è un solo insieme di prodotti; processi multi-canale, con più insiemi di prodotti.

A tal riguardo ritorniamo all'esempio dell'esperimento di Rutherford, in cui il processo di interesse è uno a canale singolo (non relativistico), dove particelle alfa incidono elasticamente su bersagli fissi, ossia atomi di oro $\alpha^+ \text{Au} \rightarrow \alpha^+ \text{Au}$. Questo modello di diffusione, ossia collisione a **canale singolo** di un proiettile **su bersaglio fisso**, è quello che studieremo più in dettaglio. Nel caso di collisioni tra due particelle, dove una è molto più pesante dell'altra, è infatti sempre possibile ricondursi alla collisione su bersaglio fisso di un proiettile. In questo caso il centro di massa coincide con la particella più massiva; possiamo dunque separare il moto del centro di massa e il moto relativo, dove quest'ultimo corrisponde al caso che studieremo. Inoltre si trova che in generale non esistono veri processi a canale singolo, ma ad energie sufficientemente basse questa risulta essere una buona approssimazione per una vasta classe di processi.

Inoltre ci occuperemo soprattutto di **collisioni elastiche**, ossia con conservazione dell'energia cinetica, che di nuovo sono una buona approssimazione a basse energie. Uno scattering di questo tipo coinvolge dunque effettivamente una singola particella e un potenziale scalare ed è detto dunque **scattering da potenziale**.

I potenziali di interazione coinvolti saranno poi tipicamente **potenziali centrali**, che permettono di sfruttare la simmetria rotazionale e la conservazione del momento angolare (oltre che dell'energia).

Capitolo 1

Scattering Classico

Per scopi storici e didattici iniziamo col discutere lo scattering da un punto di vista classico. Già con questo formalismo troveremo le generalità del fenomeno, che si trasporteranno facilmente a quello quantistico.

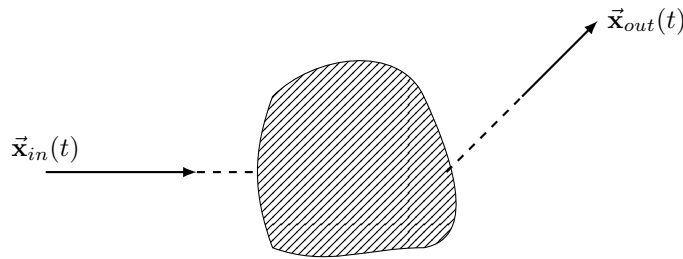
1.1 Orbite di Scattering

Cerchiamo adesso di visualizzare un tipico processo di collisione tra un proiettile e un bersaglio fisso, che interagisce con il proiettile tramite un certo potenziale. Il raggio d'azione del potenziale è dell'ordine di una lunghezza d molto piccola, che non può essere osservata direttamente. Supponendo velocità dell'ordine di $v \sim 10^6 \text{ms}^{-1}$ e $d \sim 10^{-8} \text{cm}$ allora il tempo di interazione è puro molto breve $\tau \sim 10^{-16} \text{s}$. Questo significa che non riusciamo a studiare lo stato della particella durante l'interazione, ma solo prima e dopo la collisione.

Dal punto di vista classico prima della collisione la particella viaggia con moto uniforme lungo una retta e dopo la collisione, fuori dal raggio d'azione, inizia nuovamente a viaggiare con moto uniforme lungo una diversa retta. Detta $\vec{x}(t)$ l'orbita del proiettile (nello spazio delle configurazioni), tutto ciò che possiamo conoscere sul moto sono dunque le condizioni asintotiche per $t \rightarrow \pm\infty$:

$$\begin{cases} \vec{x}(t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \vec{x}_{in}(t) = \vec{b}_{in} + \vec{v}_{in}t \\ \vec{x}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \vec{x}_{out}(t) = \vec{b}_{out} + \vec{v}_{out}t \end{cases} \quad (1.1)$$

Un'orbita di questo tipo è detta **orbita di scattering** e le orbite $\vec{x}_{in}(t)$, $\vec{x}_{out}(t)$ sono detti asintoti di in o out, oppure iniziale e finale, o ancora passato e futuro. Questi asintoti sono dunque caratterizzate da soli sei parametri, ossia due coppie di vettori ciascuno $\vec{x}_{in} \iff (\vec{b}_{in}, \vec{v}_{in})$ e $\vec{x}_{out} \iff (\vec{b}_{out}, \vec{v}_{out})$. Schematicamente lo scattering può essere visto come nella seguente figura.



Una teoria di scattering classica è dunque una capace di predire l'asintoto finale dato l'asintoto iniziale.

1.1.1 Tipi di Orbite

Chiaramente per un potenziale di interazione generico le uniche orbite non saranno solo di scattering. Infatti se il potenziale è attrattivo in certe regioni ci aspettiamo l'esistenza anche di moti limitati, che non sono rilevanti ai processi di collisione.

In generale possiamo distinguere tra orbite **limitate** e orbite **non limitate**, a seconda che avvengano in una regione finita dello spazio o meno. In quelle non limitate possiamo poi fare un'ulteriore distinzione in:

1. Orbite di **Scattering**, che ammettono asintoti di in ed out;
2. Orbite di **Cattura**, in cui vi è solo l'asintoto di in;

3. Orbite di **Decadimento**, in cui vi è l'asintoto di out.

Le orbite di cattura sono quelle che finiscono in un'orbita limitata dopo essere entrate nel potenziale con asintoto iniziale. Le orbite di decadimento sono invece quelle inizialmente in un'orbita limitata che sono emesse dal potenziale finché non diventano libere.

Questo significa che non tutte le orbite non limitate sono orbite di scattering. A sua volta questo implica che in generale non potremo trovare una relazione univoca tra asintoti iniziali e finali, in quanto sarà possibile che certi asintoti iniziali non posseggano affatto asintoti finali. Se esiste una relazione biunivoca tra $(\vec{b}_{in}, \vec{v}_{in})$ e $(\vec{b}_{out}, \vec{v}_{out})$ per ogni orbita di scattering allora diciamo che il potenziale è **asintoticamente completo**.

1.2 Vantaggi del Potenziale Centrale

1.2.1 Simmetrie in un Potenziale Centrale

Iniziamo adesso a parlare più quantitativamente dello scattering. Come accennato, siamo interessati al caso in cui i potenziali sono centrali. Questi potenziali permettono di semplificare notevolmente il problema dello scattering. Supponiamo poi che vadano a zero all'infinito, senza fare per il momento supposizioni sull'ordine con cui va a zero:

$$U(\vec{x}) = U(r), \quad r = |\vec{x}| \quad \lim_{r \rightarrow \infty} U(r) = 0 \quad (1.2)$$

Usando questo ricordiamo alcuni risultati di meccanica classica. In un campo di forze centrale, generato da un potenziale centrale, il momento angolare è conservato:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m\vec{r} \times \vec{v} = \text{cost} \quad (1.3)$$

Questo significa che il moto giace in un piano Σ . È sufficiente dunque studiare il moto di particelle limitate ad un piano, estendendo questo ad ogni altro piano per rotazione intorno al bersaglio, centro del potenziale e origine del sistema di riferimento. L'orbita della particella sarà dunque descritta da una coppia di coordinate polari $(r(t), \phi(t))$, con ϕ angolo tra la direzione e un asse fissato.

Per semplicità possiamo scegliere Σ come il piano xy , così che il momento angolare è diretto tutto lungo l'asse z . Inoltre vi è ancora simmetria rotazionale nel piano, indicando che nello studio di orbite di scattering, l'asintoto di in può essere scelto sempre parallelo ad una data direzione in maniera convenzionale, con velocità diretta verso l'origine. Una scelta tipica è quella con velocità parallela all'asse x , nel verso positivo.

Questo significa che la direzione e il verso della velocità \vec{v}_{in} sono già determinate. Bisogna dunque solo specificare il modulo $v_{in} = |\vec{v}_{in}|$. L'intercetta è infine specificata equivalentemente dalla distanza della retta dall'asse x , che viene detta **parametro d'impatto** b_{in} . In realtà questa distanza definisce due asintoti, ma sono equivalenti in quanto la loro dinamica è simmetrica (il potenziale centrale è anche invariante per riflessioni), indicando che basta considerare solo gli asintoti appartenenti ad un semipiano. In un campo di forze centrale pertanto l'asintoto di in è specificato, per una data scelta della direzione iniziale, dai due parametri positivi (v_{in}, b_{in}) . Questa scelta corrisponde alla condizione iniziale:

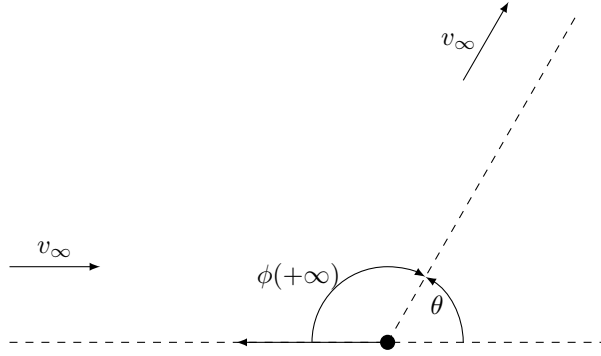
$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \phi(t) = 0 \quad (1.4)$$

con semiasse polare la semiretta negativa delle x .

La direzione dell'asintoto di out sarà a sua volta specificato dall'angolo formato da \vec{v}_{out} con l'asse x o equivalentemente il suo supplementare, che chiamiamo **angolo di deflessione** θ , e dalla velocità $v_{out} = |\vec{v}_{out}|$. In questo caso vale dunque:

$$\theta = \left| \pi - \lim_{t \rightarrow +\infty} \phi(t) \right| = \arccos(\hat{v}_{in} \cdot \hat{v}_{out}) \quad (1.5)$$

Il valore assoluto è scelto in modo tale che θ sia tra 0 e π , ossia è indipendente se la deflessione. In figura vediamo più precisamente.



L'intercetta dell'asintoto sarà poi specificata dalla distanza tra l'asintoto e la retta corrispondente a questa pendenza passante per l'origine, ossia un parametro d'impatto b_{out} . L'asintoto di out sarà dunque specificato dai tre parametri $(v_{out}, b_{out}, \theta)$.

In realtà già per un potenziale centrale generico possiamo dire che questi due set di parametri non sono indipendenti. Siccome $U(r) \rightarrow 0$ per $r \rightarrow \infty$ (altrimenti non sarebbero possibili moti uniformi all'infinito), allora negli asintoti l'energia è puramente cinetica (e senza contributi di momento angolare, che vanno come $1/r^2$). Siccome l'energia è conservata allora la velocità iniziale e finale coincidono:

$$\frac{1}{2}mv_{in}^2 = \frac{1}{2}mv_{out}^2 \Rightarrow v_{in} = v_{out} = v \quad (1.6)$$

Questo in realtà vale per ogni collisione elastica, mediata da un certo potenziale. Nel caso specifico di potenziale angolare è conservato il momento angolare. Per quanto detto questo è diretto unicamente lungo z , ossia:

$$L_z = m(xv_y - yv_x) \quad (1.7)$$

Se consideriamo questo per $t \rightarrow +\infty$ troviamo che anche il parametro di impatto è unico:

$$L_z = mb_{in}v = mb_{out}v \Rightarrow b_{in} = b_{out} = b \quad (1.8)$$

Infine, abbiamo dimostrato che in un potenziale centrale un'orbita di scattering è definita dai tre parametri (v, b, θ) , o altri tre equivalenti.

La condizione di completezza asintotica per il potenziale si riduce dunque a poter trovare una relazione $\theta = \theta(v, b)$. Due parametri equivalenti a questi sono poi dati dall'energia e il momento angolare:

$$(v, b) \iff (W, L) \Rightarrow \theta = \theta(v, b) = \theta(W, L) \quad (1.9)$$

Notiamo che la scelta di questi tre parametri è indipendente dalla direzione iniziale della particella. La velocità v coincide in generale con il modulo della velocità iniziale o finale. Il parametro d'impatto b è la distanza tra l'origine e l'asintoto iniziale o finale. Rispetto ai parametri $\vec{b}_{in}, \vec{v}_{in}$ questo è definito come segue:

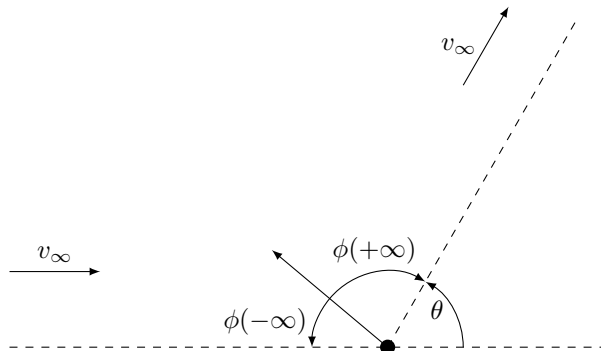
$$b = b_{in} \cos \alpha = b_{in} \sqrt{1 - (\hat{b}_{in} \cdot \hat{v}_{in})^2} \quad (1.10)$$

Infine, sempre rispetto ai parametri che definiscono gli asintoti, l'angolo di deflessione in generale è dato da:

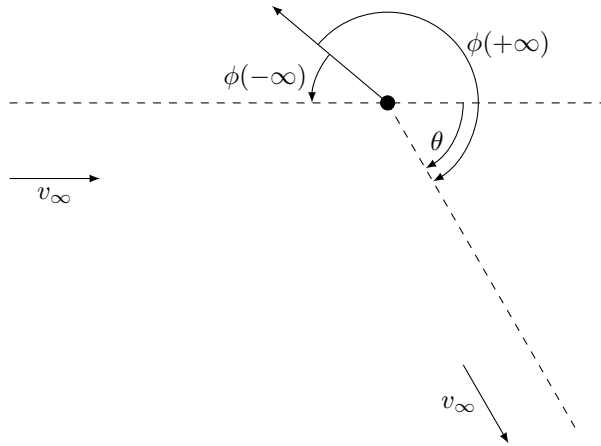
$$\theta = \arccos(\hat{v}_{in} \cdot \hat{v}_{out}) \quad 0 < \theta < \pi \quad (1.11)$$

o equivalentemente:

$$\theta = \left| \pi - \lim_{t \rightarrow +\infty} \phi(t) + \lim_{t \rightarrow -\infty} \phi(t) \right| \quad (1.12)$$



Notiamo come il valore assoluto sia importante se ad esempio la differenza tra gli angoli in entrata e in uscita è maggiore di π . Ad esempio troveremmo, lasciando lo stesso asse ma prendendo l'orbita simmetrica:



Infatti stavolta:

$$\theta = \phi(+\infty) - \phi(-\infty) - \pi \quad (1.13)$$

1.2.2 Traiettorie

Facciamo adesso una discussione più generale sulle traiettorie in cui vi è un asintoto di in. Come prima possiamo scegliere che il moto della particella giaccia nel piano xy e che viaggi da sinistra verso destra (non necessariamente parallelamente all'asse x), con asintoto iniziale "sopra" il centro. In tal caso $L_z > 0$ e possiamo scrivere che:

$$\vec{r} \times \vec{v} = r(r\dot{\phi}) \Rightarrow L_z = L = mr^2\dot{\phi} > 0 \Rightarrow \dot{\phi} = \frac{L}{mr^2} > 0 \quad (1.14)$$

Questo significa che ϕ è una funzione strettamente crescente di t e dunque la particella deve muoversi sempre verso destra o al più ruotare in senso orario attorno all'origine. Inoltre questo implica che la particella non è mai ferma, anche se $\dot{r} = 0$, a meno che non fosse inizialmente ferma all'infinito (nel qual caso rimane all'infinito, che è banale). Escludiamo il caso $L = 0$, in cui la direzione iniziale è radiale, in quanto è tipicamente problematico.

Ricordiamo adesso che l'energia della particella è data da:

$$W = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + U(r) = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + U_{\text{eff}}(r) \quad (1.15)$$

Ma siccome l'energia è conservata nel moto allora troviamo \dot{r} in funzione di r , a seconda che vi sia allontanamento $\dot{r} > 0$ o avvicinamento $\dot{r} < 0$:

$$\dot{r} = \pm \sqrt{\frac{2}{m}(W - U_{\text{eff}}(r))} \quad (1.16)$$

Pertanto il segno cambia ogni qual volta che $\dot{r} = 0$. Da questa relazione d'altra parte ricaviamo, integrando, una relazione tra t ed r :

$$dt = \pm \frac{dr}{\sqrt{\frac{2}{m}(W - U_{\text{eff}}(r))}} \Rightarrow t(r) = t_0 \pm \int_{r_0}^r \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}(W - U_{\text{eff}}(x))}} \quad (1.17)$$

Questo integrale è in generale difficile da calcolare analiticamente e anche da invertire, così che non fornisce direttamente $r(t)$. Permette di arrivare comunque ad utili informazioni al moto, anche se noi siamo interessati solo al problema dello scattering, e dunque non a valori di t, r finiti in cui $U(r)$ è non nullo. Il segno dell'integrale va poi cambiato ogni qual volta che $\dot{r} = 0$, ossia ogni volta che vi è un'inversione nel moto rispetto ad r . Questo accade per i valori di r tali che:

$$W = U_{\text{eff}}(r) \iff W = U(r) + \frac{L^2}{2mr^2} \quad (1.18)$$

Notiamo adesso che usando contemporaneamente la conservazione di energia e momento angolare troviamo un'espressione, anche se implicita, della traiettoria:

$$\begin{cases} \dot{r} = \pm \sqrt{\frac{2}{m}(W - U_{\text{eff}}(r))} \\ \dot{\phi} = \frac{L}{mr^2} \end{cases} \Rightarrow \frac{dr}{d\phi} = \frac{\dot{r}}{\dot{\phi}} = \mp \frac{mr^2}{L} \sqrt{\frac{2}{m}(W - U_{\text{eff}}(r))} \quad (1.19)$$

Troviamo dunque la $\phi(r)$, posto $r(0) = r_0 \iff \phi(r_0) = \phi(t = 0)$:

$$\phi(r) = \phi(r_0) \mp \int_{r_0}^r \frac{L}{x^2} \frac{dx}{\sqrt{2m(W - U_{\text{eff}}(x))}} \quad (1.20)$$

Questa, unita alla $t(r)$, fornisce la legge oraria della particella $(\phi(t), r(t))$. L'uso degli integrali primi ha dunque ridotto equazioni differenziali ad equazioni algebriche, che però sono difficili da calcolare esattamente ed invertire rispetto alle variabili cercate.

1.2.3 Angolo di Deflessione

Dopo aver fatto una discussione generale sulla traiettoria di una particella in un potenziale centrale, torniamo ad esaminare il caso di scattering. Vogliamo dunque esaminare i limiti delle precedenti equazioni per $t \rightarrow -\infty$, nel caso in cui la particella abbia un asintoto iniziale. In particolare vogliamo trovare l'angolo di deflessione θ , indagando il comportamento asintotico di ϕ .

Iniziamo col notare che il segno degli integrali va invertito tante volte quanto sono gli zeri dell'equazione $W = U_{\text{eff}}(r)$, per i valori di r che assume la particella nell'orbita data. Valutiamo i possibili casi:

1. Se incontra due zeri l'orbita è limitata (anche se non necessariamente chiusa), questo dunque non può accadere se la particella arriva dall'infinito.
2. Se la particella arriva dall'infinito e non incontra zeri (che accade se il potenziale cancella l'effetto della barriera centrifuga, andando ad un valore finito oppure a $-\infty$) allora il moto dipende da $\lim_{r \rightarrow 0} U_{\text{eff}}(r)$. Se questo è finito minore di W allora la particella continua con una certa deflessione, compiendo un'orbita di scattering. Se invece il limite è $-\infty$ allora la particella compie un numero infinito di giri intorno al centro in un tempo infinito, risultando in un'orbita di cattura.
3. Se la particella arriva dall'infinito ed incontra uno zero (che non sia estremo per $U(r)$, nel qual caso l'orbita è di cattura), allora torna indietro (lungo l'asse delle r , ossia si allontana invece che avvicinarsi) e l'orbita è di scattering.

In quest'ultimo caso lo zero corrisponde alla minima distanza r_{\min} a cui arriva la particella. Siccome torna indietro allora percorre la stessa curva di potenziale allo stesso modo con cui è arrivata e dunque la traiettoria sarà simmetrica rispetto all'asse individuato da $\phi(r_{\min})$. Possiamo dunque sempre scegliere l'asse temporale in modo tale che $r(t = 0) = r_{\min}$, con un angolo $\phi(t = 0) = \phi(r = r_{\min})$ rispetto ad un certo asse. Con questa scelta:

$$\begin{aligned} t(r) &= \begin{cases} - \int_{r_{\min}}^r \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}(W - U_{\text{eff}}(x))}} & t < 0 \\ + \int_{r_{\min}}^r \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}(W - U_{\text{eff}}(x))}} & t > 0 \end{cases} \\ \phi(r) &= \begin{cases} \phi(r_{\min}) + \int_{r_{\min}}^r \frac{L}{x^2} \frac{dx}{\sqrt{2m(W - U_{\text{eff}}(x))}} & t < 0 \iff \phi > \phi(r_{\min}), L > 0 \\ \phi(r_{\min}) - \int_{r_{\min}}^r \frac{L}{x^2} \frac{dx}{\sqrt{2m(W - U_{\text{eff}}(x))}} & t > 0 \iff \phi < \phi(r_{\min}) \end{cases} \end{aligned} \quad (1.21)$$

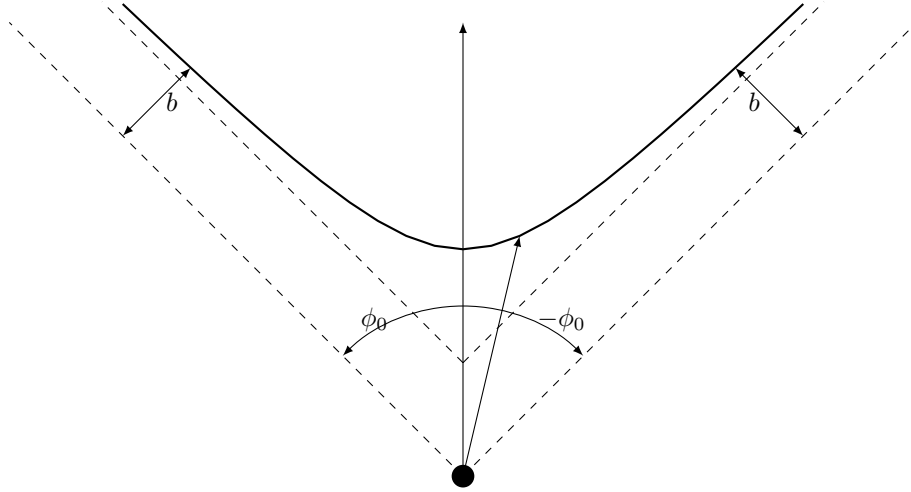
Notiamo che adesso che $t(r)$ è una funzione strettamente crescente o decrescente in r a seconda che siamo in fase di avvicinamento o allontanamento. Pertanto valutare i limiti per $t \rightarrow \pm\infty$ in $\phi(t)$ corrisponde a valutare i limiti per $r \rightarrow \infty$ di $\phi(r)$ nelle due fasi del moto. Indichiamo dunque con $\phi_-(r)$ l'angolo nella fase di avvicinamento e con $\phi_+(r)$ la fase di allontanamento, così che l'angolo di deflessione diventa:

$$\theta = \left| \pi - \lim_{r \rightarrow \infty} \phi_+(r) + \lim_{r \rightarrow \infty} \phi_-(r) \right| \quad (1.22)$$

Siccome ci interessa solo la differenza tra questi allora poniamo per semplicità $\phi(r_{\min}) = 0$. Inoltre siccome le funzioni sono simmetriche allora risulta:

$$\phi_0 = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{L}{x^2} \frac{dx}{\sqrt{2m(W - U_{\text{eff}}(x))}} = \phi_-(\infty) = -\phi_+(\infty) \Rightarrow \theta = |\pi - 2\phi_0| \quad (1.23)$$

Nel caso $L > 0$ poi anche $\phi_0 > 0$. Se $\phi_0 < \pi/2$ allora $2\phi_0 < \pi$ e vale dunque una figura simile a quella di prima (del primo caso):



1.3 Legame tra Orbite e Potenziali

Come già accennato, ci aspettiamo che il tipo di potenziale di interazione tra proiettile e bersaglio determini quali siano le possibili orbite. In particolare possiamo ricavare queste informazioni a partire dal grafico del potenziale efficace. Per determinare le possibili orbite facciamo un'analisi al variare di W e della posizione iniziale, mentre L è incluso nel potenziale efficace. In questo modo il moto può essere considerato unidimensionale e dipende solo dalle intersezioni di $U_{\text{eff}}(r)$ con W . In particolare vogliamo trovare le possibili orbite al variare di W e quindi fare esempi di potenziali asintoticamente completi e non asintoticamente completi. Questa analisi si basa sulle discussioni fatte nella sezione precedente.

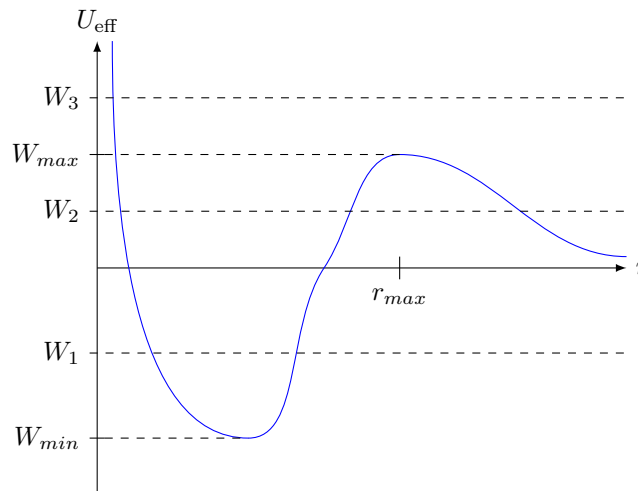
1.3.1 Potenziale Asintoticamente Completo

Iniziamo a considerare un potenziale che all'infinito va a zero più velocemente di $1/r^2$, mentre in zero va all'infinito più lentamente di $1/r^2$:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{U(r)}{r^2} = 0 \quad \lim_{r \rightarrow 0} r^2 U(r) = 0 \quad (1.24)$$

Questo significa che a basse distanze predomina la barriera centrifuga mentre a grande distanze predomina il potenziale stesso.

Per semplicità supponiamo poi che il potenziale abbia un massimo positivo e un minimo negativo. Chiaramente ci aspettiamo che i loro valori e posizioni dipendano da L in generale. Qualitativamente ci aspettiamo un andamento con nella seguente figura.



Consideriamo i possibili moti al variare dell'energia W .

Se assumiamo un valore $W_1 < 0$ allora le orbite possibili sono tutte limitate e dunque non rilevanti allo scattering. Quando $0 < W_2 < W_{\text{max}}$ ci sono due possibilità. Se $r_0 > r_{\text{max}}$ allora la particella, diretta verso l'origine, non riesce

a superare la barriera di potenziale e dunque viene repulsa, risultando in un'orbita di scattering. Se invece $r_0 < r_{max}$ allora la particella non può superare la barriera all'origine e in r_{max} , così che compie un moto limitato.

Consideriamo poi $W_3 > W_{max}$. In questo caso tutte le orbite sono non limitate e siccome non ci sono estremi intersecati allora non sono possibili moti limitati o statici. Le orbite sono dunque anche tutte di scattering.

Il caso $W = W_{max}$ è poi particolare, in quanto se una particella è diretta verso r_{max} allora impiegherà un tempo infinito ad arrivare in questa, compiendo un numero infinito di giri. In particolare se $r_0 < r_{max}$ l'orbita è limitata, mentre se $r_0 > r_{max}$ l'orbita non è limitata, ma non ammette asintoto di out. Questo significa che esistono orbite non limitate ma non di scattering.

In realtà siccome il valore di energia per cui questo succede è di misura nulla rispetto alle orbite non limitate, questa soluzione può essere ignorata a scopi pratici. Questo significa che, per i valori di W compatibili con orbite di scattering, è possibile trovare una relazione univoca tra asintoti di uscita e di entrata, ossia il potenziale è asintoticamente completo.

Potenziali Puramente Repulsivi

Una classe importante di potenziali è quelli **puramente repulsivi**, ossia monotoni decrescenti con $U_{eff}(r) > 0$. In questo caso per ogni valore di $W > 0$ vi è un solo zero, senza possibilità di cattura. Pertanto le orbite possono solo essere di scattering. I potenziali puramente repulsivi sono dunque **sempre asintoticamente completi**.

1.3.2 Potenziale Non Asintoticamente Completo

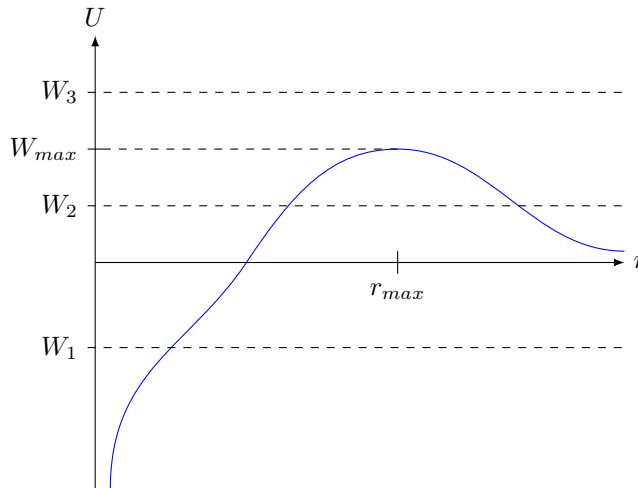
Ci chiediamo dunque quale sia un esempio di potenziale non asintoticamente completo. Il caso più semplice è quello di un potenziale attrattivo che va come $1/r^3$:

$$U(r) = -\frac{q}{r^3} \quad (1.25)$$

In questo caso falliscono le ipotesi di prima:

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 U(r) = -\infty \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{U(r)}{r^2} = 0 \quad (1.26)$$

Stavolta vi è un solo estremo, un massimo W_{max} in r_{max} .



Per $W_1 < 0$ chiaramente i moti sono tutti limitati, e in particolare diretti verso l'origine. Per $0 < W_2 < W_{max}$ nuovamente troviamo orbite limitate e di scattering a seconda del valore di r rispetto ad r_{max} . Se invece $W_3 > W_{max}$ non troviamo più orbite di scattering: se la particella viaggia verso l'origine con r_0 finito allora l'orbita è limitata; se la particella arriva dall'infinito verso l'origine allora l'orbita è non limitata ma ha solo asintoto di in, ossia è un moto di cattura; se la particella è diretta fuori dall'origine allora compie un'orbita non limitata senza asintoto di in, ossia è un moto di decadimento.

1.4 Condizioni Necessarie al Moto Libero Asintotico

Studiamo adesso alcune condizioni necessarie affinché un potenziale ammetta moto asintotico libero. Questo chiaramente ci porta ad una prima condizione alla completezza asintotica di un potenziale. Per fare questo ci poniamo nel sistema

di riferimento con $\phi(t \rightarrow -\infty) = 0$, in modo che:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} y(t) = b \quad \lim_{t \rightarrow -\infty} x(t) = r(t) \quad (1.27)$$

Vogliamo trovare sotto quali condizioni vale la condizione di asintoto di in:

$$x(t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} x_0 - vt \quad (1.28)$$

Supponiamo vi siano un solo zero, così che esiste una distanza minima r_{min} . Come prima possiamo usare gli integrali primi per trovare $t(r)$, inoltre possiamo scegliere l'asse dei tempi tale che $t(r_{min}) = 0$, in modo che:

$$t(r; v, b) = - \int_{r_{min}}^r \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}(W - U_{eff}(x))}} \quad t < 0 \quad (1.29)$$

Siccome vogliamo studiare l'andamento asintotico allora prendiamo un grande R tale che $r_{min} \ll R < r$, che divide l'integrale in una quantità costante ed una che dipende da r . Esplicitiamo poi l'integrale rispetto al potenziale, non quello efficace:

$$\begin{aligned} t(r; v, b) &= - \int_{r_{min}}^R \frac{dx}{v^2 - \frac{2U(x)}{m} - \frac{v^2 b^2}{x^2}} - \int_R^r \frac{dx}{v^2 - \frac{2U(x)}{m} - \frac{v^2 b^2}{x^2}} = \\ &= -A(R) - \int_R^r \frac{dx}{v^2 - \frac{2U(x)}{m} - \frac{v^2 b^2}{x^2}} \end{aligned} \quad (1.30)$$

Siccome R, r sono grandi allora possiamo sviluppare l'integrando in serie di Taylor:

$$\begin{aligned} t(r; v, b) &= -A(R) - \frac{1}{v} \int_R^r \frac{dx}{1 - \frac{2U(x)}{mv^2} - \frac{b^2}{x^2}} \approx \\ &= -A(R) - \frac{1}{v} \int_R^r dx \left[1 - \frac{U(x)}{mv^2} - \frac{b^2}{2x^2} \right] = \\ &= -A(R) - \frac{r - R}{v} + \frac{1}{v} \int_R^r \frac{U(x)}{mv^2} dx - \frac{1}{v} \int_R^r \frac{b^2}{2x^2} \end{aligned} \quad (1.31)$$

Troviamo dunque che affinché sia possibile moto asintotico libero nel potenziale $U(r)$ allora questo deve essere **assolutamente convergente** all'infinito:

$$\int_R^\infty |U(x)| dx < \infty \quad (1.32)$$

Se questo è verificato allora il termine corrispondente dipende debolmente da r . Troviamo dunque una legge $t(r)$ invertibile per ogni v, b , che ci fornisce la legge oraria asintotica:

$$\begin{aligned} t(r) &= -A(R) - \frac{r - R}{v} + A'_b(R) + A''_v(R) \\ t(r) &= k(R) - \frac{r}{v} \\ r(t) &= -k(R) - vt \end{aligned} \quad (1.33)$$

Nel sistema di riferimento dato troviamo dunque:

$$k(R) = -b \quad (1.34)$$

Pertanto questa funzione $k(R)$ è indipendente dalla scelta del parametro R , del potenziale e della velocità, e dipende solo dal parametro di impatto. Questo risultato continua a valere anche inserendo termini di ordine superiore nel calcolo dell'integrale, che però chiaramente influenzano ancora meno il valore di t .

La condizione trovata è anche una condizione necessaria per l'esistenza di asintoti di out. Tuttavia non è una condizione sufficiente, in quanto abbiamo ad esempio supposto l'esistenza di un r_{min} , che non si verifica per ogni potenziale assolutamente convergente all'infinito.

Caso Coulombiano

Il potenziale coulombiano è un esempio di potenziale non assolutamente convergente. In questo caso infatti A''_v dipende fortemente da r . In particolare ha un andamento logaritmico:

$$U(r) = \frac{B}{r} \Rightarrow A''_v = \frac{1}{v} \int_R^r \frac{1}{mv^2} \frac{B}{x} dx = \frac{C}{v} \log \frac{r}{R} \quad (1.35)$$

Vi sono dunque **correzioni logaritmiche** alla legge orarie:

$$\begin{aligned} t &\approx -\bar{k} - \frac{r}{v} + \frac{C}{v} \log \frac{r}{R} \\ r &\approx -\bar{k} - vt + C \log \frac{r}{R} \\ r &\approx b - vt + C \log \left(-\frac{vt}{R} \right) \end{aligned} \quad (1.36)$$

In realtà siccome siamo interessati all'andamento asintotico, per t sufficientemente grandi la correzione logaritmica è trascurabile. In un certo senso pertanto il potenziale coulombiano ancora permette moto asintotico libero.

1.5 Sezione d'Urto

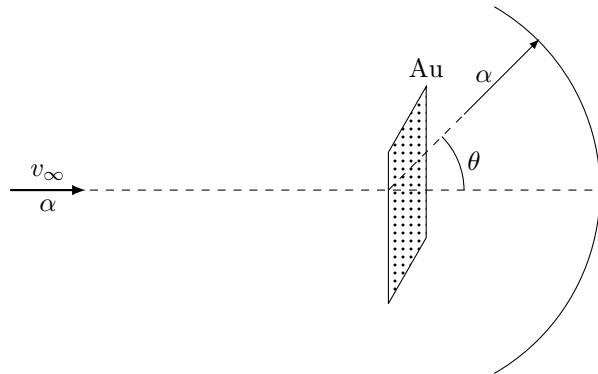
1.5.1 Definizione

Preliminari

Vogliamo adesso introdurre un fondamentale strumento per descrivere la collisione di particelle in fisica. Finora ci siamo limitati a discutere il problema della collisione di un singolo proiettile su un singolo bersaglio fisso. Abbiamo visto come, almeno per opportuni potenziali, sia possibile determinare l'asintoto di out a partire da quello di in. In particolare per quelli centrali questo significa trovare la funzione $\theta = \theta(v, b) = \theta(W, L)$.

In laboratorio d'altra parte non si hanno singoli proiettili e singoli bersaglio. Una situazione tipica è invece quella di un fascio di particelle che incidono su bersaglio esteso, ciascuno dei quali dell'ordine del numero di Avogadro. In un esperimento tipico non saremo dunque in grado di determinare il parametro di impatto e la velocità di ogni singola particella, in quanto la sorgente emette in varie direzioni, posizioni e varie velocità.

Consideriamo ad esempio l'esperimento di Rutherford, che coinvolgeva particelle alfa ($Z = 2$) e un foglio d'oro ($Z = 79$) contenente i centri di diffusione. Il nucleo d'oro può essere considerato fisso in quanto avente massa molto maggiore della particella alfa. Inoltre siccome la distanza tra gli atomi d'oro è molto maggiore del range d'azione del potenziale di interazione ci aspettiamo che una singola particella alfa possa urtare un singolo nucleo. Il potenziale d'interazione ci aspettiamo a priori essere approssimativamente centrale. Pertanto in questo caso vale con buona approssimazione il modello finora elaborato per lo scattering. Le particelle alfa, incidenti sul foglio, verranno dunque deflesse di un certo angolo θ rispetto alla direzione iniziale. Non siamo per ora interessati alle caratteristiche precise di questo potenziale.



Per misurare le varie deflessioni possiamo dunque usare uno schermo. Questo ha apertura limitata, in quanto si trova che la maggior parte delle particelle sono deflesse ad un piccolo angolo, e solo alcune a grandi angoli.

Notiamo adesso come in questo caso non sia possibile applicare direttamente il modello precedentemente elaborato. Infatti siccome i range dei potenziali coinvolti sono piccoli allora i parametri di impatto rilevanti non possono essere misurati con adeguata accuratezza. Il problema è ulteriormente complicato dalla presenza di un numero di Avogadro di proiettili, che incidono su diversi bersagli. In generale si riesce però a determinare l'energia e la direzione del fascio con una certa precisione, così che possiamo spesso assumere la velocità e la direzione dell'asintoto di in come fissate per ogni particella.

Definizione di Sezione d'Urto Differenziale e Totale

Le discussioni precedenti implicano che poter descrivere adeguatamente un esperimento di scattering tipico è necessario un approccio di tipo **statistico**. Dobbiamo dunque introdurre nuove grandezze che descrivono il sistema macroscopico da un punto di vista statistico, ossia "in media". Consideriamo dunque la generalizzazione del processo precedente, con un fascio di particelle incidenti su un foglio di bersagli fissi.

Affinchè la collisione sia singola e centrale supponiamo che il raggio d'azione del potenziale sia molto minore della distanza tra i centri $d \ll d_{ij}$ e inoltre il foglio è sufficientemente sottile da impedire collisioni multiple. Supponiamo dunque che il potenziale di interazione tra un proiettile e un bersaglio sia centrale.

La prima grandezza che definiamo è il **flusso di particelle incidente** n_{in} , dato dalla quantità di particelle dN_{in} (per unità di tempo dt) che attraversano una superficie $d\Sigma$ perpendicolare alla direzione di incidenza:

$$n_{in} = \frac{dN_{in}}{d\Sigma} \quad [dN_{in}] = s^{-1}, \quad [n_{in}] = m^{-2} s^{-1} \quad (1.37)$$

Supponiamo in generale che il flusso sia uniforme, ossia direzionato e costante al variare della posizione lungo il piano perpendicolare alla direzione di incidenza.

Indichiamo poi con $d\sigma(\theta)$ la superficie del foglio attraversata dalle particelle che vengono deflesse ad un angolo θ da un singolo centro diffusore. Detto dN_{sc} il numero di particelle diffuse in $d\sigma(\theta)$ nell'unità di tempo, allora deve valere:

$$dN_{sc}(\theta) = n_{in} d\sigma(\theta) \quad (1.38)$$

Supponiamo adesso che, per ogni v , l'angolo di deflessione θ sia **strettamente decrescente** in b . Questo implica ad esempio che per $b \rightarrow 0, \theta \rightarrow \pi$, ma soprattutto che $\theta(b)$ è invertibile:

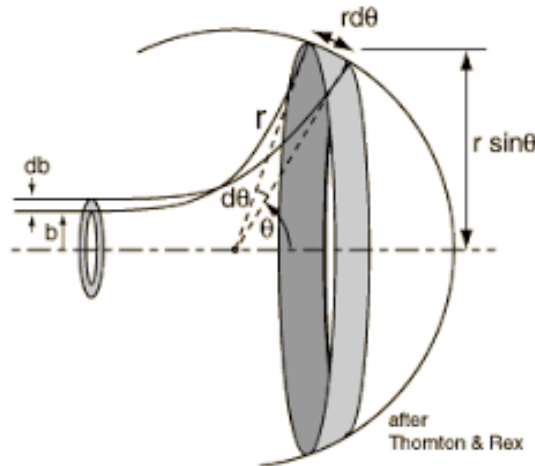
$$\theta = \theta(b) \iff b = b(\theta) \quad \forall v \quad (1.39)$$

A sua volta questo significa che un intervallo di angoli di deflessione corrisponde ad un intervallo di parametri di impatto:

$$(\theta, \theta + d\theta) \iff (b + db, b) \quad (1.40)$$

Questo significa che la sezione $d\sigma(\theta)$ del foglio delle particelle deflesse in $(\theta, \theta + d\theta)$, coincide con l'area della corna circolare di raggi $(b + db, b)$:

$$d\sigma(\theta) = 2\pi b |db| = 2\pi b(\theta) \left| \frac{db}{d\theta} \right| d\theta \quad (1.41)$$



Questo ci fornisce la sezione d'urto differenziale rispetto all'angolo di deflessione:

$$\frac{d\sigma}{d\theta}(\theta) = 2\pi b(\theta) \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad (1.42)$$

In realtà preferiamo tipicamente lavorare con l'angolo solido $d\Omega$ sotteso dalla corona sferica $(\theta, \theta + d\theta)$:

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta \Rightarrow d\theta = \frac{d\Omega}{2\pi \sin \theta} \quad (1.43)$$

Troviamo infine la **sezione d'urto differenziale classica** rispetto all'angolo solido, nel caso di un potenziale centrale asintoticamente completo, espressa rispetto al parametro di impatto:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b(\theta)}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|} \quad (1.44)$$

Notiamo che in generale, indipendentemente dal potenziale e dalla teoria considerata, continua a valere la definizione:

$$\boxed{dN_{sc} = n_{in} d\sigma} \quad (1.45)$$

dove dN_{sc} è il numero di particelle diffuse (per unità di tempo) caratterizzate da un certo parametro (tipicamente l'angolo solido finale), ottenute a partire dalle particelle $dN_{in}(d\Sigma)$ che attraversano . In una qualunque teoria di scattering la sezione d'urto differenziale è dunque definita dal legame tra dN_{in} e dN_{sc} .

Ad esempio per potenziali non centrali si può continuare a parlare di parametro di impatto ma la deflessione va specificata con due angoli $b = b(\theta, \phi)$. Questa definizione inoltre continuerà a valere anche in meccanica quantistica.

Citiamo infine anche la **sezione d'urto totale**, ottenuta integrando su tutto l'angolo solido:

$$\boxed{\sigma_{tot} = \int_{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega} \quad (1.46)$$

Nel caso discusso questo prende la forma:

$$\sigma_{tot} = 2\pi \int_0^{b_{max}} b db = \pi b_{max}^2 \quad (1.47)$$

Notiamo dunque che la sezione d'urto totale non è infinita solo per un potenziale centrale a supporto finito.

1.5.2 Sezione d'Urto di Rutherford

Facciamo adesso l'importante esempio della sezione d'urto differenziale nel caso di un potenziale coulombiano, dovuta a Rutherford. In unità gaussiane questo ha la forma:

$$U(r) = \frac{q_1 q_2}{r} \quad (1.48)$$

Per trovare la sezione d'urto dobbiamo dunque calcolare $b(\theta) \iff \theta(b)$ (verificando l'invertibilità). Per fare usiamo il teorema dell'impulso, supponendo che la deflessione avvenga tutta lungo z :

$$\Delta p_z = \int_{-\infty}^{\infty} F_z(\vec{r}(t)) dt \quad (1.49)$$

La variazione della quantità di moto si trova notando che il modulo è conservato come conseguenza della conservazione dell'energia, così che il modulo della variazione è dato da:

$$W = \text{cost} \Rightarrow |\vec{p}| = |\vec{p}'| \Rightarrow \Delta p = |\vec{p}' - \vec{p}| = 2p \sin \frac{\theta}{2} \quad (1.50)$$

D'altra parte questo coincide con Δp_z :

$$2p \sin \frac{\theta}{2} = \int_{-\infty}^{\infty} F_z(\vec{r}(t)) dt \quad (1.51)$$

Esplicitiamo dunque l'integrale al secondo membro, dove l'asse z è scelto passante per il punto di minima distanza. Scegliamo poi $\phi(t=0) = \phi(r_{min}) = 0$, in modo che risulti anche $\phi(t \rightarrow \pm\infty) = \pm(\pi - \theta)/2$. In questo modo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} F_z(\vec{r}(t)) dt = q_1 q_2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(\phi(t))}{r^2(t)} dt \quad (1.52)$$

Ci conviene ora fare il cambiamento di variabile $t \rightarrow \phi$, dato dalla conservazione del momento angolare:

$$L = pb = mr^2 \dot{\phi} \Rightarrow \frac{dt}{r^2} = \frac{m}{pb} d\phi \quad (1.53)$$

Possiamo ora integrare a vista, usando gli estremi di integrazione di sopra:

$$\int_{-\infty}^{\infty} F_z(\vec{r}(t)) dt = q_1 q_2 \frac{m}{pb} \int_{-(\pi-\theta)/2}^{(\pi-\theta)/2} \cos \phi d\phi = \frac{2mq_1 q_2}{pb} \cos \frac{\theta}{2} \quad (1.54)$$

Eguagliando i due membri troviamo $\theta(b)$:

$$\begin{aligned} 2p \sin \frac{\theta}{2} &= \frac{2mq_1q_2}{pb} \cos \frac{\theta}{2} \\ \tan \frac{\theta}{2} &= \frac{q_1q_2}{2Wb} \\ b(\theta) &= \frac{q_1q_2}{2W \tan(\theta/2)} \end{aligned} \quad (1.55)$$

Questa è effettivamente monotona decrescente in θ così che la funzione è invertibile. Calcoliamo la derivata:

$$\left| \frac{db}{d\theta} \right| = \left| \frac{q_1q_2}{2W \tan^2(\theta/2)} \frac{1/2}{\cos^2(\theta/2)} \right| = \frac{q_1q_2}{4W} \frac{1}{\sin^2(\theta/2)} \quad (1.56)$$

Infine troviamo la sezione d'urto differenziale di Rutherford:

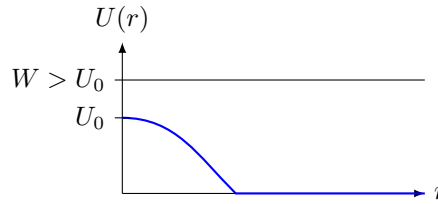
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left(\frac{q_1q_2}{2W} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad (1.57)$$

1.5.3 Potenziale Repulsivo a range finito

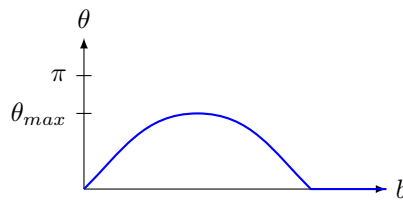
Consideriamo adesso un esempio interessante in cui $\theta(b)$ non è monotona e dunque non invertibile. Il potenziale considerato è uno a range finito R che è repulsivo e non diverge in 0:

$$\lim_{r \rightarrow 0} U(r) < \infty \quad U(r < R) > 0 \quad \frac{dU}{dr}(r < R) < 0 \quad U(r \geq R) = 0 \quad (1.58)$$

Ci aspettiamo dunque un profilo come quello nella figura seguente.



Per $b > R$ non vi è affatto interazione per ogni W e dunque $\theta(b > R) = 0$. Chiaramente già questo rende impossibile invertire $\theta(b)$ per $b > R$. Potremmo comunque pensare di invertire solo su un certo range, ma anche per $b < R$ incontriamo problemi, come conseguenza del fatto che il potenziale non va $+\infty$. Infatti chiaramente per $b = 0$ e $W > U_0$ allora $\theta = 0$. Siccome $0 < \theta < \pi$ allora al variare di b ci aspetteremo un andamento come in figura, prima decrescente e poi crescente.



Pertanto $\theta(b)$ non è strettamente crescente neppure in $(0, R)$ e dunque non è invertibile, ossia per ogni $\theta < \theta_{max}$ troviamo due valori di b corrispondenti. In questo caso allora la sezione d'urto infinitesima relativa all'angolo θ sarà la somma delle corone circolari centrate nei b_i corrispondenti e di spessore db :

$$d\sigma(\theta) = \sum_i 2\pi b_i db_i(\theta) = \sum_i 2\pi b_i \left| \frac{d\theta}{db} \right|_{b=b_i} \quad (1.59)$$

Capitolo 2

Preliminari allo Scattering Quantistico

In questo capitolo discutiamo di alcuni preliminari matematici necessari per poter formulare lo scattering in meccanica quantistica. Ricordiamo infatti che per il principio di corrispondenza passiamo da un punto nello spazio delle configurazioni ad un vettore nello spazio di Hilbert, e da osservabili a operatori. Ad esempio l'evoluzione temporale sarà descritta da un operatore unitario (o meglio un gruppo ad un parametro di operatori unitari).

2.1 Operatori Unitari

Iniziamo col ricordare la definizione di **operatore unitario** U :

1. Operatore Lineare sullo Spazio di Hilbert $U: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$;
2. Operatore Suriiettivo $\mathcal{D}(U) = \mathcal{R}(U) = \mathcal{H}$;
3. Conserva la norma $\|U\psi\| = \|\psi\|$.

2.1.1 Invertibilità

Possiamo dimostrare che un operatore unitario è invertibile e inoltre il suo inverso coincide con l'aggiunto (hermitiano).

Per dimostrare l'invertibilità basta dimostrare l'iniettività, visto che è una sua caratteristica la suriettività. Siano $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$, vogliamo dimostrare che:

$$U|\psi_1\rangle = U|\psi_2\rangle \iff |\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle \quad (2.1)$$

Questo discerne dalla linearità, dalla conservazione della norma e il fatto che l'unico vettore con norma nulla è il vettore nullo:

$$U|\psi_1\rangle - U|\psi_2\rangle = U(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) = U|\chi\rangle = 0 \iff \|U\chi\| = \|\chi\| = 0 \iff |\chi\rangle = 0 \iff |\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle \quad (2.2)$$

Questo significa che $\exists U^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ tale che $U^{-1}U = UU^{-1} = \mathbb{1}$.

Notiamo che l'inverso è ancora unitario. Banalmente è anche lineare e suriiettivo, ma conserva anche la norma. Infatti per la suriettività di U , ogni $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ può essere scritto come $|\psi\rangle = U|\phi\rangle$. Pertanto:

$$\begin{aligned} \|U^{-1}\psi\|^2 &= \langle U^{-1}\psi | U^{-1}\psi \rangle = \langle U^{-1}U\phi | U^{-1}U\phi \rangle = \langle \phi | \phi \rangle = \\ &= \|\phi\|^2 = \|U\psi\|^2 = \|\psi\|^2 \end{aligned} \quad (2.3)$$

come volevasi dimostrare.

2.1.2 Aggiunto Hermitiano

Siccome un operatore unitario conserva la norma allora è banalmente limitata e dunque ammette operatore aggiunto U^\dagger su tutto \mathcal{H} . Ricordiamo che l'aggiunto di un operatore $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ è definito in modo tale che:

$$\langle \psi | A\phi \rangle = \langle A^\dagger \psi | \phi \rangle \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{D}(A), |\psi\rangle \in \mathcal{D}(A^\dagger) \quad (2.4)$$

Identità Vettoriali e Operatoriali

Per fare questo dimostriamo prima una fondamentale identità che ci servirà in numerose dimostrazioni. Siano A, B due operatori definiti su tutto \mathcal{H} (in realtà basta un sottospazio denso) per cui valga la seguente identità scalare:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | B | \psi \rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.5)$$

Possiamo dimostrare che questa è equivalente ad un'identità operatoriale. Siano $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$, allora la loro combinazione lineare "reale" e "immaginaria" ancora soddisfa l'identità:

$$\begin{cases} (\langle \psi | + \langle \phi |) A (|\psi\rangle + |\phi\rangle) = (\langle \psi | + \langle \phi |) B (|\psi\rangle + |\phi\rangle) \\ (\langle \psi | - \mathbf{i} \langle \phi |) A (|\psi\rangle + \mathbf{i} |\phi\rangle) = (\langle \psi | - \mathbf{i} \langle \phi |) B (|\psi\rangle + \mathbf{i} |\phi\rangle) \end{cases} \quad (2.6)$$

Sviluppiamo entrambe le equazioni usando la linearità del prodotto scalare e degli operatori:

$$\begin{aligned} (\langle \psi | + \langle \phi |) A (|\psi\rangle + |\phi\rangle) &= (\langle \psi | + \langle \phi |) B (|\psi\rangle + |\phi\rangle) \\ \langle \psi | A | \psi \rangle + \langle \phi | A | \psi \rangle + \langle \psi | A | \phi \rangle + \langle \phi | A | \phi \rangle &= \langle \psi | B | \psi \rangle + \langle \phi | B | \psi \rangle + \langle \psi | B | \phi \rangle + \langle \phi | B | \phi \rangle \\ \langle \phi | A | \psi \rangle + \langle \psi | A | \phi \rangle &= \langle \phi | B | \psi \rangle + \langle \psi | B | \phi \rangle \\ (\langle \psi | - \mathbf{i} \langle \phi |) A (|\psi\rangle + \mathbf{i} |\phi\rangle) &= (\langle \psi | - \mathbf{i} \langle \phi |) B (|\psi\rangle + \mathbf{i} |\phi\rangle) \\ \langle \phi | A | \psi \rangle - \langle \psi | A | \phi \rangle &= \langle \phi | B | \psi \rangle - \langle \psi | B | \phi \rangle \end{aligned} \quad (2.7)$$

Sommiamo ora la prima equazione alla seconda e dividiamo per due:

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle \phi | B | \psi \rangle \quad \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.8)$$

Siccome questa identità è vera per ogni $|\phi\rangle$ allora i vettori $A|\psi\rangle$ e $B|\psi\rangle$ devono coincidere, così che l'identità scalare diventa vettoriale:

$$A|\psi\rangle = B|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.9)$$

A sua volta questo implica che l'identità vettoriale diventa operatoriale, come volevasi dimostrare:

$$\boxed{A = B \iff \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | B | \psi \rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}} \quad (2.10)$$

Inverso e Aggiunto di un Operatore Unitario

La dimostrazione adesso è immediata. Posto $A = U^\dagger U$ allora per la conservazione della norma:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \|\psi\|^2 = \|U\psi\|^2 = \langle U\psi | U\psi \rangle = \langle \psi | U^\dagger U | \psi \rangle \quad (2.11)$$

Ma questo è equivalente a:

$$\langle \psi | U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbb{1} | \psi \rangle \quad (2.12)$$

che per la dimostrazione precedente si riduce a:

$$U^\dagger U = \mathbb{1} \quad (2.13)$$

Dimostriamo poi anche che $UU^\dagger = \mathbb{1}$ usando la suriettività di U :

$$|\phi\rangle = U|\psi\rangle = U\mathbb{1}|\psi\rangle = U(U^\dagger U)|\psi\rangle = (UU^\dagger)U|\psi\rangle = (UU^\dagger)|\phi\rangle \quad (2.14)$$

Siccome questo è vero per ogni $|\phi\rangle$ allora $UU^\dagger = \mathbb{1}$ e dunque $U^\dagger = U^{-1}$, come volevasi dimostrare.

Questa proprietà implica automaticamente anche gli operatori unitari conservano il prodotto scalare:

$$\langle U\phi | U\psi \rangle = \langle \phi | U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \quad (2.15)$$

Avendo fatto queste dimostrazioni possiamo allora "ridefinire" un operatore unitario come un **operatore lineare invertibile che conserva il prodotto scalare**.

2.2 Operatori Isometrici

Un'altra classe di operatori che affronteremo nel contesto dello scattering sono gli operatori **isometrici**. Un operatore isometrico Ω è analogo ad uno unitario ma non è necessariamente suriettivo:

1. Operatore Lineare $\Omega \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$;
2. Conserva la norma $\|\Omega\psi\| = \|\psi\|$.

Chiaramente tutti gli operatori unitari sono isometrici ma non tutti quelli isometrici sono unitari. Un esempio di operatore isometrico non unitario è uno che su una base ortonormale numerabile opera da traslazione $\Omega|n\rangle = |n+1\rangle$. In tal caso infatti $|1\rangle$ non è immagine di alcune vettore tramite Ω e dunque Ω non è suriettivo e dunque non invertibile.

2.2.1 Inverso Sinistro

Con queste sole due proprietà possiamo comunque dimostrare che Ω è ancora iniettivo e dunque ammette inverso sul proprio range:

$$\exists \Omega^{-1}: \mathcal{R}(\Omega) \rightarrow \mathcal{H} \quad \left\{ \begin{array}{l} \Omega^{-1}\Omega = \mathbb{1} \\ \Omega\Omega^{-1} = \mathbb{1} \Big|_{\mathcal{R}(\Omega)} \end{array} \right. \quad (2.16)$$

Siccome un operatore isometrico è limitato allora ancora ammette aggiunto, che però è definito su tutto lo spazio di Hilbert:

$$\Omega^\dagger: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad (2.17)$$

Chiaramente già ci aspettiamo che questo non coincida con l'inverso, eccetto che sul sottospazio in cui è definito. Come prima, usando la conservazione della norma e la linearità degli operatori e del prodotto scalare possiamo dimostrare che:

$$\Omega^\dagger\Omega = \mathbb{1} \quad (2.18)$$

Questo significa che l'inverso e l'aggiunto coincidono sul range di Ω :

$$\forall |\phi\rangle \in \mathcal{R}(\Omega) \Omega^{-1}|\phi\rangle = |\psi\rangle = \Omega^\dagger\Omega|\psi\rangle = \Omega^\dagger|\phi\rangle \Rightarrow \Omega^\dagger \Big|_{\mathcal{R}(\Omega)} = \Omega^{-1} \quad (2.19)$$

Fuori da questo dominio l'aggiunto invece manda ogni vettore a zero:

$$\forall |\phi\rangle \in \mathcal{R}_\perp(\Omega), \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \langle \phi|\Omega|\psi\rangle = 0 \iff \langle \psi|\Omega^\dagger|\phi\rangle = 0 \iff \Omega^\dagger|\phi\rangle = 0, \forall |\phi\rangle \in \mathcal{R}_\perp(\Omega) \quad (2.20)$$

Troviamo infine che per un operatore isometrico:

$$\Omega^\dagger = \begin{cases} \Omega^{-1} & \mathcal{R}(\Omega) \\ 0 & \mathcal{R}_\perp(\Omega) \end{cases} \quad (2.21)$$

Questo significa d'altra parte che l'aggiunto è solo inverso sinistro ma non destro:

$$\Omega\Omega^\dagger = \begin{cases} \mathbb{1} & \mathcal{R}(\Omega) \\ 0 & \mathcal{R}_\perp(\Omega) \end{cases} \quad (2.22)$$

Notiamo dunque che se restringiamo lo spazio degli stati a \mathcal{R} allora Ω diventa unitario.

2.3 Limiti di Vettori

2.3.1 Convergenza Forte e Debole

Siccome nello scattering siamo interessati allo stato "asintotico" del sistema, allora dobbiamo elaborare un concetto di limite per i vettori. Sia una funzione $t \mapsto |\psi_t\rangle$ (anche detta insieme o famiglia $|\psi_t\rangle$), diciamo che $|\psi_t\rangle$ converge a $|\psi\rangle$ per $t \rightarrow \pm\infty$ se e solo se:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|\psi_t - \psi\| = 0 \quad (2.23)$$

Questo limite è ben definito in quanto è semplicemente una funzione scalare, data dalla composizione di una funzione $\mathbb{R} \mapsto \mathcal{H}$ alla norma $\mathcal{H} \mapsto \mathbb{R}^+$. Questa definizione di convergenza è anche detta **convergenza forte**.

Questa infatti implica anche la convergenza delle probabilità di overlap, detta **convergenza debole**:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\langle \phi|\psi_t\rangle|^2 = |\langle \phi|\psi\rangle|^2 \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.24)$$

Notiamo che se limitiamo $|\phi\rangle$ ad un sottospazio denso, in questa concezione di convergenza non è neppure necessario che $|\psi\rangle$ appartenga allo spazio di Hilbert. Infatti è sufficiente che sia un funzionale lineare, e dunque anche non limitato (ricordiamo che per il Teorema di Riesz ogni funzionale lineare limitato corrisponde biunivocamente ad un vettore dello spazio di Hilbert). In fisica due stati sono distinguibili solo per le probabilità di overlap e dunque in realtà il concetto di convergenza "sufficiente" in fisica è quello di convergenza debole. Per dimostrare alcuni risultati è però utile usare il concetto di convergenza forte.

Verifichiamo adesso la convergenza forte (che ha senso solo con un vettore propriamente detto) implica convergenza debole. Per fare questo è sufficiente la disuguaglianza di Schwartz:

$$|\langle \phi|\psi_t\rangle - \langle \phi|\psi\rangle| = |\langle \phi|(|\psi_t\rangle - |\psi\rangle)| \leq \|\phi\| \|\psi_t - \psi\| = \|\psi_t - \psi\| \quad (2.25)$$

Siccome la funzione $\|\psi_t - \psi\|$ va a 0 per $t \rightarrow \infty$ allora per il teorema del confronto anche la funzione al primo membro va a zero. Siccome poi il valore assoluto è definito positivo allora vi è convergenza debole:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|\psi_t - \psi\| = 0 \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} |\langle \phi|\psi_t\rangle - \langle \phi|\psi\rangle| = 0 \iff \lim_{t \rightarrow \infty} |\langle \phi|\psi_t\rangle|^2 = |\langle \phi|\psi\rangle|^2 \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.26)$$

Convergenza Debole non Implica Convergenza Forte

Facciamo adesso un esempio per verificare che il viceversa non è vero. Sia una particella libera con stato iniziale $|\psi\rangle$, che nello spazio delle configurazioni è un pacchetto gaussiano. La sua evoluzione temporale $|\psi_t\rangle = U_0(t)|\psi\rangle$ forma una famiglia di vettori. È noto che nello spazio delle configurazioni $|\psi_t\rangle$ è un pacchetto gaussiano con varianza che aumenta nel tempo. Questo significa che per $t \rightarrow \infty$ la probabilità di overlap con ogni posizione va a zero:

$$|\langle \vec{x} | \psi_t \rangle|^2 = |\psi_t(\vec{x})| \rightarrow 0 \quad t \rightarrow \infty \quad (2.27)$$

Siccome $|\vec{x}\rangle$ forma una base allora questo è vero per ogni vettore, indicando che $|\psi_t\rangle$ converge nel senso debole al vettore nullo $|\psi\rangle = 0$. Chiaramente questo non è vero nel senso forte (dove invece la famiglia non ha limite), in quanto $U_0(t)$ è unitario e dunque conserva la norma:

$$\|U_0(t)\psi\| = \|\psi\| \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} \|\psi_t\| = \|\psi\| \neq 0 \quad (2.28)$$

Pertanto effettivamente la convergenza debole non implica quella forte, come ci aspettavamo dalla nomenclatura usata.

Notazione

Citiamo poi come spesso ci riferiremo sia alla convergenza forte che debole con la notazione seguente:

$$|\psi_t\rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} |\psi\rangle \quad (2.29)$$

Faremo distinzione tra i due casi solo dove necessario.

2.3.2 Andamento Asintotico

Nel contesto dello scattering noi siamo tipicamente interessati all'andamento asintotico del sistema, e non al preciso stato a cui tende, che comunque non possiamo facilmente prevedere a priori. In realtà nello scattering quantistico avremo due famiglie di vettori, date dall'evoluzione temporale nel potenziale e libera della particella:

$$|\psi_t\rangle = U(t)|\psi\rangle \quad |\psi_t^0\rangle = U_0(t)|\tilde{\psi}\rangle \quad (2.30)$$

Pertanto in realtà saremo interessati a verificare che le due famiglie convergono (nel senso forte) allo stesso limite. Questo equivale a verificare che:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|\psi_t - \psi_t^0\| = 0 \quad (2.31)$$

2.3.3 Condizione Sufficiente alla Convergenza Forte

Nello scattering quantistico siamo dunque interessati a verificare che una famiglia ammette limite piuttosto che calcolarlo. Pertanto vogliamo trovare un criterio che stabilisce una condizione sufficiente alla convergenza. Ricordiamo che per funzioni complesse una condizione necessaria e sufficiente è fornita dal **Criterio di Cauchy**, che possiamo scrivere nella seguente forma compatta (anche se non rigorosa):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |a_t - a'_t| = 0 \iff \exists a \in \mathbb{C}: \lim_{t \rightarrow \infty} |a_t - a| = 0 \quad (2.32)$$

In realtà uno spazio di Hilbert ammette tutta la struttura necessaria a generalizzare questo criterio, che non dimostriamo:

$$\lim_{t, t' \rightarrow \infty} \|\psi_t - \psi_{t'}\| = 0 \iff \exists |\psi\rangle \in \mathcal{H}: \lim_{t \rightarrow \infty} \|\psi_t - \psi\rangle = 0 \quad (2.33)$$

Come vedremo, l'evoluzione temporale può essere scritta anche sotto forma di integrale. Consideriamo dunque una famiglia $|\psi_t\rangle$ che può essere scritta nella seguente forma:

$$|\psi_t\rangle = \int_0^t d\tau |\phi_\tau\rangle \quad (2.34)$$

Applichiamo il Criterio di Cauchy a questo caso. Calcoliamo la differenza, a cui possiamo applicare una generalizzazione della disuguaglianza triangolare

$$\left\| \int_0^t d\tau |\phi_\tau\rangle - \int_0^{t'} d\tau |\phi_\tau\rangle \right\| = \left\| \int_t^{t'} d\tau |\phi_\tau\rangle \right\| \leq \int_t^{t'} d\tau \|\phi_\tau\| \quad (2.35)$$

Pertanto una condizione sufficiente alla convergenza è che:

$$\lim_{t, t' \rightarrow \infty} \int_t^{t'} d\tau \|\phi_\tau\| = 0 \quad (2.36)$$

Applicando il Criterio di Cauchy all'integrale questo significa che la seguente è una condizione sufficiente alla convergenza in senso forte:

$$\int_0^\infty d\tau \|\phi_\tau\| < \infty \Rightarrow \exists |\psi\rangle \in \mathcal{H}: |\psi_t\rangle = \int_0^t d\tau |\phi_\tau\rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} |\psi\rangle \quad (2.37)$$

2.4 Limiti di Operatori

Discutiamo adesso brevemente il concetto di limite per una famiglia di operatori $t \mapsto A_t$, che supponiamo limitati per semplicità $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Possiamo estendere il concetto di convergenza forte agli operatori, notando che per ogni $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ si trova una famiglia $A_t |\psi\rangle$:

$$\exists A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}): A_t |\psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} A |\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.38)$$

dove " \rightarrow " sta per convergenza forte. Si dimostra facilmente che questo concetto di convergenza non conserva l'aggiunto e il prodotto:

$$\begin{aligned} A_t &\rightarrow A \not\Rightarrow A_t^\dagger \rightarrow A \\ B_t &\rightarrow A \not\Rightarrow A_t B_t \rightarrow AB \end{aligned} \quad (2.39)$$

Nella teoria dello scattering siamo però tipicamente interessati a limiti di operatori unitari. Immediatamente troviamo che il limite di una famiglia di operatori unitari è certamente isometrico in quanto conserva la norma (ed è lineare):

$$U_t \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \Omega \quad \||\psi\rangle\| = \lim_{t \rightarrow \infty} \|U_t \psi\| = \|\Omega \psi\| \Rightarrow \Omega^\dagger \Omega = \mathbf{1} \quad (2.40)$$

2.5 Integrale Gaussiano

2.5.1 Caso Reale

Un importante risultato che useremo relativamente spesso nel corso è l'integrale gaussiano. Questo è definito come segue:

$$I(A, B) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{A}{2}x^2 + Bx\right) \quad A, B \in \mathbb{C}, \operatorname{Re}\{A\} > 0 \quad (2.41)$$

Ricordiamo il valore per $A = 1, B = 0$, che si riconduce agli altri per sostituzione:

$$I(1, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/2} = \sqrt{2\pi} \quad (2.42)$$

Pertanto in generale possiamo fare un cambiamento di variabile, permesso dal completamento del quadrato, che però risulta in un cammino nel piano complesso:

$$\frac{A}{2}x^2 - Bx = \frac{A}{2}\left(x - \frac{B}{A}\right)^2 - \frac{B^2}{2A} \Rightarrow I(A, B) = e^{B^2/2A} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{A}{2}\left(x - \frac{B}{A}\right)^2\right) = e^{B^2/2A} \int_{C_1} dz \exp\left(-\frac{A}{2}z^2\right) \quad (2.43)$$

dove C_1 è il cammino ottenuto traslando di B/A il cammino iniziale. Chiaramente la traslazione di $\operatorname{Re}\{B/A\}$ non influenza il cammino è lungo l'asse reale stesso, mentre $\operatorname{Im}\{B/A\}$ trasla da \mathbb{R} ad un cammino "parallelo" nel piano complesso. Possiamo però usare il Teorema di Cauchy, che afferma che neanche questa traslazione cambia l'integrale e dunque possiamo tornare ad integrare su \mathbb{R} , dove possiamo ricondurci all'integrale iniziale con un ultimo cambiamento di variabile:

$$I(A, B) = e^{B^2/2A} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{A}{2}x^2\right) = \sqrt{\frac{1}{A}} e^{B^2/2A} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp(-u^2/2) \quad (2.44)$$

Troviamo infine:

$$\boxed{I(A, B) = \sqrt{\frac{2\pi}{A}} e^{B^2/2A}} \quad \forall A, B \in \mathbb{C}: \operatorname{Re}\{A\} > 0 \quad (2.45)$$

2.5.2 Caso Complesso

In realtà possiamo dimostrare che il risultato continua a valere anche per $\text{Re}\{A\} = 0, \text{Im}\{A\} \neq 0$. In questo l'integrale non converge secondo Lebesgue in quanto diventa un integrale di un esponenziale reale su tutta la retta reale:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left| \exp\left(-i\frac{A}{2}x^2 + Bx\right) \right| = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\text{Re}\{B\}x} = +\infty \quad (2.46)$$

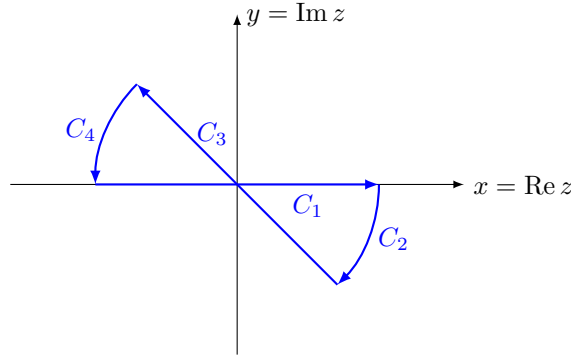
Tuttavia siccome l'integrale è oscillante è comunque possibile che all'infinito i contributi "si cancellino" in modo da ottenere un risultato finito. Dimostriamo adesso infatti che l'integrale nel senso improprio di Riemann, ossia come limite, esiste ed è una semplice estensione della formula precedente:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-i\frac{A}{2}x^2 + Bx\right) = \lim_{c \rightarrow +\infty} \int_{-c}^c dx \exp\left(-i\frac{A}{2}x^2 + Bx\right) = \sqrt{\frac{2\pi}{iA}} e^{B^2/2A} \quad (2.47)$$

Possiamo dimostrare questo facendo uso ad esempio del Teorema di Cauchy nel piano complesso. 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:

$$\oint_C dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} \quad (2.48)$$

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.



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:

$$\oint_C dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} = 0 \quad (2.49)$$

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

$$\oint_C dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} = \int_{C_1} dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} + \int_{C_3} dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} = 0 \quad (2.50)$$

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 $z = -e^{-i\pi/4}t$. Siccome questa retta passa per l'origine e per $-e^{-i\pi/4}$ allora t è reale e non cambia l'ordine dell'integrale:

$$\begin{aligned} \int_{C_1} dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} &= - \int_{C_3} dz e^{-i\frac{A}{2}z^2} \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{A}{2}x^2} &= -e^{-i\pi/4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-e^{-i\pi/2}i\frac{A}{2}t^2} = -e^{-i\pi/4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{A}{2}t^2} = -e^{-i\pi/4} I(A, 0) = \\ &= -e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2\pi}{A}} = \sqrt{e^{-i\pi/2} \frac{2\pi}{A}} = \sqrt{e^{-i\pi/2} \frac{2\pi}{A}} = \sqrt{\frac{2\pi}{iA}} \end{aligned} \quad (2.51)$$

Abbiamo dunque dimostrato quanto cercato:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{A}{2}x^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{iA}} \quad A > 0 \quad (2.52)$$

Analogamente si può fare per $A < 0$ scegliendo la bisettrice del primo e terzo quadrante opportunamente orientata, con la parametrizzazione $z = e^{i\pi/4}t$. Per $B \neq 0$ basta poi fare un opportuno cambio di variabile in modo di riportarsi al caso dimostrato.

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:

$$\boxed{I(A, B) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{A}{2}x^2 + Bx\right) = \sqrt{\frac{2\pi}{A}} e^{B^2/2A}} \quad A, B \in \mathbb{C}, \begin{cases} \operatorname{Re}\{A\} > 0 \\ \operatorname{Re}\{A\} = 0, \operatorname{Im}\{A\} \neq 0 \end{cases} \quad (2.53)$$

Per $A < 0$ l'integrale diverge, con parte reale che va a $+\infty$, anche se potremmo pensare di estendere l'integrale per continuazione analitica. Nell'origine ($A = 0$) invece l'integrale non converge neppure secondo Riemann, ma converge nel senso delle distribuzioni ad una delta di Dirac.

2.6 Evoluzione Libera di un Pacchetto Gaussiano

Usando i risultati della sezione precedente verifichiamo quantitativamente l'evoluzione libera di un pacchetto gaussiano. A meno di normalizzazione lo stato è dato da:

$$\langle \vec{x} | \psi(0) \rangle = \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{a})^2}{2\xi^2}\right) \quad (2.54)$$

Siccome l'hamiltoniana dipende solo dal momento allora ci conviene passare alla base dei momenti:

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p} | \psi(0) \rangle \\ |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} |\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} |\psi(0)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p} | \psi(0) \rangle \end{aligned} \quad (2.55)$$

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

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t} \langle \vec{p} | \psi(0) \rangle = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t} \langle \vec{p} | \vec{x}' \rangle \psi(\vec{x}', 0) \end{aligned} \quad (2.56)$$

Usando poi l'identità:

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \quad (2.57)$$

troviamo:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t} \langle \vec{p} | \vec{x}' \rangle \psi(\vec{x}', 0) = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t} e^{-\frac{(\vec{x}' - \vec{a})^2}{2\xi^2}} = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}') - i \frac{p^2}{2m\hbar} t - \frac{(\vec{x}' - \vec{a})^2}{2\xi^2}\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \int_{\mathbb{R}^3} d^3y \exp\left(-\frac{y^2}{2\xi^2} - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{y} + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{a}) - i \frac{p^2}{2m\hbar} t\right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \exp\left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{a})\right) \int_{\mathbb{R}^3} d^3y \exp\left(-\frac{y^2}{2\xi^2} - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{y}\right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \exp\left(-i \frac{p^2}{2m\hbar} t + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{a})\right) I_1 I_2 I_3 \end{aligned} \quad (2.58)$$

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

$$I_k = I(A_k, B_k) \quad A_k = \frac{1}{\xi^2} \quad B_k = -\frac{i}{\hbar} p_k \Rightarrow \frac{B^2}{2A} = -\frac{\xi^2 p_k^2}{2\hbar^2} \Rightarrow I_1 I_2 I_3 = (2\pi)^{3/2} \xi^3 e^{-\frac{\xi^2 p^2}{2\hbar^2}} \quad (2.59)$$

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

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi)^{3/2} \xi^3 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \exp\left(-\frac{\xi^2 p^2}{2\hbar^2} - i \frac{p^2}{2m\hbar} t + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{a})\right) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi)^{3/2} \xi^3 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{\xi^2}{\hbar^2} + i \frac{1}{m\hbar} t\right) p^2 + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{a})\right) \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi)^{3/2} \xi^3 J_1 J_2 J_3
\end{aligned} \tag{2.60}$$

con:

$$A_k = \frac{\xi^2}{\hbar^2} + \frac{it}{m\hbar}, \quad B_k = \frac{i}{\hbar}(x_k - a_k) \quad J_k = I(A_k, B_k) = \frac{(2\pi)^{3/2}}{\left(\frac{\xi^2}{\hbar^2} + \frac{it}{m\hbar}\right)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(x_k - a_k)^2}{2\left(\frac{\xi^2}{\hbar^2} + \frac{it}{m\hbar}\right)^{3/2}}\right) \tag{2.61}$$

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

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{\left(1 + \frac{i\hbar t}{m\xi^2}\right)} \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{a})^2}{2\xi^2\left(1 + \frac{i\hbar t}{m\xi^2}\right)}\right) = \frac{1}{\left(1 + \frac{i\hbar t}{m\xi^2}\right)} \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{a})^2}{2\xi_t^2}\right) \tag{2.62}$$

Pertanto la funzione d'onda è ancora una gaussiana con una varianza ξ_t^2 che aumenta linearmente nel tempo, come ci aspettavamo:

$$\xi_t^2 = \xi^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{m\xi^2}\right) \tag{2.63}$$

In realtà la quantità osservabile è l'ampiezza:

$$|\psi(\vec{x}, t)| = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\xi}\right)^2\right]^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\vec{x} - \vec{a})^2}{2\xi^2\left(1 + \frac{\hbar t}{m\xi^2}\right)^2}\right] \tag{2.64}$$

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

Capitolo 3

Primi Risultati per lo Scattering Quantistico

Siamo ora in grado di formulare il problema dello scattering quantistico.

3.1 Scattering da Potenziale

Come visto nel caso classico, siamo interessati a collisioni elastiche di un proiettile su un bersaglio fisso, con interazione mediata da un potenziale locale. Per il principio di corrispondenza vale poi:

$$\begin{cases} (\vec{q}(t), \vec{p}(t)) & \Longleftrightarrow |\psi_t\rangle = U(t) |\psi\rangle \\ \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 & \Longleftrightarrow \mathcal{H} \end{cases} \quad (3.1)$$

Lo spazio di Hilbert \mathcal{H} deve essere poi separabile (e dotato di operatori posizione e momento che soddisfano l'algebra di Heisenberg). Ad esempio nella rappresentazione delle configurazioni o dei momenti si usa $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, e più in generale uno spazio di Hilbert unitariamente equivalente.

L'operatore $U(t)$ è poi l'evolutore temporale dall'istante 0 all'istante t . Siccome l'urto è elastico e il sistema è isolato allora l'hamiltoniana sarà indipendente dal tempo così che l'evolutore temporale è dato (a meno di una fase) da:

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \quad (3.2)$$

In particolare siccome siamo interessati solo al moto del proiettile l'hamiltoniana è data da:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\vec{x}) \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} \quad (3.3)$$

L'hamiltoniana \hat{H}_0 , che coincide con la parte cinetica, è l'hamiltoniana di una particella libera. A queste due hamiltoniane sono dunque associati due evolutori temporali, che indichiamo con $U(t)$ e $U_0(t)$ rispettivamente.

Sempre per il principio di corrispondenze, il fatto che il sistema ammetta asintoto passato e futuro rispettivamente corrisponde al fatto che l'evoluzione della particella coincide a partire da un certo stato per $t = 0$ con l'evoluzione libera di un certo stato detto **stato asintotico** passato o futuro:

$$\begin{aligned} \vec{x}(t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \vec{x}_{in}(t) & \Longleftrightarrow |\psi(t)\rangle = U(t) |\psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} U_0(t) |\psi_{in}\rangle \\ \vec{x}(t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \vec{x}_{out}(t) & \Longleftrightarrow |\psi(t)\rangle = U(t) |\psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} U_0(t) |\psi_{out}\rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

Qui stiamo usando la convergenza forte, ossia una famiglia $U(t) |\psi\rangle$ ammette asintoto passato/futuro se:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|U(t)\psi - U_0(t)\psi_{in}\| = 0 \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \|U(t)\psi - U_0(t)\psi_{out}\| = 0 \quad (3.5)$$

Questo implica convergenza debole e dunque che i due stati sono fisicamente indistinguibili per valori di t sufficientemente grandi. Notiamo che questa condizione è molto più forte della semplice condizione di convergenza dei valori medi di posizione e momento, in quanto stabiliscono solo come si muove il centro del pacchetto, senza convergenza debole e dunque neppure forte.

Uno stato $|\psi\rangle$ che ammette sia asintoti passati che futuri $|\psi_{in}\rangle, |\psi_{out}\rangle$ è detto **stato di scattering**, rispetto ad un dato potenziale $V(\vec{x})$.

Come nel caso classico non tutti gli stati ammettono asintoti passati e futuri. Questa distinzione è particolarmente importante, tale che li distinguiamo dagli altri:

1. Indichiamo con \mathcal{R} il sottospazio di \mathcal{H} a cui appartengono gli stati di scattering;
2. Indichiamo con \mathcal{B} il sottospazio di \mathcal{H} a cui appartengono gli stati legati.

Questo ci porta alla definizione di potenziali asintoticamente completi. Infatti questo significa che tutti gli stati non legati sono dati solo dagli stati di scattering. Diciamo dunque che un potenziale soddisfa la **completezza asintotica** se:

$$\boxed{\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B}} \quad (3.6)$$

Questo significa che tutti gli stati devono essere legati o di scattering rispetto al potenziale dato.

3.2 Condizioni Sufficienti alla Completezza Asintotica

Nell'attuale situazione della matematica dello scattering quantistico non esiste un elenco di condizioni necessarie e sufficienti a caratterizzare la completezza asintotica. Noi ci limiteremo piuttosto a studiare condizioni sufficienti per i potenziali centrali.

Prima di fare questo ricordiamo la notazione di O grande ("Big O Notation"):

$$V(r) = O(r^p) \iff \exists c > 0: |V(r)| \leq cr^p \quad \forall r \quad (3.7)$$

In realtà questa definizione continua ad avere senso se limitiamo gli r all'intorno di un punto di accumulazione finito r_0 , e anche per $r_0 \rightarrow \infty$ se la condizione è valida per ogni $r > M$ a partire da un certo $M > 0$.

Possiamo ora enunciare delle condizioni sufficienti per la completezza asintotica di un potenziale centrale.

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

1. $V(r) = O(r^{-3-\varepsilon})$ per qualche $\varepsilon > 0$ per $r \rightarrow \infty$;
2. $V(r) = O(r^{-3/2+\varepsilon})$ per qualche $\varepsilon > 0$ per $r \rightarrow 0$;
3. $V(r)$ è continua su $\mathbb{R} \setminus \{0\}$, con un numero finito di discontinuità a salto;

allora vale la completezza asintotica per $V(r)$, ossia $\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B}$.

Questo significa che per potenziali centrali continui che vanno a zero all'infinito e all'infinito in zero sufficientemente rapidamente vi è completezza asintotica. Questo include potenziali limitati a range finito come buche e barriere sferiche, ma anche potenziali a range infinito come il potenziale di Yukawa.

Le ipotesi del teorema implicano poi che il potenziale converge assolutamente su tutto \mathbb{R}^3 .

Chiaramente notiamo che se vale questo teorema allora è possibile una semplice generalizzazione a potenziali non centrali, ottenuti ad esempio dalla somma di potenziali centrali con diversi centri.

3.3 Condizione Asintotica

Sebbene la dimostrazione della completezza asintotica sia piuttosto complicata, e fuori dagli scopi del corso, possiamo dimostrare una condizione più debole, detta **condizione asintotica** per il potenziale V . Si dice che la condizione asintotica vale per il potenziale V se:

$$\begin{aligned} \forall |\psi_{in}\rangle \in \mathcal{H} \exists! |\psi\rangle : U(t)|\psi\rangle &\xrightarrow{t \rightarrow -\infty} U_0(t)|\psi_{in}\rangle \\ \forall |\psi_{out}\rangle \in \mathcal{H} \exists! |\psi\rangle : U(t)|\psi\rangle &\xrightarrow{t \rightarrow +\infty} U_0(t)|\psi_{out}\rangle \end{aligned} \quad (3.8)$$

Questa condizione afferma dunque che dato un qualunque pacchetto, la sua evoluzione temporale libera nel passato/futuro è tale che possiamo sempre scegliere uno stato la cui evoluzione con interazione nel passato/futuro è indistinguibile da quest'ultima.

Notiamo che siccome $U(t), U_0(t)$ sono operatori unitari allora:

$$\|U(t)\psi - U_0(t)\psi_{in/out}\| = \|U^\dagger(t)U(t)\psi - U^\dagger(t)U_0(t)\psi_{in/out}\| = \|U^\dagger(t)U_0(t)\psi_{in/out} - \psi\| \quad (3.9)$$

Questo significa che la condizione asintotica è equivalente a:

$$\begin{aligned} \forall |\psi_{in}\rangle \in \mathcal{H} \exists |\psi\rangle : U^\dagger(t)U_0(t) |\psi_{in}\rangle &\xrightarrow{t \rightarrow -\infty} |\psi\rangle \\ \forall |\psi_{out}\rangle \in \mathcal{H} \exists |\psi\rangle : U^\dagger(t)U_0(t) |\psi_{out}\rangle &\xrightarrow{t \rightarrow +\infty} |\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.10)$$

In realtà siccome il limite è nel senso forte allora se il limite esiste è anche unico e dunque la condizione asintotica si riduce a dimostrare che esistono i limiti:

$$\begin{aligned} \forall |\psi_{in}\rangle \in \mathcal{H} \exists \lim_{t \rightarrow -\infty} U^\dagger(t)U_0(t) |\psi_{in}\rangle \\ \forall |\psi_{out}\rangle \in \mathcal{H} \exists \lim_{t \rightarrow +\infty} U^\dagger(t)U_0(t) |\psi_{out}\rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

Potremmo ulteriormente ridurre queste a limiti di operatori, ma ai fini della dimostrazione rimaniamo con l'espressione dei limiti di vettori.

3.3.1 Dimostrazione

Possiamo ora effettivamente dimostrare che nelle ipotesi del Teorema precedente il potenziale soddisfa la condizione asintotica. Iniziamo col trovare un'espressione integrale della famiglia di vettori considerata, così da poter applicare il criterio di Cauchy. Questa si trova dall'equazione di Schrodinger rispetto agli evolutori temporali:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}(U^\dagger(t)U_0(t)) = \frac{d}{dt}U^\dagger(t)U_0(t) + U^\dagger(t)\frac{d}{dt}U_0(t) = \frac{i}{\hbar}U^\dagger(t)(\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}_0)U_0(t) = \frac{i}{\hbar}U^\dagger(t)VU_0(t) \\ U(0) = U_0(0) = \mathbb{1} \end{cases} \quad (3.12)$$

da cui, integrando:

$$U^\dagger(t)U_0(t) |\psi_{in}\rangle = |\psi_{in}\rangle + \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau U^\dagger(\tau)VU_0(\tau) |\psi_{in}\rangle \quad (3.13)$$

Pertanto, per il criterio di Cauchy integrale su spazi di Hilbert, una condizione sufficiente all'esistenza del limite di questa famiglia di vettori è data da:

$$\int_{-\infty}^0 d\tau \|U^\dagger(\tau)VU_0(\tau)\psi_{in}\| < \infty \quad (3.14)$$

Iniziamo con l'usare l'unitarietà:

$$\int_{-\infty}^0 d\tau \|U^\dagger(\tau)VU_0(\tau)\psi_{in}\| = \int_{-\infty}^0 d\tau \|VU_0(\tau)\psi_{in}\| \quad (3.15)$$

Dimostriamo adesso la convergenza dell'integrale nel caso di un asintoto passato dato da un pacchetto gaussiano $|\psi_{in}^g\rangle$, di cui conosciamo l'evoluzione temporale libera [2.64](#):

$$\begin{aligned} \|VU_0(\tau)\psi_{in}^g\|^2 &= \|V\psi_{in}^g(t)\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |V(\vec{x})|\psi_{in}^g(\vec{x}, t)|^2 = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} |V(\vec{x})|^2 \left(1 + \frac{\tau^2 \hbar^2}{m^2 \xi^4}\right)^{-3} \exp\left[-\frac{(\vec{x} - \vec{a})^2}{\xi^2 \left(1 + \frac{\tau^2 \hbar^2}{m^2 \xi^4}\right)}\right] \leq \\ &\leq \left(1 + \frac{\tau^2 \hbar^2}{m^2 \xi^4}\right)^{-3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |V(\vec{x})|^2 < \infty \end{aligned} \quad (3.16)$$

Inseriamo ora questo risultato nell'integrale che vogliamo effettivamente calcolare:

$$\int_{-\infty}^0 d\tau \|VU_0(\tau)\psi_{in}^g\| \leq \sqrt{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |V(\vec{x})|^2} \int_{-\infty}^0 d\tau \left(1 + \frac{\tau^2 \hbar^2}{m^2 \xi^4}\right)^{-3/2} < \infty \quad (3.17)$$

Dobbiamo adesso dimostrare questo risultato per ogni vettore dello spazio di Hilbert. In realtà basta usare che i pacchetti gaussiani formano una base per lo spazio di Hilbert (la base degli stati coerenti), per cui:

$$\forall |\psi_{in}\rangle \in \mathcal{H}, \forall \varepsilon > 0 \exists \sum_k c_k |\psi_k^g\rangle : \left\| \psi_{in} - \sum_k c_k \psi_k^g \right\| < \varepsilon \quad (3.18)$$

Usando la disuguaglianza triangolare pertanto ci riduciamo al caso precedente:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^0 \|VU_0(\tau)\psi_{in}\| &= \int_{-\infty}^0 \left\| VU_0(\tau) \sum_k c_k \psi_k^g \right\| \leq \sum_k |c_k| \|VU_0(\tau)\psi_k^g\| \leq \int_{-\infty}^0 \sum_k |c_k|^2 \|VU_0(\tau)\psi_k^g\| \leq \\ &\leq \sum_k |c_k|^2 \int_{-\infty}^0 \max_k \|VU_0(\tau)\psi_k^g\| = \int_{-\infty}^0 \max_k \|VU_0(\tau)\psi_k^g\| \sum_k |c_k|^2 = \int_{-\infty}^0 \max_k \|VU_0(\tau)\psi_k^g\| < \infty \end{aligned} \quad (3.19)$$

La dimostrazione è assolutamente analoga per gli asintoti di out, in quanto la funzione effettivamente integrata in $d\tau$ è pari.

Notiamo infine come per questa dimostrazione l'unica ipotesi necessaria era la convergenza assoluta del potenziale su tutto lo spazio, che è più debole delle ipotesi dati nel teorema.

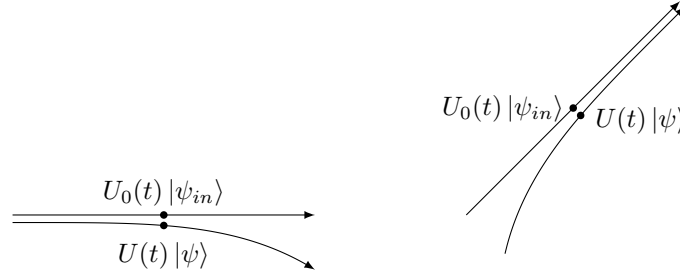
3.4 Operatori di Moeller

Notiamo adesso come la condizione asintotica è equivalente a richiedere che esistano degli operatori tali che (attenzione ai segni):

$$\boxed{\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^{\dagger}(t)U_0(t), \quad \Omega_{\pm} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})} \quad (3.20)$$

Questi prendono il nome di **operatori d'onda di Moeller** o semplicemente operatori di Moeller. Per quanto detto questi sono operatori isometrici, ossia operatori definiti su tutto lo spazio di Hilbert che conservano la norma. Ammettono dunque aggiunto che coincide con l'inverso sinistro.

Cerchiamo di capire meglio il loro significato fisico, descrivendo l'evoluzione temporale in termine di orbite classiche. L'evoluzione libera degli asintoti descrivono dunque due rette. L'operatore di Moeller Ω_+ definisce uno stato $|\psi\rangle = \Omega_+ |\psi_{in}\rangle$ tale che la sua evoluzione temporale con interazione nel passato $U(t)|\psi\rangle$ è una certa curva che per nel passato converge alla retta descritta da $U_0(t)|\psi_{in}\rangle$. Pertanto Ω_+ porta uno stato asintotico allo stato effettivo corrispondente, e analogamente per Ω_- . Questo significa che gli operatori di Moeller, e dunque la condizione asintotica, forniscono una corrispondenza tra stati asintotici e stati effettivi.



3.4.1 Ortogonalità di Stati Asintotici e Legati

Ci chiediamo adesso se per ogni stato $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ sia possibile trovare due asintoti $|\psi_{in}\rangle, |\psi_{out}\rangle$. Chiaramente questo non avviene generale, a causa della presenza di stati legati e, se il potenziale non è asintoticamente completo, di stati non legati non di scattering. Escludendo i secondi nel caso di completezza asintotica, chiaramente non esistono asintoti di stati legati. Ad esempio gli autovettori (propri) dell'hamiltoniana sono lasciati invariati (a meno di una fase) dall'evoluzione temporale in quanto anche autovettori dell'evolvente temporale:

$$\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Rightarrow U(t)|\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\psi\rangle \quad (3.21)$$

Gli stati legati sono dati da combinazioni lineari di autostati e dunque comunque non ammettono asintoti.

Questo che significa che in generale i range degli operatori di Moeller $\mathcal{R}_{\pm} = \mathcal{R}(\Omega_{\pm})$ sono strettamente contenuti in \mathcal{H} e sono distinti dall'insieme degli stati legati \mathcal{B} . Possiamo però dimostrare che i range sono entrambi perpendicolari all'insieme degli stati legati, ossia gli stati che ammettono stati asintotici (almeno uno) sono perpendicolari agli stati legati (che non ammettono stati asintotici). Questo teorema va sotto il nome di **Teorema di Ortogonalità**.

Teorema 2 (Teorema di Ortogonalità). *Se $V(r)$ soddisfa la condizione asintotica, allora $\mathcal{R}_{\pm} \perp \mathcal{B}$.*

Dimostrazione. Sia $|\psi\rangle \in \mathcal{B}$, nel caso di autostato di $\hat{\mathcal{H}}$ con energia E . Sia poi $|\phi\rangle \in \mathcal{R}_+$, così che per definizione:

$$\exists! |\phi_{in}\rangle \in \mathcal{H}: |\phi\rangle = \Omega_+ |\phi_{in}\rangle \quad (3.22)$$

Calcoliamo adesso il loro prodotto scalare:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \langle U(t)\phi | U(t)\psi \rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle U(t)\phi | U(t)\psi \rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle U_0(t)\phi_{in} | e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi \rangle = \\ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \langle U_0(t)\phi_{in} | \psi \rangle \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Possiamo poi prendere il caso del pacchetto gaussiano $|\phi_{in}^g\rangle$, per cui la probabilità di overlap va a zero con un qualunque vettore. Come prima questo continua a valere anche per ogni altro vettore, così che:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \langle U_0(t)\phi_{in} | \psi \rangle \right) = 0 \quad (3.24)$$

Infine siccome gli autostati formano una base per \mathcal{B} allora questo vale anche per ogni $|\psi\rangle$, ossia $\mathcal{R}_+ \perp \mathcal{B}$, e analogamente per \mathcal{R}_- , come volevasi dimostrare. \square

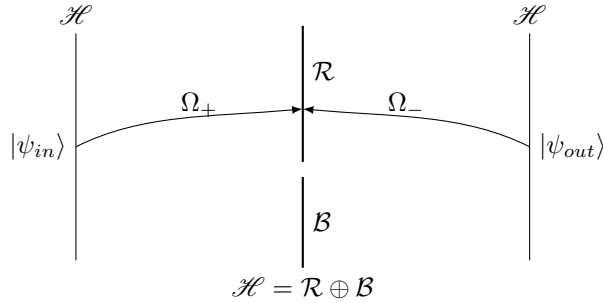
3.4.2 Legame alla Completezza Asintotica

Rispetto a questi operatori, grazie al Teorema di Ortogonalità, la completezza asintoticamente equivale a richiedere infine che:

$$\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_- = \mathcal{R} \Rightarrow \mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B} \quad (3.25)$$

In generale possiamo dire che gli stati di scattering sono quelli che ammettono sia asintoti di in che di out, ossia sono appartenenti ad entrambi i sottospazi $\mathcal{R} = \mathcal{R}_+ \cap \mathcal{R}_-$. La completezza asintotica equivale a dimostrare che questi due range coincidono. Se fosse così infatti allora non esistono stati che ammettono un solo asintoto, ossia stati non legati che non sono di scattering. Questo significa \mathcal{B} è non solo perpendicolare a \mathcal{R} ma è anche il suo complemento ortogonale, ossia $\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B}$.

Illustriamo infine il ruolo degli operatori di Moeller nel caso di completezza asintotica con il seguente grafico.



La parte difficile della dimostrazione della completezza asintotica è dunque proprio che $\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_-$.

3.5 Operatore di Scattering

3.5.1 Definizione

Cerchiamo adesso di trovare una corrispondenza tra asintoti di out e di in. Sia uno stato di scattering $|\psi\rangle \in \mathcal{R}$ con stati asintotici $|\psi_{in}\rangle, |\psi_{out}\rangle$. Allora per definizione di operatori di Moeller:

$$\begin{cases} |\psi\rangle = \Omega_+ |\psi_{in}\rangle \\ |\psi\rangle = \Omega_- |\psi_{out}\rangle \end{cases} \quad (3.26)$$

Siccome gli operatori di Moeller sono isometrici allora ammettono l'aggiunto come inverso sinistro, ossia per ogni stato di scattering possiamo trovare gli stati asintotici:

$$\Omega_{\pm}^\dagger \Omega_{\pm} = \mathbb{1} \Rightarrow \begin{cases} |\psi_{in}\rangle = \Omega_+^\dagger |\psi\rangle \\ |\psi_{out}\rangle = \Omega_-^\dagger |\psi\rangle \end{cases} \quad (3.27)$$

Siccome vogliamo una corrispondenza tra asintoto di out e di in allora usiamo:

$$\begin{cases} |\psi\rangle = \Omega_+ |\psi_{in}\rangle \\ |\psi_{out}\rangle = \Omega_-^\dagger |\psi\rangle \end{cases} \quad (3.28)$$

Questo ci porta a definire l'operatore di scattering:

$$\boxed{S = \Omega_-^\dagger \Omega_+ \quad |\psi_{out}\rangle = S |\psi_{in}\rangle} \quad (3.29)$$

Questo è ben definito anche con la sola condizione asintotica, anche se in tal caso se $\Omega_+ |\psi_{in}\rangle \notin \mathcal{R}_-$ allora $S |\psi_{in}\rangle = 0$.

3.5.2 Contenuto Fisico dell'Operatore di Scattering

Verifichiamo a questo punto che l'operatore di scattering fornisce tutte le informazioni fisiche sullo scattering. Sia una particella nello stato asintotico iniziale $|\phi\rangle$ emessa da una certa sorgente. Sappiamo che per definizione di operatore di scattering $|\psi_{out}\rangle = S |\phi\rangle$. Vogliamo verificare con un rivelatore se la particella dopo la collisione si trova in uno stato $|\chi\rangle$. Vogliamo dunque misurare la probabilità di overlap tra lo stato effettivo a $t = 0$ che ha $|\phi\rangle$ come asintoto iniziale e lo stato ipotetico a $t = 0$ che ha per stato asintotico finale $|\chi\rangle$. Questi si ottengono applicando l'opportuno operatore di Moeller a ciascuno degli stati, e li indichiamo come segue:

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &\xrightarrow{t=0} \Omega_+ |\phi\rangle = |\phi, +\rangle \\ |\chi\rangle &\xrightarrow{t=0} \Omega_- |\chi\rangle = |\chi, -\rangle \end{aligned} \quad (3.30)$$

La probabilità di overlap che lo stato con asintoto iniziale $|\phi\rangle$ abbia asintoto finale $|\chi\rangle$ è data dunque da:

$$W(\phi \rightarrow \chi) = |\langle \chi, - | \phi, + \rangle|^2 = \left| \langle \chi | \Omega_-^\dagger \Omega_+ | \phi \rangle \right|^2 = |\langle \chi | S | \phi \rangle|^2 \quad (3.31)$$

Questo significa che effettivamente l'operatore S racchiude tutte le informazioni relative allo scattering di una particella.

3.5.3 Proprietà

Dimostriamo adesso alcune fondamentali proprietà dell'operatore di scattering.

Unitarietà

Iniziamo col dimostrare che S è unitario. Ci poniamo nel caso di completezza asintotica, così che $\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_- = \mathcal{R}$. In questo caso allora Ω_-^\dagger agisce solo sul range di Ω_- e dunque si riduce all'inverso:

$$\Omega_-^\dagger \Omega_+ = \Omega_-^{-1} \Omega_+ \quad (3.32)$$

In tal caso allora S è dato dal prodotto di operatori isometrici e dunque è a sua volta isometrico. Inoltre il suo range coincide con tutto lo spazio di Hilbert:

$$\mathcal{H} \xrightarrow{\Omega_+} \mathcal{R} \xrightarrow{\Omega_-^{-1}} \mathcal{H} \Rightarrow \mathcal{R}(S) = \mathcal{R}(\Omega_-^{-1} \Omega_+) = \mathcal{H} \quad (3.33)$$

Questo significa che S è anche suriettivo e dunque unitario. Pertanto è anche invertibile e conserva il prodotto scalare. Questo ce lo potevamo aspettare in quanto in presenza di completezza asintotica nel caso classico vi era corrispondenza biunivoca tra asintoti di out e di in, che ritroviamo dunque anche nel caso quantistico.

3.5.4 Conservazione dell'Energia

Possiamo dimostrare che S conserva anche l'energia del sistema, ossia commuta con l'hamiltoniana libera. Non commuta con l'hamiltoniana d'interazione in quanto l'operatore S agisce sugli stati asintotici. Per fare questo vogliamo dimostrare le **relazioni di interpolazione**:

$$\widehat{\mathcal{H}} \Omega_\pm = \Omega_\pm \widehat{\mathcal{H}}_0 \quad (3.34)$$

Applichiamo U^\dagger agli operatori di Moeller, usando le proprietà di gruppo degli evolutori temporali:

$$\begin{aligned} U^\dagger(\tau) \Omega_\pm &= U^\dagger(\tau) \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^\dagger(t) U_0(t) = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^\dagger(\tau) U^\dagger(t) U_0(t) = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^\dagger(t + \tau) U_0(t) = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^\dagger(t + \tau) U_0(t + \tau) U_0^\dagger(\tau) = \\ &= \left[\lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^\dagger(t + \tau) U_0(t + \tau) \right] U_0^\dagger(\tau) = \left[\lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^\dagger(t) U_0(t) \right] U_0^\dagger(\tau) = \Omega_\pm U_0^\dagger(\tau) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Siccome questo vale per ogni τ allora vale anche per tempi infinitesimi:

$$\begin{aligned} U^\dagger(d\tau)\Omega_\pm &= \Omega_\pm U_0^\dagger(d\tau) \\ \Omega_\pm + \frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}\Omega_\pm d\tau &= \Omega_\pm + \frac{i}{\hbar}\Omega_\pm\hat{\mathcal{H}}_0 d\tau \\ \hat{\mathcal{H}}\Omega_\pm &= \Omega_\pm\hat{\mathcal{H}}_0 \end{aligned} \quad (3.36)$$

Come volevasi dimostrare. Queste relazioni prendono anche la forma seguente, che ha maggiore significato fisico:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}\Omega_\pm &= \Omega_\pm\hat{\mathcal{H}}_0 \\ \Omega_\pm^\dagger\hat{\mathcal{H}}\Omega_\pm &= \Omega_\pm^\dagger\Omega_\pm\hat{\mathcal{H}}_0 \\ \hat{\mathcal{H}}_0 &= \Omega_\pm^\dagger\hat{\mathcal{H}}\Omega_\pm \end{aligned} \quad (3.37)$$

Pertanto gli operatori di Moeller forniscono l'hamiltoniana libera a partire da quella di interazione, mentre viceversa forniscono gli stati "d'interazione" a partire da quelli "liberi". Notiamo come sia fondamentale che in generale questi operatori *non* siano unitari ma isometrici. Se infatti fosse isometrici allora $\hat{\mathcal{H}}$ dovrebbe avere necessariamente puro spettro continuo (la natura dello spettro è conservata per trasformazioni unitarie).

Se poi restringiamo lo spazio ai soli stati di scattering troviamo però che gli operatori di Moeller sono effettivamente unitari. Questo significa che lo spettro associato agli stati di scattering è continuo ed è superiormente illimitato come quello di $\hat{\mathcal{H}}_0$, che è dato da $(0, +\infty)$. In particolare sarà proprio $(0, +\infty)$ a meno di traslazioni (o discontinuità di misura nulla, come visto nel caso classico).

Usiamo ora queste relazioni per dimostrare che l'operatore di scattering commuta con l'hamiltoniana libera:

$$S\hat{\mathcal{H}}_0 = \Omega_-^\dagger(\Omega_+\hat{\mathcal{H}}_0) = (\Omega_-^\dagger\hat{\mathcal{H}})\Omega_+ = \hat{\mathcal{H}}_0(\Omega_-^\dagger\Omega_+) = \hat{\mathcal{H}}_0S \iff [S, \hat{\mathcal{H}}_0] = 0 \quad (3.38)$$

Immediatamente questo ci porta alla conservazione del valore medio dell'energia tra gli stati asintotici:

$$\langle\psi_{out}|\hat{\mathcal{H}}_0|\psi_{out}\rangle = \langle\psi_{in}|S^\dagger\hat{\mathcal{H}}_0S|\psi_{in}\rangle = \langle\psi_{in}|S^\dagger S\hat{\mathcal{H}}_0|\psi_{in}\rangle = \langle\psi_{in}|\hat{\mathcal{H}}_0|\psi_{in}\rangle \quad (3.39)$$

Siccome $\hat{\mathcal{H}}_0$ è diagonale nella base dei momenti ed S commuta con $\hat{\mathcal{H}}_0$ allora questo suggerisce una naturale espressione dell'operatore di scattering nella base dei momenti, dove prende il nome di **matrice di scattering**:

$$S(\vec{p}, \vec{p}') = \langle\vec{p}'|S|\vec{p}\rangle \quad (3.40)$$

Notiamo che nello scattering quantistico, per una stessa particella di "momento iniziale" \vec{p} , ha senso parlare di osservare uno spettro di momenti finali \vec{p}' , che hanno stesso modulo ma direzione diversa. In meccanica classica per una singola particella potevamo infatti prevedere esattamente \vec{p}' , mentre in meccanica classica possiamo solo fare considerazioni statistiche sulla distribuzione dei possibili \vec{p}' finali.

Capitolo 4

Ampiezza di Scattering

In questo capitolo vogliamo definire una grandezza fondamentale e trovare il suo legame alla sezione d'urto, che è la quantità effettivamente misurabile in laboratorio. Questo fornisce dunque un primo collegamento tra teoria ed esperimento, anche se non esamineremo tecniche di calcolo e casi specifici e dunque effettivamente non faremo predizioni.

4.1 Definizione

4.1.1 Matrice t on shell

Nel precedente capitolo abbiamo dimostrato che nel caso di completezza asintotica esiste un operatore di scattering S che lega gli stati asintotici:

$$|\psi_{out}\rangle = S |\psi_{in}\rangle \quad (4.1)$$

Abbiamo poi dimostrato che questo è unitario e dunque invertibile e conserva l'energia. In particolare questo ci ha portato alla matrice di scattering:

$$S(\vec{p}, \vec{p}') = \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle \quad (4.2)$$

Notiamo adesso che siccome l'energia è conservata allora:

$$0 = \langle \vec{p}' | [\hat{H}_0, S] | \vec{p} \rangle = (E_{p'} - E_p) \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = (E_{p'} - E_p) S(\vec{p}, \vec{p}') \quad (4.3)$$

Questo significa che la matrice di scattering può essere scritta come la somma di una parte che è nulla quando gli stati hanno diversa energia e un "**resto**" che contribuisce solo quando gli stati hanno stessa energia:

$$S(\vec{p}, \vec{p}') = \delta(E_{p'} - E_p) \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle + R(\vec{p}, \vec{p}') \quad (4.4)$$

Questo suggerisce di fattorizzare l'operatore di scattering nell'identità più un resto:

$$S = \mathbb{1} + R \quad (4.5)$$

Ci aspettiamo dunque che in assenza di potenziale $V(\vec{x}) = 0$ lo stato asintotico passato e futuro coincidono, così che $S = \mathbb{1}$, $R = 0$. Pertanto l'operatore R deve misurare l'effetto del potenziale, anche se in maniera non banale.

IN questo caso è dunque chiaro che R conserva l'energia e dunque nella base dei momenti è della forma:

$$\langle \vec{p}' | R | \vec{p} \rangle \propto \delta(E_{p'} - E_p) \quad (4.6)$$

Definiamo dunque la **funzione t** come segue:

$$\langle \vec{p}' | R | \vec{p} \rangle = -2\pi i \delta(E_{p'} - E_p) t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad (4.7)$$

Rispetto a questa funzione la matrice di scattering si scrive nel seguente modo:

$$\langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \delta_3(\vec{p}' - \vec{p}) - 2\pi i \delta(E_{p'} - E_p) t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad (4.8)$$

Mentre la relazione tra stati asintotici è data da:

$$\psi_{out}(\vec{p}') = \psi_{in}(\vec{p}') - 2\pi i \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \delta(E_{p'} - E_p) t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \psi_{in}(\vec{p}) \quad (4.9)$$

Notiamo che all'integrale contribuiscono solo i valori di \vec{p} che hanno lo stesso modulo di \vec{p}' . Altrimenti detto, il valore della funzione d'onda dell'asintoto futuro in un impulso \vec{p}' è determinato solo dai valori della funzione d'onda dell'asintoto passato valutata negli impulsi che hanno stesso modulo di \vec{p}' .

Definizione on shell

A causa della presenza della delta, la funzione t è definita **on shell**, ossia non è funzione di (\vec{p}, \vec{p}') che variano in \mathbb{R}^6 , ma solo di coppie (\vec{p}, \vec{p}') che hanno stessa energia (o equivalentemente stesso modulo):

$$t: (\vec{p}, \vec{p}') \rightarrow \mathbb{C} \quad |\vec{p}| = |\vec{p}'| \quad (4.10)$$

Pertanto è in realtà solo una funzione del modulo e degli angoli che definiscono le direzioni di \vec{p}, \vec{p}' :

$$t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = t(E_p, \alpha, \beta, \alpha', \beta') \quad (4.11)$$

Siccome la dipendenza dal potenziale nell'operatore di scattering è tutta contenuta in R e dunque in t , allora ci aspettiamo che per un potenziale siano rispettate le solite simmetrie e dunque conti solo l'angolo di deflessione:

$$t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = t(E_p, \theta) \quad (4.12)$$

Guardando la definizione della funzione t ci chiediamo però se sia possibile estendere la definizione ad una vera e propria matrice t e dunque un operatore corrispondente:

$$\exists t \in \mathcal{L}(\mathcal{H}): \langle \vec{p}' | t | \vec{p} \rangle \stackrel{?}{=} t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \quad \forall (\vec{p}, \vec{p}') \quad (4.13)$$

La risposta a questa domanda è sì, ossia è possibile dimostrare che $t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ è la restrizione di una funzione analitica definita anche off-shell, che definisce un operatore. Questa matrice t è utile a dimostrare alcuni risultati ma è fuori dagli obiettivi del corso.

4.1.2 Definizione di Ampiezza di Scattering

Siamo ora pronti a definire la grandezza di vero interesse fisico, che chiamiamo **ampiezza di scattering**. Questa differisce dalla funzione t solo per fattori dimensionali:

$$\begin{aligned} f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') &= -\frac{1}{(2\pi)^2 m \hbar} t(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \\ \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle &= \delta_3(\vec{p}' - \vec{p}) + \frac{i}{2\pi m \hbar} \delta(E_{p'} - E_p) f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') \end{aligned} \quad (4.14)$$

Notiamo che in questo modo l'ampiezza di scattering ha dimensioni di una lunghezza:

$$[f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')] = \left[\frac{m \hbar \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle}{\delta(E_{p'} - E_p)} \right] = \left[\frac{m \hbar \delta_3(\vec{p}' - \vec{p})}{\delta(E_{p'} - E_p)} \right] = [M][P][L][E][P]^{-3} = [M][P]^{-2}[L][P]^2[M]^{-1} = [L] \quad (4.15)$$

Questa definizione è dovuta al fatto che si trova una sorprendente relazione tra sezione d'urto differenziale (nell'angolo solido) e l'ampiezza di scattering:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')|^2} \quad (4.16)$$

Prima di fare questo chiaramente dobbiamo generalizzare opportunamente la sezione d'urto al caso quantistico.

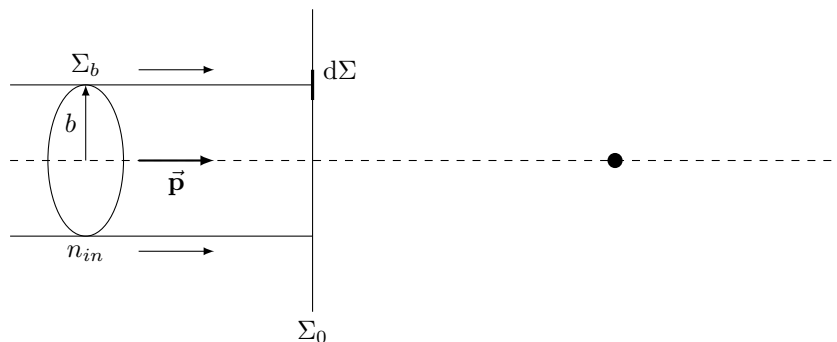
4.2 Sezione d'Urto nello Scattering Quantistico

Cerchiamo adesso di generalizzare la definizione di sezione d'urto al caso quantistico. Sia un bersaglio fisso e delle particelle incidenti con impulso approssimativamente ben definito, ossia centrato attorno ad un certo \vec{p} . Sia Σ_0 un piano perpendicolare a \vec{p} lontano dal bersaglio. Il flusso delle particelle incidenti n_{in} è definito come la quantità di particelle dN_{in} (per unità di tempo) che attraversano una sezione $d\Sigma$ di Σ_0 :

$$dN_{in} = n_{in} d\Sigma \quad (4.17)$$

Notiamo che in meccanica quantistica ha ancora senso dire che una particella attraversa un elemento di superficie $d\Sigma$ se ragioniamo di valore medio della posizione e i pacchetti sono sufficientemente localizzati intorno ad esso (ma non tanto da rendere la variazione su \vec{p} troppo grande). Rispetto a questo ha dunque ancora senso parlare di parametro di impatto come distanza tra la posizione media e la retta parallela a \vec{p} passante per il bersaglio. Come nel caso classico non ha senso parlare di parametro di impatto di singola particella. Possiamo comunque richiedere che il parametro di impatto abbia un valore massimo R , limitando dunque le posizioni medie ad un cilindro che ha per asse la retta parallela a \vec{p} passante per il bersaglio. Questo è motivato dal fatto che in un esperimento di scattering questo è il tipico modo in cui una sorgente emette un fascio di particelle. Limitiamo dunque effettivamente Σ_0 a questo cerchio. A questo punto

ha senso anche richiedere che il flusso sia uniforme, ossia che i parametri di impatto siano distribuiti uniformemente su tutto il cerchio.



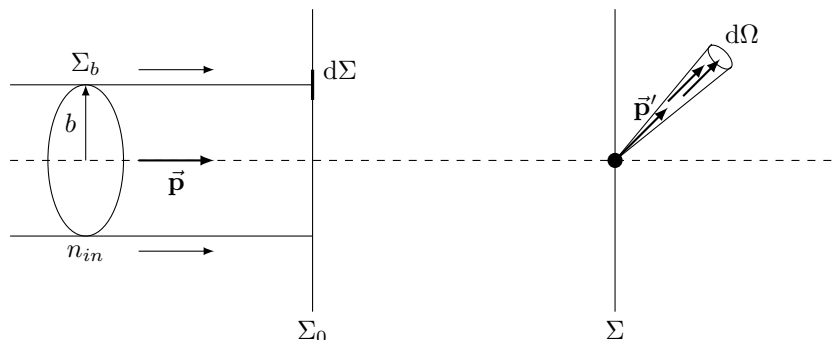
Pertanto fissato il momento $\vec{\mathbf{p}}$ e le funzioni d'onda delle particelle che costituiscono il fascio, il numero di particelle incidenti dipende solo dalla sezione $d\Sigma$ attraversata:

$$dN_{in}(d\Sigma) = n_{in}d\Sigma \quad (4.18)$$

Indicando con $dN_{sc}(d\Omega)$ la particelle diffuse con impulso finale centrato in \mathbf{p}' nell'angolo $d\Omega$, allora definiamo la sezione d'urto differenziale come segue:

$$dN_{sc}(d\Omega) = n_{in} d\sigma(\vec{p}, d\Omega) = n_{in} d\sigma(\vec{p}, \vec{p}') \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p}, \vec{p}') = \frac{1}{n_{in}} \frac{dN_{sc}}{d\Omega} \quad (4.19)$$

Notiamo che a differenza del caso classico si richiede che il *momento* della particella finisca nell'angolo $d\Omega$, e non la *posizione*. In realtà per grandi t questa richiesta diventa equivalente, anche se noi vedremo la dimostrazione basata solo sui momenti.



Siccome in collisioni elastiche l'energia è conservata allora in realtà la sezione d'urto dipende dall'energia e dagli angoli che definiscono le direzioni $\vec{\mathbf{p}}, \vec{\mathbf{p}}'$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{\mathbf{p}}, \vec{\mathbf{p}}') = \frac{d\sigma}{d\Omega}(E_p, \alpha, \beta, \alpha', \beta') \quad (4.20)$$

In realtà siccome $\vec{\mathbf{p}}$ è fissato allora sono rilevanti solo gli angoli tra $\vec{\mathbf{p}}'$ e $\vec{\mathbf{p}}$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{\mathbf{p}}, \vec{\mathbf{p}}') = \frac{d\sigma}{d\Omega}(E_p, \alpha', \beta') \quad (4.21)$$

Infine, per potenziali centrali è rilevante solo l'angolo di deflessione, così che infine ci aspettiamo:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{\mathbf{p}}, \vec{\mathbf{p}}') = \frac{d\sigma}{d\Omega}(E_p, \theta) \quad (4.22)$$

Notiamo come nello scattering quantistico la "statistica" è presente doppiamente: nella definizione di sezione d'urto e nella natura stessa della misura dello stato.

4.3 Sezione d'Urto Differenziale ed Ampiezza di Scattering

Per arrivare alla relazione tra sezione d'urto differenziale ed ampiezza di scattering dobbiamo adesso elaborare ulteriormente l'espressione della sezione d'urto differenziale. Per fare questo dobbiamo capire come esprimere come esprimere dN_{in} e dN_{sc} rispetto ai parametri del sistema.

4.3.1 Distribuzione degli Stati Asintotici Passati

Per fare questo iniziamo col fare l'ipotesi che gli stati delle particelle che costituiscono il fascio si ottengano semplicemente per traslazione dello stato di una particella lungo il piano Σ_0 (limitato al cerchio di raggio R). Dobbiamo dunque capire che effetto ha la traslazione sullo stato della particella considerata.

Sia dunque una particella appartenente al fascio che ha stato asintotico iniziale $|\psi_{in}\rangle = |\phi\rangle$, la sua funzione d'onda nello spazio delle configurazioni è data da:

$$\phi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \phi \rangle \quad (4.23)$$

Lo stato di un'altra particella sarà dunque dato dalla traslazione di un certo vettore $\vec{\rho}$:

$$\phi_{\vec{\rho}} = \phi(\vec{x} - \vec{\rho}) \quad (4.24)$$

Pertanto gli stati delle particelle che costituiscono il fascio possono essere parametrizzati da $\vec{\rho}$ e li indichiamo in notazione di Dirac con $|\phi_{\vec{\rho}}\rangle$. In realtà noi siamo interessati all'espressione nello spazio dei momenti, in quanto l'ampiezza di scattering fornisce la relazione tra asintoti passati e futuri di una particella nello spazio dei momenti.

Vediamo dunque la traslazione che effetto ha in questo caso:

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{\rho}}(\vec{p}) &= \langle \vec{p} | \phi_{\vec{\rho}} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \phi_{\vec{\rho}} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d^3x \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) \phi(\vec{x} - \vec{\rho}) = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\rho}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d^3x \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{\rho})\right) \phi(\vec{x} - \vec{\rho}) = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\rho}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d^3x \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) \phi(\vec{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\rho}} \phi(\vec{p}) \end{aligned} \quad (4.25)$$

La "distribuzione" degli stati asintotici passati del fascio di particelle incidente è data dunque da:

$$\phi_{\vec{\rho}}(\vec{p}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{\rho}} \phi(\vec{p}) \quad (4.26)$$

L'unica differenza tra gli asintotici delle particelle che costituiscono il fascio è dunque una semplice fase. In particolare $\vec{\rho}$ varia su un dominio tale che il parametro di impatto delle particelle vari su Σ_0 . Per semplicità possiamo assumere che $|\phi\rangle$ sia lo stato della particella con parametro d'impatto nullo, così che $|\vec{\rho}|$ coincide con il parametro d'impatto e il dominio su cui varia $\vec{\rho}$ coincide con il cerchio di raggio R :

$$\vec{\rho} \in \mathbb{S}_2(R) = \{\vec{\rho} \in \mathbb{R}^2 : |\vec{\rho}| \leq R\} \quad (4.27)$$

Con questa parametrizzazione possiamo riscrivere la relazione tra il flusso e il numero di particelle incidenti che attraversano l'area $d\Sigma = d^2\rho$:

$$dN_{in}(\vec{\rho} \in d^2\rho) = n_{in} d^2\rho \quad (4.28)$$

La richiesta che il flusso di particelle sia costante diventa dunque che n_{in} non vari rispetto a $\vec{\rho}$.

4.3.2 Media Classica nello Scattering di Particelle

Vediamo adesso come mettere in relazione $dN_{sc}(d\Omega)$ e $dN_{in}(d^2\rho)$. Per ogni area $d\Sigma$ di Σ_0 , la frazione di particelle $dN_{in}(d^2\rho)$ che vengono diffuse in $d\Omega$ è data da:

$$dN_{in}(d^2\rho) W(\phi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) \quad (4.29)$$

dove $W(\phi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega)$ è la probabilità (infinitesima) che la particella nello stato $\phi_{\vec{\rho}}$ venga diffusa con un momento \vec{p} contenuto nell'elemento di angolo solido $d\Omega$. Pertanto sommando su tutti i possibili $d^2\rho$ troviamo:

$$dN_{sc}(\phi, d\Omega) = \int dN_{in}(d^2\rho) W(\phi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) = n_{in} \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\phi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) \quad (4.30)$$

Questo significa che facendo una media classica sui possibili parametri di impatto, il numero di particelle diffuse nell'angolo solido dipende solo dall'angolo solido considerato e dallo stato iniziale di una particella (in particolare quella a parametro d'impatto nullo). Questo significa che la sezione d'urto stessa dipende solo da questi parametri e la leggiamo come la sezione efficace in cui una particella nello stato ϕ viene diffusa in $d\Omega$:

$$dN_{sc}(\phi, d\Omega) = n_{in} d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) \quad (4.31)$$

Troviamo infine la seguente espressione per la sezione d'urto differenziale:

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\phi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) \quad (4.32)$$

Notiamo che questo si riduce opportunamente al caso classico dove W può assumere solo i valori 0 ed 1 e la somma si fa dunque solo sui parametri d'impatto rilevanti.

Tuttavia come visto nella sezione precedente, ci aspettiamo che la sezione d'urto dipenda solo dal momento \vec{p}_0 in cui è centrato ϕ e dall'angolo solido $d\Omega$ in cui è contenuto il momento finale \vec{p}' :

$$\boxed{d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = d\sigma(\vec{p}_0 \rightarrow d\Omega)} \quad (4.33)$$

In realtà facendo opportune ipotesi sulla forma del pacchetto ϕ dimostreremo che questo è valido. Notiamo che, dal punto di vista matematico, questo è possibile solo a causa della media classica su $d\Sigma$. Con questo risultato è poi facile compiere altre generalizzazioni. Se infatti gli stati del fascio sono ottenuti non solo per traslazioni di un solo stato, ma per traslazioni di diversi stati, allora possiamo ottenere un simile risultato se facciamo la media anche su questi stati, distribuiti con certe probabilità classiche π_k :

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = \sum_k \pi_k \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\phi_{\vec{\rho}}^{(k)} \rightarrow d\Omega) \quad \sum_k \pi_k = 1 \quad (4.34)$$

Questo continua a funzionare anche quando il bersaglio non è unico, ma vi sono diversi bersagli opportunamente distribuiti, su cui nuovamente facciamo la media classica. Supponiamo come al solito che la distanza tra due sia maggiore del raggio d'azione del potenziale e che siano distribuiti su un foglio sufficientemente sottile da impedire collisioni multiple.

Questo risultato implica dunque che la sezione d'urto differenziale non dipende più dallo specifico pacchetto considerato, così che infine questa dipende da \vec{p}_0 e $d\Omega$, o equivalentemente \vec{p}' con modulo fissato, e la specifica dipendenza funzionale è dovuta tutta al potenziale considerato. Questo è infatti quello che già avevamo trovato nel caso classico, e dunque non ci sorprende. In questo modo poi inizia ad avere senso la relazione con l'ampiezza di scattering, che per definizione dipende solo da \vec{p} e \vec{p}' (con definizione on shell).

4.3.3 Dimostrazione

Espressione della Probabilità

Dato un fascio di particelle in stati ottenuti per traslazione dello stato ϕ , se questo ϕ ha momento sufficientemente localizzato attorno ad un \vec{p}_0 , allora la sezione d'urto differenziale non dipende dai dettagli del pacchetto, ma solo dal momento \vec{p}_0 :

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = d\sigma(\vec{p}_0 \rightarrow d\Omega) \quad (4.35)$$

Contemporaneamente a questo risultato troveremo poi anche l'attesa relazione tra sezione d'urto differenziale e ampiezza di scattering.

Per fare questo torniamo all'espressione rispetto alla probabilità che la particella con stato $\phi_{\vec{\rho}}$ sia diffusa nell'angolo $d\Omega$:

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\phi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) \quad (4.36)$$

Esplicitiamo ora questa probabilità:

$$W(\phi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) = \int_{\vec{p} \in d\Omega} d^3p |\psi_{out}(\vec{p})|^2 = d\Omega \int_0^\infty dp p^2 |\psi_{out}(\vec{p})|^2 \quad (4.37)$$

Qui lasciamo come argomento \vec{p} , ma in realtà dovremmo fissare la direzione, ossia due angoli, in quanto racchiusa in $d\Omega$.

Esplicitiamo ora l'asintoto di out rispetto al pacchetto $\phi_{\vec{\rho}}$ e l'ampiezza di scattering:

$$\begin{aligned} \psi_{out}(\vec{p}) &= \psi_{in}(\vec{p}) + \frac{i}{2\pi m \hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) \psi_{in}(\vec{p}') = \\ &= \phi_{\vec{\rho}}(\vec{p}) + \frac{i}{2\pi m \hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) \phi_{\vec{\rho}}(\vec{p}') \end{aligned} \quad (4.38)$$

Chiaramente $\psi_{out}(\vec{p})$ è implicitamente ancora parametrizzato con $\vec{\rho}$, ma lo sottintendiamo per brevità di notazione.

Ipotesi di Assenza di Forward Scattering

Facciamo adesso un'ipotesi fondamentale, necessaria a calcolare il risultato cercato. Supponiamo di non fare osservazioni di **forward scattering**, ossia collisioni in cui il momento finale è deviato di poco rispetto alla direzione iniziale, contenuta in un angolo solido infinitesimo $d\Omega_0$. Questo significa che non facciamo misura per $d\Omega$ vicino ad $d\Omega_0$, ossia gli angoli solidi considerati sono tali che:

$$d\Omega \cap d\Omega_0 = \emptyset \quad (4.39)$$

Possiamo dunque trascurare il contributo di solo $\phi_{\vec{p}}(\vec{p})$ all'asintoto finale della corrispondente particella:

$$\psi_{out}(\vec{p}) \approx \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) \phi_{\vec{p}}(\vec{p}') \quad (4.40)$$

Possiamo ora inserire questa approssimazione nel calcolo della sezione d'urto differenziale (sottintendiamo che è quella relativa alla diffusione di ϕ con direzione del momento finale \vec{p} racchiusa in $d\Omega$):

$$\begin{aligned} d\sigma &= \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\phi_{\vec{p}} \rightarrow d\Omega) = d\Omega \int_{\Sigma_0} d^2\rho \int_0^\infty dp p^2 |\psi_{out}(\vec{p})|^2 = \\ &= d\Omega \int_{\Sigma_0} d^2\rho \int_0^\infty dp p^2 \left| \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) \phi_{\vec{p}}(\vec{p}') \right|^2 = \\ &= \frac{d\Omega}{(2\pi m\hbar)^2} \int_{\Sigma_0} d^2\rho \int_0^\infty dp p^2 \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) \phi_{\vec{p}}(\vec{p}') \right|^2 = \\ &= \frac{d\Omega}{(2\pi m\hbar)^2} \int_{\Sigma_0} d^2\rho \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) \phi_{\vec{p}}(\vec{p}') \int_{\mathbb{R}^3} d^3p'' \delta(E_p - E_{p''}) f^*(\vec{p}'' \rightarrow \vec{p}) \phi_{\vec{p}}^*(\vec{p}'') = \\ &= \frac{d\Omega}{(2\pi m\hbar)^2} \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p'' \delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_p - E_{p''}) f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) f^*(\vec{p}'' \rightarrow \vec{p}) \phi(\vec{p}') \phi^*(\vec{p}'') \int_{\Sigma_0} d^2\rho e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}'' - \vec{p}') \cdot \vec{\rho}} \end{aligned} \quad (4.41)$$

Manipolazione delle Delta

Estendiamo ora Σ_0 a tutto il piano e lo scegliamo per comodità coincidente con xy (\vec{p}_0 diretto lungo z), in modo che l'ultimo integrale coincide con il prodotto di due delta:

$$\int_{\Sigma_0} d^2\rho e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}'' - \vec{p}') \cdot \vec{\rho}} = (2\pi\hbar)^2 \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) \quad (4.42)$$

Facciamo adesso alcune manipolazioni dell'integrando e in particolare delle delta, in modo da rendere chiaro l'effettivo dominio di integrazione.

Iniziamo col notare che:

$$\delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_p - E_{p''}) = \delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_{p'} - E_{p''}) \quad (4.43)$$

da cui:

$$d\sigma = \frac{d\Omega}{m^2} \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3p' \int_{\mathbb{R}^3} d^3p'' \delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_{p'} - E_{p''}) \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) f(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) f^*(\vec{p}'' \rightarrow \vec{p}) \phi(\vec{p}') \phi^*(\vec{p}'') \quad (4.44)$$

Usando la proprietà $\delta(\alpha x) = \delta(x)/|\alpha|$ troviamo poi che:

$$\begin{aligned} \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) \delta(E_{p'} - E_{p''}) &= \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) \delta\left(\frac{p_z'^2 - p_z''^2}{2m}\right) = \\ &= 2m \delta(p''_x - p'_x) \delta(p''_y - p'_y) \delta(p_z'^2 - p_z''^2) \end{aligned} \quad (4.45)$$

Usiamo poi la proprietà di composizione della delta, con funzioni che hanno zeri localmente invertibili:

$$\delta(y(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{\left| \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_i}} \quad y(x_i) = 0, y'(x_i) \neq 0 \quad (4.46)$$

Possiamo applicare questa identità al nostro caso:

$$\begin{cases} x \rightarrow p_z'' \\ y(x) \rightarrow p_z'^2 - p_z''^2 \\ x_i \rightarrow \pm p_z' \\ y'(x) \rightarrow 2p_z'' \end{cases} \Rightarrow \delta(p_z'^2 - p_z''^2) = \frac{1}{2|p_z'|} \delta(p_z'' - p_z') + \frac{1}{2|p_z'|} \delta(p_z'' + p_z') \quad (4.47)$$

da cui:

$$\delta(p''_x - p'_x)\delta(p''_y - p'_y)\delta(E_{p'} - E_{p''}) = \frac{m}{|p'_z|}\delta(p''_x - p'_x)\delta(p''_y - p'_y)[\delta(p''_z - p'_z) + \delta(p''_z + p'_z)] \quad (4.48)$$

Siccome $\phi(\vec{\mathbf{p}})$ è centrato attorno a $\vec{\mathbf{p}}_0 = p_0 \hat{\mathbf{z}}$ allora nell'integrazione certamente non contribuiscono i momenti in direzione opposta, ossia contiamo solo $p''_z, p'_z \approx p_0 > 0$:

$$\delta(p''_x - p'_x)\delta(p''_y - p'_y)\delta(E_{p'} - E_{p''}) = \frac{m}{|p'_z|}\delta(p''_x - p'_x)\delta(p''_y - p'_y)\delta(p''_z - p'_z) = \frac{m}{|p'_z|}\delta_3(\vec{\mathbf{p}}'' - \vec{\mathbf{p}}') \quad (4.49)$$

Calcoli Finali

Possiamo ora inserire quanto trovato nell'integrale:

$$\begin{aligned} d\sigma &= \frac{d\Omega}{m} \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p'' \frac{1}{|p'_z|} \delta(E_p - E_{p'}) \delta_3(\vec{\mathbf{p}}'' - \vec{\mathbf{p}}') f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) f^*(\vec{\mathbf{p}}'' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) \phi(\vec{\mathbf{p}}') \phi^*(\vec{\mathbf{p}}'') = \\ &= \frac{d\Omega}{m} \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} \delta(E_p - E_{p'}) f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) f^*(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) \phi(\vec{\mathbf{p}}') \phi^*(\vec{\mathbf{p}}') = \\ &= \frac{d\Omega}{m} \int_0^\infty dp p^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} \delta(E_p - E_{p'}) |f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 = \\ &= d\Omega \int_0^\infty dE_p p \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} \delta(E_p - E_{p'}) |f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \end{aligned} \quad (4.50)$$

Facciamo adesso l'ipotesi ragionevole che $|f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2$ vari poco nel supporto D_ϕ di $\phi(\vec{\mathbf{p}})$, ossia sia approssimativamente costante:

$$|f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \approx |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \quad \forall \vec{\mathbf{p}}' \in D_\phi \quad (4.51)$$

Questo continua a valere anche in presenza di "rapide" variazioni dell'ampiezza di scattering, se rimaniamo nell'ipotesi che la larghezza del pacchetto è molto più stretta della larghezza di variazione dell'ampiezza di scattering. Per ora consideriamo però sempre variazioni "lente in assoluto".

In questa ipotesi l'ampiezza di scattering può essere portata fuori dall'integrale in $d^3 p'$. Notiamo poi che l'ampiezza di scattering è definita on shell, così che in realtà non dipende neppure dall'integrale su dE_p . Questo diventa chiaro se esplicitiamo i veri argomenti da cui dipende:

$$f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}}) = f(E_{p_0}, \alpha, \beta) \quad (4.52)$$

con α, β angoli che definiscono $\vec{\mathbf{p}}$ rispetto a $\vec{\mathbf{p}}_0$. In questo modo chiaramente:

$$\begin{aligned} d\sigma &= d\Omega \int_0^\infty dE_p p \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \delta(E_p - E_{p'}) |f(\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \approx \\ &\approx d\Omega \int_0^\infty dE_p p \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \delta(E_p - E_{p'}) |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 = \\ &= d\Omega \int_0^\infty dE_p p |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \delta(E_p - E_{p'}) = \\ &= d\Omega |f(E_{p_0}, \alpha, \beta)|^2 \int_0^\infty dE_p p \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \delta(E_p - E_{p'}) = \\ &= d\Omega |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \int_0^\infty dE_p p \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \delta(E_p - E_{p'}) \end{aligned} \quad (4.53)$$

Stavolta il $\vec{\mathbf{p}}$ come argomento in f non è una variabile di integrazione ma lo specifico momento che ha direzione in $d\Omega$ e modulo pari a $\vec{\mathbf{p}}_0$. Continuiamo dunque il calcolo:

$$\begin{aligned} d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) &= d\Omega |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \frac{1}{|p'_z|} |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \int_0^\infty dE_p p \delta(E_p - E_{p'}) = \\ &= d\Omega |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' \left| \frac{p'}{p'_z} \right| |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \end{aligned} \quad (4.54)$$

Come prima possiamo supporre che p'/p'_z vari di poco nel supporto D_ϕ , in modo che:

$$p'_z \approx p' \Rightarrow \left| \frac{p'}{p'_z} \right| \approx 1 \quad (4.55)$$

da cui:

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = d\Omega |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p' |\phi(\vec{\mathbf{p}}')|^2 \quad (4.56)$$

Siccome ϕ è ortonormalizzato troviamo:

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = |f(\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 d\Omega \quad (4.57)$$

Siccome questo è valido per ogni ϕ centrato in $\vec{\mathbf{p}}_0$ allora scriviamo il risultato atteso, facendo la sostituzione $\vec{\mathbf{p}}_0 \rightarrow \vec{\mathbf{p}}, \vec{\mathbf{p}} \rightarrow \vec{\mathbf{p}}'$:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{\mathbf{p}}, \vec{\mathbf{p}}') = |f(\vec{\mathbf{p}} \rightarrow \vec{\mathbf{p}}')|^2} \Rightarrow d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = d\sigma(\vec{\mathbf{p}}, \vec{\mathbf{p}}') \quad (4.58)$$

come volevasi dimostrare.

4.4 Forward Scattering

Vediamo adesso brevemente cosa succede quando consideriamo il forward scattering. In questo caso si trova che la sezione d'urto infinitesima corrispondente diverge, a causa del contributo di grandi parametri di impatto. Infatti siccome W è definita positiva, preso un $R > 0$ qualunque:

$$d\sigma(\phi \rightarrow d\Omega) = \int_{\Sigma_0} d^2\rho W(\phi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) \geq \int_{|\vec{\rho}| \geq R} d^2\rho W(\phi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) \quad (4.59)$$

Se prendiamo $R \gg d$, con d raggio d'azione del potenziale, allora l'interazione tra la particella e il potenziale è trascurabile, così che l'asintoto iniziale e finale coincidono:

$$\psi_{out}(\vec{\mathbf{p}}) \approx \psi_{in}(\vec{\mathbf{p}}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\rho}} \phi(\vec{\mathbf{p}}) \quad (4.60)$$

Inserendo questa nell'integrale troviamo che diverge:

$$\begin{aligned} \int_{|\vec{\rho}| \geq R} d^2\rho W(\phi_{\vec{\rho}} \rightarrow d\Omega) &= d\Omega \int_{|\vec{\rho}| \geq R} d^2\rho \int_0^\infty dp p^2 |\psi_{out}(\vec{\mathbf{p}})|^2 = d\Omega \int_{|\vec{\rho}| \geq R} d^2\rho \int_0^\infty dp p^2 |\phi(\vec{\mathbf{p}})|^2 = \\ &= d\Omega \int_0^\infty dp p^2 |\phi(\vec{\mathbf{p}})|^2 \int_{|\vec{\rho}| \geq R} d^2\rho = +\infty \end{aligned} \quad (4.61)$$

Pertanto la presenza di direzioni del momento contenute in $d\Omega_0$ implica che $|\psi_{out}(\vec{\mathbf{p}})| \neq 0$ in $d\Omega_0$, risultando nella divergenza. Questo implica che fisicamente non ha senso misurare la sezione d'urto nella direzione di incidenza. Notiamo che questo problema si potrebbe evitare se potessimo fare esperimenti con pacchetti con localizzazione spaziale ben definita a scala macroscopica, che non ci obbliga a usare una media classica.

Questo significa che dobbiamo preparare pacchetti iniziali ben collimati, in modo da poter ottenere questa semplice dipendenza tra sezione d'urto e ampiezza di scattering, ma non tanto piccola che $\vec{\mathbf{p}}'$ appartiene a $d\Omega_0$.

Notiamo che tipicamente l'ampiezza di scattering è continua e dunque per estrapolazione si ottiene un valore finito per la sezione d'urto differenziale:

$$\lim_{\vec{\mathbf{p}}' \rightarrow \vec{\mathbf{p}}} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{\mathbf{p}} \rightarrow \vec{\mathbf{p}}') = |f(\vec{\mathbf{p}} \rightarrow \vec{\mathbf{p}})|^2 < \infty \quad (4.62)$$

4.5 Teorema Ottico

Il legame tra sezione d'urto e ampiezza di scattering non si ferma al risultato dimostrato nelle sezioni precedenti. Dimostriamo adesso un importante teorema che afferma questo, come conseguenza dell'unitarietà dell'operatore di scattering S . Siccome siamo interessati all'ampiezza di scattering allora troviamo l'identità equivalente per R :

$$\begin{aligned} S^\dagger S &= \mathbb{1} \\ (1 + R^\dagger)(1 + R) &= \mathbb{1} \\ 1 + R + R^\dagger + R^\dagger R &= 1 \\ R + R^\dagger &= -R^\dagger R \end{aligned} \quad (4.63)$$

Valutiamo quest'identità nella base degli impulsi:

$$\begin{aligned} \langle \vec{\mathbf{p}}' | R | \vec{\mathbf{p}} \rangle + \langle \vec{\mathbf{p}}' | R^\dagger | \vec{\mathbf{p}} \rangle &= -\langle \vec{\mathbf{p}}' | R^\dagger R | \vec{\mathbf{p}} \rangle \\ \langle \vec{\mathbf{p}}' | R | \vec{\mathbf{p}} \rangle + \langle \vec{\mathbf{p}}' | R^\dagger | \vec{\mathbf{p}} \rangle &= - \int d^3 \vec{\mathbf{p}}'' \langle \vec{\mathbf{p}}' | R^\dagger | \vec{\mathbf{p}}'' \rangle \langle \vec{\mathbf{p}}'' | R | \vec{\mathbf{p}} \rangle \\ \langle \vec{\mathbf{p}}' | R | \vec{\mathbf{p}} \rangle + \langle \vec{\mathbf{p}} | R | \vec{\mathbf{p}}' \rangle^* &= - \int d^3 \vec{\mathbf{p}}'' \langle \vec{\mathbf{p}}'' | R | \vec{\mathbf{p}}' \rangle^* \langle \vec{\mathbf{p}}'' | R | \vec{\mathbf{p}} \rangle \end{aligned} \quad (4.64)$$

Vediamo poi in termini dell'ampiezza di scattering:

$$\begin{aligned}
\frac{i\delta(E_{p'} - E_p)}{2\pi m\hbar} [f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') + f^*(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})] &= -\frac{1}{(2\pi m\hbar)^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}'' \delta(E_{p''} - E_{p'}) \delta(E_{p''} - E_p) f^*(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}'') f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'') \\
\frac{i\delta(E_{p'} - E_p)}{2\pi m\hbar} [f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') + f^*(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})] &= -\frac{\delta(E_{p'} - E_p)}{(2\pi m\hbar)^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}'' \delta(E_{p''} - E_{p'}) f^*(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}'') f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'') \\
f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') + f^*(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) &= \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}'' \delta(E_{p''} - E_{p'}) f^*(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}'') f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')
\end{aligned} \tag{4.65}$$

Possiamo semplificare la delta ricordando che negli integrali deve risultare $E_p = E_{p'}$. Valutiamo ora il caso di forward scattering $\vec{p}' = \vec{p}$, che come abbiamo detto in generale risulta in un valore finito dell'ampiezza di scattering:

$$\begin{aligned}
f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}) - f^*(\vec{p} \rightarrow \vec{p}) &= \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}'' \delta(E_{p''} - E_p) |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')| \\
2i \operatorname{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} &= \frac{i}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}'' \delta(E_{p''} - E_p) |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')|^2 \\
2 \operatorname{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} &= \frac{1}{2\pi m\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p}'' 2m\delta(p''^2 - p^2) |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')|^2 \\
2 \operatorname{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} &= \frac{1}{\pi\hbar} \int_{4\pi} d\Omega'' \int_0^\infty dp'' p''^2 \delta(p''^2 - p^2) |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')|^2 \\
2 \operatorname{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} &= \frac{1}{\pi\hbar} \int_{4\pi} d\Omega'' \int_0^\infty \frac{1}{2} dp''^2 \delta(p''^2 - p^2) p'' |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')|^2 \\
2 \operatorname{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} &= \frac{p}{2\pi\hbar} \int_{4\pi} d\Omega'' |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')|^2 \\
2 \operatorname{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} &= \frac{p}{2\pi\hbar} \int_{4\pi} d\Omega'' \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}'')
\end{aligned} \tag{4.66}$$

Nel penultimo passaggio notiamo che $|\vec{p}''| = |\vec{p}|$, come deve essere, visto che f è in realtà definita solo on shell. Troviamo infine una relazione tra parte immaginaria dell'ampiezza di scattering nel caso "in avanti" e la sezione d'urto totale, che prende il nome di **Teorema Ottico**:

$$\boxed{\operatorname{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} = \frac{p}{4\pi\hbar} \sigma(\vec{p})} \tag{4.67}$$

Insieme alla relazione trovata prima, questo teorema per mettere di estrapolare l'ampiezza di scattering a partire dalla sezione d'urto differenziale in avanti¹ e la sezione d'urto totale.

4.6 Matrice di Scattering per un dato potenziale

Vediamo adesso come in generale è possibile calcolare la matrice di scattering e dunque risolvere il problema dello scattering da potenziale. Notiamo che l'elemento di matrice generico può essere scritto come il prodotto scalare di due stati:

$$\langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}' | \Omega_-^\dagger \Omega_+ | \vec{p} \rangle = \langle \Omega_- \vec{p}' | \Omega_+ \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}', - | \vec{p}, + \rangle \tag{4.68}$$

Gli stati $|\vec{p}, \pm\rangle$ sono stati che, posti a $t = 0$, hanno per asintoto passato/futuro gli stati di momento $|\vec{p}\rangle$.

$$|\vec{p}, \pm\rangle = \Omega_\pm |\vec{p}\rangle = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^\dagger(t) U_0(t) |\vec{p}\rangle \tag{4.69}$$

In particolare siccome i $|\vec{p}\rangle$ sono non normalizzabili e gli operatori di Moeller sono isometrici allora anche i $|\vec{p}, \pm\rangle$ sono non normalizzabili, ossia vettori/stati impropri. Siccome gli operatori di Moeller mandano l'hamiltoniana d'interazione in quella libera per le relazioni di interpolazione, si trova che mandano autovettori di $\hat{\mathcal{H}}_0$ in autovettori di $\hat{\mathcal{H}}$, ossia i $|\vec{p}, \pm\rangle$ sono autostati di $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\hat{\mathcal{H}} |\vec{p}, \pm\rangle = \hat{\mathcal{H}} \Omega_\pm |\vec{p}\rangle = \Omega_\pm \hat{\mathcal{H}}_0 |\vec{p}\rangle = \frac{p^2}{2m} \Omega_\pm |\vec{p}\rangle = \frac{p^2}{2m} |\vec{p}, \pm\rangle \tag{4.70}$$

Questi stati hanno in particolare la stessa energia tra loro e di $|\vec{p}\rangle$ e appartengono dunque allo spettro continuo di $\hat{\mathcal{H}}$. In quanto autostati appartenenti allo spettro continuo di $\hat{\mathcal{H}}$ allora possiamo fattorizzarli nella base degli autostati

¹Come si misura? Escludendo gli alti parametri d'impatto?

comuni ad L^2, L_z . Questi sono indicizzati dai soli numeri quantici discreti l, m più l'indice continuo dell'energia W o equivalentemente del modulo dell'impulso p :

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{H}} |p, l, m\rangle = \frac{p^2}{2m} |p, l, m\rangle \\ \hat{L}^2 |p, l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |p, l, m\rangle \\ \hat{L}_z |p, l, m\rangle = m\hbar |p, l, m\rangle \end{cases} \quad (4.71)$$

Queste soddisfano condizioni di ortonormalizzazione improprie:

$$\langle p', l', m' | p, l, m \rangle = \delta(p' - p) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (4.72)$$

Siccome l'energia è fissata allora per un dato $|\vec{p}, \pm\rangle$, la combinazione lineare degli $|p, l, m\rangle$ può coinvolgere solo autostati con diversi numeri quantici l, m :

$$|\vec{p}, \pm\rangle = \sum_{lm} c_{lm}^{(\pm)}(p) |p, l, m\rangle \quad c_{lm}^{(\pm)}(\vec{p}) = \langle p, l, m | \vec{p}, \pm \rangle \quad (4.73)$$

Tipicamente affronteremo il problema dello scattering nello spazio delle configurazioni, dove parliamo invece delle autofunzioni improprie "di scattering" $u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x})$ (entranti/in con +, uscenti/out con -):

$$u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \vec{p}, \pm \rangle \quad (4.74)$$

Le autofunzioni improprie "radiali" saranno invece:

$$u_{plm}(\vec{x}) = \langle r, \theta, \phi | p, l, m \rangle = R_{pl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (4.75)$$

dove le Y_{lm} sono le armoniche sferiche e le y_{pl} soddisfano l'equazione radiale:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] y_{pl}(r) = E_p y_{pl}(r) \quad E_p = \frac{p^2}{2m} \quad (4.76)$$

che soddisfano le stesse condizioni di ortonormalizzazione improprie:

$$\int_0^\infty dr y_{p'l'}^*(r) y_{pl}(r) = \delta(p' - p) \delta_{ll'} \quad (4.77)$$

Mentre la fattorizzazione diventa:

$$u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x}) = \sum_{lm} c_{lm}^{(\pm)}(\vec{p}) u_{plm}(\vec{x}) \quad (4.78)$$

Il problema della determinazione della matrice di scattering (e dunque ampiezza di scattering e sezione d'urto) si riduce quindi a calcolare i coefficienti $c_{lm}^{(\pm)}(\vec{p})$.

4.7 Condizione Asintotica sulle Autofunzioni Improprie di Scattering

Vogliamo adesso dimostrare un risultato fondamentale, ossia che vale la seguente condizione asintotica sulle autofunzioni improprie di scattering:

$$u_{\vec{p}}^{(\pm)}(\vec{x}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) + f^{(\pm)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \frac{\exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} pr\right)}{r} \right] \quad (4.79)$$

Questa condizione afferma che le autofunzioni di scattering sono date dalla sovrapposizione di un'onda piana diretta come \vec{p} e un'onda sferica uscente dall'origine modulata nell'angolo tra \vec{p} e la posizione \vec{x} , da una funzione che dipende dal modulo p .

Sia adesso $|\psi_{in}\rangle$ un asintoto entrante e $|\psi\rangle$ il corrispondente stato interagente; li scriviamo nelle basi dei momenti $|\vec{p}\rangle$ e dei momenti "interagenti" $|\vec{p}, +\rangle$:

$$\begin{aligned} |\psi_{in}\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) |\vec{p}\rangle \\ |\psi\rangle &= \Omega_+ |\psi_{in}\rangle = \Omega_+ \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) |\vec{p}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) |\vec{p}, +\rangle \end{aligned} \quad (4.80)$$

dove $c(\vec{p})$ è una funzione a quadrato integrabile. Notiamo come la seconda equazione suggerisca che ogni stato di scattering possa essere scritto come combinazione lineare delle $|\vec{p}, \pm\rangle$, indicando che queste formano una base, almeno per \mathcal{R} ; vedremo questo in dettaglio più avanti. L'evoluzione temporale di questi stati è dato poi da:

$$\begin{aligned} |\psi_{in}(t)\rangle &= U_0(t) |\psi_{in}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) |\vec{p}\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= U(t) |\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) |\vec{p}, +\rangle \end{aligned} \quad (4.81)$$

Siccome abbiamo imposto la condizione asintotica nella configurazione dei momenti allora passiamo alle funzioni corrispondenti:

$$\begin{aligned} \psi_{in}(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x} | U_0(t) |\psi_{in}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{p^2}{2m} t\right)\right) \\ \psi(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x} | U(t) |\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (4.82)$$

Verificare la condizione asintotica sulle $u_{\vec{p}}^{(+)}$ a questo punto significa verificare che $\psi_{in}(\vec{x}, t)$ ha lo stesso limite di $\psi(\vec{x}, t)$ per $t \rightarrow -\infty$ per $r \rightarrow \infty$:

$$0 = \lim_{t \rightarrow -\infty} (\psi(\vec{x}, t) - \psi_{in}(\vec{x}, t)) \quad (4.83)$$

Verifichiamo prima questo per ogni \vec{x} finito. Per fare questo basta usare il seguente teorema dell'analisi di Fourier (noto tipicamente come Lemma di Riemann-Lebesgue).

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

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{ixt} = 0 \quad (4.84)$$

Questo significa che la trasformata di una funzione integrabile va a zero all'infinito. Possiamo applicare questo a $\psi_{in}(\vec{x}, t)$:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \psi_{in}(\vec{x}, t) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \quad (4.85)$$

In realtà questo teorema continua a valere anche per opportune autofunzioni improprie, così che vale anche per $\psi(\vec{x}, t)$ nell'espansione data (possiamo ricondurci al caso descritto dal teorema stesso passando alla base dei $|\vec{p}\rangle$, anche se così cambia l'integrando):

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \psi(\vec{x}, t) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \quad (4.86)$$

Questo dimostra che per \vec{x} finiti le due funzioni ψ_{in}, ψ hanno lo stesso limite, come in realtà potevamo dare per scontato per definizione di Ω_+ .

Notiamo come per discutere la condizione asintotica sulle $u_{\vec{p}}^{(\pm)}$ sia necessario considerare un pacchetto, in quanto altrimenti non vi è convergenza per gli stati propagati a $t \rightarrow \pm\infty$. Se infatti per il pacchetto vi è convergenza tramite il Teorema di Lebesgue, non vi è convergenza per la sola onda piana e dunque non ha senso verificare la convergenza per le singole autofunzioni improprie (sia radiali che di scattering). Questo continuerà ad essere vero anche più avanti, dove useremo pacchetti piuttosto che semplici autostati impropri.

Verifichiamo adesso che effettivamente questo vale anche ad $r \rightarrow \infty$ per la condizione asintotica data. Dobbiamo dunque verificare che $\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \psi_{in}(\vec{x}, t)$. Vediamo come si comporta $\psi(\vec{x}, t)$ a $r \rightarrow \infty$ per $t \rightarrow -\infty$:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) = \\ &\stackrel{r \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) + f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \frac{\exp\left(+\frac{i}{\hbar} pr\right)}{r} \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{p^2}{2m} t\right)\right) + \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p c(\vec{p}) \frac{f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}})}{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(pr - \frac{p^2}{2m} t\right)\right) = \\ &= \psi_{in}(\vec{x}, t) + \psi_{sc}(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (4.87)$$

Pertanto per $r \rightarrow \infty, t \rightarrow -\infty$ lo stato della particella è data da una sovrapposizione dello stato iniziale e di una componente di scattering. Resta dunque da verificare che ψ_{sc} vada a zero in modo che (per $r \rightarrow \infty, t \rightarrow -\infty$) le

funzioni ψ, ψ_{in} coincidano. Possiamo ricondurre questa componente di scattering ad un integrale unidimensionale:

$$\begin{aligned}\psi_{sc}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \, c(\vec{p}) \frac{f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{px}})}{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(pr - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) = \\ &= \frac{1}{r(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_0^\infty dp \, p^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(pr - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) \int_{4\pi} d\Omega_{\vec{p}} \, c(\vec{p}) f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{px}}) = \\ &= \frac{1}{r(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_0^\infty dp \, h(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(pr - \frac{p^2}{2m}t\right)\right)\end{aligned}\quad (4.88)$$

Possiamo ora estendere formalmente questo integrale a tutta la retta con $h(p) = 0, p \leq 0$:

$$\psi_{sc}(\vec{x}, t) = \frac{1}{r(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}} dp \, h(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(pr - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) \quad (4.89)$$

Pertanto formalmente questa funzione è equivalente alla propagazione di un pacchetto unidimensionale lungo la retta r nella direzione positiva. Questo significa che per $t \rightarrow -\infty$ il pacchetto sta sul semiasse negativo $r < 0$, che non è fisico. Pertanto per $r > 0$ il pacchetto è nullo, che era proprio quello che volevamo dimostrare:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \psi_{sc}(\vec{x}, t) = 0 \quad r \rightarrow +\infty \quad (4.90)$$

4.7.1 Legame tra Asintoto Entrante e Uscente

Notiamo come potremmo ripetere sostanzialmente invariata la dimostrazione di prima per le $u_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{x})$, usando il Teorema di Lebesgue per $t \rightarrow +\infty$ e la propagazione di ψ_{sc} nell'asse negativo delle r per $t \rightarrow +\infty$. Questo però non chiarisce il legame tra autofunzioni improprie di scattering entranti e uscenti. Per trovare questo basta notare che vi è simmetria per inversione temporale, data dalla coniugazione e inversione del momento, che possiamo verificare "a mano". Infatti troviamo che le $u_{-\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})^*$ soddisfano la condizione asintotica per le $u_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{x})$ per una certa $f^{(-)}$:

$$\begin{aligned}u_{-\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})^* &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) + \frac{f^{(+)}(p, \theta_{-\widehat{px}})^*}{r} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} pr\right) \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) + \frac{f^{(+)}(p, \pi - \theta_{\widehat{px}})^*}{r} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} pr\right) \right]\end{aligned}\quad (4.91)$$

Pertanto se poniamo:

$$\boxed{f^{(-)}(p, \theta_{\widehat{px}}) = f^{(+)}(p, \pi - \theta_{\widehat{px}})^*} \quad (4.92)$$

Questo significa che $u_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{x}) = u_{-\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})^*$ e che la condizione asintotica per le autofunzioni di scattering entranti fornisce le autofunzioni di scattering uscenti o viceversa.

Capitolo 5

Equazione di Schrodinger in Potenziali Centrali

Come visto nelle ultime sezioni del capitolo precedente, è fondamentale conoscere gli autostati o autofunzioni di una data hamiltoniana per il calcolo della matrice di scattering. Siccome noi siamo interessati a scattering da potenziale centrale allora vediamo alcune generalità sulle autofunzioni di un'hamiltoniana con potenziale centrale e in particolare quelle dell'hamiltoniana libera, espresse in coordinate sferiche.

5.1 Equazione di Schrodinger Radiale Stazionaria

5.2 Equazione Angolare

5.3 Equazione Radiale

5.4 Particella Libera

Capitolo 6

Metodo delle Onde Parziali

In questo capitolo usiamo la simmetria radiale del potenziale centrale per sviluppare un metodo per ottenere risultati generali su questi problemi, ma anche per risolvere problemi di scattering in maniera concreta.

Uno dei risultati fondamentali che otterremo è che la condiziona asintotica sulle autofunzioni improprie di scattering è determinata in maniera banale dall'ampiezza di (forward) scattering, tramite la relazione:

$$\boxed{f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{pp'}}) = f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')} \quad (6.1)$$

Pertanto il calcolo dell'ampiezza di scattering si riduce al calcolo delle $u_{\vec{p}}^{(\pm)}$ e dunque dei $c_{lm}^{(\pm)}$ e delle u_{plm} , da cui la condizione asintotica. Notiamo come questo risultato non è affatto banale a priori, in quanto significa che abbiamo trasformato completamente un problema dipendente dal tempo, ossia lo **scattering**, in un problema **indipendente dal tempo**; anche se solo per scattering da potenziale centrale.

Nell'ottenere questo risultato svilupperemo un metodo per il calcolo dell'ampiezza di scattering sotto forma di serie. Questo è un metodo "pratico" nel senso che, troncando la serie ai primi ordini, fornisce soluzioni che ben approssimano quella effettiva, pur di considerare lo scattering a bassi valori dell'energia o impulso.

6.1 Condizione Asintotica sulle Autofunzioni Improprie Radiali

Come accennato nell'introduzione al capitolo, vogliamo trovare l'espressione della $f^{(+)}(p, \theta)$ calcolando i coefficienti $c_{lm}^{(+)}$ e le u_{plm} . In realtà siamo solo interessati alle condizioni asintotiche sulle u_{plm} . Ricordiamo che queste sono date dal prodotto delle armoniche sferiche per funzioni radiali:

$$u_{plm}(\vec{x}) = \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] y_{pl} = \frac{p^2}{2m} y_{pl} \quad (6.2)$$

Siccome siamo nelle ipotesi del teorema 1, allora per $r \rightarrow \infty$ sia il potenziale che la barriera centrifuga vanno a zero, lasciando solo la derivata seconda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} y_{pl}'' = \frac{p^2}{2m} y_{pl} \iff y_{pl}'' = -\frac{p^2}{\hbar^2} y_{pl} \quad r \rightarrow \infty \quad (6.3)$$

Questo significa che le soluzioni, ossia le condizioni asintotiche sulla parte radiale delle autofunzioni radiali, sono in generale una combinazione di funzioni trigonometriche o esponenziali immaginari. Siccome l'equazione iniziale è a coefficienti reali allora possiamo prendere sempre soluzioni reali, determinate a meno di un segno. Pertanto, a meno di costanti troviamo:

$$y_{pl}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) \quad (6.4)$$

dove gli sfasamenti $\alpha_l(p)$ dipendono in generale dalla soluzione, che sono determinati a meno di $n\pi$ con $n \in \mathbb{Z}$ (visto che le soluzioni sono determinate a meno di un segno). Possiamo dunque scegliere in generale $\alpha_l(p)$ tra 0 e π .

Condizione di Ortonormalizzazione

Per determinare univocamente le $y_{pl}(r)$ dobbiamo dunque fissare anche un coefficiente, che per motivi dimensionali già sappiamo dover avere dimensioni di $1/\sqrt{\hbar}$. Facciamo la seguente ansatz:

$$u_{plm}(\vec{x}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \frac{1}{r} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) Y_{lm}(\theta, \phi) \iff y_{pl} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) \quad (6.5)$$

Per verificare che questo sia corretto dobbiamo verificare le condizioni di ortonormalizzazione:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3r u_{p'l'm'}^*(\vec{x}) u_{plm}(\vec{x}) = \delta(p - p') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (6.6)$$

In realtà siccome già è verificato per le armoniche sferiche bisogna verificarlo solo per la parte radiale:

$$\int_0^\infty dr y_{p'l'}(r) y_{pl}(r) = \delta(p - p') \quad (6.7)$$

Siccome queste sono autofunzioni improprie allora non possiamo verificare le condizioni direttamente, ma tramite pacchetti arbitrari ottenuti variando p :

$$\begin{cases} \psi_{lm}(\vec{x}) = \int_0^\infty dp c(p) u_{plm}(\vec{x}) \\ \phi_{lm}(\vec{x}) = \int_0^\infty dp d(p) u_{plm}(\vec{x}) \end{cases} \quad (6.8)$$

La dipendenza da l, m è fissata in quanto come detto è già verificata l'ortogonalità e normalizzazione. Notiamo adesso come la condizione di ortonormalizzazione coinvolga un integrale su tutta la retta reale e dunque anche parti di y_{pl} che non conosciamo in generale. La soluzione a questo problema è data come prima dal Teorema di Lebesgue, che richiede dunque di considerare l'evoluzione temporale per $t \rightarrow \infty$ (non è rilevante il segno). Per fare questo base notare che l'operatore di evoluzione è unitario così che:

$$\langle \phi_{lm} | \psi_{lm} \rangle = \langle U(t) \phi_{lm} | U(t) \psi_{lm} \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle U(t) \phi_{lm} | U(t) \psi_{lm} \rangle \quad (6.9)$$

Per esplicitare questo iniziamo con lo scrivere la forma integrale delle $\psi_{lm}(\vec{x}, t), \phi_{lm}(\vec{x}, t)$:

$$\begin{aligned} \psi_{lm}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) y_{pl}(r) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \\ \phi_{lm}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp d(p) y_{pl}(r) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \end{aligned} \quad (6.10)$$

Scriviamo dunque:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{lm} | \psi_{lm} \rangle &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{4\pi} d\Omega \int_0^\infty dr r^2 \phi_{lm}^*(\vec{x}, t) \psi_{lm}(\vec{x}, t) = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{4\pi} d\Omega |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \int_0^\infty dr \int_0^\infty dp d^*(p) y_{pl}^*(r) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \int_0^\infty dp' c(p') y_{p'l}(r) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p'^2}{2m} t\right) = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dp d^*(p) y_{pl}^*(r) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \int_0^\infty dp' c(p') y_{p'l}(r) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p'^2}{2m} t\right) = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dp \int_0^\infty dp' d^*(p) c(p') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{p^2 - p'^2}{2m} t\right) \int_0^\infty dr y_{pl}^*(r) y_{p'l}(r) \end{aligned} \quad (6.11)$$

Ci concentriamo adesso sul limite $t \rightarrow +\infty$ di $\psi_{lm}(\vec{x}, t)$ (vale lo stesso per ϕ_{lm}). Notiamo che in questo limite del cos nella condizione asintotica (ipotizzata) delle y_{pl} "sopravvive" l'esponenziale immaginario con argomento "positivo", per lo stesso argomento usato discutendo della componente di scattering 4.90, ossia equivale ad un pacchetto che si propaga verso $r < 0$:

$$\begin{aligned} \psi_{lm}(\vec{x}, t) &\stackrel{r, t \rightarrow +\infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi \hbar)^{1/2}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \left[\exp\left(i\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right)\right) + \exp\left(-i\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right)\right) \right] \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi \hbar)^{1/2}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{i\alpha_l(p)} \exp\left(i\frac{pr}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \end{aligned} \quad (6.12)$$

Pertanto, per il Teorema di Lebesgue rispetto alla trasformata in p , nel limite $t \rightarrow \infty$, per ogni r finito, le due funzioni d'onda si annullano. Pertanto nell'integrale sopravvive solo il contributo di $r \rightarrow +\infty$, dove le y_{pl} possono essere sostituite dalle loro condizioni asintotiche. Siccome comunque il contributo è nullo per r finiti allora il prodotto scalare coincide

anche se l'integrale si fa con le condizioni asintotiche su tutto $(0, +\infty)$. Possiamo anzi per comodità estendere l'integrale su tutta la retta reale. Troviamo dunque la seguente espressione per il prodotto scalare:

$$\begin{aligned}\langle \phi_{lm} | \psi_{lm} \rangle &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dp \int_0^\infty dp' d^*(p) c(p') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{p^2 - p'^2}{2m} t\right) \int_0^\infty dr y_{pl}^*(r) y_{pl}(r) = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dp \int_0^\infty dp' d^*(p) c(p') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{p^2 - p'^2}{2m} t\right) \int_{-\infty}^\infty dr e^{i(\alpha_l(p') - \alpha_l(p))} \exp\left(i \frac{(p - p')r}{\hbar}\right)\end{aligned}\quad (6.13)$$

D'altra parte, possiamo usare l'identità (nel senso delle distribuzioni):

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^\infty dr \exp\left(i \frac{(p - p')r}{\hbar}\right) = \delta(p - p') \quad (6.14)$$

Questo permette di arrivare al risultato cercato:

$$\begin{aligned}\langle \phi_{lm} | \psi_{lm} \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dp \int_0^\infty dp' d^*(p) c(p') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{p^2 - p'^2}{2m} t\right) \int_{-\infty}^\infty dr e^{i(\alpha_l(p') - \alpha_l(p))} \exp\left(i \frac{(p - p')r}{\hbar}\right) = \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^\infty dp \int_0^\infty dp' d^*(p) c(p') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{p^2 - p'^2}{2m} t\right) e^{i(\alpha_l(p') - \alpha_l(p))} \delta(p - p') = \\ &= \int_0^\infty dp d^*(p) c(p)\end{aligned}\quad (6.15)$$

come volevasi dimostrare.

6.1.1 Autofunzioni Improprie Radiali di una Particella Libera

Ricordiamo adesso che le autofunzioni improprie per una particella libera, usando p, l, m come numeri quantici:

$$u_{plm}(\vec{\mathbf{x}}) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} p j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6.16)$$

dove le $j_l(\rho)$ sono le funzioni sferiche di Bessel di prima specie. Queste godono effettivamente della condizione asintotica attesa, in quanto:

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} j_l(\rho) = \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \quad (6.17)$$

Troviamo dunque gli sfasamenti di una particella libera, che notiamo essere indipendenti da p :

$$\alpha_l^0(p) = -(l+1)\frac{\pi}{2} \quad (6.18)$$

Questo suggerisce di ridefinire gli sfasamenti in modo che sono "nulli" quando coincidono con quelli liberi:

$$\alpha_l(p) = \alpha_l^0(p) + \delta_l(p) \Rightarrow \delta_l(p) = \alpha_l(p) + (l+1)\frac{\pi}{2} \quad (6.19)$$

Pertanto la condizione asintotica sulle y_{pl} diventa:

$$y_{pl} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right) \quad (6.20)$$

6.2 Decomposizione delle Autofunzioni di Scattering nelle Autofunzioni Radiali

Nota la condizione asintotica sulle autofunzioni di scattering radiali e su quelle di scattering allora possiamo calcolare i coefficienti $c_{lm}^{(+)}$ a partire dalle condizioni asintotiche (essendo questi indipendenti dalla posizione). Come fatto per le condizioni asintotiche, facciamo un'ansatz e verifichiamo sia corretta:

$$c_{lm}^{(+)}(\vec{\mathbf{p}}) = \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{i\delta_l(p)} \quad (6.21)$$

con α, β angoli formati da $\vec{\mathbf{p}}$ rispettivamente con l'asse z e il piano xy . Notiamo che rispetto agli sfasamenti $\alpha_l(p)$ la forma cambia:

$$\begin{aligned}\exp\left(-i(l+1)\frac{\pi}{2}\right) &= \exp\left(-i\frac{\pi}{2}\right)^{(l+1)} = \frac{1}{(e^{i\pi/2})^{l+1}} = \frac{1}{i^{l+1}} \\ e^{i\alpha_l(p)} &= \frac{1}{i^{l+1}} e^{i\delta_l(p)} \\ c_{lm}^{(+)}(\vec{\mathbf{p}}) &= \frac{i^{2l+1}}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{i\alpha_l(p)}\end{aligned}\quad (6.22)$$

Vogliamo adesso verificare che:

$$u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) = \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{i\delta_l(p)} u_{plm}(\vec{x}) \quad (6.23)$$

Siccome i coefficienti sono indipendenti dalla posizione allora se questo è vero per le condizioni asintotiche 4.79 e 6.5, è vero anche in generale ($\forall \vec{x}$):

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

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) + f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right)}{r} \right] = \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{i\delta_l(p)} \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{r} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6.24)$$

Per continuare dobbiamo adesso ricordare alcuni risultati:

1. il Teorema di Addizione;

$$P_l(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\alpha, \beta) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6.25)$$

2. lo sviluppo dell'onda piana nelle autofunzioni improprie radiali libere, con conseguente andamento asintotico;

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

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\hbar}{pr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \quad (6.26)$$

Cerchiamo adesso di ricondurre il secondo membro dell'equazione al primo membro attraverso una serie di manipolazioni algebriche e l'uso dei citati risultati:

$$\begin{aligned} &= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{pr} \sum_l i^l e^{i\delta_l(p)} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) \sum_m Y_{lm}^*(\alpha, \beta) Y_{lm}(\theta, \phi) = \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{pr} \sum_l i^l e^{i\delta_l(p)} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1}{pr} \sum_l i^l (2l+1) e^{i\delta_l(p)} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{pr} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) e^{i\delta_l(p)} \left[\exp\left(i\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right)\right) + \exp\left(-i\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p)\right)\right) \right] = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{pr} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \left[\exp\left(i\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p) + \delta_l(p)\right)\right) + \exp\left(-i\left(\frac{pr}{\hbar} + \alpha_l(p) - \delta_l(p)\right)\right) \right] = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{pr} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \left[\exp\left(i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + 2\delta_l(p)\right)\right) + \exp\left(-i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)\right) \right] = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{pr} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \left[\exp(i(\gamma_l(p, r) + 2\delta_l(p))) + e^{-i\gamma_l(p, r)} \right]_{\gamma_l(p, r) = \frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2}} = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{pr} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \left[\exp(i(\gamma_l(p, r) + 2\delta_l(p))) - e^{i\gamma_l(p, r)} + e^{i\gamma_l(p, r)} + e^{-i\gamma_l(p, r)} \right] = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{pr} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \left[e^{i\gamma_l(p, r)} (e^{2i\delta_l(p)} - 1) + 2 \cos(\gamma_l(p, r)) \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\sum_l \frac{2\pi\hbar}{pr} i^l \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) e^{i\gamma_l(p, r)} (e^{2i\delta_l(p)} - 1) + \sum_l \frac{4\pi\hbar}{pr} i^l \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \cos(\gamma_l(p, r)) \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\frac{\hbar}{pr} \sum_l i^l (2l+1) \cos(\gamma_l(p, r)) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) + \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right)}{r} \left(\sum_l \frac{2\pi\hbar}{p} i^l \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) e^{-i(l+1)\pi/2} (e^{2i\delta_l(p)} - 1) \right) \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) + \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right)}{r} \left(\frac{\hbar}{2ip} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) (e^{2i\delta_l(p)} - 1) \right) \right] \end{aligned} \quad (6.27)$$

Abbiamo dunque trovato che è soddisfatta l'identità con i dati coefficienti se la funzione $f^{(+)}$ è definita come segue:

$$\begin{aligned} f^{(+)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) &= \frac{\hbar}{2ip} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) (e^{2i\delta_l(p)} - 1) = \\ &= \frac{\hbar}{p} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) e^{i\delta_l(p)} \sin(\delta_l(p)) \end{aligned} \quad (6.28)$$

6.2.1 Coefficienti per Autofunzioni di Scattering Uscenti

Usando la relazione tra autofunzioni di scattering uscenti ed entranti 4.92 ricaviamo ora i coefficienti $c_{lm}^{(-)}(\vec{p})$:

$$u_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{x}) = u_{-\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})^* = \sum_{lm} \frac{(-i)^l}{p} Y_{lm}(\pi - \alpha, \pi + \beta) e^{-i\delta_l(p)} u_{plm}^*(\vec{x}) \quad (6.29)$$

Notiamo che le u_{plm} sono coniugate e dunque dobbiamo esplicitare la somma in modo tale da ricondurci ad una combinazione delle u_{plm} , sempre in termini di condizioni asintotiche. Per fare questo usiamo alcune proprietà sulla riflessione delle armoniche sferiche:

$$Y_{lm}(\pi - \alpha, \pi + \beta) = (-1)^l Y_{lm}(\alpha, \beta) \quad Y_{lm}^*(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{l, -m}(\theta, \phi) \quad (6.30)$$

Usando queste più le condizioni asintotiche sulle u_{plm} troviamo:

$$\begin{aligned} u_{\vec{p}}^{(-)}(\vec{x}) &= \sum_{lm} \frac{(-i)^l}{p} Y_{lm}(\pi - \alpha, \pi + \beta) e^{-i\delta_l(p)} u_{plm}^*(\vec{x}) = \\ &= \sum_{lm} \frac{(-i)^l}{p} (-1)^l Y_{lm}(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{lm}^*(\theta, \phi) = \\ &= \sum_{lm} \frac{(-i)^l}{p} (-1)^l (-1)^m Y_{l, -m}^*(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} \frac{y_{pl}(r)}{r} (-1)^m Y_{l, -m}(\theta, \phi) = \\ &= \sum_{lm} \frac{(-i)^l}{p} (-1)^l Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} \frac{y_{pl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) = \\ &= \sum_{lm} \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} u_{plm}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (6.31)$$

Troviamo infine:

$$c_{lm}^{(-)} = \frac{i^l}{p} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} = \frac{(-i)^l}{p} (-1)^l Y_{lm}^*(\alpha, \beta) e^{-i\delta_l(p)} = c_{l, -m}^{(+)}(-\vec{p}) \quad (6.32)$$

Notiamo che in realtà l'unica differenza tra i coefficienti delle autofunzioni di scattering entranti e uscenti è il segno degli sfasamenti. Se l'autofunzione è entrante allora i coefficienti "guadagnano" uno sfasamento, mentre se è uscente "perdono" uno sfasamento.

6.2.2 Cambiamento di Base

Abbiamo visto che i $|\vec{p}, \pm\rangle$ sono autostati di $\widehat{\mathcal{H}}$ ad energia E_p e dunque combinazioni lineari di $|p, l, m\rangle$ con p fissato. ci chiediamo ora se è possibile invertire questa relazione, ossia se $|\vec{p}, \pm\rangle$ forma una base per lo spazio degli stati di scattering \mathcal{R} , come in realtà già ci aspettiamo dalla discussione fatta sulla condizione asintotica delle autofunzioni improprie di scattering. Come al solito facciamo un'ansatz e verifichiamo se sia corretta. Siccome $|\vec{p}| = p$ allora ci aspettiamo che i $|p, l, m\rangle$ siano dati da un'integrale delle $|\vec{p}, \pm\rangle$ al variare del solo angolo solido (il modulo è fissato):

$$u_{plm}(\vec{x}) = \int_{4\pi} d\Omega_{\alpha\beta} c_{lm}^{(+)}(p, \alpha, \beta) u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) \quad (6.33)$$

Per trovare questi coefficienti basta notare che per ottenere una quantità proporzionale ad u_{plm} da un integrale di $u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x})$ nell'angolo solido bisogna moltiplicare per la corrispondente armoniche sferica, così che l'integrale diventa un prodotto scalare tra armoniche sferiche:

$$\begin{aligned} \int_{4\pi} d\Omega_{\alpha\beta} Y_{lm}(\alpha, \beta) u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) &= \int_{4\pi} d\Omega_{\alpha\beta} Y_{lm}(\alpha, \beta) \sum_{l'm'} \frac{i^{l'}}{p} Y_{l'm'}^*(\alpha, \beta) e^{i\delta_{l'}(p)} u_{pl'm'}(\vec{x}) = \\ &= \sum_{l'm'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \frac{i^{l'}}{p} e^{i\delta_{l'}(p)} u_{pl'm'}(\vec{x}) = \\ &= \frac{i^l}{p} e^{i\delta_l(p)} u_{plm}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (6.34)$$

Concludiamo che:

$$\begin{aligned} c_{lm}^{(+)}(p, \alpha, \beta) &= (-i)^l p e^{-i\delta_l(p)} Y_{lm}(\alpha, \beta) = p^2 c_{lm}^{(+)}(\vec{p})^* \\ u_{plm}(\vec{x}) &= (-i)^l p e^{-i\delta_l(p)} \int_{4\pi} d\Omega_{\alpha\beta} Y_{lm}(\alpha, \beta) u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (6.35)$$

come volevasi dimostrare.

6.3 Ampiezza di Scattering con il Metodo delle Onde Parziali

Noti i coefficienti $c_{lm}^{(\pm)}(\vec{p})$ possiamo finalmente calcolare la matrice di scattering, da cui l'ampiezza di scattering, arrivando al citato risultato ad inizio capitolo. Esplicitiamo dunque la matrice di scattering:

$$\begin{aligned} S(\vec{p}, \vec{p}') &= \langle \vec{p}' | S | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}', - | \vec{p}, + \rangle = \sum_{l'm'} \sum_{lm} \frac{(-i)^{l'} i^l}{p' p} \exp(i(\delta_{l'}(p') - \delta_l(p))) Y_{l'm'}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) \langle p' l' m' | p l m \rangle = \\ &= \sum_{l'm'} \sum_{lm} \frac{(-i)^{l'} i^l}{p' p} \exp(i(\delta_{l'}(p') + \delta_l(p))) Y_{l'm'}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(p - p') = \\ &= \sum_{lm} \frac{1}{p^2} e^{2i\delta_l(p)} Y_{lm}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) \delta(p - p') = \frac{\delta(p - p')}{p^2} \sum_{lm} e^{2i\delta_l(p)} Y_{lm}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) = \\ &= \frac{\delta(p - p')}{p^2} \sum_{lm} Y_{lm}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) + \frac{\delta(p - p')}{p^2} \sum_{lm} (e^{2i\delta_l(p)} - 1) Y_{lm}(\alpha', \beta') Y_{lm}^*(\alpha, \beta) \end{aligned} \quad (6.36)$$

Usiamo ora la condizione di ortonormalizzazione delle armoniche sferiche in forma matriciale:

$$\sum_{lm} Y_{lm}^*(\alpha, \beta) Y_{lm}(\alpha', \beta') = \delta(\cos \alpha - \cos \alpha') \delta(\beta - \beta') = \delta(\hat{p} - \hat{p}') \quad (6.37)$$

con \hat{p}, \hat{p}' versori di \vec{p}, \vec{p}' . Nel secondo termine usiamo poi il Teorema di Addizione, trovando:

$$\begin{aligned} S(\vec{p}, \vec{p}') &= \frac{1}{p^2} \delta(p - p') \delta(\hat{p} - \hat{p}') + \frac{\delta(p - p')}{p^2} \sum_l (e^{2i\delta_l(p)} - 1) \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta_{\hat{p}\hat{p}'}) = \\ &= \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{\delta(p - p')}{p^2} \sum_l (e^{2i\delta_l(p)} - 1) \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta_{\hat{p}\hat{p}'}) = \\ &= \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{i\delta(p - p')}{2\pi\hbar p} \frac{\hbar}{2ip} \sum_l (2l+1) (e^{2i\delta_l(p)} - 1) P_l(\cos \theta_{\hat{p}\hat{p}'}) = \\ &= \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{i\delta(p - p')}{2\pi\hbar p} f^{(+)}(p, \theta_{\hat{p}\hat{p}'}) = \\ &= \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{i\delta(p^2 - p'^2)}{\pi\hbar} f^{(+)}(p, \theta_{\hat{p}\hat{p}'}) = \\ &= \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{i2m\delta(p^2 - p'^2)}{2m\pi\hbar} f^{(+)}(p, \theta_{\hat{p}\hat{p}'}) = \\ &= \delta_3(\vec{p} - \vec{p}') + \frac{i}{2\pi m\hbar} \delta(E_p - E_{p'}) f^{(+)}(p, \theta_{\hat{p}\hat{p}'}) \end{aligned} \quad (6.38)$$

Ma per definizione di ampiezza di scattering chiaramente:

$$\boxed{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = f^{(+)}(p, \theta_{\hat{p}\hat{p}'})} \quad (6.39)$$

come volevasi dimostrare. Questo significa che è anche già nota l'espressione dell'ampiezza di scattering come serie:

$$\boxed{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = \frac{\hbar}{p} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l(p)} \sin(\delta_l(p)) P_l(\cos \theta_{\hat{p}\hat{p}'})} \quad (6.40)$$

Per risolvere un problema di scattering da potenziale centrale pertanto è sufficiente trovare le condizioni asintotiche delle autofunzioni (dell'hamiltoniana) improprie radiali u_{plm} e confrontarle con quelle della particella libera, in modo da ottenere gli sfasamenti.

6.3.1 Sezione d'Urto Differenziale e Totale

Quanto appena detto vale in generale per lo scattering di un singolo proiettile da un singolo bersaglio fisso tramite potenziale centrale. Nelle ipotesi di scattering discusse precedentemente vale poi anche il legame dell'ampiezza di scattering con sezione d'urto differenziale 4.3 (e totale 4.5):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) = |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')|^2 \quad \sigma_{tot}(\vec{p}) = \frac{4\pi\hbar}{p} \text{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} \quad (6.41)$$

Ricaviamo dunque le espressioni per sezione d'urto differenziale e totale come serie:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) &= \left| \frac{\hbar}{p} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l(p)} \sin(\delta_l(p)) P_l(\cos \theta) \right|^2 = \\ &= \frac{\hbar^2}{p^2} \sum_{l, l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l(p) - \delta_{l'}(p))} \sin(\delta_l(p)) \sin(\delta_{l'}(p)) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \\ \sigma_{tot}(\vec{p}) &= \frac{4\pi\hbar}{p} \text{Im} \left\{ \frac{\hbar}{p} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l(p)} \sin(\delta_l(p)) P_l(1) \right\} = \\ &= \frac{4\pi\hbar}{p} \text{Im} \left\{ \frac{\hbar}{p} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l(p)} \sin(\delta_l(p)) \right\} = \\ &= \frac{4\pi\hbar^2}{p^2} \sum_l (2l+1) \sin^2(\delta_l(p)) \end{aligned} \quad (6.42)$$

D'altra parte potevamo ottenere questo integrando la sezione d'urto differenziale sull'angolo solido, che dimostra dunque immediatamente il Teorema Ottico:

$$\begin{aligned} \sigma_{tot}(p) &= \int_{4\pi} d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) = \int_{4\pi} d\Omega |f(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')|^2 = \\ &= \frac{\hbar^2}{p^2} \sum_{l, l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l(p) - \delta_{l'}(p))} \sin(\delta_l(p)) \sin(\delta_{l'}(p)) 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \\ &= \frac{\hbar^2}{p^2} \sum_{l, l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l(p) - \delta_{l'}(p))} \sin(\delta_l(p)) \sin(\delta_{l'}(p)) \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'} = \\ &= 4\pi \frac{\hbar^2}{p^2} \sum_l (2l+1) \sin^2(\delta_l(p)) = 4\pi \frac{\hbar}{p} \text{Im}\{f(\vec{p} \rightarrow \vec{p})\} \end{aligned} \quad (6.43)$$

Notiamo come questo metodo di calcolo si basa dunque cosa succede alle "onde parziali", le autofunzioni, di un pacchetto d'onda con momento centrato in un certo \vec{p} . Pertanto è noto come **metodo delle onde parziali**.

Questo suggerisce di definire anche le ampiezza di scattering e sezioni d'urto parziali:

$$f = \sum_l f_l \quad f_l(p, \theta) = \frac{\hbar}{p} (2l+1) e^{i\delta_l(p)} \sin(\delta_l(p)) P_l(\cos \theta) \quad (6.44)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{l, l'} \frac{d\sigma_{ll'}}{d\Omega} \quad \frac{d\sigma_{ll'}}{d\Omega}(p, \theta) = \frac{\hbar^2}{p^2} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l(p) - \delta_{l'}(p))} \sin(\delta_l(p)) \sin(\delta_{l'}(p)) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \quad (6.45)$$

$$\sigma = \sum_l \sigma_l \quad \sigma_l(p) = \frac{4\pi\hbar^2}{p^2} (2l+1) \sin^2(\delta_l(p)) \quad (6.46)$$

6.4 Buca Quadrata Sferica

Nelle precedenti sezioni abbiamo elaborato il metodo delle onde parziali per la risoluzione di problemi di scattering da potenziale centrale, dimostrando alcuni risultati importanti allo stesso tempo. Tuttavia il calcolo dell'ampiezza di scattering e dunque sezione d'urto differenziale e totale si basa sul poter calcolare esattamente gli sfasamenti $\delta_l(p)$. La possibilità di trovare la somma della serie è complicato per generici sfasamenti δ_l , ed è ulteriormente complicato dalla dipendenza continua da p . Per rendere questo un metodo pratico è dunque necessario poter troncare la serie ad un numero finito di termini, fornendo una buona approssimazione almeno per certi valori di p e/o θ .

Per fare questo facciamo l'importante esempio della buca quadrata sferica. In questo caso il potenziale è dato da:

$$V(r) = \begin{cases} -U_0 & r < b \\ 0 & r > b \end{cases} \quad (6.47)$$

6.4.1 Formula Generale per gli Sfasamenti

Per trovare gli sfasamenti dobbiamo prima trovare le autofunzioni improprie radiali u_{plm} . Queste sono della forma:

$$u_{plm}(\vec{x}) = R_{pl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6.48)$$

con le Y_{lm} armoniche sferiche e le R_{pl} che soddisfano:

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R(r) = E_p R(r) \\ & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} R''(r) + -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{r} R'(r) + \left(V(r) - E_p + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R(r) \right] = 0 \\ & R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) + \left(\alpha^2(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0 \end{aligned} \quad (6.49)$$

dove:

$$\alpha^2(r) = \begin{cases} \frac{2m}{\hbar^2} (E_p + U_0) = \frac{p^2 + 2mU_0}{\hbar^2} = \bar{k}^2 & r < b \\ \frac{2m}{\hbar^2} E_p = \frac{p^2}{\hbar^2} = k^2 & r > b \end{cases} \quad (6.50)$$

Facciamo adesso il cambio di variabile (discontinuo) seguente:

$$\rho = \begin{cases} \bar{k}r & r < b \\ kr & r > b \end{cases} \quad (6.51)$$

In questo modo l'equazione radiale diventa quella per le funzioni sferiche di Bessel $j_l(\rho), n_l(\rho)$:

$$R''(\rho) + \frac{2}{\rho} R'(\rho) + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R(\rho) = 0 \quad (6.52)$$

Ricordiamo che gli andamenti asintotici delle funzioni di Bessel di prima specie sono:

$$\begin{cases} j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \\ j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \end{cases} \quad (6.53)$$

mentre per quelle di seconda specie:

$$\begin{cases} n_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} \\ j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \end{cases} \quad (6.54)$$

La soluzione generale per R_{pl} è data dunque da una combinazione lineare di queste:

$$R_{pl}(r) = \begin{cases} A j_l(\bar{k}r) + B n_l(\bar{k}r) & r < b \\ C j_l(kr) + D n_l(kr) & r > b \end{cases} \quad (6.55)$$

Affinchè la funzione sia regolare allora per $r < b$ non può esserci la funzione di seconda specie:

$$\lim_{r \rightarrow 0} R_{pl}(r) < \infty \Rightarrow B = 0 \quad (6.56)$$

Anticipando il risultato facciamo poi le posizioni:

$$D = E \cos \delta_l \quad D = -E \sin \delta_l \quad (6.57)$$

Resta ad esso da imporre le condizioni di continuità sulla funzione e sulle sue derivate:

$$\begin{cases} R_{pl}(b^+) = R_{pl}(b^-) \\ R'_{pl}(b^+) = R'_{pl}(b^-) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A j_l(\bar{k}b) = E [\cos \delta_l j_l(kb) - \sin \delta_l n_l(kb)] \\ \bar{k} A j'_l(\bar{k}b) = E k [\cos \delta_l j'_l(kb) - \sin \delta_l n'_l(kb)] \end{cases} \quad (6.58)$$

Siccome non siamo interessati ai valori esatti di A, E , che si ottengono imponendo la normalizzazione, allora dividiamo membro a membro le due equazioni, rimanendo con un'equazione trascendente negli sfasamenti. Facciamo poi le utili posizioni $\rho = kb, \bar{\rho} = \bar{k}b$;

$$\begin{aligned}
\frac{j_l(\bar{\rho})}{\bar{k}j'_l(\bar{\rho})} &= \frac{\cos \delta_l j_l(\rho) - \sin \delta_l n_l(\rho)}{k[\cos \delta_l j'_l(\rho) - \sin \delta_l n'_l(\rho)]} \\
kj_l(\bar{\rho})[\cos \delta_l j'_l(\rho) - \sin \delta_l n'_l(\rho)] &= \bar{k}j'_l(\bar{\rho})[\cos \delta_l j_l(\rho) - \sin \delta_l n_l(\rho)] \\
kj_l(\bar{\rho})[j'_l(\rho) - \tan \delta_l n'_l(\rho)] &= \bar{k}j'_l(\bar{\rho})[j_l(\rho) - \tan \delta_l n_l(\rho)] \\
kj_l(\bar{\rho})j'_l(\rho) - kj_l(\bar{\rho})\tan \delta_l n'_l(\rho) &= \bar{k}j'_l(\bar{\rho})j_l(\rho) - \bar{k}j'_l(\bar{\rho})\tan \delta_l n_l(\rho) \\
\bar{k}j'_l(\bar{\rho})\tan \delta_l n_l(\rho) - kj_l(\bar{\rho})\tan \delta_l n'_l(\rho) &= \bar{k}j'_l(\bar{\rho})j_l(\rho) - kj_l(\bar{\rho})j'_l(\rho) \\
\tan(\delta_l(p)) &= \frac{\rho j_l(\bar{\rho})j'_l(\rho) - \bar{\rho}j'_l(\bar{\rho})j_l(\rho)}{\rho j_l(\bar{\rho})n'_l(\rho) - \bar{\rho}j'_l(\bar{\rho})n_l(\rho)}
\end{aligned} \tag{6.59}$$

Verifichiamo ora che i $\delta_l(p)$ sono effettivamente gli sfasamenti soliti, calcolando la condiziona asintotica:

$$\begin{aligned}
R_{pl}(r) &\stackrel{r \geq b}{=} E[\cos(\delta_l)j_l(kr) - \sin(\delta_l)n_l(kr)] = \\
&\stackrel{r \rightarrow \infty}{=} \frac{E}{kr} \left[\cos(\delta_l) \cos\left(kr - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) - \sin(\delta_l) \sin\left(kr - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \right] = \\
&= \frac{E}{kr} \cos\left(kr - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right)
\end{aligned} \tag{6.60}$$

6.4.2 Casi Limite

Vogliamo ora studiare i casi limite di quest'equazione per trovare risultati esatti, ossia per $p \rightarrow 0$ e $p \rightarrow \infty$. Rispetto a questi limiti troviamo:

$$p \rightarrow 0 \Rightarrow \begin{cases} \rho \rightarrow 0 \\ \bar{\rho} \rightarrow \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} p \end{cases} \quad p \rightarrow \infty \Rightarrow \begin{cases} \rho \rightarrow \infty \\ \bar{\rho} \rightarrow \infty \end{cases} \tag{6.61}$$

Pertanto dobbiamo prima trovare gli andamenti delle derivate delle funzioni di Bessel sferiche:

$$\begin{cases} j'_l(\rho) \stackrel{\rho \rightarrow 0}{=} \frac{l\rho^{l-1}}{(2l+1)!!} = \frac{l}{\rho} j_l(\rho) \\ j'_l(\rho) \stackrel{\rho \rightarrow \infty}{=} -\frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) = -n_l(\rho) \end{cases} \quad \begin{cases} n'_l(\rho) \stackrel{\rho \rightarrow 0}{=} (l+1) \frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+2}} = -\frac{(l+1)}{\rho} n_l(\rho) \\ n'_l(\rho) \stackrel{\rho \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) = j_l(\rho) \end{cases} \tag{6.62}$$

Facciamo ora il limite per $p \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned}
\tan(\delta_l(p)) &= \frac{\rho j_l(\bar{\rho})j'_l(\rho) - \bar{\rho}j'_l(\bar{\rho})j_l(\rho)}{\rho j_l(\bar{\rho})n'_l(\rho) - \bar{\rho}j'_l(\bar{\rho})n_l(\rho)} = \\
&\stackrel{p \rightarrow 0}{=} \frac{l j_l(\bar{\rho})j_l(\rho) - \bar{\rho}j'_l(\bar{\rho})j_l(\rho)}{-(l+1)j_l(\bar{\rho})n_l(\rho) - \bar{\rho}j'_l(\bar{\rho})n_l(\rho)} = \\
&= \frac{l j_l(\bar{\rho}) - \bar{\rho}j'_l(\bar{\rho})}{-(l+1)j_l(\bar{\rho}) - \bar{\rho}j'_l(\bar{\rho})} \frac{j_l(\rho)}{n_l(\rho)} = \\
&= \frac{l j_l(\bar{\rho}) - \bar{\rho}j'_l(\bar{\rho})}{-(l+1)j_l(\bar{\rho}) - \bar{\rho}j'_l(\bar{\rho})} \frac{1}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \rho^{2l+1} = \beta \rho^{2l+1}
\end{aligned} \tag{6.63}$$

Prima di fare il limite di grandi energia notiamo che la differenza $\rho, \bar{\rho}$ va come $1/\rho$ o equivalentemente $1/p$ e dunque non può essere trascurata all'ordine più basso:

$$\begin{aligned}
\bar{\rho} - \rho &= (\bar{k} - k)b = \left(\frac{\sqrt{p^2 + 2mU_0}}{\hbar} - \frac{p}{\hbar} \right) b = \left(\sqrt{p^2 + 2mU_0} - p \right) \frac{b}{\hbar} = \\
&= p \left(\sqrt{1 + \frac{2mU_0}{p^2}} - 1 \right) \frac{b}{\hbar} = \frac{pb}{\hbar} \frac{mU_0}{p^2} = \frac{mU_0 b}{p\hbar} = \frac{1}{\rho} \frac{mU_0 b^2}{\hbar^2}
\end{aligned} \tag{6.64}$$

Questo significa che non possiamo semplicemente sostituire $\bar{\rho}$ con ρ all'interno degli argomenti delle funzioni di Bessel e in particolare di sin e cos. Poniamo adesso:

$$\rho_l = \rho - (l+1)\frac{\pi}{2} \quad \bar{\rho} = \rho + \frac{1}{\rho} \frac{mU_0 b^2}{\hbar^2} = \rho + \frac{\alpha}{\rho} \tag{6.65}$$

da cui:

$$\begin{aligned}
\cos\left(\bar{\rho} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) &= \cos\left(\rho_l + \frac{\alpha}{\rho}\right) = \cos(\rho_l) \cos\left(\frac{\alpha}{\rho}\right) - \sin(\rho_l) \sin\left(\frac{\alpha}{\rho}\right) = \\
&= \cos(\rho_l) - \frac{\alpha \sin \rho_l}{\rho_l} = \cos(\rho_l) - \frac{\alpha \sin \rho_l}{\rho} \\
\sin\left(\bar{\rho} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) &= \sin\left(\rho_l + \frac{\alpha}{\rho}\right) = \sin(\rho_l) + \frac{\alpha \cos \rho_l}{\rho} \\
\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\bar{\rho}} &= \frac{\bar{\rho} - \rho}{\bar{\rho}\rho} = \frac{\alpha/\rho}{\rho^2 + \alpha} = \frac{\alpha}{\rho^3}
\end{aligned} \tag{6.66}$$

Vediamo ora cosa succede nel limite $p \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned}
\tan(\delta_l(p)) &= \frac{\rho j_l(\bar{\rho}) j_l'(\rho) - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho}) j_l(\rho)}{\rho j_l(\bar{\rho}) n_l'(\rho) - \bar{\rho} j_l'(\bar{\rho}) n_l(\rho)} = \\
&\stackrel{p \rightarrow \infty}{=} \frac{-\rho j_l(\bar{\rho}) n_l(\rho) + \bar{\rho} n_l(\bar{\rho}) j_l(\rho)}{\rho j_l(\bar{\rho}) j_l(\rho) + \bar{\rho} n_l(\bar{\rho}) n_l(\rho)} = \\
&= \frac{-\frac{1}{\bar{\rho}} \cos\left(\bar{\rho} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \sin\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) + \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \sin\left(\bar{\rho} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)}{\frac{1}{\bar{\rho}} \cos\left(\bar{\rho} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \cos\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) + \frac{1}{\rho} \sin\left(\bar{\rho} - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) \sin\left(\rho - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)} = \\
&= \frac{-\frac{1}{\bar{\rho}} \left[\cos(\rho_l) - \frac{\alpha \sin \rho_l}{\rho} \right] \sin(\rho_l) + \frac{1}{\rho} \cos(\rho_l) \left[\sin(\rho_l) + \frac{\alpha \cos \rho_l}{\rho} \right]}{\frac{1}{\bar{\rho}} \left[\cos(\rho_l) - \frac{\alpha \sin \rho_l}{\rho} \right] \cos(\rho_l) + \frac{1}{\rho} \left[\sin(\rho_l) + \frac{\alpha \cos \rho_l}{\rho} \right] \sin(\rho_l)} = \\
&= \frac{\sin \rho_l \cos \rho_l \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\bar{\rho}} \right) + \frac{\alpha}{\rho_l} \left[\frac{\sin^2 \rho_l}{\bar{\rho}} + \frac{\cos^2 \rho_l}{\rho} \right]}{\frac{\alpha}{\rho_l} \sin \rho_l \cos \rho_l \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\bar{\rho}} \right) + \left[\frac{\sin^2 \rho_l}{\bar{\rho}} + \frac{\cos^2 \rho_l}{\rho} \right]} = \\
&= \frac{\sin \rho_l \cos \rho_l \frac{\alpha}{\rho^3} + \frac{\alpha}{\rho_l} \left[\frac{1}{\rho} - \frac{\alpha}{\rho^3} \sin^2 \rho_l \right]}{\frac{\alpha}{\rho_l} \sin \rho_l \cos \rho_l \frac{\alpha}{\rho^3} + \left[\frac{1}{\rho} - \frac{\alpha}{\rho^3} \sin^2 \rho_l \right]}
\end{aligned} \tag{6.67}$$

Trascurando infine i termini di ordine superiore e ponendo $\rho_l \approx \rho$ troviamo:

$$\begin{aligned}
\tan(\delta_l(p)) &\stackrel{p \rightarrow \infty}{=} \frac{\cancel{\sin \rho_l \cos \rho_l \frac{\alpha}{\rho^3}} + \frac{\alpha}{\rho_l} \left[\frac{1}{\rho} - \cancel{\frac{\alpha}{\rho^3} \sin^2 \rho_l} \right]}{\cancel{\frac{\alpha}{\rho_l} \sin \rho_l \cos \rho_l \frac{\alpha}{\rho^3}} + \left[\frac{1}{\rho} - \cancel{\frac{\alpha}{\rho^3} \sin^2 \rho_l} \right]} = \\
&= \frac{\alpha}{\rho_l \rho} = \frac{\alpha}{\rho_l} = \frac{\alpha}{\rho} = \frac{m U_0 b^2}{p \hbar}
\end{aligned} \tag{6.68}$$

Ricapitolando:

$$\begin{cases} \tan(\delta_l(p)) \stackrel{p \rightarrow 0}{\sim} p^{2l+1} \\ \tan(\delta_l(p)) \stackrel{p \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{p} \end{cases} \tag{6.69}$$

Pertanto troviamo che a basse energie $p \rightarrow 0 \iff E_p \rightarrow 0$ l'ordine maggiore è dato da $\tan(\delta_0(p))$ e dunque anche $\sin \delta_0$ nelle serie trovate. Questo significa che a **basse energie** la **serie** considerata può essere **troncata** ad un ordine l fornendo un risultato approssimato ma corretto all'ordine di p^l .

Per **grandi energie** invece l'andamento diventa **indipendente da l** , indicando che tutte le onde parziali contribuiscono alla serie e dunque il metodo delle onde parziali non può essere effettivamente applicato.

Notiamo poi sia in $p \rightarrow 0$ che $p \rightarrow \infty$ la tangente degli sfasamenti vada a zero, indicando che lo sfasamento va ad un multiplo di π :

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \delta_l(p) = m\pi \quad \lim_{p \rightarrow \infty} \delta_l(p) = n\pi \tag{6.70}$$

6.5 Approssimazione in Onde Parziali

6.5.1 Teorema di Levinson

I risultati ottenuti per la buca sferica sono in realtà piuttosto generali ed indicano che il metodo di onde parziali è più efficace a basse energie. Continua dunque a valere il seguente sviluppo degli sfasamenti a basse energie:

$$\delta_l(p) = \delta_l(0) - a_l p^{2l+1} + c_l p^{2l+3} + \dots \tag{6.71}$$

Inoltre continua a valere che a 0 e all'infinito $\tan \delta_l(p)$ va a 0, così che in generale possiamo dire:

$$\delta_l(0) - \delta_l(\infty) = n\pi \quad (6.72)$$

Questo significa che per fissare univocamente uno sfasamento $\delta_l(p)$ dobbiamo imporre due condizioni di continuità. Ad esempio:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \delta_l(p) = m\pi \quad \lim_{p \rightarrow p_0} \delta_l(p) = \delta_l(p_0) \quad (6.73)$$

Se sono fissate tali condizioni in modo tale che $\delta_l(p)$ sia continua, allora si può dimostrare il seguente teorema.

Teorema 4 (Teorema di Levinson). *Sia un potenziale centrale (con completezza asintotica) e:*

$$\delta_l(0) - \delta_l(\infty) = n_l\pi \quad (6.74)$$

allora n_l è uguale al numero di stati legati che hanno l come numero quantico orbitale (la degenerazione del sottospazio).

Questo significa che nella scelta naturale $\delta_l(\infty) = 0$ (ad altissime energie l'effetto del potenziale è trascurabile) allora a basse energie deve risultare:

$$\delta_l(p) = n_l\pi - a_l p^{2l+1} + c_l p^{2l+3} + \dots \quad (6.75)$$

Inoltre implica che affinché lo sfasamento sia continuo allora il range di $\delta_l(p)$ non può stare solo in $(0, \pi)$, ma almeno tra 0 ed $n_l\pi$ (in generale potrà essere anche tutto \mathbb{R}).

6.5.2 Troncamento della Serie

Noto lo sviluppo in serie degli sfasamenti possiamo espandere attorno a $p = 0 \iff k = 0$ i vari termini che compaiono nelle serie di ampiezza di scattering e sezione d'urto. Ad esempio l'ampiezza di scattering, che dipende dagli sfasamenti tramite il termine:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2ik} \left(e^{2i\delta_l(p)} - 1 \right) &\stackrel{k \rightarrow 0}{\approx} \frac{1}{2ik} [\exp(2i(n_l\pi - a_l k^{2l+1} + \dots)) - 1] = \frac{1}{2ik} [\exp(-2ia_l k^{2l+1} + \dots) - 1] = \\ &= \frac{1}{2ik} [-2ia_l k^{2l+1} + \dots] = -a_l k^{2l} + \dots \end{aligned} \quad (6.76)$$

Pertanto all'ordine più basso:

$$f(p, \theta) \stackrel{k \rightarrow 0}{\approx} - \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l k^{2l} P_l(\cos \theta) \quad (6.77)$$

Questo significa che effettivamente l'ordine predominante è $l = 0$, indicando che a basse energie:

$$f(p, \theta) \approx -a_0 \quad (6.78)$$

Analogamente per la sezione d'urto:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) &\approx \frac{d\sigma_{00}}{d\Omega}(p, \theta) = a_0^2 \\ \sigma_{tot}(p) &\approx \sigma_0(p) = 4\pi a_0^2 \end{aligned} \quad (6.79)$$

In generale all'ordine zero, senza approssimare anche la fase oltre che troncare la serie, possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} f(p, \theta) &\approx \frac{\hbar}{p} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 \\ \frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) &\approx \frac{\hbar^2}{p^2} \sin^2 \delta_0 \\ \sigma_{tot}(p) &\approx \frac{4\pi\hbar^2}{p^2} \sin^2 \delta_0 \end{aligned} \quad (6.80)$$

Notiamo come all'ordine zero non vi è dipendenza dall'angolo di incidenza. Questo è compatibile col fatto che l'onda s (corrispondente alle armoniche sferiche Y_{0m}) è a simmetria sferica e dunque indipendente dall'angolo di incidenza. Se poi volessimo esplicitare gli sfasamenti in serie troveremmo che non vi è dipendenza neppure dal modulo, ossia ha un valore costante.

Al primo ordine troviamo invece:

$$\begin{aligned} f(p, \theta) &\approx \frac{\hbar}{p} [e^{i\delta_0} \sin \delta_0 + e^{i\delta_1} \sin \delta_1 \cos \theta] \\ \frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) &\approx \frac{\hbar^2}{p^2} [\sin^2 \delta_0 + 3e^{i(\delta_0 - \delta_1)} \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos \theta + 3e^{i(\delta_1 - \delta_0)} \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos \theta + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta] = \\ &= \frac{\hbar^2}{p^2} [\sin^2 \delta_0 + 6 \cos(\delta_0 - \delta_1) \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos \theta + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta] \\ \sigma_{tot}(p) &= \frac{4\pi\hbar^2}{p^2} (\sin^2 \delta_0 + 3 \sin^2 \delta_1) \end{aligned} \quad (6.81)$$

Se il potenziale di interazione non è noto (o vuole essere approssimato) allora si possono fare fit in θ a bassi valori di p , che permettono di determinare δ_0, δ_1 . Variando p troviamo poi i coefficienti a_0, a_1 , che possono essere confrontati con quelli previsti dal modello del potenziale. Se il fit non è adatto allora vi sono diverse possibilità: il valore di troncamento di l è troppo basso; il potenziale non è centrale; correzioni relativistiche; collisione non elastica e così via.

6.5.3 Calcolo Generale degli Sfasamenti

6.6 Scattering da Sfera Dura

6.7 Potenziale di Yukawa

6.8 Potenziale a Delta

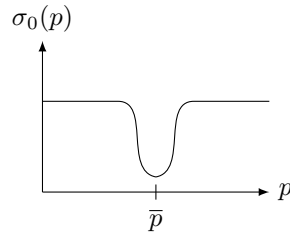
Capitolo 7

Risonanze

In questo capitolo studiamo, attraverso il metodo delle onde parziali, alcuni fenomeni legate alla presenza di forti variazioni della sezione d'urto, le cosiddette **risonanze**. Queste sono state notoriamente tra le più grandi evidenze della teoria quantistica, in quanto non erano affatto previste della teoria di scattering classico, e sono ancora un mezzo fondamentale per lo scattering tra particelle.

7.1 Effetto Ramsauer-Townsend

Iniziamo col discutere qualitativamente di un esempio. Supponiamo che per un certo valore del momento $p = \bar{p}$ esiste un valore del momento angolare $l = \bar{l}$ tale che $\delta_{\bar{l}}(\bar{p}) = m\pi$ con $m \in \mathbb{Z}$. Da questo segue $\sin(\delta_{\bar{l}}(\bar{p})) = 0$ e dunque all'impulso \bar{p} si annulla il contributo dell'onda parziale \bar{l} . Si annullerà poi anche la sezione d'urto parziale $\sigma_{\bar{l}}(\bar{p}) = 0$. Supponiamo di considerare un potenziale per cui \bar{p} è piccolo e $\bar{l} = 0$. Siccome a basse energie l'onda s è predominante allora troviamo che la sezione d'urto totale va quasi a zero, con un andamento come in figura.



Questo fenomeno è stato osservato storicamente nello scattering di elettroni su gas nobili. Nel caso dell'argon in particolare si è trovato ad un'energia di $E_{\bar{p}} = 0.7\text{eV}$. Il fenomeno prende il nome di **Effetto di Ramsauer-Townsend**.

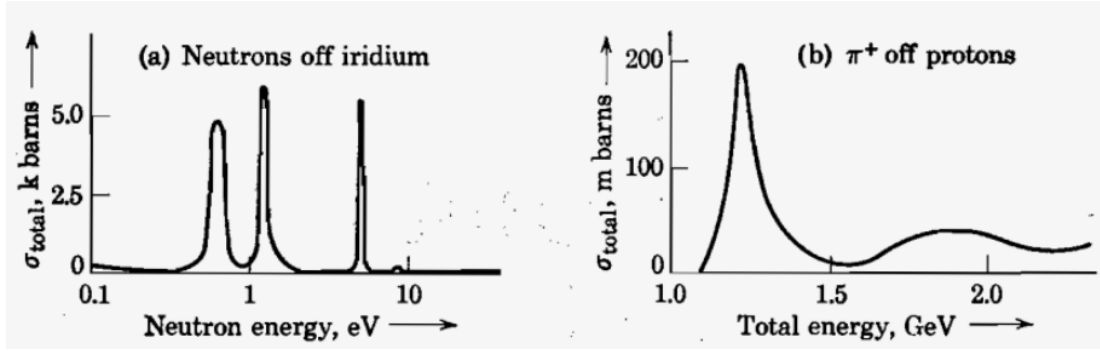
Ci possiamo aspettare questo effetto in presenza di stati legati. Se infatti vi sono infatti almeno due stati legati ad un certo l allora $\delta_l(p)$ ha range almeno tra 0 e 2π . Per continuità di $\delta_l(p)$ vi deve essere almeno un valore di \bar{l} per cui $\delta_{\bar{l}}(\bar{p}) = \pi$. Chiaramente affinché si possa osservare la "discesa" della sezione d'urto gli altri termini invece non devono essere pure trascurabili.

7.2 Generalità delle Risonanze

In generale diciamo che un certo valore del momento (energia) è di risonanza per lo scattering se in corrispondenza di questo la sezione d'urto totale varia rapidamente cambiando di poco il momento. Dal punto di vista sperimentale si osserva dunque che aumentando l'energia del fascio incidente la diffusione aumenta o diminuisce fortemente, tornando a valori simili a quelli iniziali aumentando ulteriormente l'energia di un breve intervallo.

Il caso più semplice è quella di una rapida crescita, ossia la presenza di un picco nel grafico di $\sigma(p)$, che ha un'altezza anche di diversi ordini di grandezza più grande rispetto ai valori circostanti. Questo fenomeno è quello che storicamente ha giustificato l'uso del "barn" ("finile" in italiano) come unità di misura delle sezioni d'urto, in quanto usato dagli americani per descrivere qualcosa di grandi dimensioni.

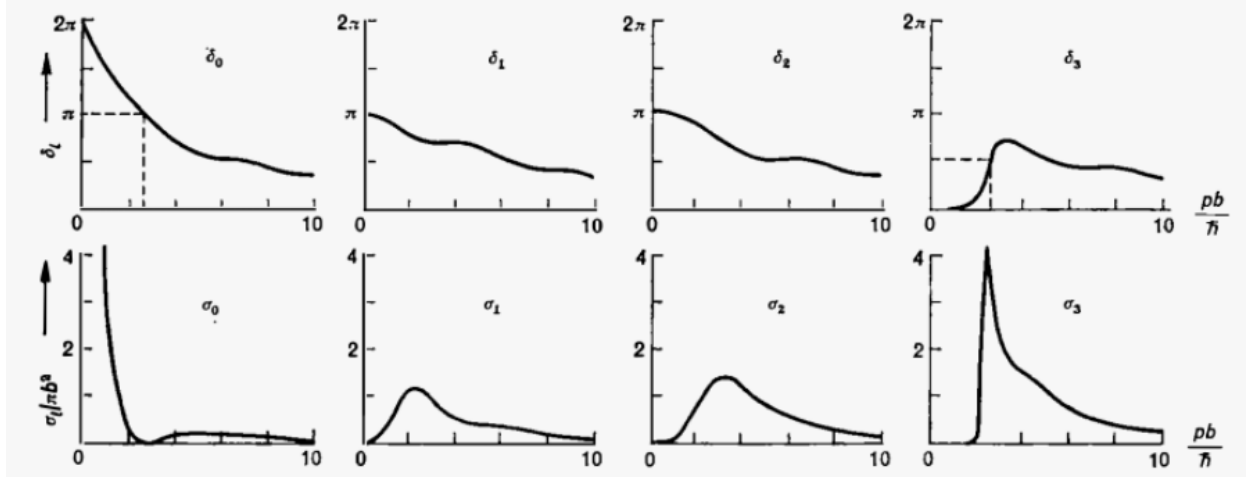
Tipici andamenti sperimentali delle risonanze sono riportate nella figura seguente, dove vediamo la presenza di molteplici risonanze per uno stesso scattering e anche la presenza di code.



A basse energie possiamo spiegare le risonanze in termini del metodo delle onde parziali. Ricordiamo la formula della sezione d'urto totale:

$$\sigma_{tot}(p) = 4\pi \frac{\hbar^2}{p^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l(p)) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(p) \quad (7.1)$$

Vediamo dunque che una rapida variazione di un certo sfasamento $\delta_l(p)$ corrisponde ad una rapida variazione di $\sin^2 \delta_l(p)$ e dunque di $\sigma_l(p)$. Se la variazione avviene a basse energie allora può accadere che $\sigma_l(p)$ predomina e dunque anche $\sigma(p)$ mostra una rapida variazione. Ad esempio nel caso della buca quadrata si osserva questo andamento per $l = 3$, anche se in questo caso il picco nella sezione d'urto totale non è molto pronunciato in quanto i valori di σ_l per $l \neq 3$ non sono trascurabili rispetto a quelli con $l = 3$.



Notiamo come per ricavare la relazione tra ampiezza di scattering e sezione d'urto (differenziale e totale) abbiamo fatto l'ipotesi che l'ampiezza di scattering $f(p, \theta)$ vari lentamente nel supporto del pacchetto incidente $\psi_{in}(\vec{p})$. Questo chiaramente continua a valere anche nel caso delle risonanze se il pacchetto ha un'incertezza energetica molto minore dell'ampiezza della risonanza:

$$\Delta W \ll \Gamma \quad (7.2)$$

Tuttavia se $\Delta W \approx \Gamma$ o addirittura $\Delta W \gg \Gamma$ si trova che in realtà la risonanza non si osserva, in quanto vi sarà una sorta di convoluzione con la distribuzione dell'energia della particella, che appiattisce, e dunque nasconde, la risonanza. Questo significa che è ancora possibile applicare:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) = |f(p, \theta)|^2 \quad (7.3)$$

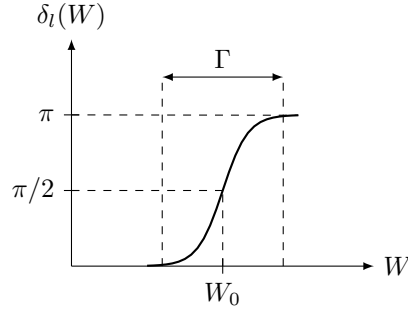
Pertanto questa relazione ha in realtà una validità estremamente generale e vale anche in presenza di risonanze.

7.3 Formula di Breit-Wigner

7.3.1 Caso di un Picco

Iniziamo adesso finalmente a discutere quantitativamente delle risonanze nel contesto del metodo delle onde parziali, e scegliamo come parametro di dipendenza di sfasamenti e sezioni d'urto l'energia W piuttosto che l'impulso p . Iniziamo col discutere il caso di un picco per $\sigma_l(W)$ per un certo W_0 . Questo significa che $\sin^2 \delta_l(W)$ è massimo, ossia $\delta_l(W_0) =$

$\pi/2$. Supponiamo poi per semplicità che la derivata sia non nulla e in particolare decrescente, variando tra 0 e π . Ci aspettiamo dunque un andamento come in figura.

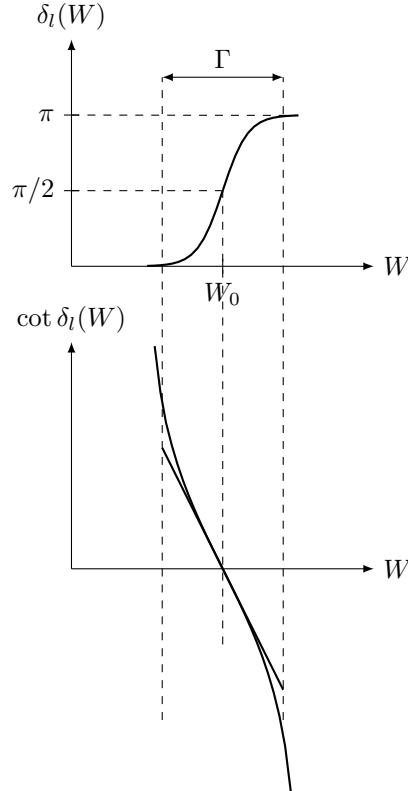


Per studiare questo andamento potremmo pensare di fare uno sviluppo lineare intorno a W_0 , così che è necessario solo W_0 e la derivata di δ_l in W_0 :

$$\delta_l(W) = \delta(W_0) + \left. \frac{d\delta_l}{dW} \right|_{W=W_0} (W - W_0) = \frac{\pi}{2} + \frac{2}{\Gamma} (W - W_0) \quad \Gamma = \frac{2}{\left. \frac{d\delta_l}{dW} \right|_{W=W_0}} \geq 0 \quad (7.4)$$

Tuttavia il range di validità di questo sviluppo è troppo limitato in termini di energia, in quanto ci aspettiamo che lo sfasamento vari molto più rapidamente di una retta tra 0 e π .

Una migliore approssimazione è quella fatta da Breit e Wigner. Questa fa un approssimazione lineare, che varia tra $+\infty$ e $-\infty$ passando per 0. Come si vede in figura l'approssimazione lineare è migliore in un range di validità più ampio.



Possiamo dunque fare la seguente approssimazione:

$$\begin{aligned} \cot \delta_l(W) &= \left. \frac{d \cos \delta_l(W)}{dW} \right|_{W=W_0} = \left. \frac{d \cot \delta_l}{d\delta_l} \right|_{\pi/2} \left. \frac{d\delta_l}{dW} \right|_{W_0} (W - W_0) = \\ &= -\frac{1}{\sin^2(\pi/2)} \left. \frac{d\delta_l}{dW} \right|_{W_0} (W - W_0) = -\frac{2}{\Gamma} (W - W_0) \end{aligned} \quad (7.5)$$

Questo equivale a fare la seguente approssimazione nell'ampiezza di scattering parziale di ordine l :

$$\begin{aligned} e^{i\delta_l} \sin \delta_l &= \frac{\sin \delta_l}{e^{-i\delta_l}} = \frac{\sin \delta_l}{\cos \delta_l - i \sin \delta_l} = \frac{1}{\cos \delta_l - i} \approx \\ &\approx \frac{1}{-\frac{\Gamma}{2}(W - W_0) - i} = -\frac{\Gamma/2}{(W - W_0) + i\Gamma/2} \end{aligned} \quad (7.6)$$

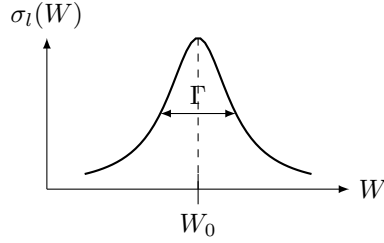
Ricordando poi l'espressione della sezione d'urto parziale corrispondente:

$$\sigma_l(W) = 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} \sin^2 \delta_l(W) \quad (7.7)$$

troviamo infine la **formula di Breit-Wigner**:

$$\sigma_l(W) = 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} \frac{(\Gamma/2)^2}{(W - W_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (7.8)$$

Se $\sigma_l(W)$ domina intorno a W_0 allora $\sigma(W) \approx \sigma_l(W)$ per $W \approx W_0$ e dunque ha lo stesso andamento. In particolare questo è dato da una lorentziana centrata in W_0 e di ampiezza a metà altezza (FWHM) pari a Γ .



7.3.2 Risonanza attorno ad una Fase Generica

Il caso precedente non è però l'unico modo in cui si possono presentare risonanze (nel contesto del metodo delle onde parziali). Una situazione più generale è una in cui vi è una rapida crescita della fase intorno ad un generico valore $\bar{\delta}_l$:

$$\delta_l(W) = \bar{\delta}_l + \delta_l^{ris}(W) \quad (7.9)$$

dove per δ_l^{ris} vale la discussione fatta prima. Notiamo che $\delta_l(W_0) = \bar{\delta}_l + \pi/2 \neq \bar{\delta}_l$, ossia includiamo $\pi/2$ nello sfasamento "di risonanza".

Stavolta la sezione d'urto parziale è data da:

$$\begin{aligned} \sigma_l(W) &= 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} \sin^2 \delta_l(W) = 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} \sin^2(\bar{\delta}_l + \delta_l^{ris}(W)) = \\ &= 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} [\sin \bar{\delta}_l \cos \delta_l^{ris}(W) + \cos \bar{\delta}_l \sin \delta_l^{ris}(W)]^2 \end{aligned} \quad (7.10)$$

Per l'approssimazione di Breit e Wigner:

$$\sin \delta_l^{ris}(W) \approx \frac{\Gamma/2}{\sqrt{(W - W_0)^2 + (\Gamma/2)^2}} \quad \cos \delta_l^{ris}(W) \approx \frac{W_0 - W}{\sqrt{(W - W_0)^2 + (\Gamma/2)^2}} \quad (7.11)$$

Inserendo queste troviamo infine la generalizzazione della formula di Breit e Wigner:

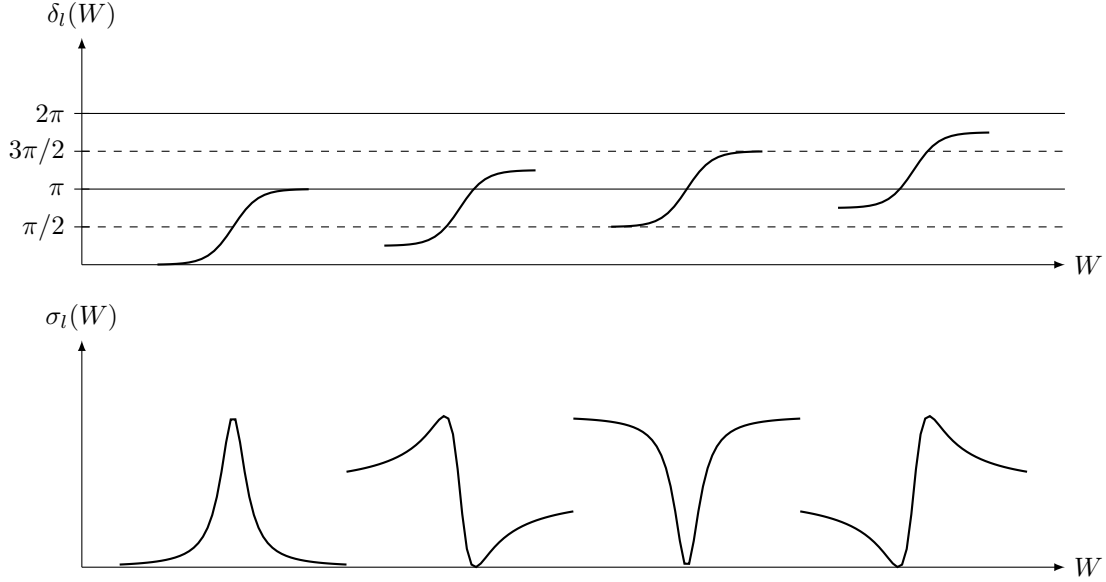
$$\begin{aligned} \sigma_l(W) &= 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} [\sin \bar{\delta}_l \cos \delta_l^{ris}(W) + \cos \bar{\delta}_l \sin \delta_l^{ris}(W)]^2 = \\ &\approx 4\pi(2l+1) \frac{\hbar^2}{p^2} \frac{[(W - W_0) \sin \bar{\delta}_l + (\Gamma/2) \cos \bar{\delta}_l]^2}{(W - W_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \end{aligned} \quad (7.12)$$

Consideriamo adesso i possibili casi al variare di $\bar{\delta}_l$ tra 0 e π (altri valori sono equivalenti):

1. Per $\bar{\delta}_l = 0$, $\sigma_l(W)$ ha un massimo in W_0 e dunque osserviamo un picco, come già sapevamo;
2. Per $0 < \bar{\delta}_l < \pi/2$ vi è prima un massimo e poi un minimo (all'aumentare di W), e in particolare vi è simmetria per $\bar{\delta}_l = \pi/4$;

3. Per $\bar{\delta}_l = \pi/2$ vi è un solo minimo, analogo all'effetto di Ramsauer;
4. Per $\pi/2 < \bar{\delta}_l < \pi$ vi è prima un minimo e poi un massimo, con simmetria per $\bar{\delta}_l = 3\pi/4$;
5. Il caso $\bar{\delta}_l = \pi$ è poi equivalente al caso $\bar{\delta}_l$.

Riportiamo ciascuno di questi casi nella seguente figura.



7.4 Limiti sulla Variazione dello Sfasamento

Nella formula di Breit-Wigner abbiamo supposto che vi sia una rapida crescita dello sfasamento, a cui corrisponde una rapida variazione della sezione d'urto. Ci chiediamo dunque se sia possibile osservare variazioni anche con una rapida decrescita dello sfasamento. Per trovare dei limiti chiaramente dobbiamo trovare sugli sfasamenti, che compaiono nelle condizioni asintotiche delle y_{pl} . Siccome queste sono funzioni reali allora possiamo sfruttare che il loro quadrato è definito positivo. Per coinvolgere poi le derivate di δ_l dobbiamo calcolare le derivate delle (condizioni asintotiche delle) y_{pl} rispetto a p . Faremo questo prendendo il limite di un rapporto, che è indeterminato, e applicando la regola di L'Hopital.

Iniziamo col definire le funzioni w_{pl} , che coincidono con la condizione asintotica delle y_{pl} del potenziale considerato:

$$w_{pl} = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right) \quad r \geq 0 \quad (7.13)$$

Queste soddisfano la seguente equazione:

$$-w_{pl}''(r) = \frac{p^2}{\hbar^2} w_{pl}(r) \quad (7.14)$$

Prendiamo p, p' distinti e moltiplichiamo le due equazioni corrispondenti per $w_{p'l}$ e w_{pl} rispettivamente:

$$\begin{cases} -w_{p'l}(r)w_{pl}''(r) = \frac{p^2}{\hbar^2} w_{p'l}(r)w_{pl}(r) \\ -w_{pl}(r)w_{p'l}''(r) = \frac{p'^2}{\hbar^2} w_{pl}(r)w_{p'l}(r) \end{cases} \quad (7.15)$$

Sottraiamo la prima alla seconda e facciamo l'integrale tra 0 ed r :

$$\begin{aligned} \frac{p'^2 - p^2}{\hbar^2} w_{pl}(r)w_{p'l}(r) &= w_{p'l}(r)w_{pl}''(r) - w_{pl}(r)w_{p'l}''(r) \\ \frac{p'^2 - p^2}{\hbar^2} \int_0^r dr' w_{pl}(r')w_{p'l}(r') &= \int_0^r dr' [w_{p'l}(r')w_{pl}''(r') - w_{pl}(r')w_{p'l}''(r')] \end{aligned} \quad (7.16)$$

Notiamo che il secondo membro si riconduce ad una derivata totale e dunque si integra a vista:

$$w_{p'l}(r')w_{pl}''(r') - w_{pl}(r')w_{p'l}''(r') = \frac{d}{dr'} [w_{p'l}(r')w_{pl}'(r') - w_{pl}(r')w_{p'l}'(r')] \quad (7.17)$$

Troviamo dunque la seguente identità:

$$\frac{p'^2 - p^2}{\hbar^2} \int_0^r dr' w_{pl}(r') w_{p'l}(r') = [w_{p'l}(r') w'_{pl}(r') - w'_{p'l}(r') w_{pl}(r')]_{r'=0}^r \quad (7.18)$$

In realtà possiamo dimostrare questo anche per le y_{pl} . Queste soddisfano l'equazione:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} y''_{pl}(r) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] y_{pl}(r) &= \frac{p^2}{2m} y_{pl}(r) \\ -y''_{pl}(r) + \alpha_l^2(r) y_{pl}(r) &= \frac{p^2}{\hbar^2} y_{pl}(r) \end{aligned} \quad (7.19)$$

Come prima:

$$\begin{cases} -y_{p'l}(r) y''_{pl}(r) + \alpha_l^2(r) y_{p'l}(r) y_{pl}(r) &= \frac{p^2}{\hbar^2} y_{p'l}(r) y_{pl}(r) \\ -y_{pl}(r) y''_{p'l}(r) + \alpha_l^2(r) y_{pl}(r) y_{p'l}(r) &= \frac{p'^2}{\hbar^2} y_{pl}(r) y_{p'l}(r) \end{cases} \quad (7.20)$$

Nel fare la differenza siccome α_l non dipende da p allora si cancella:

$$\frac{p'^2 - p^2}{\hbar^2} y_{pl}(r) y_{p'l}(r) = y_{p'l}(r) y''_{pl}(r) - y_{pl}(r) y''_{p'l}(r) \quad (7.21)$$

Siccome questa è la stessa trovata per le w_{pl} allora vale anche la stessa identità per y_{pl} , che si riduce al caso precedente per $r \rightarrow \infty$.

$$\frac{p'^2 - p^2}{\hbar^2} \int_0^r dr' y_{pl}(r') y_{p'l}(r') = [y_{p'l}(r') y'_{pl}(r') - y'_{p'l}(r') y_{pl}(r')]_{r'=0}^r \quad (7.22)$$

In particolare in questo le funzioni si annullano con le derivate in 0 e dunque al secondo membro rimane solo per $r' = r$:

$$\frac{p'^2 - p^2}{\hbar^2} \int_0^r dr' y_{pl}(r') y_{p'l}(r') = y_{p'l}(r) y'_{pl}(r) - y'_{p'l}(r) y_{pl}(r) \quad (7.23)$$

Prendiamo ora $r \rightarrow \infty$, ossia scegliamo un r grande tale che valga l'approssimazione asintotica delle y_{pl} :

$$\frac{p'^2 - p^2}{\hbar^2} \int_0^r dr' y_{pl}(r') y_{p'l}(r') = w_{p'l}(r) w'_{pl}(r) - w'_{p'l}(r) w_{pl}(r) \quad (7.24)$$

Possiamo ora fare la differenza con l'identità esatta ottenuta per le w_{pl} , in modo che al secondo membro sopravvive solo la parte con $r' = 0$:

$$\int_0^r dr' [y_{pl}(r') y_{p'l}(r') - w_{pl}(r') w_{p'l}(r')] = \frac{\hbar^2}{p'^2 - p^2} [w_{p'l}(r) w'_{pl}(r) - w'_{p'l}(r) w_{pl}(r)]_{r'=0} \quad (7.25)$$

Vogliamo ora prendere il limite per $p' \rightarrow p$ come detto, in modo applicando la regola di L'Hopital emerga $\frac{d\delta_l}{dp}$:

$$\begin{aligned} \int_0^r [y_{pl}^2(r') - w_{pl}^2(r')] &= \hbar^2 \lim_{p' \rightarrow p} \frac{[w_{p'l}(r) w'_{pl}(r) - w'_{p'l}(r) w_{pl}(r)]_{r'=0}}{p'^2 - p^2} \\ \int_0^r [y_{pl}^2(r') - w_{pl}^2(r')] &= \hbar^2 \lim_{p' \rightarrow p} \frac{\frac{d}{dp'} [w_{p'l}(r) w'_{pl}(r) - w'_{p'l}(r) w_{pl}(r)]_{r'=0}}{2p'} \end{aligned} \quad (7.26)$$

Lavoriamo ora sul secondo membro, facendo prima la posizione:

$$\bar{\delta}_l(p) = -(l+1) \frac{\pi}{2} + \delta_l(p) \quad (7.27)$$

In questo modo:

$$\begin{aligned} &= \hbar^2 \lim_{p' \rightarrow p} \frac{\frac{d}{dp'} \left[-\frac{2}{\pi \hbar} \frac{p}{\hbar} \cos\left(\frac{p'r}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p')\right) \sin\left(\frac{pr}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p)\right) + \frac{2}{\pi \hbar} \frac{p'}{\hbar} \sin\left(\frac{p'r}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p)\right) \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p)\right) \right]_{r'=0}}{2p'} = \\ &= \frac{1}{\pi} \lim_{p' \rightarrow p} \frac{\frac{d}{dp'} \left[-p \cos\left(\frac{p'r}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p')\right) \sin\left(\frac{pr}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p)\right) + p' \sin\left(\frac{p'r}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p)\right) \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p)\right) \right]_{r'=0}}{p'} = \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\left[p \left(\frac{r}{\hbar} + \frac{d\delta_l}{dp} \right) \sin^2\left(\frac{pr}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p)\right) + \sin\left(\frac{pr}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p)\right) \cos\left(\frac{pr}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p)\right) + p \left(\frac{r}{\hbar} + \frac{d\delta_l}{dp} \right) \cos^2\left(\frac{pr}{\hbar} + \bar{\delta}_l(p)\right) \right]_{r'=0}}{p} = \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{p \frac{d\delta_l}{dp} \sin^2(\bar{\delta}_l(p)) + \sin(\bar{\delta}_l(p)) \cos(\bar{\delta}_l(p)) + p \frac{d\delta_l}{dp} \cos^2(\bar{\delta}_l(p))}{p} = \frac{1}{\pi} \frac{p \frac{d\delta_l}{dp} + \sin(\bar{\delta}_l(p)) \cos(\bar{\delta}_l(p))}{p} = \\ &= \frac{1}{\pi} \left[\frac{d\delta_l}{dp} + \frac{1}{2p} \sin(2\bar{\delta}_l(p)) \right] = \frac{1}{\pi} \left[\frac{d\delta_l}{dp} + \frac{1}{2p} \sin(2\delta_l(p) - (l+1)\pi) \right] = \frac{1}{\pi} \left[\frac{d\delta_l}{dp} - \frac{1}{2p} (-1)^l \sin(2\delta_l(p)) \right] \end{aligned} \quad (7.28)$$

Isoliamo ora la derivata dello sfasamento:

$$\frac{d\delta_l}{dp} \approx \pi \int_0^r dr' \left[|y_{pl}(r')|^2 - |w_{pl}(r')|^2 \right] + \frac{1}{2p} (-1)^l \sin(2\delta_l(p)) \quad (7.29)$$

Siccome $|y_{pl}| \geq 0$ allora troviamo un limite inferiore alla derivata dello sfasamento (anche se approssimato e quindi non un limite forte, in quanto dipende dallo scegliere un certo r sufficientemente grande):

$$\begin{aligned} \frac{d\delta_l}{dp} &= \pi \int_0^r dr' \left[|y_{pl}(r')|^2 - |w_{pl}(r')|^2 \right] + \frac{1}{2p} (-1)^l \sin(2\delta_l(p)) \geq \\ &\geq -\pi \int_0^r dr' |w_{pl}(r')|^2 + \frac{1}{2p} (-1)^l \sin(2\delta_l(p)) \geq \\ &\geq -\pi \int_0^r dr' |w_{pl}(r')|^2 - \frac{1}{2p} \geq -\pi \int_0^r dr' \frac{2}{\pi \hbar} - \frac{1}{2p} = \\ &= -\left(\frac{2r}{\hbar} + \frac{1}{2p} \right) \end{aligned} \quad (7.30)$$

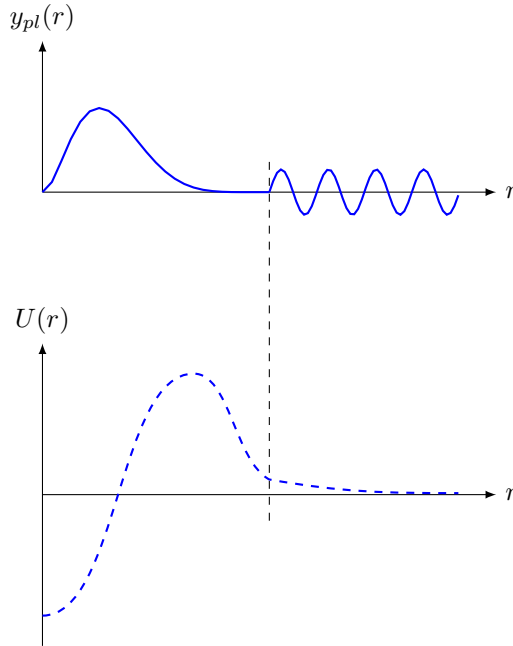
Il limite inferiore non dipende dal potenziale considerato ed è dunque un risultato generale. Questo significa che uno sfasamento non può avere una rapida decrescita, ossia una risonanza si verifica (nel contesto del metodo delle onde parziali) solo in presenza di una rapida crescita di uno sfasamento. Pertanto la formula di Breit-Wigner ha validità generale, ossia non include tutti i casi possibili entro il metodo delle onde parziali.

L'identità ottenuta fornisce anche una condizione sulle stesse autofunzioni affinché avvenga la risonanza. Infatti la derivata siccome il termine con $1/2p$ varia lentamente, l'unica possibilità che la derivata sia grande è che vi sia una grande differenza tra i moduli.

$$\frac{d\delta_l}{dp} \approx \pi \int_0^r dr' \left[|y_{pl}(r')|^2 - |w_{pl}(r')|^2 \right] + \frac{1}{2p} (-1)^l \sin(2\delta_l(p)) \rightarrow \infty \iff |y_{pl}(r)|^2 \gg |w_{pl}(r)|^2 \quad (7.31)$$

In particolare siccome per grandi r le due funzioni coincidono allora una condizione necessaria è che la differenza sia grande per piccoli r , ossia vicino alla regione di interazione.

Moltiplicando per le armoniche sferiche parliamo poi direttamente delle autofunzioni u_{plm} . Abbiamo dunque dimostrato che una condizione necessaria per poter osservare risonanza di ordine l è che il **modulo** della corrispondente **autofunzione radiale** u_{plm} sia **molto grande vicino all'origine** (potenziale significativo) rispetto ai valori assunti lontani dall'origine (potenziale assente, $y_{pl} \approx w_{pl}$). Ci aspettiamo dunque un andamento come nella figura seguente.



Notiamo come questa richiesta abbia senso anche per funzioni non normalizzabili, in quanto la normalizzazione cambia sia la funzione vicina che lontana dal potenziale.

7.5 Stati Metastabili

Finora abbiamo ricondotto la formazione di risonanze agli sfasamenti e poi alla forma degli autofunzioni, ma ancora non è chiaro quando fisicamente questo possa accadere. Discutiamo adesso che la presenza di risonanze è legata alla formazione di **stati metastabili**, ossia stati di scattering che trascorrono un lungo tempo "intrappolati" nel potenziale.

Già sappiamo dallo studio della condizione asintotiche delle autofunzioni improprie di scattering 4.7 che per $r \rightarrow +\infty$ un pacchetto si scompone in onda incidente e onda di scattering. Dobbiamo dunque dimostrare che il tempo di decadimento dello scattering è "grande".

7.5.1 Condizioni sul Pacchetto

Sia un potenziale centrale che per un certo l ammette una risonanza in W_0 di larghezza Γ . Possiamo costruire uno stato come pacchetto delle autofunzioni improprie radiali $u_{plm}(\vec{x})$, fissando m per semplicità (il valore di l considerato è quello per cui si ha la risonanza). Mettiamo in evidenza lo sfasamento $e^{i\delta_l(p)}$ nei coefficienti $c(p)$ senza perdita di generalità:

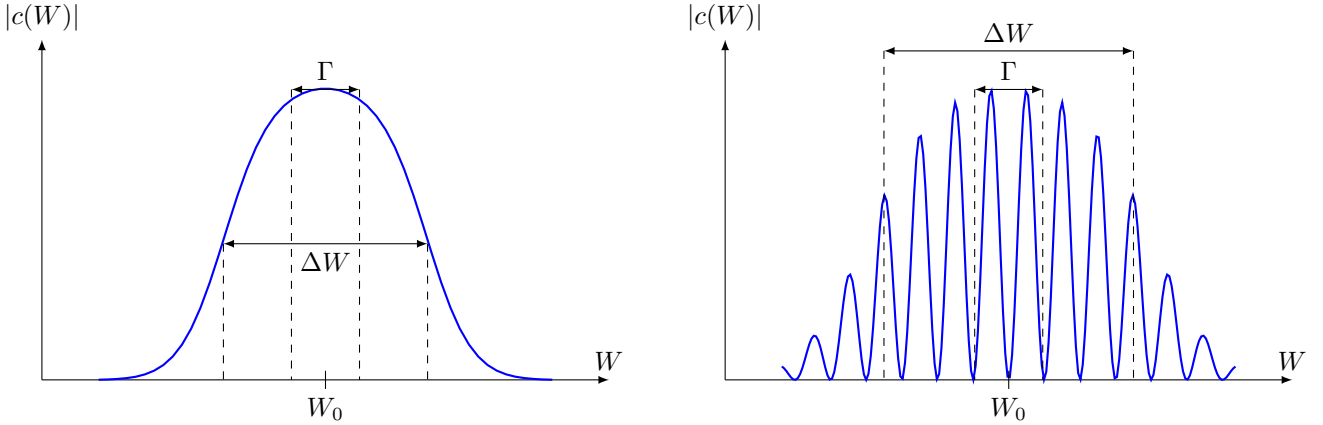
$$\psi(\vec{x}) = \int_0^\infty dp c(p) e^{i\delta_l(p)} u_{plm}(\vec{x}) \quad (7.32)$$

Siccome le u_{plm} sono autofunzioni dell'hamiltoniana sappiamo anche come si propaga il pacchetto, partendo da $t = 0$:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int_0^\infty dp c(p) e^{i\delta_l(p)} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) u_{plm}(\vec{x}) \quad (7.33)$$

Pertanto per $t = 0$ il pacchetto si trova all'origine, ossia nella regione dove il potenziale è significativo.

Scegliamo $c(p)$ centrato in $p_0 = \sqrt{2mW_0}$ con larghezza $\Delta W \gg \Gamma$ e supponiamo che vari lentamente in ΔW . Vogliamo dunque un andamento come quello nella figura a sinistra, non come quello a destra.



Pertanto, come detto, non osserveremo una risonanza nella sezione d'urto di un fascio con particelle in tali stati, ma comunque ha senso parlare della rapida crescita dello sfasamento δ_l intorno a p_0 , con altri sfasamenti trascurabili (vicini ad un multiplo di π).

7.5.2 Andamento Asintotico del Pacchetto

Cerchiamo adesso l'andamento asintotico di questo pacchetto. Per fare questo ricordiamo quello delle autofunzioni improprie radiali:

$$\begin{aligned} u_{plm}(\vec{x}) &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar}} \frac{1}{r} \cos\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right) Y_{lm}(\theta, \phi) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \left[\exp\left(i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right)\right) + \exp\left(-i\left(\frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} + \delta_l(p)\right)\right) \right] \end{aligned} \quad (7.34)$$

Per ridurre le espressioni facciamo la posizione:

$$\gamma_l(pr) = \frac{pr}{\hbar} - (l+1)\frac{\pi}{2} \quad (7.35)$$

Vediamo ora cosa succede ai pacchetti:

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{x}, t) &= \int_0^\infty dp c(p) e^{i\delta_l(p)} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) u_{plm}(\vec{x}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{=} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) e^{i\delta_l(p)} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \left[e^{i(\gamma_l(pr) + \delta_l(p))} + e^{-i(\gamma_l(pr) + \delta_l(p))} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \left[e^{i(\gamma_l(pr) + 2\delta_l(p))} + e^{-i\gamma_l(pr)} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \left[e^{i(\gamma_l(pr) + 2\delta_l(p))} - e^{i\gamma_l(pr)} + e^{i\gamma_l(pr)} + e^{-i\gamma_l(pr)} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \left[e^{i\gamma_l(pr)} (e^{2i\delta_l(p)} - 1) + (e^{i\gamma_l(pr)} + e^{-i\gamma_l(pr)}) \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \left[(e^{i\gamma_l(pr)} + e^{-i\gamma_l(pr)}) + e^{i\gamma_l(pr)} (e^{2i\delta_l(p)} - 1) \right] = \\
&= \psi_{in}(\vec{x}, t) + \psi_{scat}(\vec{x}, t)
\end{aligned} \tag{7.36}$$

Nuovamente troviamo che per $r \rightarrow \infty$ l'onda si può decomporre in onda incidente e onda di scattering:

$$\begin{aligned}
\psi_{in}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) (e^{i\gamma_l(pr)} + e^{-i\gamma_l(pr)}) \\
\psi_{scat}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) e^{i\gamma_l(pr)} (e^{2i\delta_l(p)} - 1)
\end{aligned} \tag{7.37}$$

Notiamo che non abbiamo fatto limiti temporali e dunque queste espressioni sono valide per ogni t , anche se solo a grandi distanze.

7.5.3 Contributo dell'Onda Incidente

Iniziamo con studiare l'onda incidente, che notiamo può essere scomposta in un pacchetto di onde sferiche uscenti ed uno di onde sferiche entranti:

$$\begin{aligned}
\psi_{in}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) (e^{i\gamma_l(pr)} + e^{-i\gamma_l(pr)}) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) e^{i\gamma_l(pr)} + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) e^{-i\gamma_l(pr)} = \\
&= \frac{\phi_{in}^+(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) + \frac{\phi_{in}^-(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi)
\end{aligned} \tag{7.38}$$

Esplicitiamo ora $\gamma_l(pr)$:

$$\begin{aligned}
\phi_{in}^+(r) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(i\left(\frac{pr}{\hbar} - \frac{p^2}{2m} t - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)\right) \\
\phi_{in}^-(r) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \exp\left(-i\left(\frac{pr}{\hbar} + \frac{p^2}{2m} t - (l+1)\frac{\pi}{2}\right)\right)
\end{aligned} \tag{7.39}$$

Siccome questo è valido per $r \rightarrow \infty$ allora i due integrali oscillano fortemente, che ci permette di usare il metodo della fase stazionaria. In particolare nei due pacchetti la fase è stazionaria quando:

$$\begin{cases} r = \frac{p_0}{m} t & \phi_{in}^+ \\ r = -\frac{p_0}{m} t & \phi_{in}^- \end{cases} \tag{7.40}$$

Questo significa che per $t < 0$ è trascurabile ϕ_{in}^+ in quanto non esistono soluzioni, e viceversa per $t > 0$ è trascurabile ϕ_{in}^- .

$$\begin{cases} \psi_{in}(\vec{x}, t) \approx \frac{\phi_{in}^-(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) & t < 0 \\ \psi_{in}(\vec{x}, t) \approx \frac{\phi_{in}^+(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) & t > 0 \end{cases} \tag{7.41}$$

Siccome ΔW è la larghezza energetica del pacchetto, possiamo ora stimare la durata di ciascuna di queste onde con la relazione di indeterminazione tempo-energia:

$$\Delta t = \frac{\hbar}{\Delta W} \quad (7.42)$$

Siccome siamo nelle ipotesi $\Delta W \gg \Gamma$ allora è grande l'incertezza energetica e dunque molto piccola la durata temporale. Pertanto questo non è lo stato "metastabile"; d'altra parte ce lo potevamo aspettare dal fatto che questo andamento è indipendente dalla presenza di risonanze o meno.

7.5.4 Contributo dell'Onda di Scattering

Studiamo adesso l'onda di scattering, che possiamo esplicitare usando l'approssimazione di Breit-Wigner per la risonanza.

$$\begin{aligned} \psi_{scat}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) e^{i\gamma_l(pr)} 2i e^{i\delta_l(p)} \sin(\delta_l(p)) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) e^{i\gamma_l(pr)} \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} = \\ &= \frac{(-i)^{l+1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \int_0^\infty dp c(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right) \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} \end{aligned} \quad (7.43)$$

Notiamo adesso che la funzione

$$\frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} \quad (7.44)$$

varia rapidamente intorno a W_0 ed è sostanzialmente nulla fuori da un intervallo di larghezza Γ . Siccome per ipotesi $c(p)$ varia lentamente allora la possiamo portare fuori dall'integrale:

$$\psi_{scat}(\vec{x}, t) = \frac{(-i)^{l+1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) c(p_0) \int_0^\infty dp \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right) \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} \quad (7.45)$$

Facciamo poi il cambio di variabile da momento ad energia:

$$W = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow dW = \frac{p}{m} dp \Rightarrow dp = \frac{m}{p} dW \quad (7.46)$$

Siccome anche $1/p$ varia lentamente allora approssimiamo:

$$dp = \frac{m}{p} dW \approx \frac{m}{p_0} dW \quad (7.47)$$

e spostiamo il centro degli esponenziali in modo che coincida con W_0 :

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W t\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (W - W_0 + W_0) t\right) = e^{-\frac{i}{\hbar} W_0 t} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (W - W_0) t\right) \\ W - W_0 &= \frac{(p - p_0)(p + p_0)}{2m} = \frac{p + p_0}{2} \frac{p - p_0}{m} \approx \frac{p_0}{m} (p - p_0) \\ \exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} (p - p_0 + p_0) r\right) = e^{\frac{i}{\hbar} p_0 r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (p - p_0) r\right) \approx e^{\frac{i}{\hbar} p_0 r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{p_0} (W - W_0) r\right) \end{aligned} \quad (7.48)$$

Inserendo questo nell'integrale troviamo:

$$\begin{aligned} \psi_{scat}(\vec{x}, t) &= \frac{(-i)^{l+1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) c(p_0) \int_0^\infty dp \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right) \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} \approx \\ &\approx \frac{(-i)^{l+1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{m}{p_0 r} Y_{lm}(\theta, \phi) c(p_0) e^{-\frac{i}{\hbar} W_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 r} \int_0^\infty dW \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (W - W_0) t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{p_0} (W - W_0) r\right) \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} = \\ &= \frac{(-i)^{l+1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{m}{p_0 r} Y_{lm}(\theta, \phi) c(p_0) e^{-\frac{i}{\hbar} W_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 r} \int_0^\infty dW \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (W - W_0) \left(t - \frac{m}{p_0} r\right)\right) \end{aligned} \quad (7.49)$$

7.5.5 Durata degli Stati Metastabili

Per trovare la durata dell'onda di scattering dobbiamo dunque capire in che modo il seguente integrale dipende dal tempo:

$$\begin{aligned} J(r, t) &= \int_0^\infty dW \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(W - W_0)\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)\right) = \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}W_0\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)\right) \int_0^\infty dW \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}W\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)\right) \end{aligned} \quad (7.50)$$

Possiamo trovare il valore di questo integrale a seconda del segno di $t - mr/p_0$ usando il Teorema dei Residui. Siccome l'integrando è risonante intorno a W_0 allora possiamo estendere l'integrale a tutto \mathbb{R} :

$$J(r, t) \approx \int_{-\infty}^\infty dW \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(W - W_0)\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)\right) \quad (7.51)$$

Se vogliamo estendere l'integrale al piano complesso dobbiamo però notare che l'integrando ammette un polo in $W = W_0 - i\Gamma/2$. Infatti un tipico cammino è una semicirconfenza di raggio infinito, che dunque interseca un semiasse dei numeri immaginari. È dunque importante il segno nell'esponentiale immaginario, in quanto per W immaginario diventa un esponenziale reale. Distinguiamo dunque i casi:

$$t - \frac{m}{p_0}r < 0 \quad t - \frac{m}{p_0}r > 0 \quad (7.52)$$

Notiamo che siccome r è positivo allora nel secondo caso $t > 0$ necessariamente, mentre nel primo t non può arbitrariamente positivo:

$$t < \frac{m}{p_0}r \quad t > \frac{m}{p_0}r > 0 \quad (7.53)$$

Primo Caso

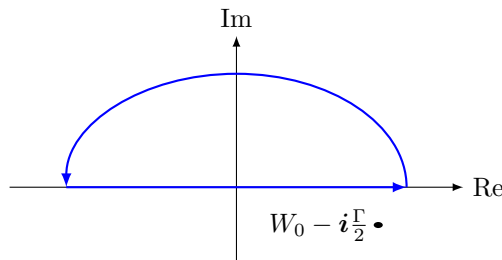
Nel primo caso abbiamo facciamo le seguenti posizioni lungo l'asse immaginario:

$$\begin{cases} W = i\mathcal{W} \\ t - \frac{m}{p_0}r = -\tau < 0 \end{cases} \quad (7.54)$$

Inserendo questo troviamo che l'andamento dell'esponentiale lungo l'asse immaginario è dato da:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}W\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(i\mathcal{W})(-\tau)\right) = \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\mathcal{W}\tau\right) \quad (7.55)$$

Pertanto l'integrando diverge sul semiasse immaginario negativo e va a 0 su quello positivo, facendo convergere l'integrale. In questo scegliamo dunque il cammino di seguito.

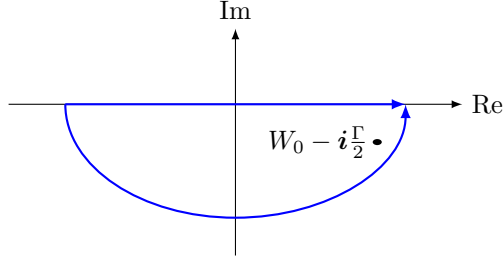


Pertanto per mandando il raggio della semicirconfenza all'infinito $R \rightarrow \infty$, l'unico contributo all'integrale è proprio J , per cui vale il Teorema dei Residui. Siccome l'integrando non ha poli nel semipiano immaginario positivo allora questo è nullo:

$$J(r, t) = 0 \quad (7.56)$$

Secondo Caso

Consideriamo adesso il secondo caso. Già sappiamo che il segno nell'argomento dell'esponentiale è opposto e dunque prendiamo il cammino di seguito.



In questo caso esiste un polo (semplice) all'interno del cammino e dunque l'integrale non è nullo:

$$\begin{aligned}
 J(r, t) &= 2\pi i \operatorname{Res} \left\{ \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (W - W_0) \left(t - \frac{m}{p_0} r \right) \right) \right\}_{W_0 - i\Gamma/2} = \\
 &= 2\pi i \lim_{W \rightarrow W_0 - i\Gamma/2} (W - W_0 + i\Gamma/2) \frac{-i\Gamma}{W - W_0 + i\Gamma/2} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (W - W_0) \left(t - \frac{m}{p_0} r \right) \right) = \\
 &= 2\pi i (-i\Gamma) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \left(-i\frac{\Gamma}{2} \right) \left(t - \frac{m}{p_0} r \right) \right) = \\
 &= 2\pi \Gamma \exp \left(-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right) \right)
 \end{aligned} \tag{7.57}$$

Possiamo ora inserire questi risultati nell'espressione dell'onda di scattering:

$$\psi_{scat}(\vec{x}, t) = \begin{cases} 0 & t < \frac{m}{p_0} r \\ \left((-i)^{l+1} \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}} \frac{m\Gamma}{p_0} c(p_0) \right) \frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)} Y_{lm}(\theta, \phi) \exp \left(-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right) \right) & t > \frac{m}{p_0} r > 0 \end{cases} \tag{7.58}$$

Inseriamo tutte le costanti in una sola:

$$\psi_{scat}(\vec{x}, t) = \begin{cases} 0 & t < \frac{m}{p_0} r \\ \left[N \exp \left(-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right) \right) \right] \frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)} Y_{lm}(\theta, \phi) & t > \frac{m}{p_0} r > 0 \end{cases} \tag{7.59}$$

Pertanto per $t < 0$ non vi è onda di scattering (come ci aspettiamo), mentre per $t > mr/p_0 > 0$ vi è un'onda di scattering data da un'onda sferica con modulo che decresce esponenzialmente con il tempo.

Ricordando che l'onda totale è $\psi = \psi_{in} + \psi_{scat}$ troviamo che, a grandi distanze $r \rightarrow \infty$:

1. Per $t < 0$ l'onda coincide con un'onda sferica entrante;

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{\phi_{in}^-(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad t < 0, r \rightarrow \infty \tag{7.60}$$

2. Per $0 < t < \frac{m}{p_0} r$ l'onda coincide con un'onda sferica uscente;

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{\phi_{in}^+(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad 0 < t < \frac{m}{p_0} r, r \rightarrow \infty \tag{7.61}$$

3. Per $t > \frac{m}{p_0} r$ l'onda è una sovrapposizione di un'onda sferica uscente e un'onda sferica uscente che decade esponenzialmente nel tempo;

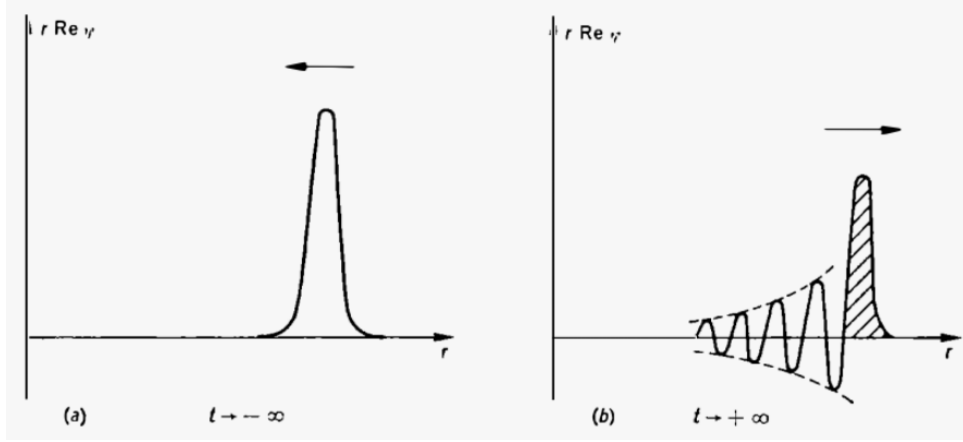
$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{\phi_{in}^+(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) + \left[N \exp \left(-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r \right) \right) \right] \frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad t > \frac{m}{p_0} r, r \rightarrow \infty \tag{7.62}$$

Questo significa che la durata del pacchetto è fissata dalla durata dell'onda di scattering, che ha una durata pari a:

$$\widetilde{\Delta t} = \frac{2\hbar}{\Gamma} \gg \frac{\hbar}{\Delta W} = \Delta t \tag{7.63}$$

Inoltre troviamo che la durata del pacchetto incidente è molto minore rispetto a quella del pacchetto uscente. Ricapitoliamo i risultati ottenuti nei seguenti commenti. Sia un potenziale centrale con uno sfasamento δ_l che varia rapidamente

intorno ad un'energia W_0 . Inizialmente ($t \rightarrow -\infty$), la particella si trova in un pacchetto di grande incertezza energetica centrato attorno a W_0 e con momento angolare l ben definito. Questo pacchetto arriva dall'infinito verso l'origine, risultando in un breve tempo di incidenza $\Delta t = \hbar/\Delta W$. Il pacchetto viene poi riflesso dal potenziale e si allontana ($t \rightarrow +\infty$), guadagna però una coda esponenziale, che aumenta di molto il tempo di allontanamento rispetto a quello di incidenza $\tilde{\Delta t} \gg \Delta t$. Questo è riassunto nella seguente figura.



Questa situazione è dunque chiaramente distinta da un tipico caso di scattering, in cui sia l'onda entrante che l'onda uscente hanno breve durata. Questo comunque non chiarisce esattamente la legge di decadimento, né il comportamento dello stato vicino all'origine, che è quello a cui siamo più interessati.

7.5.6 Legge di Decadimento degli Stati Metastabili

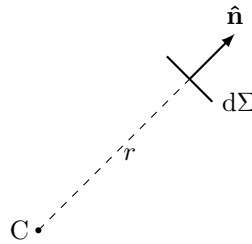
Cerchiamo adesso di ricavare un'effettiva legge di decadimento di stati metastabili attraverso l'equazione di continuità. Ricordiamo la definizione di flusso di probabilità per una particella che rispetta l'equazione di Schrodinger con potenziale scalare, che ha massa m e si trova in uno stato ψ :

$$\vec{S}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{4\pi i m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (7.64)$$

La probabilità che la particella venga trasmessa attraverso una superficie $d\Sigma$ (che sta in posizione \vec{x}) con normale \hat{n} nell'intervallo di tempo $t, t + dt$ è data da:

$$dP(\vec{x}, t) = dt d\Sigma \vec{S}(\vec{x}, t) \cdot \hat{n} \quad (7.65)$$

per definizione di flusso di probabilità. Vogliamo adesso calcolare la dipendenza temporale di dP dal tempo nel caso in cui la superficie $d\Sigma$ è posta a distanza r con normale radiale, come in figura.



In questo caso dunque $\hat{n} = \hat{r}$ ed $\vec{S} \cdot \hat{n} = S_r$, che ha una semplice espressione:

$$S_r = \psi^* \partial_r \psi - \psi \partial_r \psi^* \quad (7.66)$$

Se prendiamo r sufficientemente grande e $t \geq \frac{m}{p_0} r + \Delta t$ allora la particella è data dal solo pacchetto di scattering:

$$\psi(\vec{x}, t) \approx \psi_{scart}(\vec{x}, t) = \left[N \exp\left(-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r\right)\right) \right] \frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad t \geq \frac{m}{p_0} r, r \rightarrow \infty \quad (7.67)$$

Siccome ne vogliamo calcolare la derivata radiale allora racchiudiamo tutta la parte non dipendente da r in un fattore:

$$\psi(\vec{x}, t) \approx A \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{m}{p_0} r\right)\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_0 r - W_0 t)\right) \quad A = N Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (7.68)$$

Notiamo che solo la parte complessa deve essere derivata, in quanto quella reale si semplifica. Posto $\psi = \alpha\phi$ con α reale e ϕ complesso allora:

$$\begin{aligned}\psi^*\partial\psi - \psi\partial\psi^* &= (\alpha\phi^*)\partial(\alpha\phi) - (\alpha\phi)\partial(\alpha\phi^*) = (\alpha^2\phi^*)\partial\phi + \alpha|\phi|^2\partial\alpha - (\alpha^2\phi)\partial\phi^* - \alpha|\phi|^2\partial\alpha = \\ &= \alpha^2(\phi^*\partial\phi - \phi\partial\phi^*)\end{aligned}\quad (7.69)$$

Nel nostro caso la parte complessa è data da una semplice fase oscillante:

$$\begin{aligned}S_r &= \psi^*\partial_r\psi - \psi\partial_r\psi^* = \\ &= |A|^2 \frac{1}{r} e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar}\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)} \left[e^{-\frac{i}{\hbar}(p_0r - W_0t)} \partial_r e^{\frac{i}{\hbar}(p_0r - W_0t)} - e^{\frac{i}{\hbar}(p_0r - W_0t)} \partial_r e^{-\frac{i}{\hbar}(p_0r - W_0t)} \right] = \\ &= |A|^2 \frac{1}{r} e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar}\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)} \left[\frac{i}{\hbar}p_0 + \frac{i}{\hbar}p_0 \right] = \frac{2i}{\hbar}p_0 |A|^2 \frac{1}{r} e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar}\left(t - \frac{m}{p_0}r\right)}\end{aligned}\quad (7.70)$$

Troviamo infine che la legge di decadimento è esponenziale con tempo caratteristico $\widetilde{\Delta t}$, come ci aspettavamo già d'altra parte:

$$dP \propto S_r \propto \exp\left(-\frac{\Gamma}{2\hbar}t\right) \quad (7.71)$$

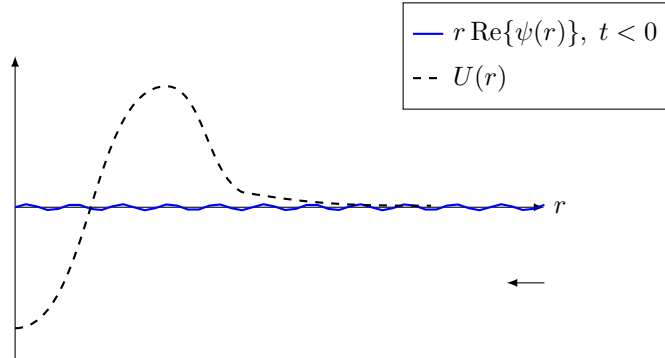
Notiamo che la legge di decadimento dipende debolmente dal pacchetto, ossia solo tramite $c(p_0)$ e ΔW , che è implicito. Pertanto questa legge è generale e descrive *tutti* gli stati metastabili.

7.5.7 Evoluzione degli Stati Metastabili in prossimità del Centro di Diffusione

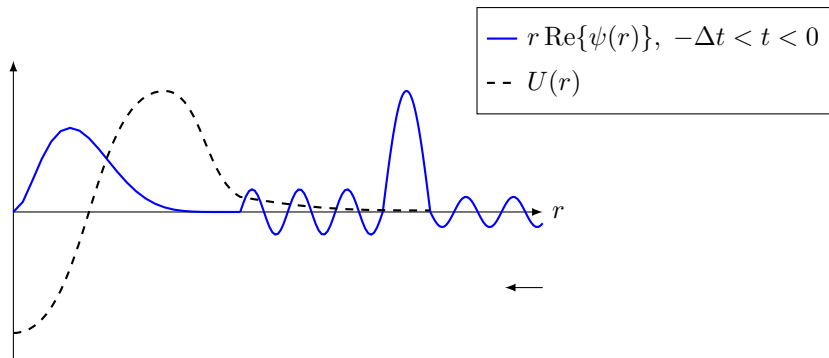
Ci chiediamo adesso cosa succede ad uno stato metastabile a brevi distanze, ossia dove il potenziale è significativo. Ricordiamo che una condizione necessaria affinché sia possibile una risonanza all'ordine l ad un momento p_0 è che l'ampiezza dell'autofunzione u_{plm} con p vicino a p_0 nella regione dove il potenziale è significativo sia molto maggiore della regione dove il potenziale è assente.

Lo stato a cui siamo interessati è però uno stato metastabile, ossia un pacchetto composto da onde u_{plm} , che è centrato attorno a p_0 . Facciamo adesso considerazioni qualitative sulla propagazione del pacchetto vicino all'origine.

Per istanti negativi, quando il picco è lontano dall'origine, le onde monocromatiche che compongono il pacchetto interferiscono distruttivamente, risultando in un'ampiezza trascurabile all'interno della buca di potenziale.



Per tempi immediatamente precedenti a 0, minori di $(-)\Delta t$, il picco del pacchetto (che viaggia come un'onda sferica di momento p_0) si avvicina e l'interferenza diventa costruttiva. Pertanto prevale la presenza di u_{p_0lm} e troviamo una situazione come quella di seguito.



Nel tempo di collisione Δt il picco inizia ad allontanarsi con una coda esponenziale. Per tempi successivi, minori della vita media $\Delta t < t < \Delta t$, il picco è uscita dalla buca di potenziale e dunque l'unico contributo significativo è dato dall'onda di scattering, che ha valore approssimativamente nullo fuori dalla buca. Pertanto durante questo tempo lo stato della particella è analogo ad uno stato legato. Per tempi positivi ($t > \Delta t$) la coda esponenziale si "porta via" l'onda di scattering dall'origine e le onde monocromatiche fanno interferenza distruttiva nuovamente. A questo punto l'ampiezza vicino all'origine è di nuovo nulla e rimane tale fino a $t \rightarrow +\infty$. Questi stati sono dunque analoghi a quelli legati ("stabili"), ma comunque hanno un tempo di decadimento finito, da cui il nome "metastabili".

7.5.8 Condizioni per la Risonanza sul Potenziale

Possiamo ora chiederci di che forma deve essere il potenziale affinché sia possibile la formazione di risonanze, stati metastabili ed autofunzioni con modulo molto maggiore vicino all'origine che lontano dall'origine. Affinchè $|y_{pl}|$ possa avere un massimo dove è presente il potenziale, ossia crescere e poi decrescere, la concavità deve essere diretta verso il basso. Notiamo che per l'equazione di Schrodinger relativa alla parte radiale il segno di funzione e derivata seconda sono legati:

$$-y''_{pl}(r) = \frac{2m}{\hbar^2}(W - U_{\text{eff}}(r))y_{pl}(r) \Rightarrow \text{sign}(y''_{pl}) = \text{sign}((U_{\text{eff}} - W)y_{pl}) \quad (7.72)$$

Pertanto se vogliamo che la funzione cresca (e poi decresca) in modulo all'interno di una certa regione, deve risultare:

$$W \leq U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (7.73)$$

Consideriamo il caso di potenziali puramente attrattivi (asintoticamente completi), ossia strettamente crescenti e negativi. In questo caso per $W < 0$ gli stati sono legati e per $W > 0$ gli stati sono di scattering. Chiaramente in onda s ($l = 0$) la barriera centrifuga è nulla e dunque non esistono valori di W (positivi) che soddisfano questa condizione. Pertanto non esistono risonanze in onda s per potenziali puramente attrattivi. Affinchè questo sia possibile è dunque necessaria almeno una regione attrattiva.

Capitolo 8

Approssimazione di Born

Nei precedenti capitoli abbiamo elaborato un metodo basato sul calcolo degli sfasamenti tra le condizioni asintotiche delle autofunzioni improprie radiali nel potenziale e le condizioni asintotiche delle autofunzioni improprie radiali libere. Questo ha fornito risultati esatti e utili predizioni sulle risonanze. Tuttavia ha effettiva utilità solo a basse energie, a meno di calcolare molti termini, che è computazionalmente intenso. In questo capitolo elaboriamo dunque un altro metodo particolarmente adatto al regime di alte energie e basato sulla Teoria delle Perturbazioni indipendenti dal tempo.

Come prima chiaramente l'obiettivo di una teoria di scattering è il calcolo dell'ampiezza di scattering, che racchiude tutte le informazioni relative ad uno scattering da potenziale e in particolare la sezione d'urto differenziale e totale.

8.1 Metodo Perturbativo per Autofunzioni Improprie

Per calcolare l'ampiezza di scattering dobbiamo ricondurci alla condizione asintotica sulle autofunzioni improprie di scattering:

$$u_{\vec{p}}^{(+)}(\vec{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) + \frac{f(p, \theta_{\vec{p}\vec{x}})}{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right) \right] \quad (8.1)$$

Vogliamo dunque calcolare queste autofunzioni con il metodo perturbativo. Possiamo infatti scrivere l'hamiltoniana come la somma dell'hamiltoniana libera più il potenziale che fa da perturbazione:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{x}) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad \hat{H}_1 = O(\lambda) \quad (8.2)$$

con λ parametro piccolo. Supponiamo dunque di conoscere gli autostati di \hat{H}_0 :

$$\hat{H}_0 u^{(0)}(\vec{x}) = W^{(0)} u^{(0)}(\vec{x}) \quad (8.3)$$

Supponiamo adesso di poter espandere le autofunzioni e autovalori di \hat{H} in serie:

$$\hat{H}u(\vec{x}) = Wu(\vec{x}) \quad u(\vec{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} u^{(n)}(\vec{x}) \quad W = \sum_{n=0}^{\infty} W^{(n)} \quad (8.4)$$

con $u^{(n)} = O(\lambda^n)$ e $W^{(n)} = O(\lambda^n)$. In realtà noi siamo interessati solo agli stati di scattering e possiamo usare dunque che gli spettri di \hat{H}_0 ed \hat{H} coincidono con $[0, +\infty)$ (a meno di traslazioni di \hat{H}). Possiamo dunque supporre $W = W^{(0)} > 0$, così che dobbiamo espandere in serie solo le autofunzioni. Inseriamo quest'ansatz nell'equazione agli autovalori per \hat{H} :

$$\begin{aligned} \hat{H}u(\vec{x}) &= Wu(\vec{x}) \\ \sum_{n=0}^{\infty} (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) u^{(n)}(\vec{x}) &= \sum_{n=0}^{\infty} W u^{(n)}(\vec{x}) \\ \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{x}) \right) u^{(n)}(\vec{x}) &= \sum_{n=0}^{\infty} W u^{(n)}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (8.5)$$

Siccome questo è valido per ogni λ allora l'equazione vale per i singoli ordini. Siccome $U(\vec{x})$ è dell'ordine di λ allora "aumenta" l'autofunzione che moltiplica di un ordine. Troviamo dunque le seguenti equazioni ai vari ordini:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}u^{(0)}(\vec{x}) &= Wu^{(0)}(\vec{x}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}u^{(1)}(\vec{x}) + U(\vec{x})u^{(0)}(\vec{x}) &= Wu^{(1)}(\vec{x}) \\ &\dots = \dots \\ -\frac{\hbar^2}{2m}u^{(n)}(\vec{x}) + U(\vec{x})u^{(n-1)}(\vec{x}) &= Wu^{(n)}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (8.6)$$

Siccome W appartiene allo spettro continuo allora ammette un grado di degenerazione infinito. Infatti queste equazioni adesso possono definire $u = u_{\vec{p}}^{(+)}$ ma anche $u = u_{plm}$. Per determinare una soluzione (a meno di normalizzazione) usiamo l'andamento asintotico delle $u_{\vec{p}}^{(+)}$. All'ordine zero sappiamo che:

$$u^{(0)}(\vec{x}) = u_{\vec{p}}^{(0)}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p} \cdot \vec{x}\right) \quad (8.7)$$

Deve dunque risultare:

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{f(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}})}{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pr\right) \stackrel{r \rightarrow \infty}{=} \sum_{n=1}^{\infty} u^{(n)}(\vec{x}) \quad (8.8)$$

Richiediamo dunque che i termini della serie perturbativa soddisfino la seguente condizioni asintotiche:

$$u_{\vec{p}}^{(n)}(\vec{x}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{f^{(n)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}})}{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pr\right) \quad (8.9)$$

in modo tale che:

$$f(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(p, \theta_{\widehat{p\vec{x}}}) \quad (8.10)$$

Pertanto all'ordine più basso saremo interessati a determinare solo la $u^{(1)}$, da cui la $f^{(1)}$.

8.2 Funzione di Green per l'Equazione di Helmholtz

Notiamo adesso come le equazioni che determinano le $u^{(n)}$ sono adesso PDE lineari del secondo ordine a coefficienti costanti, in quanto il potenziale moltiplica una quantità già nota. Le equazioni per $n \geq 1$ sono dunque equivalenti all'**equazione di Helmholtz** con termine di sorgente, ossia non omogenea:

$$(\nabla^2 + k^2)u^{(n)}(\vec{x}) = j^{(n)}(\vec{x}) \quad \begin{cases} k^2 = \frac{2mW}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} \\ j^{(n)}(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2}U(\vec{x})u^{(n-1)}(\vec{x}) \end{cases} \quad (8.11)$$

Per risolvere quest'equazione usiamo il metodo della funzione di Green, ossia vogliamo cercare soluzioni all'equazione:

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{x}) = \delta_3(\vec{x}) \quad (8.12)$$

con la condizione asintotica:

$$G_k(\theta) = h(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (8.13)$$

In questo modo la seguente funzione è automaticamente soluzione dell'equazione:

$$u^{(n)}(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G(\vec{x} - \vec{x}') j^{(n)}(\vec{x}') \quad (8.14)$$

Infatti:

$$\begin{aligned} \nabla^2 u^{(n)}(\vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' (\nabla^2 G(\vec{x} - \vec{x}')) j^{(n)}(\vec{x}') = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' (\delta_3(\vec{x} - \vec{x}') - k^2 G(\vec{x} - \vec{x}')) j^{(n)}(\vec{x}') = \\ &= j^{(n)}(\vec{x}) - k^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G(\vec{x} - \vec{x}') j^{(n)}(\vec{x}') = j^{(n)}(\vec{x}) - k^2 u^{(n)}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (8.15)$$

Verifichiamo dopo che soddisfa la condizione al contorno data e per quale funzione $f^{(n)}$.

Facciamo adesso la seguente ansatz, che dobbiamo verificare:

$$G_k(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (8.16)$$

Calcoliamone il laplaciano:

$$\nabla^2 G_k(\vec{x}) = \nabla^2 \left(-\frac{1}{4\pi r} \right) e^{ikr} + 2 \nabla \left(-\frac{1}{4\pi r} \right) \cdot \nabla (e^{ikr}) - \frac{1}{4\pi r} \nabla^2 e^{ikr} \quad (8.17)$$

Ricordiamo adesso che nel primo laplaciano vi è la funzione di Green per l'equazione di Poisson, ossia:

$$\begin{aligned} \nabla^2 G_k(\vec{x}) &= \delta_3(\vec{x}) e^{ikr} + 2 \nabla \left(-\frac{1}{4\pi r} \right) \cdot \nabla (e^{ikr}) - \frac{1}{4\pi r} \nabla^2 e^{ikr} = \\ &= \delta_3(\vec{x}) + 2 \nabla \left(-\frac{1}{4\pi r} \right) \cdot \nabla (e^{ikr}) - \frac{1}{4\pi r} \nabla^2 e^{ikr} \end{aligned} \quad (8.18)$$

dove abbiamo usato che $\delta(x)f(x) = \delta(x)f(0)$ (nel senso delle distribuzioni). Calcoliamo poi il gradiente e dunque il laplaciano delle due funzioni rimanenti. Notiamo che siccome le funzioni sono radiali allora le espressioni si semplificano:

$$\begin{aligned} \nabla(f(r)) &= f'(r) \hat{\mathbf{x}} \\ \nabla^2(f(r)) &= \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rf(r)) = f''(r) + \frac{2}{r} f'(r) \end{aligned} \quad (8.19)$$

Otteniamo dunque quanto atteso:

$$\begin{aligned} \nabla^2 G_k(\vec{x}) &= \delta_3(\vec{x}) + 2 \left(\frac{\hat{\mathbf{x}}}{4\pi r^2} \right) \cdot (ik \hat{\mathbf{x}} e^{ikr}) - \frac{1}{4\pi r} \left(-k^2 + ik \frac{2}{r} \right) e^{ikr} = \\ &= \delta_3(\vec{x}) + \frac{ik}{2\pi r^2} e^{ikr} - \frac{ik}{2\pi r^2} e^{ikr} + k^2 \frac{1}{4\pi r} e^{ikr} = \\ &= \delta_3(\vec{x}) - k^2 G_k(\vec{x}) \end{aligned} \quad (8.20)$$

come volevasi dimostrare.

Possiamo ora calcolare la soluzione ad un'ordine generico. In particolare per i primi due ordini:

$$\begin{aligned} u_{\vec{p}}^{(1)}(\vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G_k(\vec{x} - \vec{x}') j^{(1)}(\vec{x}') = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') u_{\vec{p}}^{(0)}(\vec{x}') \\ u_{\vec{p}}^{(2)}(\vec{x}) &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G_k(\vec{x} - \vec{x}'') U(\vec{x}'') u_{\vec{p}}^{(1)}(\vec{x}'') = \\ &= \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G_k(\vec{x} - \vec{x}'') U(\vec{x}'') \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G(\vec{x}'' - \vec{x}') U(\vec{x}') u_{\vec{p}}^{(0)}(\vec{x}') \end{aligned} \quad (8.21)$$

In generale all'ordine n -esimo dovremo fare un integrale in $3n$ dimensioni.

8.3 Ampiezza di Scattering al primo ordine in Approssimazione di Born

Per calcolare il primo termine $f^{(1)}$ dell'ampiezza di scattering dobbiamo adesso trovare la condizione asintotica. Per fare questo approssimiamo all'ordine $1/r$ la funzione di Green, ossia:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \\ |\vec{x} - \vec{x}'| &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} r - \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) = r - \vec{x}' \cdot \hat{\mathbf{x}} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \end{aligned} \quad (8.22)$$

La funzione di Green diventa dunque:

$$G(\vec{x} - \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|} \exp(ik|\vec{x} - \vec{x}'|) \approx -\frac{1}{4\pi r} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(pr - p\vec{x}' \cdot \hat{\mathbf{x}})\right) \quad (8.23)$$

EsPLICITIAMO dunque la condizione asintotica sulla correzione $u_{\vec{p}}^{(1)}$:

$$\begin{aligned}
u_{\vec{p}}^{(1)}(\vec{x}) &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') u_{\vec{p}}^{(0)}(\vec{x}') = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' G(\vec{x} - \vec{x}') U(\vec{x}') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}'\right) \stackrel{r \rightarrow \infty}{=} \\
&= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \frac{1}{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (pr - p\vec{x}' \cdot \hat{x})\right) U(\vec{x}') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}'\right) = \\
&= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{1}{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right) \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' U(\vec{x}') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (p\hat{x} - \vec{p}) \cdot \vec{x}'\right) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{1}{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} pr\right) \left[-\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' U(\vec{x}') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (p\hat{x} - \vec{p}) \cdot \vec{x}'\right) \right]
\end{aligned} \tag{8.24}$$

Pertanto per definizione di $f^{(1)}$ troviamo:

$$\begin{aligned}
f^{(1)}(p, \theta_{\widehat{p\hat{x}}}) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' U(\vec{x}') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (p\hat{x} - \vec{p}) \cdot \vec{x}'\right) = \\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' U(\vec{x}') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{x}'\right)
\end{aligned} \tag{8.25}$$

dove abbiamo definito:

$$\vec{q} = \vec{p}' - \vec{p} \quad \vec{p}' = p\hat{x} = p' \frac{\vec{x}}{r} \tag{8.26}$$

La vera e propria **Approssimazione di Born** consiste infine nell'approssimazione:

$$f(p, \theta) = f^{(1)}(p, \theta) \iff \boxed{f(p, \theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{x}}} \tag{8.27}$$

Notiamo dunque che in questo modo l'ampiezza di scattering coincide con la trasformata di Fourier del potenziale. Siccome \vec{q} è definito a partire da \vec{p} a meno di un angolo $\theta_{\widehat{p\hat{x}}}$, l'ampiezza di scattering dipende solo dall'angolo di diffusione in quest'approssimazione, indipendentemente dal tipo di potenziale (che giustifica a posteriori la notazione usata).

Nell'approssimazione di Born la sezione d'urto differenziale è data dunque da:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(p, \theta) = |f(p, \theta)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{x}} \right|^2 \tag{8.28}$$

8.4 Potenziale Centrale Generico

Vediamo adesso come l'approssimazione di Born si riduce al caso di un potenziale centrale. Possiamo esplicitare l'integrale in coordinate sferiche:

$$\begin{aligned}
f^{(1)}(p, \theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 \int_0^{2\pi} d\beta \int_{-1}^1 d\cos\alpha U(r) \exp\left(\frac{i}{\hbar} qr \cos\alpha\right) = \\
&= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 U(r) \int_{-1}^1 d\cos\alpha \exp\left(\frac{i}{\hbar} qr \cos\alpha\right) = \\
&= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 U(r) \frac{1}{\frac{i}{\hbar} qr} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} qr\right) - \exp\left(-\frac{i}{\hbar} qr\right) \right] = \\
&= -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 U(r) \frac{\hbar}{qr} \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) = \\
&= -\frac{2m}{\hbar} \frac{1}{|\vec{p} - p\hat{x}|} \int_0^\infty dr r U(r) \sin\left(|\vec{p} - p\hat{x}| \frac{r}{\hbar}\right) = -\frac{2m}{q\hbar} \int_0^\infty dr r U(r) \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right)
\end{aligned} \tag{8.29}$$

Possiamo anche esplicitare la dipendenza solo da p e θ tramite:

$$q = |\vec{p} - p\hat{x}| = p^2 + p^2 - 2p\vec{p} \cdot \hat{x} = 2p^2(1 - \cos\theta) = 4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \tag{8.30}$$

8.4.1 Validità dell'Approssimazione di Born

Notiamo adesso come l'ampiezza di scattering va come $1/p$, indicando che per alti valori di p la correzione è piccola. Siccome ordini superiori coinvolgono multipli integrali ci aspettiamo che l'ordine delle correzioni superiori sia del tipo

$1/p^n$. Questo significa che per alti valori p la correzione che conta di più è quella di ordine più basso ed effettivamente possiamo troncare la serie al primo o ai primi ordini. Questo continua a valere in realtà anche per potenziali generici (anche se la dipendenza da p non è la stessa).

Questo risultato ce lo potevamo in realtà aspettare dalla stessa equazione. Se vogliamo infatti che il potenziale abbia un effetto piccolo allora:

$$\langle \hat{\mathcal{H}}_0 \rangle \gg \langle U(\vec{x}) \rangle \Rightarrow W \gg \langle U(\vec{x}) \rangle \quad (8.31)$$

8.5 Potenziale di Yukawa

Consideriamo adesso il caso specifico del potenziale di Yukawa:

$$U(r) = -g \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad \mu > 0 \quad (8.32)$$

Questo soddisfa le ipotesi del teorema 1 e dunque è asintoticamente completo. In questo caso il fattore $1/r$ si semplifica e l'integrale converge grazie all'esponenziale:

$$\begin{aligned} f^{(1)}(p, \theta) &= -\frac{2m}{q\hbar} \int_0^\infty dr r U(r) \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) = \frac{2mg}{\hbar q} \int_0^\infty dr e^{-\mu r} \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) = \\ &= \frac{mg}{i\hbar q} \int_0^\infty dr e^{-\mu r} \left[\exp\left(i\frac{qr}{\hbar}\right) - \exp\left(-i\frac{qr}{\hbar}\right) \right] = \\ &= \frac{mg}{i\hbar q} \left(\frac{1}{\mu - i\frac{q}{\hbar}} - \frac{1}{\mu + i\frac{q}{\hbar}} \right) = \frac{mg}{i\hbar q} \frac{2i\frac{q}{\hbar}}{\mu^2 + (q/\hbar)^2} = \\ &= \frac{2mg}{\hbar^2} \frac{1}{\mu^2 + (q/\hbar)^2} = \frac{2mg}{4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \hbar^2 \mu^2} \end{aligned} \quad (8.33)$$

8.5.1 Potenziale Coulombiano

Notiamo come il potenziale di Yukawa si riduce al potenziale coulombiano per $\mu \rightarrow 0$:

$$U_c(r) = \lim_{\mu \rightarrow 0} U_\gamma(r) \Big|_{g=-q_1 q_2} \quad (8.34)$$

Potremmo dunque pensare di trovare ampiezza di scattering e sezione d'urto differenziale in approssimazione di Rutherford mandando $\mu \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} f_c^{(1)}(p, \theta) &= -\frac{mq_1 q_2}{2p^2 \sin^2(\theta/2)} \\ \frac{d\sigma_c^{(1)}}{d\Omega}(p, \theta) &= \left(\frac{mq_1 q_2}{2p^2 \sin^2(\theta/2)} \right)^2 \end{aligned} \quad (8.35)$$

In realtà il potenziale di Coulomb non è asintoticamente completo e infatti senza il fattore esponenziale l'integrale diverge. Pertanto a priori non ci aspettiamo che questo risultato sia corretto. Per questi tipi di potenziali si può comunque usare un metodo analitico ad hoc, che fornisce il seguente risultato esatto per l'ampiezza di scattering:

$$f_c(p, \theta) = -\frac{mq_1 q_2}{2p^2 \sin^2(\theta/2)} \exp\left(i\left(-\frac{mq_1 q_2}{\hbar p} \log\left(\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right) + 2\eta_0\right)\right) \quad \eta_0 = \arg \Gamma\left(1 + i\frac{mq_1 q_2}{\hbar p}\right) \quad (8.36)$$

Notiamo dunque che l'approssimazione di Born ottenuta "impropriamente" fornisce un risultato esatto a meno di una fase. Pertanto la sezione d'urto differenziale è esatta e in particolare coincide con la sezione d'urto differenziale di Rutherford.

Guardiamo poi cosa succede per grandi p . In questo limite si perde il contributo logaritmico nell'esponenziale. Inoltre l'argomento della funzione Gamma va ad 1, che ci permette di usare:

$$\Gamma(1) = 1 \Rightarrow \arg \Gamma(1) = 0 \Rightarrow \eta_0 = 0 \Rightarrow f_c(p, \theta) \xrightarrow{p \rightarrow \infty} f_c^{(1)}(p, \theta) \quad (8.37)$$

Pertanto l'approssimazione di Born ottenuta "impropriamente" fornisce comunque il risultato corretto a grandi distanze (non solo a meno di una fase).

Capitolo 9

Cenni ad Urti Anelastici

In questo capitolo facciamo alcuni cenni ad una teoria di scattering con urti anelastici, basata sulla Teoria delle Perturbazioni dipendenti dal tempo.

9.1 Generalità

Un tipico esempio di urto anelastico è quello di un elettrone che collide su un atomo ad un elettrone. Sia W l'energia dell'elettrone ed E_0, E_1, E_2 ($E_0 < E_1 < E_2$) le energie dei primi stati legati dell'atomo, che sta nello stato fondamentale. Supponiamo per semplicità che gli elettroni siano distinguibili.

Se $W < E_1 - E_0$ allora è possibile solo uno scattering elastico e dunque vale il discorso fatto finora dello scattering da potenziale, anche se in questo non è centrale a causa della presenza sia del nucleo che di un elettrone.

Se $E_1 - E_0 < W < E_2 - E_0$, o equivalentemente $E_1 < W + E_0 < E_2$, allora uno stato finale è possibile è uno in cui l'elettrone incidente cede energia $E_1 - E_0$ all'atomo, il quale rimane nel primo stato eccitato (stiamo nell'ipotesi di atomo fisso a causa della massa). In questo l'elettrone ha un'energia finale $W_f = W_i - (E_1 - E_0)$, e dunque il processo è anelastico e non può essere trattato come prima.

Notiamo poi che il processo è multi-canale, in quanto un canale è uno scattering elastico e il secondo canale è quello di scattering anelastico. Aumentando l'energia aumentano i possibili stati finali dell'atomo e dunque i canali dello scattering.

Chiaramente questo tipo di processo deve essere trattato con un formalismo diverso.

9.2 Teoria delle Perturbazioni Dipendenti dal Tempo

Nella teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo l'hamiltoniana è data da:

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_1(t) \quad (9.1)$$

con $\hat{\mathcal{H}}_1$ dell'ordine di λ , un parametro piccolo. Indichiamo con $u_r^{(0)}$ le autofunzioni di $\hat{\mathcal{H}}_0$ con autovalore $W_r^{(0)}$:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 u_r^{(0)} = W_r^{(0)} u_r^{(0)} \Rightarrow \psi_r^{(0)} = u_r^{(0)} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_r^{(0)} t\right) \quad (9.2)$$

Supponiamo che lo spettro sia puramente discreto e dunque gli autovettori normalizzabili. La soluzione generica alla TDSE per $\hat{\mathcal{H}}_0$ è data dunque da:

$$\psi^{(0)} = \sum_r c_r^{(0)} \psi_r^{(0)}(t) \quad (9.3)$$

Possiamo dunque cercare soluzioni per la TDSE per $\hat{\mathcal{H}}(t)$ usando il metodo di variazione delle costanti arbitrarie, che è valido in quanto le $u_r^{(0)}$ formano una base per lo spazio di Hilbert:

$$\psi(t) = \sum_r c_r(t) \psi_r^{(0)}(t) = \sum_r c_r(t) u_r^{(0)} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_r^{(0)} t\right) \quad (9.4)$$

Inserendo quest'ansatz nell'equazione di Schrodinger troviamo che devono soddisfare il seguente sistema di equazioni (s indice opportuno):

$$i\hbar \frac{dc_s}{dt} = \sum_r [\hat{\mathcal{H}}_1(t)]_{sr} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (W_s^{(0)} - W_r^{(0)}) t\right) c_r(t) \quad [\hat{\mathcal{H}}_1(t)]_{sr} = \langle u_s^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}_1(t) | u_r^{(0)} \rangle \quad (9.5)$$

Questa diventa un'equazione integrale data una condizione iniziale:

$$c_s(t) = c_s(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_r \int_0^t dt' [\hat{\mathcal{H}}_1(t')]_{st} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(W_s^{(0)} - W_r^{(0)})t\right) c_r(t') \quad (9.6)$$

Possiamo risolvere esplicitamente questa equazione per ogni s facendo l'ipotesi perturbativa, ossia i coefficienti possono espandersi in serie:

$$c_s(t) = \sum_n c^{(n)}(t) \quad c^{(n)}(t) = O(\lambda^n) \quad (9.7)$$

Tipicamente ci fermiamo al primo ordine, così che la serie diventa la somma di due termini, di cui il primo è indipendente dal tempo e coincide con i coefficienti che avrebbe ψ in assenza di perturbazioni:

$$c_s(t) = c_s^{(0)} + c_s^{(1)}(t) \quad (9.8)$$

Troviamo dunque:

$$c_s(t) = c_s^{(0)} - \frac{i}{\hbar} \sum_r c_r^{(0)} \int_0^t dt' [\hat{\mathcal{H}}_1(t')]_{sr} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(W_s^{(0)} - W_r^{(0)})t\right) \quad (9.9)$$

Tipicamente si assume la condizione iniziale di autostato imperturbato:

$$c_s^{(0)} = \delta_{sn} \quad (9.10)$$

In questo modo si trova:

$$\begin{aligned} c_n(t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\hat{\mathcal{H}}_1(t')]_{nn} \\ c_k(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\hat{\mathcal{H}}_1(t')]_{kn} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(W_k^{(0)} - W_n^{(0)})t\right) \quad k \neq n \end{aligned} \quad (9.11)$$

Notiamo che questa teoria non richiede che la perturbazione sia dipendente dal tempo. Nel caso di hamiltoniana indipendente dal tempo fornisce comunque migliori previsioni temporali più precisa della teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo. In questo caso possiamo integrare le equazioni, trovando:

$$\begin{aligned} c_n(t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}_1]_{nn} t \\ c_k(t) &= [\hat{\mathcal{H}}_1]_{kn} \frac{1}{W_k^{(0)} - W_n^{(0)}} \left[1 - \exp\left(\frac{i}{\hbar}(W_k^{(0)} - W_n^{(0)})t\right) \right] \quad k \neq n \end{aligned} \quad (9.12)$$

Troviamo dunque la probabilità di overlap con lo stato k -esimo ($k \neq n$):

$$P_k(t) = |c_k(t)|^2 = 4 \left| [\hat{\mathcal{H}}_1]_{kn} \right|^2 \frac{1}{(W_k^{(0)} - W_n^{(0)})^2} \sin^2\left(\frac{W_k^{(0)} - W_n^{(0)}}{2\hbar} t\right) \quad (9.13)$$

9.3 Regola d'Oro di Fermi

Supponiamo adesso che gli autovalori $W_r^{(0)}$ abbiano certa degenerazione che può essere descritta dagli autovalori K_j (nel caso di prima possiamo assumere che vi era comunque degenerazione e alcuni $W_r^{(0)}$ coincidevano). Gli autostati dell'hamiltoniana possono dunque essere indicizzati come segue:

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{H}}_0 |W_r^{(0)}, K_j\rangle = W_r^{(0)} |W_r^{(0)}, K_j\rangle \\ \hat{K} |W_r^{(0)}, K_j\rangle = K_j |W_r^{(0)}, K_j\rangle \end{cases} \quad (9.14)$$

Supponiamo poi che gli autovalori di $\hat{\mathcal{H}}_0$ siano sufficientemente da formare un sistema quasi-continuo, che può essere descritto dalla **densità di stati**:

$$dN(W^{(0)}, K_i) = \rho(W^{(0)}, K_j) dW^{(0)} \quad (9.15)$$

dove $dN(W^{(0)}, K_i)$ è il numero di stati che hanno energia tra $W^{(0)}$ e $W^{(0)} + dW^{(0)}$ con valore K_j della grandezza K . Indichiamo con W_0 l'energia di stato fondamentale (autovalori minimo) di $\hat{\mathcal{H}}_0$ e supponiamo che l'autovalore massimo sia $+\infty$, in modo che lo spettro sia $[W_0, +\infty)$. Come prima facciamo l'ipotesi perturbativa e supponiamo che lo stato iniziale sia un autostato di $\hat{\mathcal{H}}_0$ e \hat{K} :

$$c_s(t) = c_s^{(0)} + c_s^{(1)}(t) \quad c_s^{(0)} = \delta_{nn} \Rightarrow u_n^{(0)} = |W^{(0)}, K_j\rangle \quad (9.16)$$

La probabilità che al tempo t la grandezza K assuma il valore K_i è data dalla somma delle probabilità che il sistema abbia energia W , al variare di W in tutto lo spettro:

$$P(K_i|t) = \int_{W \geq W_0} dP(W, K_i|t) \quad (9.17)$$

D'altra parte la probabilità infinitesima coincide con il prodotto tra il numero di stati che hanno energia in $W, W + dW$ e la probabilità di overlap dello stato al tempo t con quello atteso, che abbiamo calcolato nella sezione precedente:

$$\begin{aligned} dP(W, K_i|t) &= dN(W, K_i) P\left(|W^{(0)}, K_j\rangle \rightarrow |W, K_i\rangle\right) = \\ &= dW \rho(W, K_i) 4 \left| \langle W, K_i | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \frac{1}{(W - W_n^{(0)})^2} \sin^2 \left(\frac{W - W_n^{(0)}}{2\hbar} t \right) \end{aligned} \quad (9.18)$$

Inseriamo questa nell'espressione della probabilità:

$$\begin{aligned} P(K_i|t) &= \int_{W_0}^{\infty} dW \rho(W, K_i) 4 \left| \langle W, K_i | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \frac{1}{(W - W_n^{(0)})^2} \sin^2 \left(\frac{W - W_n^{(0)}}{2\hbar} t \right) = \\ &= \int_{W_0}^{\infty} dW \rho(W, K_i) \left| \langle W, K_i | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 h(W, t) \end{aligned} \quad (9.19)$$

dove abbiamo definito la funzione $h(W, t)$:

$$h(W, t) = \frac{4}{(W - W_n^{(0)})^2} \sin^2 \left(\frac{W - W_n^{(0)}}{2\hbar} t \right) \quad (9.20)$$

Questa è una funzione con un picco centrato in $W_n^{(0)}$, larghezza \hbar/t e ampiezza $(t/2\hbar)^2$. Pertanto è una funzione che per valori di t sufficientemente grandi è molto stretta intorno a $W_n^{(0)}$. Questo significa che le altre funzioni nell'integrale sono sostanzialmente costanti dove contribuiscono e dunque possono essere portate fuori dall'integrale. Inoltre possiamo estendere l'integrale su tutto \mathbb{R} , così da calcolare una forma analitica particolarmente utile:

$$\begin{aligned} P(K_i|t) &= \rho(W_n^{(0)}, K_i) \left| \langle W_n^{(0)}, K_i | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \int_{W_0}^{\infty} dW h(W, t) = \\ &= \rho(W_n^{(0)}, K_i) \left| \langle W_n^{(0)}, K_i | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dW h(W, t) = \\ &= \rho(W_n^{(0)}, K_i) \left| \langle W_n^{(0)}, K_i | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dW h(W + W_n^{(0)}, t) = \\ &= 4\rho(W_n^{(0)}, K_i) \left| \langle W_n^{(0)}, K_i | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dW \frac{1}{W^2} \sin^2 \left(\frac{Wt}{2\hbar} \right) = \\ &= \frac{2t}{\hbar} \rho(W_n^{(0)}, K_i) \left| \langle W_n^{(0)}, K_i | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = \\ &= \frac{2\pi t}{\hbar} \rho(W_n^{(0)}, K_i) \left| \langle W_n^{(0)}, K_i | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (9.21)$$

Notiamo come questa formula ha validità limitata. Chiaramente infatti non fa predizioni per $t < 0$, in quanto fornisce una probabilità negativa. Inoltre non fa predizioni neanche per tempi troppo lunghi, in quanto cresce linearmente e dunque può superare anche 1, contro la conservazione della probabilità. Ciononostante è utile nel caso di una piccola perturbazione $\hat{\mathcal{H}}_1$ e fornisce il rate di transizione, che è costante nel tempo essendo la probabilità lineare. L'espressione del rate di transizione (al primo ordine perturbativo, in approssimazioni tempi "grandi") prende il nome di **regola d'oro di Fermi**:

$$\pi(K_i) = \frac{dP(K_i|t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(W_n^{(0)}, K_i) \left| \langle W_n^{(0)}, K_i | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 \quad (9.22)$$

Notiamo che una perturbazione indipendente dal tempo permette solo transizioni tra stati con uguale energia (la simmetria traslazionale temporale infatti implica conservazione dell'energia).

Notiamo inoltre che queste considerazioni continuano a valere anche se lo spettro $W_r^{(0)}$ è specificato da più grandezze \hat{K}_j . Inoltre più in generale \hat{K} potrebbe avere uno spettro discreto e dunque usiamo la densità di stati:

$$dN(W, K) = \rho(W, K) dW dK \quad (9.23)$$

In questo modo troviamo un rate di transizione per unità di K :

$$\pi(K) = \frac{dP(K|t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(W_n^{(0)}, K) \left| \langle W_n^{(0)}, K | \hat{\mathcal{H}}_1 | W_n^{(0)}, K_j \rangle \right|^2 dK \quad (9.24)$$

9.4 Scattering Elastico

Come prima applicazione possiamo cercare di fare previsioni di scattering elastico, verificando che troviamo risultati simili a quelli già ottenuti. In questo caso dunque il sistema è quello di una particella che ha come hamiltoniana imperturbata quella libera e il potenziale come perturbazione:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_1 \quad \hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad \hat{\mathcal{H}}_1 = U(\vec{x}) \quad (9.25)$$

Notiamo che $\hat{\mathcal{H}}_0$ ha uno spettro puramente continuo, che non ci permette di applicare i risultati precedenti in quanto ogni suo autovalore ha una densità infinita. Per ridurci alla situazione di prima possiamo usare l'artificio di ridurre lo spazio ad una regione finita, per semplicità quella di un cubo di lato L , ed imponiamo condizioni al contorno periodiche. Ci poniamo dunque nello spazio di Hilbert $\mathcal{L}^2(Q)$ con Q regione occupata dal cubo. Questo spazio è dato dalle funzioni periodiche a quadrato integrabile:

$$\mathcal{L}^2(Q) = \{ \psi(\vec{x}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) : \psi(\vec{x} + L\hat{x}_k) = \psi(\vec{x}) \} \quad (9.26)$$

In questo dominio l'operatore momento è limitato, ha spettro discreto e dunque i suoi autovettori, le onde piane, possono essere normalizzati:

$$D(\hat{p}_k) = \mathcal{L}^2(Q) = \mathcal{H} \quad \vec{p} = \frac{2\pi\hbar}{L}(n_1, n_2, n_3), \quad n_k \in \mathbb{Z} \quad u_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) \quad \int_Q d^3x |u_{\vec{p}}(\vec{x})|^2 = 1 \quad (9.27)$$

Da questo troviamo dunque uno spettro discreto per $\hat{\mathcal{H}}_0$. Lo spettro di $\hat{\mathcal{H}}_0$ è degenere e può essere specificato tramite due operatori equivalenti alla direzione del momento $\hat{\vec{p}}/|\hat{\vec{p}}|$. Infine per trovare la densità di stati basta notare che per grandi L il numero di stati $dN(E_p, K_1, K_2)$ che hanno momento contenuto nel volume d^3p è dato da:

$$d^3p = \left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^3 dN \Rightarrow dN = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 d^3p \quad (9.28)$$

In realtà noi siamo interessati al numero di stati per unità di energia ed angolo solido:

$$\begin{aligned} dN &= \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 d^3p = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 d\Omega p^2 dp = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 d\Omega \frac{p}{2} dp^2 = \\ &= \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 mp dW d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 m\sqrt{2mW} dW d\Omega \end{aligned} \quad (9.29)$$

da cui la densità di stati, che dipende dall'energia W e dalla direzione \hat{l} del momento dello stato:

$$\rho(W, \hat{l}) = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 mp = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 m\sqrt{2mW} \quad (9.30)$$

Possiamo ora applicare la regola d'oro di Fermi, ottenendo il rate di transizione per unità di angolo solido nella direzione \hat{l} :

$$\begin{aligned} \pi(\hat{l}) &= \frac{2\pi}{\hbar} \rho(W_0, \hat{l}) \left| \langle p_0 \hat{l} | \hat{\mathcal{H}}_1 | \vec{p}_0 \rangle \right|^2 d\Omega = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 mp_0 \frac{1}{L^6} \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_0 - p_0 \hat{l}) \cdot \vec{x}\right) \right|^2 d\Omega = \\ &= \frac{1}{L^3} \frac{mp_0}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_0 - p_0 \hat{l}) \cdot \vec{x}\right) \right|^2 d\Omega \end{aligned} \quad (9.31)$$

9.4.1 Sezione d'Urto

Cerchiamo adesso di collegare il rate di transizione alla sezione d'urto differenziale. Ricordiamo che questa è definita come:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = \frac{1}{n_{in}} \frac{dN_{sc}}{d\Omega} \quad (9.32)$$

con n_{in} flusso incidente ed $dN_{sc}(\Omega)$ numero di particella diffuse (per unità di tempo) con momento \vec{p}' nell'angolo solido $d\Omega$. Sia un flusso di particelle incidenti composto da un grande numero di particelle incidenti N_{in} e preparate nello stato $\psi^{(0)}$ con impulso \vec{p}_0 , che è adesso uno stato normalizzabile. Il flusso di particelle incidenti è dunque proporzionale al numero di particelle incidenti N_{in} e al flusso di probabilità nella direzione di propagazione \hat{p}_0 :

$$n_{in} = N_{in} \vec{S}^{(0)} \cdot \hat{p}_0 \quad (9.33)$$

dove $\vec{S}^{(0)}$ è il flusso di probabilità associato allo stato $\psi^{(0)}$. Si trova che questo è parallelo a \vec{p}_0 :

$$\vec{S}^{(0)}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2m\mathbf{i}} \left((\psi^{(0)})^* \nabla \psi^{(0)} - \psi^{(0)} \nabla (\psi^{(0)})^* \right) = \frac{\hbar}{2m\mathbf{i}} \frac{1}{L^3} \frac{\mathbf{i}}{\hbar} \vec{p}_0 = \frac{1}{L^3} \frac{\vec{p}_0}{m} \quad (9.34)$$

da cui:

$$n = \frac{N_{in}}{L^3} \frac{p_0}{m} \quad (9.35)$$

Il numero di particelle diffuse nell'angolo solido per unità di tempo coincide invece con la frazione di particelle incidenti che vengono diffuse, ossia il prodotto tra il rate di transizione e il numero di particelle incidenti totali:

$$\begin{aligned} dN_{sc} &= N_{in} \pi(\hat{l}) = N_{in} \frac{1}{L^3} \frac{mp_0}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) \exp\left(\frac{\mathbf{i}}{\hbar} (\vec{p}_0 - p_0 \hat{l}) \cdot \vec{x}\right) \right|^2 d\Omega = \\ &= \frac{m^2}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) \exp\left(\frac{\mathbf{i}}{\hbar} (\vec{p}_0 - p_0 \hat{l}) \cdot \vec{x}\right) \right|^2 n_{in} d\Omega \end{aligned} \quad (9.36)$$

Inserendo questo nella definizione di sezione d'urto troviamo infine:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = \frac{1}{\vec{S}^{(0)} \cdot \hat{p}_0} \frac{d\pi}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x U(\vec{x}) \exp\left(\frac{\mathbf{i}}{\hbar} (\vec{p}_0 - p_0 \hat{l}) \cdot \vec{x}\right) \right|^2 \quad (9.37)$$

Notiamo che questa coincide con quella che abbiamo ottenuto con l'approssimazione di Born, che d'altra parte non ci sorprende in quanto il metodo usato adesso è pure di natura perturbativa e troncato al primo ordine.

9.5 Urto di un Elettrone su un Atomo di Idrogeno

Consideriamo adesso il caso dell'urto di un elettrone su un atomo di idrogeno (simili discussione valgono anche per atomi idrogenoidi). In questo caso l'hamiltoniana imperturbata è la parte cinetica dell'elettrone inizialmente libero, la parte cinetica più quella del potenziale dell'elettrone inizialmente legato:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_2} \quad (9.38)$$

La perturbazione è invece l'interazione tra gli elettroni e tra l'elettrone incidente con il protone:

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = -\frac{e^2}{r_1} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (9.39)$$

Gli autostati di $\hat{\mathcal{H}}_0$ possono essere etichettati dal momento \vec{p} dell'elettrone incidente e dagli indici nlm che definiscono lo stato legato dell'altro elettrone. Come prima poi \vec{p} si suppone quasi-continuo se limitiamo il sistema (o meglio, l'elettrone libero) ad un cubo di lato L . Supponiamo che inizialmente l'elettrone abbia momento \vec{p} e l'elettrone atomico sia nello stato fondamentale, così che la funzione d'onda iniziale è data da:

$$u_{\vec{p},100}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp\left(\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_1\right) u_{100}(\vec{x}_2) \quad (9.40)$$

Vogliamo calcolare il rate di transizione allo stato:

$$u_{\vec{p}',nlm}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp\left(\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}_1\right) u_{nlm}(\vec{x}_2) \quad (9.41)$$

Siccome l'energia imperturbata si deve conservare allora deve risultare:

$$W^{(0)} = \frac{p^2}{2m} + E_1 = \frac{p'^2}{2m} + E_n \Rightarrow \frac{p^2}{2m} = W_i > E_n - E_1 \quad (9.42)$$

Questo è consistente con le considerazioni qualitative fatte a inizio capitolo. Il rate di transizione per unità di angolo solido è dato dunque da:

$$\pi(\hat{l}', nlm) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle W^{(0)}, nlm, \vec{p}' \right| \hat{\mathcal{H}}_1 \left| W^{(0)}, 100, \vec{p} \right\rangle \right|^2 \rho(W^{(0)}, nlm, \vec{p}') \quad (9.43)$$

Siccome vi è uno solo stato di singolo elettrone con numeri quantici nlm allora la densità coincide con quella trovata nel caso di prima:

$$\begin{aligned} \pi &= \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 m p' d\Omega \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle W^{(0)}, nlm, \vec{p}' \right| \hat{\mathcal{H}}_1 \left| W^{(0)}, 100, \vec{p} \right\rangle \right|^2 \\ &= \frac{d\Omega}{L^3} \frac{m}{(2\pi\hbar^2)^2} p' \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \int_Q d^3x_2 \exp\left(-\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}_1\right) u_{nlm}^*(\vec{x}_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_1} \right) \exp\left(\frac{\mathbf{i}}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_1\right) u_{100}(\vec{x}_2) \right|^2 \end{aligned} \quad (9.44)$$

Il flusso di probabilità nella direzione di incidenza dell'elettrone (del fascio degli elettroni) invece è dato da:

$$\vec{S}^{(0)} \cdot \hat{p} = \frac{1}{L^3} \frac{p}{m} \quad (9.45)$$

Dall'espressione di prima della sezione d'urto ricaviamo dunque:

$$\frac{d\sigma_{nlm}}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{p'}{p} \left| \int_Q d^3x_1 \int_Q d^3x_2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}_1\right) u_{nlm}^*(\vec{x}_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_1} \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_1\right) u_{100}(\vec{x}_2) \right|^2 \quad (9.46)$$

dove $d\sigma_{nlm}$ è la sezione d'urto relativa a stati che lasciano l'atomo nello stato nlm . Estendiamo ora l'integrale a tutto \mathbb{R}^3 facendo attenzione all'integrazione delle onde piane, che possiamo trovare passando al potenziale di Yukawa e mandando μ a zero:

$$\frac{d\sigma_{nlm}}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{p'}{p} \left| \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 e^{-\mu r_1} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}_1\right) u_{nlm}^*(\vec{x}_2) \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_1} \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_1\right) u_{100}(\vec{x}_2) \right|^2 \quad (9.47)$$

Calcoliamo prima l'elemento di matrice di $1/r_1$ e poi di $1/r_{12}$. Nel primo caso notiamo che $1/r_1$ non agisce sulla parte dipendente da \vec{x}_2 e dunque possiamo usare l'ortogonalità degli stati:

$$\begin{aligned} &= \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 e^{-\mu r_1} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}_1\right) u_{nlm}^*(\vec{x}_2) \left(\frac{1}{r_1} \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_1\right) u_{100}(\vec{x}_2) = \\ &= \delta_{n1} \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \frac{1}{r_1} e^{-\mu r_1} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{x}_1\right) = \\ &= \delta_{n1} \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_0^\infty dr r^2 \int_0^{2\pi} d\beta \int_{-1}^1 d(\cos \alpha) \frac{1}{r} e^{-\mu r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} q r \cos \alpha\right) = \\ &= 2\pi \delta_{n1} \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_0^\infty dr r e^{-\mu r} \frac{1}{i \frac{q}{\hbar}} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} q r\right) - \exp\left(-\frac{i}{\hbar} q r\right) \right] = \\ &= \frac{2\pi \delta_{n1}}{i \frac{q}{\hbar}} \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_0^\infty dr e^{-\mu r} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} q r\right) - \exp\left(-\frac{i}{\hbar} q r\right) \right] = \\ &= \frac{2\pi \delta_{n1}}{i \frac{q}{\hbar}} \lim_{\mu \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\mu - i \frac{q}{\hbar}} - \frac{1}{\mu + i \frac{q}{\hbar}} \right) = \frac{2\pi \delta_{n1}}{i \frac{q}{\hbar}} \frac{2i}{\frac{q}{\hbar}} = \\ &= \frac{4\pi \hbar^2 \delta_{n1}}{q^2} = \frac{4\pi \hbar^2}{|\vec{p} - \vec{p}'|^2} \delta_{n1} \end{aligned} \quad (9.48)$$

Possiamo dire impropriamente che:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \frac{1}{|\vec{x}|} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{x}\right) = \frac{4\pi \hbar^2}{|\vec{q}|^2} \quad (9.49)$$

Per $1/r_{12}$ ci conviene fare un cambiamento di variabile, ossia una traslazione di $\vec{x}_1 \rightarrow \vec{x}_1 - \vec{x}_2$, che non cambia l'integrale visto che è fatto su tutto \mathbb{R}^3 :

$$\begin{aligned} &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}_1\right) u_{nlm}^*(\vec{x}_2) \left(\frac{1}{r_{12}} \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_1\right) u_{100}(\vec{x}_2) = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_1 \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}_1\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}_1\right) = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{x}_2\right) \int_{\mathbb{R}^3} d^3y \frac{1}{|\vec{y}|} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{y}\right) = \\ &= \frac{4\pi \hbar^2}{|\vec{p} - \vec{p}'|^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{x}_2\right) \end{aligned} \quad (9.50)$$

Notiamo dunque che nel caso anelastico $n > 1$ contribuisce solo l'interazione gli elettroni alla probabilità di overlap. Senza fare ulteriori calcoli, in tal caso otteniamo la seguente espressione per la sezione d'urto differenziale:

$$\frac{d\sigma_{nlm}}{d\Omega}(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = \frac{4m_e^2 e^4}{|\vec{p} - \vec{p}'|^4} \frac{p'}{p} \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3x_2 u_{nlm}^*(\vec{x}_2) u_{100}(\vec{x}_2) \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{x}_2\right) \right|^2 \quad (9.51)$$

Parte II

Questioni Fondamentali di Meccanica Quantistica

Capitolo 10

Entanglement

In questo capitolo parliamo di stati particolari, di natura esclusivamente quantistica, che si possono presentare per sistemi quantistici composti da più particelle.

10.1 Sistemi di N Particelle

10.1.1 Fisica Classica

In fisica classica lo stato di una particella è individuato da un punto nello spazio delle fasi $q \in \Gamma$. Tipicamente si sceglie la rappresentazione in $\Gamma = \mathbb{R}^6$, ma è possibile anche restringersi ad un sottoinsieme opportuno. In questo modo identifichiamo le prime tre componenti come la posizione e le seconde tre come il momento $q = (\vec{x}, \vec{p})$.

Per un sistema di particelle lo spazio è il prodotto cartesiano degli spazi delle fasi rispettivi $\Gamma_1 \times \Gamma_2$. Si generalizza così facilmente al caso di N particelle.

Notiamo come in questo caso uno stato del sistema è equivalente ad una coppia di stati di singola particella $q = (q_1, q_2)$. Altrimenti detto, per ogni stato del sistema si possono identificare gli stati delle singole particelle che lo compongono.

10.1.2 Fisica Quantistica

In fisica quantistica gli stati sono vettori appartenenti ad uno spazio di Hilbert, tipicamente a dimensione infinita (ma comunque separabile).

$$u \in V \iff q \in \Gamma \quad (10.1)$$

Ci chiediamo ora qual'è lo spazio degli stati del sistema di due particelle e se vi è possibile fare una corrispondenza biunivoca tra stati del sistema e stati di singola particella.

Come prima potremmo immaginare di usare il prodotto cartesiano $V \times W$, ossia ogni elemento è della forma $u \times w$ dove $u \in V$ e $w \in W$. Affinchè questo sia uno spazio appropriato deve essere a sua volta uno spazio di Hilbert, ossia uno spazio con operazioni di addizione, prodotto con scalare (esterno) e prodotto interno o scalare, ossia una forma sesquilineare. Potremmo dunque definire l'addizione nel modo seguente:

$$u_1 \times w + u_2 \times w = (u_1 + u_2) \times w \quad u \times w_1 + u \times w_2 = u \times (w_1 + w_2) \quad (10.2)$$

Tuttavia troviamo che in generale non è ben definita l'addizione, ossia non è valido il principio di sovrapposizione, in quanto la somma di due stati prodotto in generale non si può scrivere come prodotto:

$$u_1 \times w_1 + u_2 \times w_2 = ? \quad (10.3)$$

Questo significa che il prodotto cartesiano non descrive lo stato di un sistema di particelle e dobbiamo elaborare una struttura più completa.

10.2 Prodotto Tensoriale di Spazi di Hilbert

La sezione precedente rende chiaro come un semplice prodotto cartesiano non possa includere tutti gli stati del sistema di due particelle. In particolare sembrano esistere stati che non si possono scrivere come prodotto di due stati, così che non ha senso associare uno stato ad una singola particella. Tali stati sono detti **entangled** e il fenomeno legato all'esistenza

di questi stati è detto (quantum) **entanglement**. Siano V, W spazi di Hilbert per semplicità finito-dimensionali, con dimensione $\dim V = N_1, \dim W = N_2$. Fissiamo due basi ortonormali:

$$(e_1, \dots, e_{N_1}); \langle e_i, e_j \rangle_1 = \delta_{ij} \quad (f_1, \dots, f_{N_2}); \langle f_k, f_l \rangle = \delta_{kl} \quad (10.4)$$

Definiamo **prodotto tensoriale** $V \otimes W$ uno spazio vettoriale per cui esiste un'applicazione bilineare $\otimes: V \times W \mapsto V \otimes W$ tale che $(e_i \otimes f_k)$ con $i = 1, \dots, N_1; k = 1, \dots, N_2$ è una base ortonormale per $V \otimes W$. Questo spazio è fissato a meno di isomorfismi se richiediamo la **Proprietà Universale**, ossia per ogni spazio vettoriale X vi è una corrispondenza biunivoca tra le applicazioni bilineari $V \times W \rightarrow X$ e $V \times W \rightarrow V \otimes W$. Questo significa che ogni elemento di $V \otimes W$ si scrive come combinazione lineare:

$$\psi = \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{k=1}^{N_2} c_{ik} e_i \otimes f_k \quad (10.5)$$

Inoltre per ogni vettore u, w è ben definito l'elemento:

$$\otimes: (u, w) \rightarrow u \otimes w \quad (10.6)$$

Questo spazio vettoriale diventa uno spazio di Hilbert se equipaggiato con il seguente prodotto scalare, che si verifica facilmente essere una forma sesquilineare definita positiva:

$$\langle u_1 \otimes w_1, u_2 \otimes w_2 \rangle = \langle u_1, u_2 \rangle_1 \langle w_1, w_2 \rangle_2 \quad (10.7)$$

Per verificare che è sesquilineare basta infatti inserire due combinazioni lineari di stati prodotto. Questa dimostrazione è generale in quanto gli stati prodotto sono una base per il prodotto tensoriale.

10.2.1 Esistenza degli Stati Entangled

Dimostriamo adesso che effettivamente esistono stati non prodotto in $V \otimes W$, ossia l'operazione \otimes non è invertibile. Sia $\psi \in V \otimes W$, allora esistono e sono unici i coefficienti c_{ik} tali che:

$$\psi = \sum_{ik} c_{ik} e_i \otimes f_k \quad (10.8)$$

Notiamo dunque che per specificare un vettore sono necessari $N_1 \cdot N_2$ coefficienti, così che $\dim(V \otimes W) = N_1 \cdot N_2$. Sia ϕ fattorizzabile, esistono dunque $u \in V, w \in W$ tali che:

$$\phi = u \otimes w = \left(\sum_i c_i e_i \right) \otimes \left(\sum_k d_k f_k \right) = \sum_{ik} c_i d_k e_i \otimes f_k \quad (10.9)$$

Il numero di coefficienti necessari a specificare uno stato normalizzabile è al più $N_1 + N_2$, che è in generale minore di $N_1 \cdot N_2$. Questo dimostra che esistono stati di un sistema quantistico che non sono prodotto, ossia **esistono gli stati entangled** per un sistema generico.

Notiamo però che per la bilinearità del prodotto tensoriale i fattori u e w sono determinati a meno di un fattore:

$$\phi = u \otimes w = (au) \otimes \left(\frac{w}{a} \right) \quad (10.10)$$

Infatti anche i coefficienti sono determinati a meno di una costante:

$$\begin{cases} c_i \rightarrow \tilde{c}_i = a c_i \\ d_k \rightarrow \tilde{d}_k = \frac{d_k}{a} \end{cases} \Rightarrow c_{ik} = c_i d_k = \tilde{c}_i \tilde{d}_k \quad (10.11)$$

Se questo è verificato allora la varietà degli spazi \mathcal{D} prodotto ha dimensione $N_1 + N_2 - 1$.

Questa arbitrarietà si perde però se uno dei due spazi ha dimensione 1. Infatti in tal caso lo stato generico è di tipo prodotto per la bilinearità:

$$\psi = \sum_k c_k e \otimes f_k = e \otimes \left(\sum_k c_k f_k \right) = (e) \otimes w \quad (10.12)$$

Pertanto in tal caso $\dim(\mathcal{D}) = \dim(V \otimes W)$. Questo ci porta dunque ai seguenti esempi relativi alle dimensioni:

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
3	3	9	5

In particolare il penultimo caso è equivalente a quello di un sistema di due particelle a spin $1/2$ (trascurando la parte orbitale), il cui spazio ha quattro dimensioni, ossia $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \cong \mathbb{C}^4$.

Infinite Dimensioni

Se gli spazi di Hilbert sono a dimensioni infinite la situazione si complica ma comunque ricorda quella a dimensione finita.

Un caso interessante è quello di funzioni a quadrato integrabile su sottoinsiemi di \mathbb{R}^n (anche con diversi n). In tal caso per il teorema di Fubini si può dimostrare che:

$$\mathcal{L}^2(X) \otimes \mathcal{L}^2(Y) = \mathcal{L}^2(X \times Y) \quad X \subseteq \mathbb{R}^n, Y \subseteq \mathbb{R}^m \quad (10.13)$$

Infatti possiamo definire l'applicazione bilineare \otimes puntualmente come il prodotto tra funzioni:

$$\otimes: (f, h) \in \mathcal{L}^2(X) \times \mathcal{L}^2(Y) \mapsto f \otimes h \in \mathcal{L}^2(X \times Y) \quad (f \otimes h)(x, y) = f(x) \cdot h(y) \quad (10.14)$$

Questa è ben definita in quanto il prodotto di funzioni a quadrato integrabile è ancora a quadrato integrabile:

$$\int_{X \times Y} d^2x |f \otimes h(\vec{x})|^2 = \int_X dx |f(x)|^2 \int_Y dy |h(y)|^2 < \infty \Rightarrow f \otimes h \in \mathcal{L}^2(X \times Y) \quad (10.15)$$

Si trova poi banalmente che date due basi f_n ed h_k sui rispettivi spazi di Hilbert allora $f_n(x)h_k(y)$ è una base per $\mathcal{L}^2(X \times Y)$. Si dimostra poi la validità della proprietà universale, che permette infine l'identificazione $\mathcal{L}^2(X \times Y) = \mathcal{L}^2(X) \times \mathcal{L}^2(Y)$.

Notiamo come gli stati prodotto $f(x) \cdot h(y)$ sono funzioni molto particolari e dunque sono "rare" rispetto a funzioni generiche. Questa tendenza si vede già a dimensione finita. Prendendo ad esempio $N_1 = N_2 = N > 1$ allora:

$$\dim(V \otimes W) = N^2 \quad \dim(\mathcal{D}) = 2N - 1 \quad (10.16)$$

Pertanto per $N \rightarrow \infty$ la dimensione della varietà degli stati prodotto è "trascurabile" (di ordine inferiore) rispetto a quella dell'intero prodotto tensoriale degli spazi.

Un caso particolare è quello dello spazio di Hilbert di una particella che si muove in tre dimensioni, che è equivalente al sistema di tre particelle che si muovono in una dimensione:

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \quad (10.17)$$

10.2.2 Prodotto Tensoriale di Operatori

Indichiamo con $\mathcal{L}(V), \mathcal{L}(W)$ gli spazi degli operatori lineari su V, W rispettivamente. Possiamo estendere l'azione degli operatori sul prodotto tensoriale a partire dagli stati prodotto:

$$\hat{A} \in \mathcal{L}(V), \hat{B} \in \mathcal{L}(W) \quad \hat{A}(u \otimes w) = (\hat{A}u) \otimes w \quad \hat{B}(u \otimes w) = u \otimes (\hat{B}w) \quad (10.18)$$

Possiamo poi estendere per linearità ad ogni altro stato.

Inoltre possiamo definire il **prodotto tensoriale di operatori**:

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})(u \otimes w) = (\hat{A}u) \otimes (\hat{B}w) \quad (10.19)$$

estendendo per linearità agli stati non prodotto. Pertanto in realtà nell'estendere un operatore sullo spazio di una particella allo spazio di un sistema troviamo:

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A} \otimes \mathbb{1}_W \quad \hat{B} \rightarrow \mathbb{1}_V \otimes \hat{B} \quad (10.20)$$

Questo prodotto si comporta poi in maniera naturale rispetto a combinazioni lineari di operatori:

$$\begin{aligned} \alpha(\hat{A} \otimes \hat{B}) &= (\alpha\hat{A}) \otimes \hat{B} = \hat{A} \otimes (\alpha\hat{B}) \\ \hat{A} \otimes \hat{B} + \hat{A}' \otimes \hat{B} &= (\hat{A} + \hat{A}') \otimes \hat{B} \\ \hat{A} \otimes \hat{B} + \hat{A} \otimes \hat{B}' &= \hat{A} \otimes (\hat{B} + \hat{B}') \end{aligned} \quad (10.21)$$

Analogamente anche per i prodotti:

$$(\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_1) \cdot (\hat{A}_2 \otimes \hat{B}_2) = (\hat{A}_1 \hat{A}_2) \otimes (\hat{B}_1 \hat{B}_2) \quad (10.22)$$

Notiamo che nelle combinazioni lineari e nel prodotto, per operatori del tipo $\hat{A} \otimes \mathbb{1}$ o $\mathbb{1} \otimes \hat{B}$ possiamo "dimenticarci" dell'identità se ricordiamo il dominio iniziale. Pertanto scriviamo semplicemente:

$$\hat{A} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{B} = \hat{A} + \hat{B} \quad (\hat{A} \otimes \mathbb{1}) \cdot (\mathbb{1} \otimes \hat{B}) = \hat{A}\hat{B} \quad (10.23)$$

10.3 Spazio di due Particelle a Spin 1/2

Il caso più semplice di sistema di particelle non banale, ossia in cui tutti gli stati non sono fattorizzabili, è il sistema di due particelle a spin 1/2 di cui trascuriamo i gradi di libertà orbitali. In questo i singoli spazi hanno dimensione due e dunque il prodotto tensoriale ha dimensione 4. Il generico elemento è dunque una combinazione lineare di quattro vettori:

$$\psi = a_{11}e_1 \otimes f_1 + a_{12}e_1 \otimes f_2 + a_{21}e_2 \otimes f_1 + a_{22}e_2 \otimes f_2 \quad (10.24)$$

Notiamo dunque che uno stato è equivalente ad una matrice (ossia fissiamo un isomorfismo tra le matrici 2×2 e il prodotto tensoriale):

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad (10.25)$$

Uno stato fattorizzabile (non entangled) è uno per cui esistono coefficienti a_1, a_2 e b_1, b_2 tali che:

$$\begin{aligned} \psi_A &= (a_1e_1 + a_2e_2) \otimes (b_1f_1 + b_2f_2) = \\ &= a_1b_1e_1 \otimes f_1 + a_1b_2e_1 \otimes f_2 + a_2b_1e_2 \otimes f_1 + a_2b_2e_2 \otimes f_2 \end{aligned} \quad (10.26)$$

Notiamo dunque che la matrice associata ha determinante nullo:

$$\det(A) = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = a_1b_1a_2b_2 - a_1b_2a_2b_1 = 0 \quad (10.27)$$

Dimostriamo adesso che questa condizione sul determinante caratterizza gli stati fattorizzabili. Supponiamo dunque sia valido:

$$\det(A) = 0 \iff a_{11}a_{22} = a_{12}a_{21} \quad (10.28)$$

Consideriamo il caso (I) $a_{11} = 0$, che implica $a_{12}a_{21} = 0$. Escludendo il vettore nullo, sono possibili separatamente i due casi (Ia) $a_{12} = 0$ e (Ib) $a_{21} = 0$. In questi due casi troviamo che il vettore è fattorizzabile:

$$\psi_A = \begin{cases} a_{21}e_2 \otimes f_1 + a_{22}e_2 \otimes f_2 = e_2 \otimes (a_{21}f_1 + a_{22}f_2) & (Ia) \\ a_{12}e_2 \otimes f_1 + a_{22}e_2 \otimes f_2 = (a_{21}e_1 + a_{22}e_2) \otimes f_2 & (Ib) \end{cases} \quad (10.29)$$

Consideriamo poi il caso $a_{11} \neq 0$, che permette di scrivere:

$$a_{22} = \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} \quad (10.30)$$

Da cui:

$$\begin{aligned} \psi_A &= a_{11}e_1 \otimes f_1 + a_{12}e_1 \otimes f_2 + a_{21}e_2 \otimes f_1 + \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}}e_2 \otimes f_2 \\ a_{11}\psi_A &= a_{11}^2e_1 \otimes f_1 + a_{11}a_{12}e_1 \otimes f_2 + a_{11}a_{21}e_2 \otimes f_1 + a_{12}a_{21}e_2 \otimes f_2 \end{aligned} \quad (10.31)$$

Il nuovo vettore è dunque chiaramente fattorizzabile se poniamo:

$$a_1 = b_1 = a_{11} \quad a_2 = b_2 = a_{12} \quad a_{21} = a_{21} \quad (10.32)$$

Ma se è fattorizzabile $a_{11}\psi_A$ allora è fattorizzabile anche ψ_A essendo i due vettori proporzionali.

Questa caratterizzazione continua a valere anche per dimensioni $N_1 = N_2 = N$ arbitrarie, ma perde di significato a dimensione infinita. Vedremo che esiste comunque una condizione che caratterizza gli stati prodotto (e dunque entangled per negazione di tale condizione).

10.4 Base di Bell

10.4.1 Notazione

Siccome vogliamo studiare legate all'entanglement ci chiediamo adesso se possiamo costruire una base di soli stati entangled a partire da una di stati prodotto. Ci limitiamo sempre al caso $N_1 = N_2 = 2$ che si riconduce al sistema di particelle a spin 1/2. Usiamo dunque la più utile notazione di Dirac:

$$e_1 = |+\rangle_1 \quad e_2 = |-\rangle_1 \quad f_1 = |+\rangle_2 \quad f_2 = |-\rangle_2 \quad (10.33)$$

In notazione di Dirac si usano spesso le seguenti notazioni equivalenti, a seconda del caso:

$$|\psi\rangle_1 \otimes |\phi\rangle_2 = |\psi\rangle_1 |\phi\rangle_2 = |\psi, \phi\rangle \quad (10.34)$$

Notiamo che mantenendo gli indici allora il prodotto tensoriale può essere usato simmetricamente:

$$|\psi\rangle_1 \otimes |\phi\rangle_2 = |\phi\rangle_2 \otimes |\psi\rangle_1 \quad (10.35)$$

Pertanto si sottintende che $|\psi\rangle_1 \in \mathcal{H}_1$ e $|\phi\rangle_2 \in \mathcal{H}_2$. L'ordine è in realtà importante solo se $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2$, in quanto altrimenti è chiaro che i vettori sono di "natura diversa" (ad esempio uno è relativo allo spin $\mathcal{H}_1 = \mathbb{C}^2$ e un altro alla parte orbitale $\mathcal{H}_2 = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$). Per indicare il funzionale lineare (vettore riga) associato ad un tale vettore semplicemente scambiamo "ket" in "bra":

$$|\psi\rangle_1 \otimes |\phi\rangle_2 \rightarrow \langle\psi|_1 \otimes \langle\phi|_2 \quad (10.36)$$

Se usiamo la notazione compatta $|\psi, \phi\rangle$ allora cercheremo di usare la convenzione $|\psi, \phi\rangle \rightarrow \langle\psi, \phi|$. Questa notazione vale per prodotti tensoriali generici, non solo per sistemi di spin.

10.4.2 Definizione degli Stati

Vogliamo adesso definire degli stati che verifichiamo essere una base ortonormale. Per fare questo dobbiamo ricordare le matrici di Pauli:

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (10.37)$$

Pertanto nella base $|+\rangle, |-\rangle$ queste agiscono come segue:

$$\begin{aligned} \sigma_1 |+\rangle &= |-\rangle & \sigma_1 |-\rangle &= |+\rangle \\ \sigma_2 |+\rangle &= i |-\rangle & \sigma_2 |-\rangle &= -i |+\rangle \\ \sigma_3 |+\rangle &= |+\rangle & \sigma_3 |-\rangle &= -|-\rangle \end{aligned}$$

Notiamo che queste matrici sono tutti hermitiane e a traccia nulla. Inoltre vale l'identità:

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (10.38)$$

Nel caso $i = j$ questo si riduce al fatto che le matrici di Pauli sono involutive:

$$\sigma_i^2 = 1 \quad (10.39)$$

Siccome lo spazio ha quattro dimensioni allora definiamo la "quarta" matrice di Pauli come l'identità:

$$\sigma_0 = \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (10.40)$$

Iniziamo col definire il primo stato:

$$|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, +\rangle + |-, -\rangle) \quad (10.41)$$

Questo è chiaramente normalizzato e ha come matrice dei coefficienti una proporzionale all'identità:

$$\langle\phi|\phi\rangle_0 = \frac{1}{2}(\langle+, +|+, +\rangle + \langle-, -|-, -\rangle) = \frac{1}{2}(1 + 1) = 1 \quad A_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbb{1} \quad (10.42)$$

Definiamo gli altri stati usando la matrice di Pauli:

$$|\phi_i\rangle = (\mathbb{1} \otimes \sigma_i) |\phi_0\rangle \quad i = 1, 2, 3 \quad (10.43)$$

Troviamo in questo modo:

$$\begin{aligned} |\phi_1\rangle &= (\mathbb{1} \otimes \sigma_1) |\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle + |-, +\rangle) \\ |\phi_2\rangle &= (\mathbb{1} \otimes \sigma_2) |\phi_0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle) \\ |\phi_3\rangle &= (\mathbb{1} \otimes \sigma_3) |\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, +\rangle - |-, -\rangle) \end{aligned} \quad (10.44)$$

Verifichiamo l'ortogonalità di questi tre stati con il primo, usando la proprietà che la traccia è nulla:

$$\begin{aligned} \langle\phi_i|\phi_0\rangle &= \langle\phi_0|\mathbb{1} \otimes \sigma_i|\phi_0\rangle = \frac{1}{2}(\langle+, +| \langle+|\sigma_i|+ \rangle + \langle-, -| \langle-|\sigma_i|- \rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(\langle+|\sigma_i|+ \rangle + \langle-|\sigma_i|- \rangle) = \frac{1}{2} \text{Tr}\{\sigma_i\} = 0 \end{aligned} \quad (10.45)$$

Mentre l'ortonormalizzazione per questi tre vettori è garantita dall'altra identità:

$$\begin{aligned}\langle \phi_i | \phi_j \rangle &= \langle \phi_0 | (1 \otimes \sigma_i)(1 \otimes \sigma_j) | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | 1 \otimes (\sigma_i \sigma_j) | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | 1 \otimes (\delta_{ij} + \varepsilon_{ijk} \sigma_k) | \phi_0 \rangle = \\ &= \delta_{ij} \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle + \mathbf{i} \varepsilon_{ijk} \langle \phi_0 | 1 \otimes \sigma_k | \phi_0 \rangle = \delta_{ij}\end{aligned}\quad (10.46)$$

Questa si riassume usando l'indice greco:

$$\langle \phi_\mu | \phi_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu} \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3 \quad (10.47)$$

Pertanto gli stati di Bell $|\phi_\mu\rangle$ formano una base, detta per l'appunto **base di Bell**. Possiamo poi anche invertire la trasformazione, tornando alla base prodotto con i seguenti coefficienti:

$$\begin{aligned}|+, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_0\rangle + |\phi_3\rangle) \\ |-, -\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_0\rangle - |\phi_3\rangle) \\ |+, -\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle - \mathbf{i}|\phi_2\rangle) \\ |-, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle + \mathbf{i}|\phi_2\rangle)\end{aligned}\quad (10.48)$$

In generale uno stato sarà invece una loro combinazione lineare:

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu} c_{\mu} |\phi_{\mu}\rangle \quad (10.49)$$

Chiamiamo **misura di Bell** una misura su questa base, che ha una probabilità $|c_{\mu}|^2$ di ottenere lo stato $|\phi_{\mu}\rangle$.

Notiamo che questa base si sarebbe potuta ottenere, a meno di normalizzazioni, come la base degli autostati di $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_3$ (ed S^2) nel caso di particelle a spin 1/2, con la richiesta che tutti gli stati hanno simmetria ben definita. Per distinguere i quattro stati come vedremo saranno in realtà necessarie misure di tutte (o quasi) le direzioni dello spin.

Capitolo 11

Teletrasporto

11.1 Generalità

Negli anni '50, all'interno della nota serie televisiva *Star Trek*, si faceva uso di un processo di **"teletrasporto"** di un oggetto fisico. Questo era permesso dall'uso di due stazioni, dove in una l'oggetto veniva distrutto e nell'altro ricreato perfettamente. In realtà questo processo era stato ipotizzato ben prima, ma è di particolare interesse nel caso quantistico, che adesso studiamo.

11.1.1 Fisica Classica

Iniziamo col considerare in che forma potrebbe avvenire il teletrasporto in fisica classica.

Abbiamo due stazioni A, B separate spazialmente. Abbiamo un oggetto O nella stazione A . Vogliamo fare viaggiare da A dell'informazione relativa ad O che consenta a B di ricreare il corpo O .

In fisica classica un corpo è costituito da un numero e tipo ben definito di atomi con un ben definito stato microscopico. In principio, se potessimo conoscere posizione e momento di tutti i corpi e con perfetta precisione, allora potremmo essere in grado di ricomporre O ri assemblando atomi identici nella stessa configurazione.

In realtà ogni misura è affetta da errore e dunque è impossibile conoscere perfettamente la configurazione dell'oggetto. Pur disponendo di un tale apparato di misura ideale sarebbe comunque necessario un numero infinito di bit per descrivere la coordinate di un solo atomo, e dunque una quantità infinita di informazione. Pertanto in fisica classica risulta impossibile anche nel caso ideale poter fare il teletrasporto anche di una singola particella, a meno di poter trattenere un'informazione infinita. Risulterebbe però comunque possibile un teletrasporto "approssimato" ad un certo numero di bit per ciascuna particella che compone il corpo considerato.

Questo richiede poi che sia possibile effettivamente considerare un atomo o una molecola come una particella perfetta, ma sappiamo che la teoria atomica e la meccanica quantistica non essere così. Pertanto già questo ostacolo ci ferma dal discutere ulteriormente del teletrasporto in meccanica classica.

11.1.2 Fisica Quantistica

In fisica quantistica il problema cambia. Denotiamo con C il nostro sistema, e ci limitiamo per semplicità che questo sia lo spin di una particella. Lo stato sarà descritto dunque da:

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle_C + \beta|-\rangle_C \quad (11.1)$$

Nuovamente abbiamo due stazioni A, B , dove si trovano Alice e Bob rispettivamente. Il teletrasporto avviene se Bob ottiene una copia di $|\psi\rangle$ per un'altra particella, senza dover spostare fisicamente quella di Alice.

Inizialmente Alice sa solo che C sta in uno stato quantomeccanico, ma non conosce i suoi coefficienti.

Una possibilità di effettuare il teletrasporto della particella potrebbe dunque essere quella di misurare i coefficienti α, β e comunicarli a Bob, che poi ricrea lo stato. Tuttavia in meccanica quantistica il risultato della misura è probabilistico e la misura distrugge lo stato iniziale. Per determinare i coefficienti α, β (a meno di una fase) sarebbe necessario fare un numero infinito di misure su infinite copie del sistema quantistico, ossia un ensemble di particelle nello stesso stato. Per fare questo dovremmo dunque disporre di una "macchina di clonaggio" che fornisce copie del sistema iniziale.

Notiamo che anche stavolta incorriamo nel problema dell'informazione infinita, in quanto lo stato è individuato in realtà da due parametri reali (ad esempio il modulo di un coefficiente e la differenza di fase tra i coefficienti). Trascuriamo questo dettaglio, in quanto in principio potremmo costruire uno strumento capace di immagazzinare un numero finito di informazioni.

11.2 Teorema No Cloning

In realtà possiamo dimostrare che esiste un teorema *no-go* che proibisce l'esistenza di una tale macchina. Questa è una conseguenza della conservazione della probabilità, sotto forma dell'unitarietà dell'evolvente temporale generato dall'hamiltoniana del sistema.

Teorema 5 (Teorema No Cloning). *Non esiste una macchina M capace di clonare qualunque stato di un sistema quantistico.*

Dimostrazione. Sia la particella C nello stato $|\psi\rangle$ e un dispositivo M nello stato $|\phi_0\rangle$. Lo stato iniziale del sistema è dunque:

$$|\psi\rangle \otimes |\phi_0\rangle \quad (11.2)$$

La macchina è capace, dopo un certo tempo, di duplicare C , così che il sistema finale sta nello stato $|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$, ossia il vettore finale è questo a meno di una fase:

$$e^{i\alpha} |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle \quad (11.3)$$

Per i postulati della meccanica quantistica lo stato finale e iniziale sono legati tra loro da un evolvente temporale, ossia un operatore unitario:

$$U |\psi\rangle \otimes |\phi_0\rangle = e^{i\alpha} |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle, \quad \forall |\psi\rangle \quad UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1} \quad (11.4)$$

Verifichiamo adesso che un tale operatore non può esistere. Intuitivamente già ce lo aspettiamo per il fatto che nella trasformazione sono perse tutte le informazioni relative a ϕ_0 e quindi non vi è conservazione della probabilità.

Notiamo che in generale la fase α' dipende da ψ . Siccome questo è valido per ogni $|\psi\rangle$ allora possiamo prendere due stati distinti:

$$U |\psi_1\rangle |\phi_0\rangle = e^{i\alpha} |\psi_1\rangle |\psi_1\rangle \quad U |\psi_2\rangle |\phi_0\rangle = e^{i\alpha'} |\psi_2\rangle |\psi_2\rangle \quad (11.5)$$

Facciamo il prodotto scalare tra le due equazioni:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \langle \phi_0 | U^\dagger U | \psi_2 \rangle | \phi_0 \rangle &= e^{i(\alpha' - \alpha)} \langle \psi_1 | \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle | \psi_2 \rangle \\ \langle \psi_1 | \langle \phi_0 | \psi_2 \rangle | \phi_0 \rangle &= e^{i(\alpha' - \alpha)} \langle \psi_1 | \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle | \psi_2 \rangle \\ \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle &= e^{i(\alpha' - \alpha)} (\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle)^2 \\ \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= e^{i(\alpha' - \alpha)} (\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle)^2 \end{aligned} \quad (11.6)$$

Questo implica anche che il modulo coincide con il suo quadrato, che però è vero se e solo se i due stati sono ortogonali o coincidono (e sono normalizzati), escludendo il vettore nullo:

$$|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 \iff |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| = \begin{cases} 0 & |\psi_1\rangle \perp |\psi_2\rangle \\ 1 & |\psi_1\rangle = e^{i\beta} |\psi_2\rangle \end{cases} \quad (11.7)$$

Siamo giunti all'assurdo, come volevasi dimostrare. □

Questo dimostra che non è possibile costruire una macchina M che copia *ogni* stato di un dato sistema e dunque il teletrasporto non può avvenire in questo modo. Notiamo che in realtà nello stato finale non è specificato lo stato della macchina, ma solo di una seconda particella. Questa è infatti una dimostrazione elementare che però continua a valere anche in casi più generali¹.

Il teorema dimostra poi che è impossibile conoscere lo stato preciso di una particella, se non si ha nessuna informazione sul sistema.

¹Una dimostrazione più generale è data in: <http://cds.cern.ch/record/549039/files/0204153.pdf>

11.3 Teletrasporto tramite Entanglement

Sebbene non sia possibile fare teletrasporto usando una macchina di clonaggio, possiamo in realtà realizzare il teletrasporto facendo uso dell'entanglement.

Consideriamo adesso una macchina sorgente di coppie di particelle di spin $1/2$ in uno stato entangled. Le particelle sono distinte tra A e B . Dopo essere state prodotte la particella A va da Alice e la particella B va da Bob. Un caso semplice è quello dello stato di Bell (che come detto si può ad esempio ottenere facendo una misura di S_z e selezionando solo quelli con $S_z = 0$):

$$|\phi_0\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A |+\rangle_B + |-\rangle_A |-\rangle_B) \quad (11.8)$$

Conserviamo gli indici in modo da poter scambiare l'ordine del prodotto tensoriale senza ambiguità. La particella C di cui vogliamo fare il teletrasporto sta poi in uno stato qualunque di spin:

$$|\psi\rangle_C = \alpha |+\rangle_C + \beta |-\rangle_C \quad (11.9)$$

Il sistema totale è dunque formato dal prodotto tensoriale di tre spazi di Hilbert di dimensione 2, così che lo spazio totale ha dimensione 8:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C \quad \dim(\mathcal{H}) = \dim(\mathcal{H}_A)^3 = 8 \quad (11.10)$$

Lo stato iniziale è parzialmente fattorizzato:

$$|\psi\rangle_{ABC} = |\psi\rangle_C \otimes |\phi_0\rangle_{AB} \quad (11.11)$$

Dopo la produzione della coppia, Alice esegue una misura di Bell sulle particelle A, C . La misura ha un risultato $\bar{\mu} \in \{0, 1, 2, 3\}$ pari all'indice dello stato di Bell misurato. Lo stato finale sarà dunque della forma:

$$|\psi'\rangle_{ABC} = |\psi_{\bar{\mu}}\rangle_{AC} \otimes |\phi\rangle_B \quad (11.12)$$

Per trovare esattamente il nuovo stato del sistema dobbiamo fare la decomposizione di $|\psi_{ABC}\rangle$ in una base parzialmente fattorizzata, passando attraverso quella completamente fattorizzata:

$$\begin{aligned} |\psi_{ABC}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A |+\rangle_B + |-\rangle_A |-\rangle_B) \otimes (\alpha |+\rangle_C + \beta |-\rangle_C) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha |+\rangle_A |+\rangle_C |+\rangle_B + \alpha |-\rangle_A |+\rangle_C |-\rangle_B + \beta |+\rangle_A |-\rangle_C |+\rangle_B + \beta |-\rangle_A |-\rangle_C |-\rangle_B) = \\ &= \frac{1}{2}[\alpha(|\phi_0\rangle_{AC} + |\phi_3\rangle_{AC}) |+\rangle_B + \alpha(|\phi_1\rangle_{AC} + i|\phi_2\rangle_{AC}) |-\rangle_B + \\ &+ \beta(|\phi_1\rangle_{AC} - i|\phi_2\rangle_{AC}) |+\rangle_B + \beta(|\phi_0\rangle_{AC} - |\phi_3\rangle_{AC}) |-\rangle_B] = \\ &= \frac{1}{2}\left[|\phi_0\rangle_{AC}(\alpha |+\rangle_B + \beta |-\rangle_B) + |\phi_1\rangle_{AC}(\alpha |-\rangle_B + \beta |+\rangle_B) + \right. \\ &+ |\phi_2\rangle_{AC}(-i\alpha |-\rangle_B + i\beta |+\rangle_B) + |\phi_3\rangle_{AC}(\alpha |+\rangle_B - \beta |-\rangle_B)\left. \right] = \\ &= \frac{1}{2}\left[|\phi_0\rangle_{AC} |\psi\rangle_B + |\phi_1\rangle_{AC} \otimes (\sigma_1 |\psi\rangle_B) + |\phi_2\rangle_{AC} \otimes (\sigma_2 |\psi\rangle_B) + |\phi_3\rangle_{AC} \otimes (\sigma_3 |\psi\rangle_B)\right] \end{aligned} \quad (11.13)$$

Pertanto dopo la misura di Alice il sistema sta in uno dei seguenti stati, a seconda del valore di $\bar{\mu}$:

$$\begin{aligned} &|\phi_0\rangle_{AC} |\psi\rangle_B \\ &|\phi_1\rangle_{AC} \otimes (\sigma_1 |\psi\rangle_B) \\ &|\phi_2\rangle_{AC} \otimes (\sigma_2 |\psi\rangle_B) \\ &|\phi_3\rangle_{AC} \otimes (\sigma_3 |\psi\rangle_B) \end{aligned} \quad (11.14)$$

Dopo la misura, Alice telefona Bob e comunica il valore di $\bar{\mu}$. Nel caso $\bar{\mu} = 0$ allora Bob possiede una copia dello stato della particella C posseduta da Alice, senza che questa sia stata teletrasportata. Nei casi $\mu = i = \{1, 2, 3\}$ Bob per ottenere $|\psi\rangle_B$ deve prima effettuare la trasformazione unitaria $\mathbb{1}_{AC} \otimes (\sigma_i)_B$, dove usiamo il fatto che le matrici di Pauli sono involutive:

$$|\phi_0\rangle_{AB} \otimes |\psi\rangle_C \xrightarrow{(S_z)^{AB}} |\psi_i\rangle_{AC} \otimes (\sigma_i |\psi\rangle_B) \xrightarrow{(\sigma_i)^C} |\psi_i\rangle_{AC} \otimes |\psi\rangle_B \quad (11.15)$$

Notiamo che per i postulati della meccanica quantistica la misura distrugge lo stato iniziale $|\psi\rangle_C$ e dunque non è violato il teorema no cloning.

La procedura così elaborata permette dunque teletrasporto in meccanica quantistica, con limitazione temporale dovuta al tempo della misura di Bell (potenzialmente istantanea), trasporto dell'informazione da Alice a Bob e un'ulteriore eventuale misura di spin.

Il teletrasporto è sempre analogo a quanto avviene in *Star Trek*, dove invece della distruzione fisica del corpo iniziale, viene distrutto il suo stato iniziale, che però viene ricreato in un'altra particella.

Notiamo come questa procedura si basa sul fenomeno dell'entanglement, che è caratteristico della meccanica quantistica, e dunque non può essere adattato alla fisica classica.

Capitolo 12

Operatore Statistico

In questo capitolo cerchiamo un formalismo capace di descrivere sistemi i cui stati non sono noti perfettamente.

12.1 Informazione Incompleta su un Sistema Classico

In fisica classica lo stato di un sistema appartiene allo spazio delle fasi rispetto $p \in \Gamma$, ed è determinato dalle $3N$ coordinate lagrangiane e $3N$ coordinate dell'impulso. Se N è molto alto, dell'ordine del numero di Avogadro (come in un gas), allora dal punto di vista pratico è impossibile conoscere gli stati delle singole particelle e dunque determinare univocamente lo stato del sistema.

Possiamo comunque ridurci ad una descrizione statistica. Si introduce dunque una funzione $\rho(p)$, detta **funzione densità**, definita come segue:

$$dp = \rho(p) d\tau \quad (12.1)$$

dove dp è la probabilità che il sistema sia in uno stato contenuto nel volume $d\tau$ nello spazio delle fasi, centrato attorno ad un certo p . Se abbiamo un numero di copie N del sistema sufficientemente grande allora:

$$dN = N\rho(p)d\tau \quad (12.2)$$

coincide con il numero di sistemi il cui stato è contenuto nel volume $d\tau$.

Per definizione di densità allora vi è probabilità 1 che il sistema assuma un qualunque stato e la probabilità è definita positiva:

$$\int_{\Gamma} \rho(p) d\tau = 1 \quad \rho(p) \geq 0, \forall p \in \Gamma \quad (12.3)$$

Cerchiamo ora di capire quale legge di evoluzione segue la funzione densità $\rho(p, t)$. All'istante t vale:

$$dp = \rho(p, t) d\tau \quad (12.4)$$

Dopo un intervallo di tempo dt il volume si sarà spostato attorno a $\bar{p} = p + dp(t)$ e deformato in $d\bar{\tau}$. Per un sistema hamiltoniano la misura del volume si conserva così che:

$$d\bar{\tau} = d\tau \quad (12.5)$$

D'altra parte è conservata anche la probabilità, che implica che rimane invariata anche la funzione densità per evoluzioni temporali infinitesime:

$$\begin{aligned} dp(p, t) &= dp(\bar{p}, t + dt) d\bar{\tau} \\ \rho(p, t) d\tau &= \rho(\bar{p}, t + dt) d\bar{\tau} \\ \rho(p, t) d\tau &= \rho(\bar{p}, t + dt) d\bar{\tau} \\ \rho(p, t) &= \rho(p + dp(t), t + dt) \end{aligned} \quad (12.6)$$

In realtà conosciamo la relazione che lega lo spostamento delle coordinate al tempo tramite le equazioni di Hamilton:

$$dp = \begin{cases} dq_1 = \dot{q}_1 dt = \{q_1, H\} dt = \frac{\partial H}{\partial p_1} dt \\ \dots = \dots \\ dp_{3N} = \dot{p}_{3N} dt = \{p_{3N}, H\} dt = -\frac{\partial H}{\partial q_{3N}} dt \end{cases} \quad (12.7)$$

Possiamo ora fare lo sviluppo lineare della funzione densità in dt :

$$\begin{aligned}
\rho(p, t) &= \rho(p + dp(t), t + dt) = \rho(p, t) + \sum_i \frac{\partial \rho}{\partial q_i} dq_i(t) + \sum_i \frac{\partial \rho}{\partial p_i} dp_i(t) + \frac{\partial \rho}{\partial t} dt = \\
&= \rho(p, t) + \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\frac{\partial p}{\partial q_1} \frac{\partial H}{\partial q_1} + \dots - \frac{dp}{dp_{3N}} \frac{\partial H}{\partial q_{3N}} \right) \right] dt = \\
&= \rho(p, t) + \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} - \{H, \rho\} \right] dt
\end{aligned} \tag{12.8}$$

Siccome questo è vero per ogni p, t allora troviamo l'equazione di evoluzione di ρ , che prende il nome di **Equazione di Liouville**:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} - \{H, \rho\} = 0 \iff \frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}} \tag{12.9}$$

Rispetto alla funzione densità possiamo anche calcolare il valore medio di un certo osservabile $\mathcal{F}(p)$ al tempo t :

$$\overline{\mathcal{F}} = \int_{\Gamma} \mathcal{F}(p) \rho(p, t) d\tau \tag{12.10}$$

12.2 Informazione Incompleta su un Sistema Quantistico

Vediamo adesso cosa succede alla descrizione di un sistema quantistico quando si ha solo informazione incompleta. Ci limitiamo per semplicità a spazi di Hilbert a dimensione finita $\dim(\mathcal{H}) = N < \infty$ in modo da non preoccuparci di domini e convergenza di serie.

12.2.1 Traccia di un Operatore

Iniziamo col definire la traccia di un operatore $\hat{A} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Possiamo definire questa su una base ortonormale $\{\phi_n\}$ come la somma degli elementi diagonali:

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_{r=1}^N \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_r \rangle \tag{12.11}$$

Possiamo dimostrare facilmente che questa è indipendente dalla scelta della base. Data un'altra base ortonormale $\{\chi_n\}$:

$$\begin{aligned}
\sum_{s=1}^N \langle \chi_s | \hat{A} | \chi_s \rangle &= \sum_{s, r, r'} \langle \chi_s | \phi_r \rangle \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_{r'} \rangle \langle \phi_{r'} | \chi_s \rangle = \\
&= \sum_{r, r'} \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_{r'} \rangle \langle \phi_{r'} | \sum_s |\chi_s\rangle \langle \chi_s| \phi_r \rangle = \sum_{r, r'} \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_{r'} \rangle \langle \phi_{r'} | \phi_r \rangle = \\
&= \sum_{r, r'} \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_{r'} \rangle \delta_{rr'} = \sum_r \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_r \rangle
\end{aligned} \tag{12.12}$$

Per linearità del prodotto scalare e degli operatori la traccia è un funzionale lineare su $\mathcal{L}(\mathcal{H})$:

$$\text{Tr}(\alpha \hat{A} + \beta \hat{B}) = \alpha \text{Tr } \hat{A} + \beta \text{Tr } \hat{B} \tag{12.13}$$

La traccia di un prodotto è indipendente dall'ordine:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) &= \sum_r \langle \phi_r | \hat{A}\hat{B} | \phi_r \rangle = \sum_{rs} \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_s \rangle \langle \phi_s | \hat{B} | \phi_r \rangle = \sum_s \langle \phi_s | \hat{B} | \phi_r \rangle \langle \phi_r | \hat{A} | \phi_s \rangle = \\
&= \sum_s \langle \phi_s | \hat{B}\hat{A} | \phi_s \rangle = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})
\end{aligned} \tag{12.14}$$

Questo è equivalente a richiedere che la traccia di un commutatore è nulla:

$$\text{Tr}([\hat{A}, \hat{B}]) = 0 \quad \forall \hat{A}, \hat{B} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \tag{12.15}$$

È particolarmente interessante calcolare la traccia di un proiettore. Sia un proiettore ortogonale \hat{P} relativo al sottospazio R di \mathcal{H} di dimensione $\dim R = g$:

$$\hat{P}^2 = \hat{P}^\dagger = \hat{P} \quad \mathcal{R}(\hat{P}) = R \tag{12.16}$$

Sia una base $\{\xi_i\}_{i=1}^g$ per R , allora possiamo scrivere:

$$\hat{P} = \sum_i |\xi_i\rangle \langle \xi_i| \quad (12.17)$$

Calcoliamone la traccia:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{P} &= \sum_r \langle \phi_r | \hat{P} | \phi_r \rangle = \sum_r \sum_i \langle \phi_r | \xi_i \rangle \langle \xi_i | \phi_r \rangle = \\ &= \sum_i \langle \xi_i | \sum_r |\phi_r\rangle \langle \phi_r| \xi_i \rangle = \sum_i \langle \xi_i | \xi_i \rangle = g \end{aligned} \quad (12.18)$$

12.2.2 Esempi di Informazione Incompleta

Misure di due Osservabili su Ensemble

Sia un ensemble di particelle identiche in uno stato $|\psi_0\rangle$ e un osservabile L con autovalori non degeneri:

$$\hat{L} |\psi_j\rangle = \lambda_j |\psi_j\rangle \quad (12.19)$$

Facciamo ad un tempo t_1 una misura di L su tutto l'ensemble. Questa fornisce le probabilità di overlap p_j degli stati $|\psi_j\rangle$ rispetto allo stato $|\psi_0\rangle$.

Immediatamente dopo la misura $t_2 > t_1$ le particelle non stanno più nello stesso stato $|\psi_0\rangle$, ma stanno negli stati $|\psi_j\rangle$ con una certa distribuzione di probabilità p_j .

In questo caso dunque non possiamo dire quale sia lo stato di una singola particella, ma solo con quale probabilità possiamo trovare una particella in un certo stato (tra gli autostati di L).

Sia un altro osservabile G . Immaginiamo di fare immediatamente dopo la misura di L una misura di G all'istante $t_2 > t_1$, in modo tale che gli stati non si sono evoluti. La probabilità di misurare un certo valore di G su una singola particella appartenente all'ensemble sarà data dalla media pesata sulle probabilità dei singoli stati:

$$P(G = \gamma_r | t) = \sum_j p_j P_j(G = \gamma_r | t) \quad (12.20)$$

Mentre il valore medio:

$$\langle G \rangle_t = \sum_j p_j \langle G \rangle_{j,t} \quad (12.21)$$

Scattering di un Fascio su un Bersaglio Fisso

Sia uno stato $|\phi_{in}\rangle$ a momento centrato in un certo \vec{p} . Sia poi un fascio costituito da particelle, ciascuna delle quali si trova in uno stato $|\phi_{\vec{p}}\rangle$ ottenuto da una traslazione di $|\phi_{in}\rangle$ su una superficie Σ perpendicolare a \vec{p} .

Se la superficie ha dimensione finita e il flusso è uniforme allora la probabilità che una particella attraversi un elemento di superficie $d\Sigma$ è data da:

$$dp = \frac{d^2\rho}{\mu(\Sigma)} \quad (12.22)$$

In questo caso non possiamo dunque dire che una certa particella sia in un certo stato, ma comunque possiamo assegnare la probabilità classica che lo stato della particella sia $|\phi_{\vec{p}}\rangle$.

In questo caso il valore atteso di un osservabile su questo fascio è dato da:

$$\langle G \rangle_t = \frac{1}{\mu(\Sigma)} \int_{\Sigma} d^2\rho \langle \phi_{\vec{p}}^{out}(t) | \hat{G} | \phi_{\vec{p}}^{out}(t) \rangle \quad (12.23)$$

Notiamo che la media è fatta su una distribuzione di probabilità continua e che gli stati in cui si possono trovare le particelle non sono ortonormali. Infatti questa non è una richiesta necessaria a poter descrivere un sistema di cui si conosce informazione incompleta.

12.2.3 Operatore Statistico

Cerchiamo adesso di esplicitare l'espressione di probabilità e valore medio di un certo osservabile al tempo t nel caso discreto:

$$P(G = \gamma_r | t) = \sum_j p_j P_j(G = \gamma_r | t) \quad (12.24)$$

Partiamo dall'espressione della probabilità di osservare γ_r sullo stato $|\psi_j(t)\rangle$ (l'evoluzione di $|\psi_j\rangle$ al tempo t), usando una base $\{\phi_n\}$:

$$\begin{aligned} P_j(G = \gamma_r|t) &= \langle \psi_j(t) | \hat{P}_r^{(G)} | \psi_j(t) \rangle = \sum_n \langle \psi_j(t) | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \hat{P}_r^{(G)} | \psi_j(t) \rangle = \\ &= \sum_n \langle \phi_n | \hat{P}_r^{(G)} | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) | \phi_n \rangle = \sum_n \langle \phi_n | \left(\hat{P}_r^{(G)} | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) | \right) | \phi_n \rangle = \\ &= \text{Tr} \left(\hat{P}_r^{(G)} | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) | \right) \end{aligned} \quad (12.25)$$

Analogamente per il valore medio, facendo la sostituzione $\hat{P}_r^{(G)} \rightarrow \hat{G}$:

$$\langle G \rangle_{j,t} = \langle \psi_j(t) | G | \psi_j(t) \rangle = \text{Tr} \left(\hat{G} | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) | \right) \quad (12.26)$$

Inserendo questo nell'espressione delle probabilità e valori medi "totali" troviamo:

$$\begin{aligned} P(G = \gamma_r|t) &= \sum_j p_j P_j(G = \gamma_r|t) = \sum_j p_j \text{Tr} \left(\hat{P}_r^{(G)} | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) | \right) = \\ &= \text{Tr} \left(\sum_j p_j \hat{P}_r^{(G)} | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) | \right) = \\ &= \text{Tr} \left(\hat{P}_r^{(G)} \sum_j p_j | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) | \right) \\ \langle G \rangle_t &= \text{Tr} \left(\hat{G} \sum_j p_j | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) | \right) \end{aligned} \quad (12.27)$$

Questo suggerisce di definire il seguente operatore, detto **operatore statistico** oppure **operatore densità**:

$$\boxed{\hat{\rho}(t) = \sum_j p_j | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) |} \quad (12.28)$$

in modo tale che:

$$P(G = \gamma_r|t) = \text{Tr} \left(\hat{P}_r^{(G)} \hat{\rho}(t) \right) \quad \langle G \rangle_t = \text{Tr} \left(\hat{G} \hat{\rho}(t) \right) \quad (12.29)$$

Parliamo invece di **matrice densità** quando ci mettiamo in una base:

$$\rho_{rs}(t) = \langle \phi_r | \rho(t) | \phi_s \rangle \quad (12.30)$$

Nel caso dello scattering questo è invece definito come un integrale:

$$\hat{\rho} = \int_{\Sigma} \frac{d^2\rho}{\mu(\Sigma)} | \phi_{\vec{\rho}} \rangle \langle \phi_{\vec{\rho}} | \quad (12.31)$$

Se lo stato è completamente specificato, ossia le p_j sono tutte nulle eccetto che per una, allora l'operatore statistico è l'operatore di proiezione su questo stato:

$$\hat{\rho}(t) = | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \quad (12.32)$$

L'operatore statistico sostituisce e generalizza dunque il vettore ai casi in cui vi è informazione incompleta. Possiamo poi distinguere tra **stato puro**, nel qual caso l'operatore statistico è di proiezione su un singolo vettore e l'informazione è completa, e **stati miscela**, che non possono essere scritti come proiettori su un singolo vettore.

Noto questo possiamo poi fare una semplice corrispondenza tra il caso classico e quantistico quando l'informazione è incompleta:

$$\begin{aligned} \int dp &\Longleftrightarrow \text{Tr} \\ \int dp \mathcal{F}(p) \rho(p, t) &\Longleftrightarrow \text{Tr} \left(\hat{G} \hat{\rho}(t) \right) \end{aligned} \quad (12.33)$$

12.3 Proprietà dell'Operatore Statistico

12.3.1 Caratterizzazione

La definizione data di operatore statistico prevede di sapere già i possibili stati $|\psi_j(t)\rangle$ e le relative probabilità p_j (per semplicità supponiamo serie piuttosto che integrale):

$$\hat{\rho}(t) = \sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \quad (12.34)$$

Cerchiamo adesso una definizione "astratta" basata su proprietà generali dell'operatore statistico. Per definizione di probabilità classiche queste devono essere normalizzate e definite positive, mentre gli stati devono essere normalizzati. Un qualunque operatore statistico deve dunque soddisfare queste proprietà:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \quad \begin{cases} \sum_j p_j = 1 \\ p_j \geq 0 \\ \langle \psi_j(t) | \psi_j(t) \rangle = 1 \end{cases} \quad (12.35)$$

Come conseguenza di normalizzazione di probabilità e stati la traccia dell'operatore statistico è unitaria (in quanto la traccia di un proiettore su uno stato vale 1 - è automaticamente un proiettore ortogonale su un sottospazio di dimensione 1):

$$\text{Tr}(\hat{\rho}(t)) = \sum_j p_j \text{Tr}(|\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)|) = \sum_j p_j = 1 \quad (12.36)$$

Siccome le probabilità sono reali e i proiettori ortogonali sono autoaggiunti allora l'operatore statistico è autoaggiunto:

$$p_j^* = p_j \Rightarrow \hat{\rho}^\dagger(t) = \hat{\rho}(t) \quad (12.37)$$

L'operatore è anche definito positivo, ossia il suo valore di aspettazione su un qualunque stato è non negativo:

$$\hat{\rho}(t) \geq 0 \iff \forall |f\rangle \in \mathcal{H}, \langle f | \hat{\rho}(t) | f \rangle \geq 0 \quad (12.38)$$

Questo è dovuto al fatto che le probabilità sono definite positive:

$$\langle f | \hat{\rho}(t) | f \rangle = \sum_j p_j \langle f | \psi_j(t) \rangle \langle \psi_j(t) | f \rangle = \sum_j p_j |\langle f | \psi_j(t) \rangle|^2 \geq 0 \quad (12.39)$$

Vogliamo adesso verificare che queste tre proprietà caratterizzano gli operatori statistici (si sottintende che vale per ogni t):

$$\boxed{\text{Tr } \hat{\rho} = 1 \quad \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \quad \hat{\rho} \geq 0} \quad (12.40)$$

Siccome $\hat{\rho}$ è hermitiano allora ammette una decomposizione spettrale:

$$\hat{\rho} = \sum_j \pi_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| + \sum_s \int_{\sigma_c} d\pi \pi |\phi_{\pi s}\rangle \langle \phi_{\pi s}| \quad (12.41)$$

con condizioni di ortonormalizzazione:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij} \quad \langle \phi_{\pi' s'} | \phi_{\pi s} \rangle = \delta_{ss'} \delta(\pi - \pi') \quad \langle \phi_{\pi s} | \phi_j \rangle = 0 \quad (12.42)$$

Notiamo che una condizione necessaria affinché un operatore hermitiano sia di classe traccia è che non abbia spettro nullo, in quanto altrimenti la traccia diverge. Calcoliamo questa in una base ortonormale propria:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{\rho} &= \sum_r \langle \chi_r | \hat{\rho} | \chi_r \rangle = \sum_{rj} \pi_j \langle \chi_r | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \chi_r \rangle + \sum_{rs} \int_{\sigma_c} d\pi \pi \langle \chi_r | \phi_{\pi s} \rangle \langle \phi_{\pi s} | \chi_r \rangle = \\ &= \sum_j \pi_j \langle \phi_j | \phi_j \rangle + \sum_{rs} \int_{\sigma_c} d\pi \pi \langle \phi_{\pi s} | \phi_{\pi s} \rangle = \\ &= \sum_j \pi_j + \sum_s \int_{\sigma_c} d\pi \pi \delta(0) = \sum_j p_j + \infty = \infty \end{aligned} \quad (12.43)$$

Lo spettro sarà dunque puramente discreto e in particolare per la normalizzazione della traccia:

$$\sum_j \pi_j = \text{Tr } \hat{\rho} = 1 \quad (12.44)$$

Resta dunque da dimostrare che le π_j sono definite positive. Usando la proprietà per cui l'operatore statistico è definito positivo troviamo facilmente:

$$\langle \phi_k | \hat{\rho} | \phi_k \rangle = \sum_j \langle \phi_k | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \phi_k \rangle = \pi_k \geq 0 \quad \forall k \quad (12.45)$$

Notiamo che in generale la base è degenere e in particolare il nucleo dell'operatore sarà non nullo. Addirittura se lo stato è puro allora il nucleo coincide con tutto lo spazio di Hilbert a meno di un sottospazio di dimensione 1, ossia vi è degenerazione infinita per l'autovalore 0.

12.3.2 Decomposizione non Unica

Notiamo che sebbene l'operatore statistico sia definito univocamente (diversamente dai vettori, definiti a meno di una fase), la sua decomposizione come somma di proiettori non è invece unica. Basta infatti dimostrare che l'operatore statistico dato nel caso di scattering è infatti un operatore statistico:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{\rho} &= \sum_r \int_{\Sigma} \frac{d^2 \rho}{\mu(\Sigma)} \langle \chi_r | \phi_{\vec{p}} \rangle \langle \phi_{\vec{p}} | \chi_r \rangle = \int_{\Sigma} \frac{d^2 \rho}{\mu(\Sigma)} \langle \phi_{\vec{p}} | \phi_{\vec{p}} \rangle = \\ &= \int_{\Sigma} \frac{d^2 \rho}{\mu(\Sigma)} = 1 \\ \langle f | \hat{\rho} | f \rangle &= \int_{\Sigma} \frac{d^2 \rho}{\mu(\Sigma)} |\langle f | \phi_{\vec{p}} \rangle|^2 \geq 0 \end{aligned} \quad (12.46)$$

mentre è banalmente autoaggiunto in quanto $\mu(\Sigma)$ è reale e i proiettori autoaggiunti.

Chiaramente esiste almeno un'altra rappresentazione, data da quella spettrale, che è sotto forma di serie e non integrale. In quanto operatore è poi possibile sempre trovare la sua decomposizione in una qualunque base dello spazio di Hilbert, anche se non "diagonale" come in quella spettrale e questa data.

12.3.3 Caratterizzazione di Stati Puri e Misti

Facciamo adesso un'importante caratterizzazione di stati puri e misti a partire dall'operatore statistico. Notiamo che nel caso puro l'operatore statistico è un proiettore ortogonale e dunque soddisfa:

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \quad (12.47)$$

Possiamo dimostrare che questo è vero se e solo se lo stato è puro. La prima implicazione è banale, ma quella inversa è comunque semplice. Facciamo la decomposizione spettrale del quadrato:

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{jk} \pi_j \pi_k |\phi_j\rangle \langle \phi_j | \phi_k\rangle \langle \phi_k| = \sum_j \pi_j^2 |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \quad (12.48)$$

Questo significa che:

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \iff \sum_j \pi_j^2 |\phi_j\rangle \langle \phi_j| = \sum_j \pi_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \iff \pi_j^2 = \pi_j, \forall j \quad (12.49)$$

Ma questo è verificato se e solo se $\pi_j = 0$ oppure $\pi_j = 1$. Per la condizione di normalizzazione tuttavia al più un π_k potrà essere 1 e gli altri dovranno essere tutti nulli, ossia $\pi_j = \delta_{jk}$, così che lo stato è puro:

$$\hat{\rho} = |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (12.50)$$

Questo significa che uno stato miscela possiede un operatore statistico che non è un proiettore ortogonale. Notiamo poi come questa condizione può essere anche espressa in termini di traccia:

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \iff \text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1 \quad (12.51)$$

Se $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ allora:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \sum_j \pi_j^2 = 1 \quad (12.52)$$

Vi sono dunque possibilità. Se lo stato è puro questo è verificato in quanto $\pi_j = \delta_{jk}$. Se lo stato non è puro (miscela) allora $\pi_j < 1$, questo significa che $\pi_j^2 < \pi_j$. Ma se questo è verificato allora:

$$\sum_j \pi_j^2 < \sum_j \pi_j = 1 \Rightarrow \sum_j \pi_j^2 < 1 \quad (12.53)$$

Questo è un assurdo è dunque questo secondo caso è impossibile. Possiamo però dire in generale che:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1 \quad (12.54)$$

In particolare quando $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ lo stato è puro, mentre se $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) < 1$ allora lo stato è miscela.

12.3.4 Spazio degli Operatori Statistici

È interessante notare come gli operatori statistici formano uno spazio convesso. Una combinazione convessa di due operatori statistici è infatti ancora un operatore statistico:

$$\hat{\rho}(\lambda) = \lambda \hat{\rho}_1 + (1 - \lambda) \hat{\rho}_2 \quad (12.55)$$

Verifichiamolo:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^\dagger(\lambda) &= \lambda^* \hat{\rho}_1^\dagger + (1 - \lambda^*) \hat{\rho}_2^\dagger = \lambda \hat{\rho}_1 + (1 - \lambda) \hat{\rho}_2 = \hat{\rho}(\lambda) \\ \text{Tr}(\hat{\rho}(\lambda)) &= \lambda \text{Tr} \hat{\rho}_1 + (1 - \lambda) \text{Tr} \hat{\rho}_2 = \lambda + (1 - \lambda) = 1 \\ \langle f | \hat{\rho}(\lambda) | f \rangle &= \lambda \langle f | \hat{\rho}_1 | f \rangle + (1 - \lambda) \langle f | \hat{\rho}_2 | f \rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (12.56)$$

12.4 Equazione di von Neumann

Cerchiamo adesso quale equazione regoli l'evoluzione temporale di $\hat{\rho}$. In realtà già conosciamo la soluzione. Sia infatti una rappresentazione generica:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \quad (12.57)$$

allora gli stati si evolvono come segue:

$$|\psi_j(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi_j\rangle \quad (12.58)$$

con $U(t)$ operatore di evoluzione temporale e $|\psi_j\rangle$ stato iniziale. Usando la linearità dell'operatore:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_j p_j U(t, t_0) |\psi_j\rangle \langle \psi_j| U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0) \left(\sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \right) U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0) \hat{\rho}_0 U^\dagger(t, t_0) \quad (12.59)$$

con $\hat{\rho}_0$ operatore statistico iniziale del sistema. Per ottenere l'equazione del moto potremmo poi derivare rispetto al tempo e usare l'equazione di Schrodinger. Partiamo piuttosto direttamente dall'equazione di Schrodinger, senza passare per l'evolvente temporale:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} &= i\hbar \sum_j p_j \frac{\partial}{\partial t} (|\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)|) = i\hbar \sum_j p_j \left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| + |\psi_j(t)\rangle \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_j(t)| \right) = \\ &= \sum_j p_j (\hat{\mathcal{H}} |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| - |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \hat{\mathcal{H}}) = \\ &= \hat{\mathcal{H}} \left(\sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \right) - \left(\sum_j p_j |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \right) \hat{\mathcal{H}} = \\ &= \hat{\mathcal{H}} \hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t) \hat{\mathcal{H}} \end{aligned} \quad (12.60)$$

Troviamo infine l'equazione di Liouville quantistica (**equazione di Liouville-von Neumann**):

$$\boxed{\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}]} \quad (12.61)$$

Questa è un diretta corrispondenza con quella classica tramite le sostituzioni:

$$\rho(p) \longleftrightarrow \hat{\rho} \quad H(p) \longleftrightarrow \hat{\mathcal{H}}\{, \} = \frac{1}{i\hbar} [,] \quad (12.62)$$

12.5 Operatore Statistico di Sistemi

12.5.1 Operatore Statistico Ridotto

Sia adesso un sistema \mathcal{C} con spazio di Hilbert \mathcal{H} , costituito da due sottosistemi $\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2$ con spazi di Hilbert $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$. Lo spazio di Hilbert totale è il prodotto tensoriale dei due parziali:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (12.63)$$

Siano $\{\phi_{1r}\}, \{\phi_{2s}\}$ due basi rispettivamente per $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$, che formano la base $\phi_{rs} = \phi_{1r} \otimes \phi_{2s}$ per \mathcal{H} .

Sia un operatore statistico $\hat{\rho}$ su \mathcal{H} e un osservabile \hat{G}_1 relativo a \mathcal{C}_1 . Troviamo che il valore atteso sullo stato $\hat{\rho}$ non dipende "esplicitamente" dalla parte di $\hat{\rho}$ relativa a \mathcal{H}_2 :

$$\begin{aligned}\langle \hat{G}_1 \rangle &= \text{Tr}(\hat{G}_1 \hat{\rho}) = \sum_{rs} \langle \phi_{rs} | \hat{G}_1 \hat{\rho} | \phi_{rs} \rangle = \sum_{rs} \langle \phi_{1r}, \phi_{2s} | \hat{G}_1 (\mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2) \hat{\rho} | \phi_{1r}, \phi_{2s} \rangle = \\ &= \sum_{rs} \sum_{r'} \langle \phi_{1r} | \hat{G}_1 | \phi_{1r'} \rangle \langle \phi_{1r'}, \phi_{2s} | \hat{\rho} | \phi_{1r}, \phi_{2s} \rangle = \sum_{rr'} \langle \phi_{1r} | \hat{G}_1 | \phi_{1r'} \rangle \sum_s \langle \phi_{1r'}, \phi_{2s} | \hat{\rho} | \phi_{1r}, \phi_{2s} \rangle\end{aligned}\quad (12.64)$$

Definiamo dunque l'**operatore statistico ridotto** allo spazio \mathcal{H}_1 :

$$\hat{\rho}_1 = \sum_s \langle \phi_{2s} | \hat{\rho} | \phi_{2s} \rangle \quad (12.65)$$

in modo tale che:

$$\langle \hat{G}_1 \rangle = \sum_{rr'} \langle \phi_{1r} | \hat{G}_1 | \phi_{1r'} \rangle \langle \phi_{1r'} | \hat{\rho}_1 | \phi_{1r} \rangle = \sum_r \langle \phi_{1r} | \hat{G}_1 \hat{\rho}_1 | \phi_{1r} \rangle = \text{Tr}(\hat{G}_1 \hat{\rho}_1) \quad (12.66)$$

Notiamo poi che la definizione prende gli elementi diagonali nella seconda base e dunque definiamo la **traccia parziale**:

$$A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) = \mathcal{L}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2) \quad \text{Tr}_2 A \equiv \sum_s \langle \phi_{2s} | A | \phi_{2s} \rangle \Rightarrow \hat{\rho}_1 = \text{Tr}_2 \hat{\rho} \quad (12.67)$$

Come per la traccia ordinaria, anche la traccia parziale è ben definita in maniera indipendente dalla base. Inoltre si può dimostrare che l'operatore statistico ridotto è ancora un operatore statistico:

$$\hat{\rho}_1^\dagger = \hat{\rho}_1 \quad \text{Tr} \hat{\rho}_1^\dagger = 1 \quad \hat{\rho}_1 \geq 0 \quad (12.68)$$

12.5.2 Stati Puri Non Entangled

È interessante verificare che per uno stato puro non entangled l'operatore statistico ridotto si riduce a prendere lo "stato parziale". Ad esempio sia il seguente operatore statistico:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi| = |\psi_1, \psi_2\rangle \langle \psi_1, \psi_2| \quad |\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2 \quad (12.69)$$

dove gli stati singoli hanno la seguente decomposizione nelle basi date:

$$|\psi_1\rangle = \sum_r c_r |\phi_{1r}\rangle \quad |\psi_2\rangle = \sum_s d_s |\phi_{2s}\rangle \quad (12.70)$$

Calcoliamone la traccia parziale rispetto ad \mathcal{H}_2 :

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_1 &= \text{Tr}_2 \hat{\rho} = \sum_s \langle \phi_{2s} | \hat{\rho} | \phi_{2s} \rangle = \sum_s (\langle \phi_{2s} | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | \phi_{2s} \rangle) |\psi_1\rangle \langle \psi_1| = \\ &= \left(\sum_s \langle \psi_2 | \phi_{2s} \rangle \langle \phi_{2s} | \psi_2 \rangle \right) |\psi_1\rangle \langle \psi_1| = (\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle) |\psi_1\rangle \langle \psi_1| = \\ &= |\psi_1\rangle \langle \psi_1|\end{aligned}\quad (12.71)$$

come volevasi dimostrare. In realtà si può dimostrare che questa è una condizione necessaria e sufficiente, ossia un sistema sta in uno stato puro non entangled se e solo gli operatori ridotti dei sottosistemi rappresentano uno stato puro. Pertanto nel caso di uno stato puro non entangled si fattorizza anche l'operatore statistico:

$$\hat{\rho} = |\psi_1, \psi_2\rangle \langle \psi_1, \psi_2| \Rightarrow \begin{cases} \hat{\rho}_1 = |\psi_1\rangle \langle \psi_1| \\ \hat{\rho}_2 = |\psi_2\rangle \langle \psi_2| \\ \hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 \end{cases} \quad (12.72)$$

Questi sono determinati univocamente con la richiesta di traccia unitaria (oppure tramite la traccia parziale).

12.5.3 Sistemi Non Interagenti

In generale un operatore statistico del tipo $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$ rappresenta uno stato in cui i due sottosistemi sono non interagenti. Infatti in tal caso ciascun operatore ridotto agisce solo gli stati e operatori del rispettivo spazio di Hilbert parziale. È dunque ben definito lo stato parziale di un ciascuno sottosistema, così che parliamo di "stato non entangled

generalizzato", in quanto gli stati dei singoli sottosistemi non sono necessariamente puri.

Verifichiamo che effettivamente per generici operatori statistici $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2$ sui rispettivi spazi, il prodotto tensoriale è un operatore statistico sullo spazio prodotto. Per fare questo usiamo una base fattorizzata $|ik\rangle = |\phi_{1i}\rangle \otimes |\phi_{2k}\rangle$ e le basi di autovettori $|n\rangle, |m\rangle$ di $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2$ rispettivamente:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2) &= \sum_{ik} \langle ik | \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 | ik \rangle = \sum_i \langle i | \hat{\rho}_1 | i \rangle \sum_k \langle k | \hat{\rho}_2 | k \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}_1) \text{Tr}(\hat{\rho}_2) = 1 \\ \hat{\rho}^\dagger &= \hat{\rho}_1^\dagger \otimes \hat{\rho}_2^\dagger = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 = \hat{\rho} \\ \langle f | \hat{\rho} | f \rangle &= \langle f | \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 | f \rangle = \langle f | \left(\sum_n \pi_{1n} |n\rangle \langle n| \right) \otimes \left(\sum_m \pi_{2m} |m\rangle \langle m| \right) | f \rangle = \\ &= \sum_{nm} \pi_{1n} \pi_{2m} \langle f | nm \rangle \langle nm | f \rangle = \sum_{nm} \pi_{1n} \pi_{2m} |\langle f | nm \rangle|^2 \geq 0 \end{aligned} \quad (12.73)$$

Notiamo in particolare che gli autovalori dell'operatore complessivo sono il prodotto dei singoli autovalori e gli autovettori il prodotto tensoriale dei singoli autovettori:

$$\hat{\rho} |nm\rangle = \hat{\rho}(|n\rangle \otimes |m\rangle) = (\hat{\rho}_1 |n\rangle) \otimes (\hat{\rho}_2 |m\rangle) = \pi_{1n} \pi_{2m} |n\rangle \otimes |m\rangle = \pi_{nm} |nm\rangle \quad (12.74)$$

Questo continua ad essere vero nell'evoluzione temporale in quanto se l'hamiltoniana non ammette termini di interazione, ossia è la somma di due hamiltoniane che agiscono sui rispettivi spazi, allora gli evolveri temporali si scrivono sotto forma di prodotto:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_1 + \hat{\mathcal{H}}_2 \Rightarrow U(t, t_0) = U_1(t, t_0) \otimes U_2(t, t_0) \quad (12.75)$$

e dunque gli operatori statistici evolvono separatamente:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= U(t, t_0)(\hat{\rho}_1(t_0) \otimes \hat{\rho}_2(t_0))U^\dagger(t, t_0) = \\ &= (U_1(t, t_0)\hat{\rho}_1(t_0)U_1^\dagger(t, t_0)) \otimes (U_2(t, t_0)\hat{\rho}_2(t_0)U_2^\dagger(t, t_0)) = \\ &= \hat{\rho}_1(t) \otimes \hat{\rho}_2(t) \end{aligned} \quad (12.76)$$

12.5.4 Esempio

Facciamo ad esempio l'esempio di un sistema di due spin 1/2 che sta nello stato di Bell $|\phi_0\rangle$. L'operatore statistico è dato da:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= |\phi_0\rangle \langle \phi_0| = \frac{1}{2} \left(|+, +\rangle + |-, -\rangle \right) \left(\langle +, +| + \langle -, -| \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left(|+, +\rangle \langle +, +| + |+, +\rangle \langle -, -| + |-, -\rangle \langle +, +| + |-, -\rangle \langle -, -| \right) = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (12.77)$$

L'operatore ridotto alla prima particella è dato da:

$$\hat{\rho}_1 = \text{Tr}_2 \hat{\rho} = \langle + | \hat{\rho} | + \rangle + \langle - | \hat{\rho} | - \rangle = \frac{1}{2} (|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \mathbb{1} \quad (12.78)$$

Pertanto lo stato ridotto non è puro:

$$\hat{\rho}_1^2 = \frac{1}{4} \mathbb{1} \neq \hat{\rho}_1 \quad (12.79)$$

12.6 Entropia di von Neumann

Abbiamo visto nelle sezioni precedenti che gli operatori statistici soddisfano la disuguaglianza:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \geq 1 \quad (12.80)$$

e in particolare quando $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ l'informazione è "completa" o "massima" in quanto lo stato è puro, mentre se $\text{Tr}(\hat{\rho}) < 1$ l'informazione è "incompleta" in quanto lo stato è miscela. Ci chiediamo adesso se è possibile effettivamente quantificare la quantità di informazione su un sistema contenuta in un operatore statistico.

Per fare questo definiamo l'**entropia di von Neumann**, un funzionale che misura piuttosto la **mancanza di informazione**:

$$S[\hat{\rho}] = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}) \quad (12.81)$$

dove k_B è la costante di Boltzmann.

Ricordiamo che le funzioni di operatori sono definite tramite la decomposizione spettrale:

$$\hat{\rho} \log \hat{\rho} = \sum_i \pi_i \log \pi_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \quad (12.82)$$

Notiamo che questo è ben definito anche per $\pi_i = 0$ in quanto $x \log x \rightarrow 0$ per $x \rightarrow 0$. In questa base l'entropia di von Neumann assume poi la seguente espressione:

$$S = -k_B \sum_i \pi_i \log \pi_i \quad (12.83)$$

Usando che i π_i sono definiti positivi e minori di 1 troviamo che l'entropia è sempre non-negativa:

$$0 \leq \pi_i \leq 1 \Rightarrow \log \pi_i \leq 0 \Rightarrow \sum_i \pi_i \log \pi_i \leq \sum_i \log \pi_i \leq 0 \Rightarrow \boxed{S \geq 0} \quad (12.84)$$

Nel caso particolare $\pi_i = \delta_{ik}$ allora l'entropia è nulla:

$$S = -k_B \log 1 = 0 \quad (12.85)$$

Questa è una condizione necessaria è sufficiente, in quanto vale anche il viceversa:

$$S = -k_B \sum_i \pi_i \log \pi_i = 0 \Rightarrow \sum_i \pi_i \log \pi_i = 0 \quad (12.86)$$

Siccome per $0 < \pi_i < 1$ vale $\pi_i \log \pi_i < 0$ allora non possono esserci tali termini. Deve risultare dunque solo $\pi_i = 0$ e $\pi_i = 1$, che risulta in $\pi_i \log \pi_i = 0$. In particolare per la normalizzazione potrà risultare un solo π_i uguale ad 1, ossia $\pi_i = \delta_{ik}$ e lo stato è puro.

Viceversa uno stato miscela ha un'entropia positiva.

L'entropia è dunque minima quando l'informazione è massima, ossia quando lo stato è puro, mentre è "maggiore" quando lo stato è miscela.

12.6.1 Entropia di Sistemi Non Interagenti

Ricordiamo che per sistemi non interagenti l'operatore statistico è dato dal prodotto tensoriale degli operatori statistici ridotti:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 \quad (12.87)$$

Questo ha come autovalori i prodotti degli autovalori $\pi_{ik} = \pi_{1i} \pi_{2k}$.

Possiamo dimostrare che l'entropia è additiva, ossia l'entropia di sistemi non interagenti è la somma delle singole entropie dei sistemi, usando l'espressione rispetto agli autovalori:

$$\begin{aligned} S[\hat{\rho}] &= -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}) = -k_B \sum_{ik} \pi_{1i} \pi_{2k} \log(\pi_{1i} \pi_{2k}) = -k_B \sum_{ik} \pi_{1i} \pi_{2k} (\log \pi_{1i} + \log \pi_{2k}) = \\ &= -k_B \sum_{ik} \pi_{1i} \pi_{2k} \log \pi_{1i} - k_B \sum_{ik} \pi_{1i} \pi_{2k} \log \pi_{2k} = \\ &= -k_B \sum_i \pi_{1i} \log \pi_{1i} \sum_k \pi_{2k} - k_B \sum_k \pi_{2k} \log \pi_{2k} \sum_i \pi_{1i} = \\ &= S_1 + S_2 \end{aligned} \quad (12.88)$$

12.7 Principio di Massima Entropia

Nello studio di sistemi costituiti da un numero di particelle dell'ordine del Numero di Avogadro l'informazione che si possiede su una singola particelle è minima. In tal caso per determinare l'operatore statistico ricorriamo al **Principio di Massima Entropia**, ossia richiediamo che l'entropia sia massima per il dato operatore statistico:

$$\boxed{\delta S[\hat{\rho}(t)] = 0} \quad (\delta^2 S[\hat{\rho}(t)] \leq 0) \quad (12.89)$$

In particolare a seconda della situazione potremmo avere informazioni parziali sul sistema, che fanno da vincoli sulla ricerca di questo massimo.

Notiamo come in realtà l'entropia dipenda solo dagli autovalori e non dall'"intero" operatore statistico, così che in realtà la minimizzazione va fatta su un vettore (potenzialmente infinito-dimensionale) $\vec{\pi}$ che contiene gli autovalori dei singoli autovettori (che sono ignoti ai fini del principio di massima entropia):

$$S[\hat{\rho}] = -k_B \sum_i \pi_i \log \pi_i = S(\vec{\pi}) \Rightarrow \boxed{\delta S(\vec{\pi}) = 0} \quad (12.90)$$

In generale un problema di massimizzazione di una funzione a grande (potenzialmente infinito) numero di argomenti è complicato, in quanto la funzione potrebbe ammettere anche minimi o punti di sella. In casi opportuni, ossia con vincoli opportuni, si può però dimostrare che la soluzione è unica e che è un massimo.

12.7.1 Equilibrio Termodinamico

Notiamo che **il principio di massima entropia è indipendente dal tempo**, a meno di imporre vincoli dipendenti dal tempo che non permettono l'equilibrio. Esempi di tali vincoli sono la variazione nel tempo dell'energia, delle particelle (in questo caso lo spazio di Hilbert può variare e dunque serve il formalismo dello spazio di Fock) o del volume (se finito) del sistema.

Se il sistema obbedisce al principio di massima entropia con vincoli indipendenti dal tempo o che ammettono equilibrio allora la soluzione è pure indipendente dal tempo:

$$\delta S[\hat{\rho}(t)] = 0, \forall t \Rightarrow \hat{\rho}(t) = \hat{\rho}, \forall t \Rightarrow \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = 0 \quad (12.91)$$

Per l'equazione di Liouville-von Neumann questo è equivalente a richiedere che l'operatore statistico commuta con l'hamiltoniana del sistema:

$$[\hat{\rho}, \hat{\mathcal{H}}] = 0 \quad (12.92)$$

In questo caso anche l'hamiltoniana non deve dipendere dal tempo, o al più dipendere dal tempo in modo da commutare in ogni istante con il $\hat{\rho}$ che soddisfa il principio di massima entropia con i dati vincoli.

Notiamo come questo *non* implichi che l'energia del sistema sia necessariamente conservata, in quanto questo in generale (e in particolare nel caso di massima entropia) sarà uno stato miscela i cui stati non hanno tutti la stessa energia e dunque non ha senso parlare di conservazione dell'energia.

Per le proprietà degli operatori autoaggiunti questo implica poi che l'operatore statistico e l'hamiltoniana hanno una base di autovettori comune:

$$\hat{\mathcal{H}}|\phi_{ru}\rangle = E_r|\phi_{ru}\rangle \quad \hat{\rho}|\phi_{ru}\rangle = \pi_{ru}|\phi_{ru}\rangle \quad (12.93)$$

Questo significa che gli autovettori si possono trovare usando quelli dell'hamiltoniana. Chiaramente questo è impossibile da risolvere in generale per sistemi di particelle distinte, interagenti tra loro e sistemi non isolati. Nel caso di particelle identiche non interagenti è però possibile se si risolve il problema delle singole particella, in quanto gli autovettori sono semplicemente il prodotto tensoriale dei singoli autovettori e gli autovalori la somma dei singoli autovalori.

Nel caso di sistemi macroscopici, un sistema si dice all'**equilibrio termodinamico** se $\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{P}}_{tot}, \hat{\mathbf{L}}_{tot}$ sono costanti del moto, ossia commutano con l'operatore statistico (e l'hamiltoniana è indipendente dal tempo). Nel caso di un sistema isolato queste sono tutte e sole le costanti del moto, così che:

$$\hat{\rho} = f(\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{P}}_{tot}, \hat{\mathbf{L}}_{tot}) \quad (12.94)$$

12.7.2 Ensemble Microcanonico

Consideriamo il caso più semplice di uno spazio di Hilbert finito dimensionale $\dim \mathcal{H} = N < \infty$ (questo modello è indipendente dal sistema fisico descritto, che potrebbe essere ad esempio quello dei gradi di libertà di spin di certe particelle). Per un generico operatore statistico o equivalentemente vettore $\vec{\pi}$, l'entropia è data da:

$$S = -k_B \sum_{i=1}^N \pi_i \log \pi_i \quad (12.95)$$

In questo caso gli unici vincoli sono che la dimensione è fissata N , le probabilità sono normalizzate e non negative:

$$\sum_{i=1}^N \pi_i = 1 \quad 0 \leq \pi_i \leq 1 \quad (12.96)$$

Notiamo come il vincolo che N sia fissato appare implicitamente nell'espressione dell'entropia. In generale la presenza di un vincolo implica che per massimizzare S non basta semplicemente cercare il suo massimo assoluto. Vediamo però che la S dipende da $\vec{\pi}$ come una funzione analitica. Questo ci permette di massimizzare S con un vincolo analitico usando il **metodo dei moltiplicatori di Lagrange**. Vogliamo dunque massimizzare $F(\lambda, \vec{\pi})$ definita come:

$$F(\lambda, \vec{\pi}) = S(\vec{\pi}) - \lambda \phi(\vec{\pi}) \quad \phi(\vec{\pi}) = \sum_{i=1}^N \pi_i - 1 \quad (12.97)$$

Infatti se F è massimizzata allora:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial \lambda} = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \pi_k} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \phi = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial \pi_k} - \lambda \frac{\partial \phi}{\partial \pi_k} = 0 \end{cases} \quad (12.98)$$

La prima equazione è equivalente al fatto che il vincolo è soddisfatto, mentre la seconda è relativa all'entropia. Esplicitiamo ora la funzione:

$$F(\lambda, \vec{\pi}) = \sum_{i=1}^N (-k_B \pi_i \log \pi_i - \lambda \pi_i) + \lambda \quad (12.99)$$

Esplicitiamo la seconda equazione, vedendo cosa impone sui coefficienti:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \pi_k} &= 0 \\ -k_B \log \pi_k - k_B - \lambda &= 0 \\ \log \pi_k &= -1 - \frac{\lambda}{k_B} \\ \pi_k &= \exp\left(-1 - \frac{\lambda}{k_B}\right) \equiv \pi \end{aligned} \quad (12.100)$$

Questo significa che tutti i coefficienti coincidono:

$$\pi_1 = \pi_2 = \dots = \pi_N = \pi \quad (12.101)$$

e dunque per il vincolo di normalizzazione:

$$1 = \sum_{i=1}^N \pi_i = N\pi \Rightarrow \pi = \frac{1}{N} \quad (12.102)$$

Troviamo dunque l'espressione dell'operatore statistico quando l'entropia è massima in "assenza di vincoli" (il numero minimo di vincoli), anche se non conosciamo gli autovettori:

$$\hat{\rho} = \sum_i \pi |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \pi \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \frac{\mathbb{1}}{N} \quad (12.103)$$

Questo coincide dunque con l'identità normalizzata rispetto alla traccia. Questo significa che questo è lo stato ha uguale probabilità di stare in ogni possibile stato puro del sistema.

Vediamo che questo commuta con ogni operatore e in particolare ogni possibile hamiltoniana, l'impulso totale e il momento angolare totale. Pertanto un sistema descritto da questo operatore statistico è all'equilibrio termodinamico.

Notiamo che per un sistema di particelle $N \rightarrow \infty$ e dunque l'operatore statistico diventa "infinitesimo" (converge debolmente all'operatore nullo). In questo caso parliamo di ensemble microcanonico (di un sistema di particelle).

Ricordiamo poi l'esempio del sistema di due particelle nello stato di Bell $|\phi_0\rangle$. I due sottosistemi stavano proprio in $\mathbb{1}/2$, ossia nello stato che minimizza l'informazione nota su ciascun sottosistema. Questo chiaramente non è vero per l'intero sottosistema, che invece non era proporzionale all'identità.

12.7.3 Ensemble Canonico e Distribuzione di Boltzmann

Un altro comune esempio è quello di un sistema all'equilibrio termodinamico con energia media fissata (e spazio di Hilbert fissato). Questo significa che il problema da risolvere è:

$$\delta S[\hat{\rho}] = 0 \quad \sum_{ru} \pi_{ru} = 1 \quad \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = E \quad (12.104)$$

Se poi assumiamo che il sistema che $\vec{\mathbf{P}}_{tot} = \vec{\mathbf{L}}_{tot} = 0$ (valori attesi delle corrispondenti grandezze valutate sull'operatore statistico) allora dovrà risultare:

$$\hat{\rho} = f(\hat{\mathcal{H}}) \quad (12.105)$$

Pertanto gli autovalori di $\hat{\rho}$ hanno la stessa degenerazione di quelli di $\hat{\mathcal{H}}$ (si "perde" l'indice di degenerazione, diversamente dal caso generale):

$$\hat{\mathcal{H}}|\phi_{ru}\rangle = E_r|\phi_{ru}\rangle \quad \hat{\rho}|\phi_{ru}\rangle = f(E_r)|\phi_{ru}\rangle = \pi_r|\phi_{ru}\rangle \quad (12.106)$$

L'entropia del sistema sarà data dunque da:

$$S = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}) = -k_B \sum_{ru} \pi_r \log \pi_r = -k_B \sum_r \pi_r \log \pi_r \sum_u = -k_B \sum_r g_r \pi_r \log \pi_r \sum_u \quad (12.107)$$

dove g_r è la degenerazione di E_r . Notiamo che i π_r potrebbero avere un'ulteriore degenerazione, che però non è rilevante, come prima.

Esplicitiamo poi l'energia media:

$$E = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\mathcal{H}}) = \sum_{ru} \langle \phi_{ru} | \hat{\rho} \hat{\mathcal{H}} | \phi_{ru} \rangle = \sum_{ru} \pi_r E_r = \sum_r g_r \pi_r E_r \quad (12.108)$$

Stavolta i vincoli prendono la forma:

$$\phi = \sum_r g_r \pi_r - 1 \quad h = \sum_r g_r \pi_r E_r - E = 0 \quad (12.109)$$

Pertanto la funzione da massimizzare è:

$$\begin{aligned} F(\lambda, \mu, \vec{\pi}) &= S(\vec{\pi}) - \lambda \phi(\vec{\pi}) - \mu h(\vec{\pi}) = \\ &= - \sum_r g_r (k_B \pi_r \log \pi_r + \lambda \pi_r + \mu \pi_r E_r) + \lambda - \mu E \end{aligned} \quad (12.110)$$

Cerchiamo quando è stazionaria:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \pi_k} &= 0 \\ -g_k (k_B \log \pi_k + k_B + \lambda + \mu E_k) &= 0 \\ \log \pi_k &= -\mu E_k + c \\ f(E_k) = \pi_k &= \kappa e^{-\mu E_k} \end{aligned} \quad (12.111)$$

Pertanto troviamo:

$$f(E_k) = \kappa e^{-\mu E_k} \Rightarrow \hat{\rho} = \kappa e^{-\mu \hat{\mathcal{H}}} \quad (12.112)$$

Poniamo poi $\mu = \beta$ (che si trova coincidere con $\beta = 1/k_B T$ per definizione di temperatura) e $\kappa = 1/Z$:

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}}{Z} \quad (12.113)$$

dove Z è detta **funzione di partizione** ed è fissata dalla condizione di normalizzazione:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \quad (12.114)$$

Fuori dall'Equilibrio Questi due esempi fatti sono solo due casi semplici dell'applicazione del principio di massima entropia, ma l'entropia di von Neumann è definita in ogni istante e dunque si può applicare anche in situazioni dipendenti dal tempo (nel caso di vincoli dipendenti dal tempo) e quindi sistemi fuori dall'equilibrio termodinamico.

12.8 Operatore Statistico di una Particella a Spin 1/2

12.8.1 Stato Puro

12.8.2 Stato Miscela

Capitolo 13

Paradosso EPR

Uno dei più grandi problemi della meccanica quantistica, ancora ampiamente discusso nella ricerca moderna, è la natura della **misura di un sistema quantistico**. Questo è dovuto alla descrizione stessa di uno stato quantistico, per cui in generale non esistono stati ben definiti di ogni grandezza fisica.

A tal proposito citiamo due note frasi di Richard **Feynman**:

*I think I can safely say that nobody understands Quantum Mechanics.
I was born not understanding QM and I still don't understand QM.*

L'approccio moderno in comuni corsi di meccanica quantistica e in sostanzialmente tutti i campi di ricerca non relativi alle fondamenta si ha però un approccio "di arresa", che si concentra sui risultati pratici della teoria. Storicamente è attribuita a David **Mermin** la seguente citazione, che riassume questo atteggiamento:

Shut up and calculate.

Nella storia della fisica chiaramente ci sono stati innumerevoli tentativi per cercare di spiegare o negare la meccanica quantistica. In questo capitolo esaminiamo uno di questi tentativi, basato sull'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>.

In particolare ci limiteremo a trattare il sistema quantistico più semplice, ossia quello del sistema a due livelli dati dalla parte di spin di una particella a spin $1/2$. Questo permetterà di concentrarci esclusivamente sul significato dei risultati, con il minimo numero di calcoli e complicazioni.

Prima di discutere questi dobbiamo ricavare alcuni semplici risultati preliminari.

13.1 Probabilità di Overlap tra Autostati di Singola Particella

Sia una 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 $\vec{\mathbf{S}}$ della particella abbia come risultato $\hbar/2$, immediatamente dopo che una misura dello spin nella direzione $\hat{\mathbf{a}}$ abbia il risultato $\hbar/2$.

Indicando con $|\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle$ gli autostati dello spin nella direzione:

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{n}} |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle \quad (13.1)$$

allora la quantità $\pi_+(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}})$ coincide con la probabilità di overlap seguente:

$$\pi_+(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \left| \langle \hat{\mathbf{b}}, + | \hat{\mathbf{a}}, + \rangle \right|^2 \quad (13.2)$$

Per trovare questa dobbiamo dunque calcolare la decomposizione di $|\hat{\mathbf{b}}, +\rangle$ nella base $|\hat{\mathbf{a}}, \pm\rangle$.

Si trova:

$$|\hat{\mathbf{b}}, +\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\hat{\mathbf{a}}, +\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\hat{\mathbf{a}}, -\rangle \quad (13.3)$$

Pertanto:

$$\pi_+(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \left| \langle \hat{\mathbf{b}}, + | \hat{\mathbf{a}}, + \rangle \right|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad (13.4)$$

Possiamo anche calcolare la probabilità che la prima misura abbiamo come risultato $\hbar/2$ e la seconda $-\hbar/2$, che è il complementare:

$$\pi_{-}(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \left| \langle \hat{\mathbf{b}}, - | \hat{\mathbf{a}}, + \rangle \right|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (13.5)$$

Notiamo che per $\theta \rightarrow \pi - \theta$, ossia per $\hat{\mathbf{b}} \rightarrow -\hat{\mathbf{b}}$:

$$\pi_{-}(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \pi_{+}(\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}) \quad (13.6)$$

Inoltre per $\theta \rightarrow -\theta$, ossia per $\hat{\mathbf{b}} \longleftrightarrow \hat{\mathbf{a}}$, le probabilità non cambiano:

$$\pi_{\pm}(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \pi_{\pm}(\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{a}}) \quad (13.7)$$

13.2 Probabilità di Overlap tra Autostati Entangled

Sia un sistema di due particelle a spin $1/2$. Gli operatori delle componenti spin di una particella commutano con quelli dell'altra particella. Pertanto ha senso considerare la probabilità che per un dato stato la misure di $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ e $\hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}}$ abbiano entrambe il risultato $\hbar/2$.

In particolare siamo interessati al caso di stato iniziale di singoletto di spin lungo una direzione $\hat{\mathbf{n}}$, che è proporzionale allo stato di Bell $|\phi_2\rangle$ ed è dunque uno stato entangled:

$$\begin{cases} S^2 |\psi\rangle = 0 \\ S_n |\psi\rangle = 0 \end{cases} \Rightarrow |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\hat{\mathbf{n}}, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}, -\rangle_2 - |\hat{\mathbf{n}}, -\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}, +\rangle_2) \quad (13.8)$$

Vogliamo calcolare dunque la probabilità di overlap con lo stato seguente:

$$|\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}\rangle = |\hat{\mathbf{a}}, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{b}}, +\rangle_2 \quad (13.9)$$

Possiamo scrivere in maniera più conveniente la probabilità introducendo il proiettore su questo stato:

$$\hat{\Pi}(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = |\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}\rangle \langle \hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}| \quad (13.10)$$

da cui:

$$P(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \left| \langle \hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}} | \psi \rangle \right|^2 = \langle \psi | \hat{\Pi}(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) | \psi \rangle \quad (13.11)$$

Notiamo adesso che lo stato di singoletto $S^2 = 0$ non ha degenerazioni (come suggerisce il nome) e dunque è determinato univocamente. Questo è indipendente dalla scelta di $\hat{\mathbf{n}}$, così che per ogni $\hat{\mathbf{n}}_1, \hat{\mathbf{n}}_2$ vale:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\hat{\mathbf{n}}_1, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}_1, -\rangle_2 - |\hat{\mathbf{n}}_1, -\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}_1, +\rangle_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\hat{\mathbf{n}}_2, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}_2, -\rangle_2 - |\hat{\mathbf{n}}_2, -\rangle_1 |\hat{\mathbf{n}}_2, +\rangle_2) \quad (13.12)$$

Possiamo dunque scegliere $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{a}}$ in modo da semplificare i conti:

$$\begin{aligned} P(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) &= \langle \psi | \hat{\Pi}(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) | \psi \rangle = \frac{1}{2} [\langle \hat{\mathbf{a}}, + |_1 \langle \hat{\mathbf{a}}, - |_2 - \langle \hat{\mathbf{a}}, - |_1 \langle \hat{\mathbf{a}}, + |_2] \hat{\Pi}(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) [|\hat{\mathbf{a}}, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{a}}, -\rangle_2 - |\hat{\mathbf{a}}, -\rangle_1 |\hat{\mathbf{a}}, +\rangle_2] = \\ &= \frac{1}{2} \left[\langle \hat{\mathbf{a}}, + |_1 \langle \hat{\mathbf{a}}, - |_2 - \langle \hat{\mathbf{a}}, - |_1 \langle \hat{\mathbf{a}}, + |_2 \right] |\hat{\mathbf{a}}, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{b}}, +\rangle_2 \langle \hat{\mathbf{a}}, + |_1 \langle \hat{\mathbf{b}}, + |_2 [|\hat{\mathbf{a}}, +\rangle_1 |\hat{\mathbf{a}}, -\rangle_2 - |\hat{\mathbf{a}}, -\rangle_1 |\hat{\mathbf{a}}, +\rangle_2] = \\ &= \frac{1}{2} \left(\langle \hat{\mathbf{a}}, - |_2 |\hat{\mathbf{b}}, +\rangle_2 \right) \left(\langle \hat{\mathbf{b}}, + |_2 |\hat{\mathbf{a}}, -\rangle_2 \right) = \frac{1}{2} \left| \langle \hat{\mathbf{b}}, + | \hat{\mathbf{a}}, - \rangle \right|^2 = \frac{1}{2} \pi_{-}(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) \end{aligned} \quad (13.13)$$

Troviamo infine:

$$P(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (13.14)$$

13.3 Problemi della Meccanica Quantistica

Facciamo adesso alcune considerazioni seguendo quelle di Einstein, Podolski e Rosen nel loro articolo.

In meccanica quantistica uno dei postulati è l'esistenza di osservabili che non commutano, a partire da posizione e momento e da queste altre grandezze derivate. Sempre per i postulati della meccanica quantistica, legati alla struttura matematica delle teoria, non esistono autostati comuni, ossia stati che abbiano contemporaneamente valori ben definiti

di due tali grandezze. Non solo, in generale è possibile che un sistema quantistico si trovi in uno stato che non ammette un valore ben definito di una generica grandezza fisica, a meno di effettuare una misura.

Quest'ultima caratteristica della meccanica quantistica in particolare pone il problema di poter stabilire quale sia la **realtà oggettiva** dei sistemi quantistici, indipendente dall'aver effettuato o meno una misura. Questo è in netto contrasto con la fisica classica, dove è possibile ad ogni istante il valore ben preciso di un qualunque osservabile. In meccanica quantistica sembra che ciò non accada, ossia che non esistono proprietà oggettive di un sistema quantistico.

Immaginiamo di voler dimostrare il punto di vista di un "fisico quantistico". Potremmo ad esempio considerare l'apparato di misura di Stern e Gerlach. In questo una sorgente lancia un fascio collimato di particelle (atomi di argento) lungo una direzione fissata z . La regione sta tra i due poli di n magneti, che genera un campo magnetico fortemente disomogeneo diretto perpendicolarmente all'asse dell'apparato (chiamiamo $\hat{\mathbf{a}}$), ossia il campo dipende fortemente dalla coordinate x lungo $\hat{\mathbf{x}}$. È inoltre sufficientemente forte da deviare significativamente le particelle che lo attraversano. Nel caso di Stern e Gerlach le particelle sono a spin $1/2$, senza altri momenti di dipolo, così che può assumere solo due valori di spin. Il fascio iniziale si divide dunque in due, a seconda che la componente di spin lungo $\hat{\mathbf{a}}$ sia positiva o negativa.

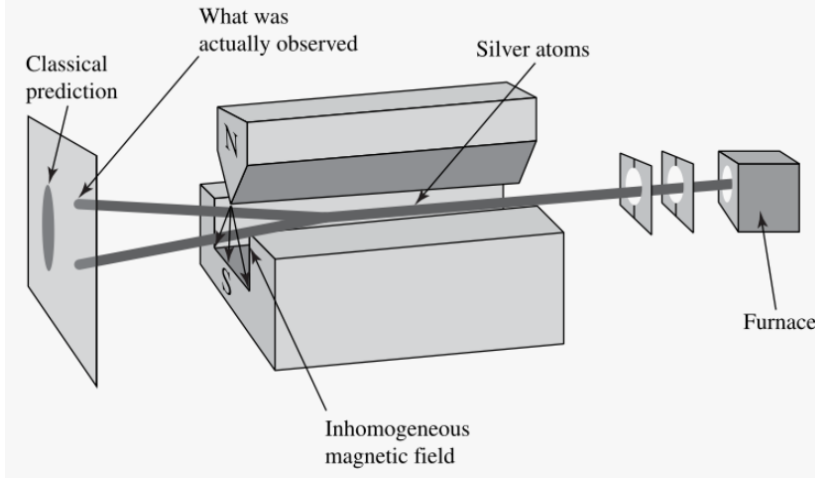


Figura 13.1: Schema dell'Apparato di Stern e Gerlach

Possiamo dunque pensare l'apparato di Stern e Gerlach come un apparato capace di misurare la proiezione dello spin lungo una certa direzione. Un dato apparato può funzionare lungo diverse direzioni se lo ruotiamo attorno al proprio asse.

Immaginiamo adesso di fare il seguente esperimento. Sia una particella lanciata lungo z . Vogliamo fare una misura di spin prima lungo $\hat{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{x}}$ e poi lungo $\hat{\mathbf{b}} = \hat{\mathbf{y}}$. Potremmo trovare dunque $S_x = \hbar/2$ con un primo apparato e poi $S_y = \hbar/2$ con un secondo apparato.

Un fisico classico direbbe che la particella possedeva già queste grandezze anche prima che fosse effettuata la misura.

Un fisico quantistico direbbe invece che ciò non è vero. Per provare questo potremmo usare un terzo apparato diretto nuovamente lungo x . Facendo questa misura su un numero sufficiente di particelle le cui prime misure erano $S_x = \hbar/2, S_y = \hbar/2$, troveremmo che alcune particelle hanno valore $S_x = \hbar/2$ e altre $S_x = -\hbar/2$, con una probabilità di circa $1/2$ per ciascun caso. Pertanto il risultato della seconda misura cambia anche in assenza di un'evoluzione del sistema relativa alla componente x dello spin. 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. Dal punto di vista del fisico quantistico infatti la prima misura produce uno stato $|\hat{\mathbf{x}}, +\rangle$:

$$|\hat{\mathbf{x}}, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{\mathbf{y}}, +\rangle + |\hat{\mathbf{y}}, -\rangle) \quad (13.15)$$

La seconda misura produce invece:

$$|\hat{\mathbf{y}}, +\rangle = \frac{1}{2}(|\hat{\mathbf{x}}, +\rangle + |\hat{\mathbf{x}}, -\rangle) \quad (13.16)$$

Il fisico classico a questo punto potrebbe notare che il fisico quantistico non ha dimostrato che non possono esistere stati con S_x, S_y ben definiti:

$$\exists |\hat{\mathbf{x}}, +; \hat{\mathbf{y}}, +\rangle? \quad (13.17)$$

Aggiungerebbe poi che nella misura l'apparato interagisce con la particella, perturbando lo stato iniziale. Questo giustifica perchè nella seconda misura alcune particelle hanno $S_x = -\hbar/2$ successivamente. Il fisico classico direbbe poi che l'impossibilità di realizzare uno stato in cui le due componenti di spin (e in generale due osservabili che non commutano) è dovuta al fatto che la meccanica quantistica è una teoria incompleta a causa di informazioni mancanti.

13.4 Esperimento Ideale di EPR

Descriviamo adesso l'esperimento ideale elaborato inizialmente nell'articolo EPR ma seguono l'approccio di Bell. Consideriamo la seguente situazione usando la meccanica quantistica ordinaria. Sia una particella η_0 ferma nel sistema del laboratorio ($\vec{p} = 0, \vec{L} = 0$), che ha spin nullo $S = 0$. Inizialmente il momento angolare è nullo:

$$\vec{J} = \vec{S}_{\eta_0} + \vec{L}_{\eta_0} = 0 \quad (13.18)$$

Questa decade decade in due muoni $\eta_0 \rightarrow \mu^+ + \mu^-$, che sono particelle a spin 1/2. Il momento angolare totale sarà dato da:

$$\vec{J} = \vec{S}_+ + \vec{S}_- + \vec{L} = \vec{S} + \vec{L} \quad (13.19)$$

con \vec{L} momento angolare orbitale relativo delle due particelle. Per le regole di quantizzazione del momento angolare:

$$|L - S| \leq J \leq L + S \quad (13.20)$$

Per la conservazione del momento angolare $J = 0$ e dunque $L = S$. Siccome S è la somma di due spin allora può assumere solo i valori 0, 1 e analogamente anche L :

$$L = 0 \iff S = 0 \quad L = 1 \iff S = 1 \quad (13.21)$$

Supponiamo che nel nostro caso $S = L = 0$, che dalla teoria dello scattering con il metodo delle onde parziali sappiamo essere l'ordine predominante a basse energie. Per la conservazione dell'impulso invece:

$$\vec{p} = 0 \Rightarrow \vec{p}_1 = -\vec{p}_2 \quad (13.22)$$

Pertanto le due particelle viaggiano in direzioni opposte, allontanandosi nel tempo.

Lo stato di singoletto di spin può essere scritto come segue, per ogni \hat{n} :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{n}, +\rangle_1 |\hat{n}, -\rangle_2 - |\hat{n}, -\rangle_1 |\hat{n}, +\rangle_2) \quad (13.23)$$

Supponiamo di misurare $\hat{S}_1 \cdot \hat{n}$ e di trovare $\hbar/2$. Dopo la misura il sistema sta nello stato:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\hat{n}, +\rangle_1 |\hat{n}, -\rangle \quad (13.24)$$

Misurando $\hat{S}_2 \cdot \hat{n}$ avremo con certezza $-\hbar/2$, ossia la misura di una particella che sta in uno stato entangled con un'altra particella determina lo stato dell'altra particella.

Nel nostro esempio i due muoni viaggiano in direzioni opposte e dunque possono allontanarsi indefinitamente. Questo significa che la distanza tra le particelle può essere arbitraria, così che l'effetto della misura su uno stato entangled è **non locale**.

Gli autori dell'articolo, basandosi sulla relatività ristretta, fanno uso del **principio di località** [Sak, p. 241], che afferma che due sistemi fisici non possono comunicare tra loro ad una velocità maggiore di quella della luce. Questo è in netto contrasto con il risultato quantistico, che suggerisce che una misura su una particella cambia lo stato dell'altro in maniera **istantanea**. Gli autori dicono dunque che: *se, senza in nessun modo disturbare il sistema, possiamo predire con certezza il valore di quantità fisica, allora deve esistere un elemento di realtà fisica oggettiva che corrisponde a questa quantità fisica*. Nel nostro caso questo implica che devono essere ben definite le componenti di spin di entrambe le particelle lungo \hat{n} , anche prima di effettuare la misura. In particolare siccome lo stato è lo stesso indipendente da \hat{n} allora devono essere ben definite le componenti di entrambe le particelle in *ogni direzione*.

Gli autori concludono dunque che la descrizione della realtà della meccanica quantistica è incompleta, in quanto viola il principio di località.

13.5 Disuguaglianza di Bell

Negli anni '60, Bell riuscì a dimostrare che EPR si sbagliavano, ossia che l'esistenza di uno stato in cui le componenti di spin lungo diverse direzioni sono ben definite è in contraddizione con l'evidenza sperimentale.

Prendiamo il punto di vista di EPR per ottenere alcuni risultati. Questi immaginavano di effettuare due misure. La prima è di $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$, che determina $\hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ senza doverla effettuare, in quanto sappiamo di essere di valore opposto essendo $S = 0$. La seconda è di $\hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}}$, che determina $\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{b}}$ senza doverla effettuare.

Per ciascuna particella è possibile che lo spin lungo una data direzione sia parallelo o antiparallelo, che indichiamo rispettivamente con $\pm\hat{\mathbf{a}}$ e $\pm\hat{\mathbf{b}}$ a seconda della direzione. Rispetto a queste due direzioni una particella può assumere $2^2 = 4$ stati, a ciascuno dei quali corrisponde lo stato "complementare" (tale che $S = 0$):

$$\begin{array}{c|c} (\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) & (-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}) \\ (\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}) & (-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) \\ (-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) & (\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}) \\ (-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}) & (\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) \end{array} \quad (13.25)$$

Possiamo estendere questo ragionamento a tre direzioni, visto che secondo EPR lo spin è definito contemporaneamente lungo ogni direzione. In questo lo stato è specificato dalle tre componenti e dunque abbiamo $2^3 = 8$ casi possibili.

Se avessimo un ensemble di coppie di particelle in stato di singoletto allora potremmo dividerlo in 8 classi a cui è associato un numero N_i , $i = 1, \dots, 8$ di particelle, con una certa distribuzione. Otteniamo dunque la seguente tabella:

$$\begin{array}{c|c|c} N_1 & (\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}}) & (-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}}) \\ N_2 & (\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}}) & (-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}}) \\ N_3 & (\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}}) & (-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}}) \\ N_4 & (\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}}) & (-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}}) \\ N_5 & (-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}}) & (\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}}) \\ N_6 & (-\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}}) & (\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}}) \\ N_7 & (-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}}) & (\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}}) \\ N_8 & (-\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, -\hat{\mathbf{c}}) & (\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}}) \end{array} \quad (13.26)$$

Siccome stiamo considerando un ensemble allora la probabilità di osservare un certo stato di spin su una particella appartenente all'ensemble coincide con la frequenza:

$$P_i = \frac{N_i}{N} \quad N = \sum_{i=1}^8 N_i \quad (13.27)$$

Per confrontare con il risultato quantistico, calcoliamo la probabilità di osservare $S_{1a} = S_{2b} = \hbar/2$, o equivalentemente $S_{1a} = -S_{1b} = \hbar/2$, ossia di tipo $(\hat{\mathbf{a}}, -\hat{\mathbf{b}}, \cdot)$ per la prima particella (complementare per la seconda). I possibili stati sono dunque il 3 e il 4:

$$P(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) = P(S_{1a} = \hbar/2; S_{1b} = -\hbar/2) = P_3 + P_4 = \frac{N_3 + N_4}{N} \quad (13.28)$$

Analogamente:

$$\begin{aligned} P(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{c}}) &= P(S_{1a} = \hbar/2; S_{1c} = -\hbar/2) = P_2 + P_4 \\ P(\hat{\mathbf{c}}, \hat{\mathbf{b}}) &= P(S_{1c} = \hbar/2; S_{1b} = -\hbar/2) = P_3 + P_7 \end{aligned} \quad (13.29)$$

Siccome poi $N_i \geq 0 \Rightarrow P_i \geq 0$:

$$P_4 + P_3 \leq (P_2 + P_4) + (P_3 + P_7) \quad (13.30)$$

Troviamo infine la **disuguaglianza di Bell**:

$$\boxed{P(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}) \leq P(\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{c}}) + P(\hat{\mathbf{c}}, \hat{\mathbf{b}})} \quad (13.31)$$

Verifichiamo subito che questo non è compatibile con il risultato quantistico. Infatti usando le formule ottenute precedentemente:

$$\frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right) \leq \frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\theta_{ac}}{2}\right) + \frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\theta_{bc}}{2}\right) \quad (13.32)$$

Questa non è vera per generiche direzioni. Prendiamo ad esempio tre direzioni complanari con $\hat{\mathbf{c}}$ bisettrice tra $\hat{\mathbf{a}}$ e $\hat{\mathbf{b}}$, ossia $\theta_{\hat{\mathbf{b}}\hat{\mathbf{c}}} = \theta_{\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{c}}} = \theta_{\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{b}}}/2 = \theta$:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \sin^2 \theta &\leq \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) + \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \\ \frac{1}{2} \sin^2 \theta &\leq \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)\end{aligned}\tag{13.33}$$

Approssimiamo per θ piccolo (basterebbe limitarci a dove \sin è crescente):

$$\frac{1}{2} \theta^2 \leq \left(\frac{\theta}{2} \right)^2 \iff \theta^2 \leq \frac{\theta^2}{2}\tag{13.34}$$

Troviamo dunque che questo non è verificato.

Questa disuguaglianza pone dunque una chiara differenza sperimentale che può essere a favore di EPR o della meccanica quantistica. Gli esperimenti fatti a riguardo, cosiddetti "test di Bell", che vanno dagli anni '70 agli ultimi anni, hanno dimostrato che questa disuguaglianza è violata e dunque che l'argomento EPR è falso.

Parte III

Invarianza di Gauge

Capitolo 14

Trasformazioni di Gauge

In questo capitolo discutiamo delle trasformazioni di gauge per i potenziali elettromagnetici nel contesto della teoria semiclassica dell'elettromagnetismo. In particolare vediamo che forma assumono le trasformazioni di gauge in meccanica quantistica e come questo ci porta ad un importante risultato se supponiamo l'esistenza di monopoli magnetici.

14.1 Trasformazioni di Gauge in Meccanica Classica

In meccanica classica le equazioni del moto di una particella carica immersa in un campo elettromagnetico (unità gaussiane) sono date da:

$$m\ddot{\vec{x}} = q\vec{E}(\vec{x}, t) + \frac{q}{c} \dots \vec{x} \wedge \vec{B}(\vec{x}, t) \quad (14.1)$$

Ricordiamo che in unità gaussiane:

$$4\pi\epsilon_0 = \frac{\mu_0}{4\pi} = 1 \quad (14.2)$$

Siccome vogliamo applicare il principio di corrispondenza per arrivare alla formulazione quantistica, dobbiamo passare al formalismo lagrangiano e da questo a quello hamiltoniano. Usando i potenziali:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad \vec{E} = -\nabla V - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (14.3)$$

la lagrangiana è data da:

$$\mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - qV(\vec{x}, t) + \frac{q}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t) \quad (14.4)$$

Le equazioni del moto sono date dalle equazioni di Eulero-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = 0 \quad i = 1, 2, 3 \quad (14.5)$$

I potenziali in realtà sono definiti a meno di una cosiddetta **trasformazione di gauge**:

$$\begin{cases} \vec{A}'(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x}, t) + \nabla \Lambda(\vec{x}, t) \\ V'(\vec{x}, t) = V(\vec{x}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \end{cases} \quad (14.6)$$

Già sappiamo che le equazioni del moto sono invarianti in quanto si riducono all'equazione di Newton. Ricaviamo questo nel formuliamo lagrangiano. Notiamo che la lagrangiana non è invariante:

$$\mathcal{L}'(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) = \vec{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) + \frac{q}{c} \left[\frac{\partial \Lambda}{\partial t} + \dot{\vec{x}} \cdot \nabla \Lambda(\vec{x}, t) \right] = \mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) + \frac{q}{c} \frac{d}{dt} \Lambda(\vec{x}, t) \quad (14.7)$$

Le equazioni del moto si ricavano richiedendo che l'azione sia stazionaria ad estremi fissati $\vec{x}(t_1) = \vec{x}_1^0$, $\vec{x}(t_2) = \vec{x}_2^0$. Dopo la trasformazione di gauge questa assume la seguente forma:

$$\begin{aligned} S'[\vec{x}(t)] &= \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}'(\vec{x}(t), \dot{\vec{x}}(t), t) = S[\vec{x}(t)] + \frac{q}{c} \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d\Lambda}{dt} = \\ &= S[\vec{x}(t)] + \frac{q}{c} [\Lambda(\vec{x}_2, t_2) - \Lambda(\vec{x}_1, t_1)] \end{aligned} \quad (14.8)$$

Siccome $\vec{x}_1, \vec{x}_2, t_1, t_2$ sono fissati allora $\delta S' = \delta S$ e dunque la soluzione è la stessa indipendentemente dalla gauge scelta.

Passiamo ora al formalismo hamiltoniano. Definiamo il **momento canonico**:

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = m\dot{\vec{x}} + \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x}, t) \Rightarrow m\dot{\vec{x}} = \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x}, t) \quad (14.9)$$

Facendo la trasformata di Legendre rispetto alle $\dot{\vec{x}}$ troviamo l'hamiltoniana:

$$H(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - \mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) \Big|_{\dot{\vec{x}}(\vec{p}, \vec{x})} = \frac{1}{2} \left[\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x}, t) \right]^2 + qV(\vec{x}, t) \quad (14.10)$$

da cui le equazioni del moto:

$$\begin{cases} \dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \end{cases} \quad (14.11)$$

Notiamo che come la lagrangiana anche l'hamiltoniana non è invariante di gauge. In particolare l'impulso canonico non è neppure gauge invariante, diversamente da posizione e velocità:

$$\vec{p}' = m\dot{\vec{x}} + \frac{q}{c}\vec{A}'(\vec{x}, t) = \vec{p} + \frac{q}{c}\nabla\Lambda(\vec{x}, t) \quad (14.12)$$

Possiamo però dimostrare che la trasformazione di gauge è canonica e dunque le equazioni del moto sono invarianti, come ci aspettavamo:

$$\begin{cases} \vec{x}' = \vec{x} \\ \vec{p}' = \vec{p} + \frac{q}{c}\nabla\Lambda \end{cases} \quad (14.13)$$

Calcoliamo le parentesi di Poisson per verificare questo:

$$\begin{aligned} \{x'_i, x'_j\} &= \{x_i, x_j\} = 0 \\ \{x'_i, p'_j\} &= \left\{ x_i, p_j + \frac{q}{c}\partial_j\Lambda \right\} = \{x_i, p_j\} + \frac{q}{c}\{x_i, \partial_j\Lambda\} = \\ &= \{x_i, p_j\} + \frac{q}{c}\frac{\partial}{\partial p_i}(\partial_j\Lambda) = \{x_i, p_j\} = \delta_{ij} \\ \{p'_i, p'_j\} &= \left\{ p_i + \frac{q}{c}\partial_i\Lambda, p_j + \frac{q}{c}\partial_j\Lambda \right\} = \{p_i, p_j\} + \frac{q^2}{c^2}\{\partial_i\Lambda, \partial_j\Lambda\} + \frac{q}{c}[\{p_i, \partial_j\Lambda\} + \{\partial_i\Lambda, p_j\}] = \\ &= \frac{q}{c}[-\partial_i\partial_j\Lambda + \partial_i\partial_j\Lambda] = 0 \end{aligned} \quad (14.14)$$

Per trovare la trasformazione dell'hamiltoniana ci conviene definire il **momento meccanico**, che è gauge invariante in quanto proporzionale a $\dot{\vec{x}}$:

$$\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x}, t) = m\dot{\vec{x}} \Rightarrow H = \frac{\pi^2}{2m} + qV(\vec{x}, t) \quad (14.15)$$

In questo modo troviamo facilmente come varia l'hamiltoniana:

$$H' = \frac{\pi'^2}{2m} + qV'(\vec{x}, t) = \frac{\pi^2}{2m} + qV(\vec{x}, t) - \frac{q}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t} = H - \frac{q}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t} \quad (14.16)$$

Tuttavia non ci conviene formulare le equazioni del moto usando il momento meccanico in quanto non è un cambiamento di coordinate canonico essendo le parentesi di Poisson in generale non nulle:

$$\begin{aligned} \{\pi_i, \pi_j\} &= \left\{ p_i - \frac{q}{c}A_i, p_j - \frac{q}{c}A_j \right\} = -\frac{q}{c}[\{p_i, A_j\} + \{A_i, p_j\}] = \\ &= -\frac{q}{c}[-\partial_i A_j + \partial_j A_i] = \frac{q}{c}(\partial_i A_j - \partial_j A_i) = \frac{q}{c}\varepsilon_{ijk}B_k \end{aligned} \quad (14.17)$$

Notiamo come il cambiamento sarebbe canonico in assenza di campo magnetico, ma non siamo interessati a questo caso particolare.

14.2 Trasformazioni di Gauge in Meccanica Quantistica

14.2.1 Principio di Corrispondenza

Per discutere delle trasformazioni di gauge e l'invarianza delle equazioni del moto vogliamo usare il principio di corrispondenza tra il formalismo classico e quantistico.

In meccanica classica lo stato di un punto materiale è descritto da un punto γ appartenente allo spazio delle fasi Γ , che è definito astrattamente. Indichiamo con \vec{P}, \vec{X} le funzioni che associano ad uno stato γ_t l'impulso e la posizione:

$$\vec{P}: \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^3 \quad \vec{X}: \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^3 \quad x_i = X_i(\gamma) \quad p_i = P_i(\gamma) \quad (14.18)$$

Nel caso più semplice $\Gamma = \mathbb{R}^6$ e queste funzioni sono solo di proiezione sulle prime tre o seconde tre componenti. Più in generale parliamo chiamiamo un osservabile una funzione a valori reali definita su questo spazio (tipicamente definita a partire da posizione e momento).

Una **trasformazione di coordinate** è invece una trasformazione invertibile (opportunamente regolare e differenziabile) dell'intero spazio delle fasi:

$$G: \Gamma \rightarrow \Gamma \quad \gamma' = G(\gamma) \quad (14.19)$$

In realtà G potrebbe essere una famiglia di funzioni G_t che dipendono dal tempo:

$$\gamma' = G_t(\gamma) \quad (14.20)$$

Se poi siamo interessati all'evoluzione temporale, ad esempio lungo una soluzione delle equazioni del moto, allora:

$$x_i(t) = X_i(\gamma_t) \quad p_i(t) = P_i(\gamma_t) \quad \gamma'_t = G_t(\gamma_t) \quad (14.21)$$

Le coordinate di posizione e momento dopo la trasformazione di coordinate saranno date dunque da:

$$\begin{cases} x'_i(t) = X_i(\gamma'_t) \\ p'_i(t) = P_i(\gamma'_t) \end{cases} \quad (14.22)$$

Nel caso di una trasformazione di gauge:

$$\begin{cases} x'_i(t) = x_i(t) \\ p'_i(t) = p_i(t) + \frac{q}{c} \partial_i \Lambda(\vec{x}(t), t) \end{cases} \iff \begin{cases} X_i(\gamma'_t) = X_i(\gamma_t) \\ P_i(\gamma'_t) = P_i(\gamma_t) + \frac{q}{c} \partial_i \Lambda(\vec{x}, t) \Big|_{\vec{x}=\vec{x}(\gamma_t)} \end{cases} \quad (14.23)$$

Possiamo fare ora la corrispondenza tra caso classico e quantistico:

$$\begin{aligned} \Gamma &\iff \mathcal{H} \\ \gamma_t &\iff |\psi(t)\rangle \\ X_i &\iff \hat{X}_i \\ P_j &\iff \hat{P}_j \\ X_i(\gamma_t) &\iff \langle \psi(t) | \hat{X}_i | \psi(t) \rangle \\ P_i(\gamma_t) &\iff \langle \psi(t) | \hat{P}_i | \psi(t) \rangle \end{aligned} \quad (14.24)$$

Siccome la trasformazione di coordinate deve essere invertibile e manda uno stato normalizzato in uno stato normalizzato allora l'operatore corrispondente alla trasformazione di gauge deve essere **unitario**:

$$\gamma_t \mapsto \gamma'_t = G(\gamma_t) \iff |\psi(t)\rangle \mapsto |\psi'(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(t)\rangle \quad (14.25)$$

Le trasformazioni di gauge in termini di coordinate saranno date dunque da:

$$\begin{cases} X_i(\gamma'_t) = X_i(\gamma_t) \\ P_i(\gamma'_t) = P_i(\gamma_t) + \frac{q}{c} \partial_i \Lambda(\vec{x}, t) \Big|_{\vec{x}=\vec{x}(\gamma_t)} \end{cases} \iff \begin{cases} \langle \psi'(t) | \hat{X}_i | \psi'(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{X}_i | \psi(t) \rangle \\ \langle \psi'(t) | \hat{P}_i | \psi'(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{P}_i + \frac{q}{c} \partial_i \hat{\Lambda} | \psi(t) \rangle \end{cases} \quad (14.26)$$

dove abbiamo definito il seguente operatore:

$$\hat{\Lambda}(t) = \Lambda(\vec{x}, t) \Big|_{\vec{x}=\vec{x}} \quad (14.27)$$

14.3 Operatore di Trasformazione di Gauge

Ricaviamo ora l'operatore di trasformazione di gauge $\hat{U}(t)$. Esplicitiamo prima di tutto la trasformazione di Gauge:

$$\begin{cases} \langle \psi(t) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{X}_i \hat{U}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{X}_i | \psi(t) \rangle \\ \langle \psi(t) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{P}_i \hat{U}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{P}_i + \frac{q}{c} \partial_i \hat{\Lambda} | \psi(t) \rangle \end{cases} \quad (14.28)$$

Siccome queste identità scalari sono verificate per ogni $|\psi(t)\rangle$ allora valgono anche le identità operatoriali 2.10:

$$\begin{cases} \hat{U}^\dagger(t) \hat{X}_i \hat{U}(t) = \hat{X}_i \\ \hat{U}^\dagger(t) \hat{P}_i \hat{U}(t) = \hat{P}_i + \frac{q}{c} \partial_i \hat{\Lambda} \end{cases} \quad (14.29)$$

Verifichiamo immediatamente che queste equazioni determinano una soluzione a meno di una fase dipendente dal tempo. Siano due soluzioni $\hat{U}_1(t), \hat{U}_2(t)$, i secondo membri sono invariati:

$$\begin{cases} \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{X}_i \hat{U}_1(t) = \hat{U}_2^\dagger(t) \hat{X}_i \hat{U}_2(t) \\ \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{P}_i \hat{U}_1(t) = \hat{U}_2^\dagger(t) \hat{P}_i \hat{U}_2(t) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{X}_i = \hat{X}_i \hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t) \\ \hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{P}_i = \hat{P}_i \hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} [\hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t), \hat{X}_i] = 0 \\ [\hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t), \hat{P}_i] = 0 \end{cases} \quad (14.30)$$

Siccome le \hat{X}_i, \hat{P}_j formano un sistema irriducibile allora qualunque operatore che commuta è necessariamente proporzionale all'identità:

$$\hat{U}_2(t) \hat{U}_1^\dagger(t) = c(t) \mathbb{1} \Rightarrow \hat{U}_2(t) = c(t) \hat{U}_1(t) \Rightarrow \hat{U}_2^\dagger(t) \hat{U}_2(t) = |c(t)|^2 \hat{U}_1^\dagger(t) \hat{U}_1(t) \Rightarrow 1 = |c(t)| \quad (14.31)$$

e dunque $c(t) = e^{i\phi(t)}$. Pertanto dal punto di vista fisico questa fase non contribuisce alla dinamica in quanto la stessa per ogni stato (ad istante fissato).

Verifichiamo adesso che la seguente ansatz è una soluzione a questa coppie di equazioni:

$$\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \quad \hat{\Lambda} = \Lambda(\vec{x}, t) \Big|_{\vec{x}=\hat{\vec{x}}} \quad (14.32)$$

Immediatamente vediamo che soddisfa la prima in quanto commuta con le \hat{X}_i . Verifichiamo la seconda:

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger(t) \hat{P}_i \hat{U}(t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \hat{P}_i \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \left[\hat{P}_i \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \right] = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \hat{P}_i - \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right), \hat{P}_i \right] \right\} = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \hat{P}_i - i\hbar \partial_i \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \right] \right\} = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \hat{P}_i - i\hbar \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}\right) \frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \partial_i \hat{\Lambda} \right\} = \\ &= \hat{P}_i + \frac{q}{c} \partial_i \hat{\Lambda}(t) \end{aligned} \quad (14.33)$$

dove abbiamo usato:

$$\begin{cases} \hat{f} = f(\vec{x}) \Big|_{\vec{x}=\hat{\vec{x}}} \\ \partial_i \hat{f} = \frac{\partial f}{\partial x_i} \Big|_{\vec{x}=\hat{\vec{x}}} \end{cases} \quad \frac{1}{i\hbar} [\hat{f}, \hat{P}_i] = \partial_i \hat{f} \Rightarrow [\hat{f}, \hat{P}_i] = i\hbar \partial_i \hat{f} \quad (14.34)$$

La soluzione più generale è dunque:

$$\boxed{\hat{U}(t) = e^{i\phi(t)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}(t)\right)} \quad (14.35)$$

In realtà possiamo dimostrare anche che $\phi(t)$ è una fase costante ϕ_0 , ma per fare questo dobbiamo considerare l'evoluzione dinamica del sistema e dunque l'hamiltoniana.

Notiamo che questo operatore è diagonale nello spazio delle configurazioni, dove diventa una semplice fase dipendenza da posizione e tempo (trascuriamo $\phi(t)$):

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x} | \hat{U}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \vec{x} | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \hat{\Lambda}(t)\right) | \psi(t) \rangle = \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\vec{x}, t)\right) \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\vec{x}, t)\right) \psi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (14.36)$$

14.4 Quantizzazione dell'Hamiltoniana di una Particella in un Campo Elettromagnetico

Cerchiamo adesso di trovare l'operatore di hamiltoniano. Ordinariamente useremo la semplice corrispondenza $\vec{x} \rightarrow \hat{\vec{X}}, \vec{p} \rightarrow \hat{\vec{P}}$, tuttavia nel caso dell'elettromagnetismo il prodotto scalare $\vec{p} \cdot \vec{A}$ rende questa corrispondenza ambigua in quanto gli operatori $\hat{\vec{P}}$ e $\hat{\vec{A}}$ non commutano:

$$\sum_i \hat{P}_i \hat{A}_i \neq \sum_i \hat{A}_i \hat{P}_i \Rightarrow \vec{p} \cdot \vec{A} \rightarrow ? \quad (14.37)$$

Siccome il prodotto scalare è lineare possiamo richiedere che l'operatore corrispondente sia pure lineare nelle componenti:

$$\vec{p} \cdot \vec{A} \rightarrow \sum_i c_i \hat{P}_i \hat{A}_i + \sum_i (1 - c_i) \hat{A}_i \hat{P}_i \quad (14.38)$$

Imponiamo che l'operatore sia hermitiano:

$$\begin{aligned} \sum_i c_i \hat{P}_i \hat{A}_i + \sum_i (1 - c_i) \hat{A}_i \hat{P}_i &= \sum_i c_i^* \hat{A}_i^\dagger \hat{P}_i^\dagger + \sum_i (1 - c_i^*) \hat{P}_i^\dagger \hat{A}_i^\dagger \\ \sum_i c_i \hat{P}_i \hat{A}_i + \sum_i (1 - c_i) \hat{A}_i \hat{P}_i &= \sum_i (1 - c_i^*) \hat{P}_i \hat{A}_i + \sum_i c_i^* \hat{A}_i \hat{P}_i \\ c_i &= 1 - c_i^* \\ c_i + c_i^* &= 1 \\ \text{Re } c_i &= \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (14.39)$$

Pertanto i coefficienti dovranno essere della forma:

$$c_i = \frac{1}{2} + i\kappa_i \quad \kappa_i \in \mathbb{R} \quad (14.40)$$

L'operatore corrispondente al prodotto scalare $\vec{p} \cdot \vec{A}$ sarà dunque:

$$\begin{aligned} \vec{p} \cdot \vec{A} &\rightarrow \sum_i \left(\frac{1}{2} + i\kappa_i \right) \hat{P}_i \hat{A}_i + \sum_i \left(\frac{1}{2} - i\kappa_i \right) \hat{A}_i \hat{P}_i = \\ &= \frac{1}{2} \sum_i (\hat{P}_i \hat{A}_i + \hat{A}_i \hat{P}_i) - i \sum_i \kappa_i (\hat{A}_i \hat{P}_i - \hat{P}_i \hat{A}_i) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_i (\hat{P}_i \hat{A}_i + \hat{A}_i \hat{P}_i) - i \sum_i \kappa_i [\hat{A}_i, \hat{P}_i] = \\ &= \frac{1}{2} \sum_i (\hat{P}_i \hat{A}_i + \hat{A}_i \hat{P}_i) + \hbar \sum_i \kappa_i \partial_i \hat{A}_i \end{aligned} \quad (14.41)$$

Restano ancora da stabilire i coefficienti κ_i . Per fissare questi la scelta naturale è data dalla proprietà di invarianza di gauge del momento meccanico. L'operatore corrispondente è dato da:

$$\hat{\vec{\pi}} = \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c} \hat{\vec{A}} \quad (14.42)$$

Sotto trasformazioni di gauge l'operatore cambia:

$$\hat{\vec{\pi}}' = \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c} \hat{\vec{A}}' = \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c} \hat{\vec{A}} - \frac{q}{c} \nabla \Lambda = \hat{\vec{\pi}} - \frac{q}{c} \nabla \Lambda \quad (14.43)$$

La condizione di invarianza di gauge (come per la posizione) ricordiamo essere equivalente a:

$$\hat{U}^\dagger(t) \hat{\vec{\pi}}' \hat{U}(t) = \hat{\vec{\pi}} \quad (14.44)$$

Verifichiamo che sia vera:

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger(t) \hat{\pi}_i' \hat{U}(t) &= \hat{U}^\dagger(t) \left(\hat{P}_i - \frac{q}{c} \hat{A}_i' \right) \hat{U}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{P}_i \hat{U}(t) - \frac{q}{c} \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_i' \hat{U}(t) = \\ &= \hat{P}_i + \frac{q}{c} \partial_i \Lambda - \frac{q}{c} \hat{A}_i' = \hat{P}_i - \frac{q}{c} \hat{A}_i = \hat{\pi}_i \end{aligned} \quad (14.45)$$

In realtà siamo più che altro interessati al quadrato $\hat{\pi} \cdot \hat{\pi}$, per cui però vale lo stesso. Pertanto l'operatore hamiltoniano si ottiene partendo dall'espressione rispetto al momento meccanico:

$$H = \frac{\pi^2}{2m} + qV(\vec{x}, t) \iff \hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\pi}^2}{2m} + q\hat{V} \quad (14.46)$$

Vediamo cosa significa questa scelta in termini dei coefficienti detti prima:

$$\begin{aligned} \pi^2 &\rightarrow \hat{\pi}^2 \\ \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 &\rightarrow \left(\hat{\vec{P}} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 \\ p^2 + \frac{q^2}{c^2}A^2 - 2\frac{q}{c}\vec{p} \cdot \vec{A} &\rightarrow \hat{P}^2 + \frac{q^2}{c^2}A^2 - \frac{q}{c}\left(\hat{\vec{P}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{\vec{P}}\right) \\ \vec{p} \cdot \vec{A} &\rightarrow \hat{\vec{P}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{\vec{P}} = \sum_i (\hat{P}_i \hat{A}_i + \hat{A}_i \hat{P}_i) \end{aligned} \quad (14.47)$$

dove la potenza $\hat{\pi}^2$ è definita in maniera univoca in quanto simmetrica, mentre il prodotto scalare tra operatori vettoriali è definito dipendente dall'ordine e quindi in generale asimmetrico:

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = \sum_i \hat{A}_i \hat{B}_i \quad (14.48)$$

Pertanto questa scelta corrisponde a $\kappa_i = 0$. Notiamo che ogni scelta dei κ_i avrebbe fornito una scelta autoconsistente ma questa è tipicamente la più comoda. In realtà questa scelta può essere ricondotta alle più generali **regole di quantizzazione di Weyl** o anche **ordinamento di Weyl**, per cui vale la seguente corrispondenza:

$$(ap_i + bx_i) \rightarrow (a\hat{P}_i + b\hat{X}_i)^m \quad (14.49)$$

Vediamo poi che come in meccanica classica l'hamiltoniana non invariante di gauge, in quanto V non è gauge invariante:

$$\hat{\mathcal{H}}' = \frac{1}{2m}\hat{\pi}'^2 + q\hat{V}' = \frac{1}{2m}\hat{\pi}^2 + q\hat{V} - \frac{q}{c}\partial_t\hat{\Lambda} = \hat{\mathcal{H}} - \frac{q}{c}\partial_t\hat{\Lambda} \neq \hat{\mathcal{H}} \quad (14.50)$$

14.5 Scelta della Fase negli Operatori di Trasformazione di Gauge

Nota l'hamiltoniana e la sua trasformazione di gauge possiamo adesso ricavare che la fase non varia nel tempo e dunque può essere eliminata. Per fare questo usiamo il fatto che l'equazione di Schrodinger deve essere invariante per trasformazioni di gauge, ossia se $|\psi(t)\rangle$ è soluzione per hamiltoniana $\hat{\mathcal{H}}$ allora lo stato trasformato $|\psi'(t)\rangle$ è soluzione con l'hamiltoniana trasformata $\hat{\mathcal{H}}'$:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\psi(t)\rangle \iff i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi'(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}'|\psi'(t)\rangle \quad (14.51)$$

Vediamo cosa succede al secondo membro trasformato facendo uso solo dell'equazione di Schrodinger non trasformata:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi'(t)\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\hat{U}(t)|\psi(t)\rangle) = \\ &= i\hbar\hat{U}(t)\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \\ &= \hat{U}(t)\hat{\mathcal{H}}|\psi(t)\rangle + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \\ &= \hat{U}(t)\hat{\mathcal{H}}\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)|\psi(t)\rangle + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)|\psi(t)\rangle = \\ &= \left[\hat{U}(t)\hat{\mathcal{H}}\hat{U}^\dagger(t) + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^\dagger(t)\right]|\psi'(t)\rangle \end{aligned} \quad (14.52)$$

Ma questo coincide con $\hat{\mathcal{H}}'|\psi'(t)\rangle$ se e solo se:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}' &= \hat{U}(t)\hat{\mathcal{H}}\hat{U}^\dagger(t) + i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}(t)\left(\frac{1}{2m}\hat{\pi}^2 + q\hat{V}\right)\hat{U}^\dagger(t) + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i\phi(t)}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\hat{\Lambda}\right)\right)\hat{U}^\dagger(t) = \\ &= \frac{1}{2m}\hat{\pi}'^2 + q\hat{V}' - \frac{q}{c}\frac{\partial\hat{\Lambda}}{\partial t} - \hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = \\ &= \frac{1}{2m}\hat{\pi}'^2 + q\hat{V}' - \hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}' - \hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} \end{aligned} \quad (14.53)$$

Questo è possibile dunque se e solo se $\frac{\partial\phi}{\partial t}$, ossia la fase è costante, come volevasi dimostrare.

14.5.1 Inclusione dello Spin

Notiamo come non abbiamo incluso la possibile che la particella avesse spin e un fattore giromagnetico non nullo. In tal caso anche lo spin interagisce internamente, ma accoppiandosi direttamente ai campi fisici, non i potenziali:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}\hat{\pi}^2 + q\hat{V} - g_s \frac{q}{2mc} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{B}} + \frac{q}{2m^2 c^2} (g_s - 1) \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{P}} \times \hat{\mathbf{E}} \quad (14.54)$$

Siccome i termini a cui è accoppiato non variano per trasformazioni di gauge allora lo spin dovrà essere pure invariante di gauge, come per gli operatori posizione (e momento meccanico):

$$\hat{U}^\dagger(t) \hat{\mathbf{S}} \hat{U}(t) = \hat{\mathbf{S}} \quad (14.55)$$

14.6 Monopolo Magnetico nelle Equazioni di Maxwell

Vogliamo adesso studiare una particolare soluzione delle equazioni di Maxwell (microscopiche). Ricordiamo che in presenza di cariche e momenti magnetici puntiformi queste hanno la forma seguente (unità gaussiane):

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} = 4\pi \sum_i q_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \\ \nabla \times \vec{\mathbf{E}} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} = 0 \\ \nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0 \\ \nabla \times \vec{\mathbf{H}} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \sum_i q_i \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \end{cases} \quad (14.56)$$

dove:

$$\vec{\mathbf{B}} = \vec{\mathbf{H}} + 4\pi \sum_i \vec{\mathbf{m}}_i(t) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \quad (14.57)$$

Notiamo che per la terza equazione di Maxwell il campo di induzione magnetica è solenoidale. Siamo però interessati a studiare le conseguenze dell'esistenza di **monopoli magnetici**, seguendo l'approccio di Dirac. Queste sono cariche magnetiche elementari, che appaiono nella divergenza di $\vec{\mathbf{B}}$ analogamente alle cariche elettriche nella divergenza di $\vec{\mathbf{E}}$:

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = \sum_i g_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \quad (14.58)$$

Notiamo però che come il moto delle cariche elettriche genera un campo magnetico rotazionale, ci aspettiamo che il moto delle cariche magnetiche generi un campo elettrico rotazionale. Più precisamente, se:

$$\nabla \times \vec{\mathbf{H}} = \frac{1}{c} \vec{\mathbf{J}}_{tot} \quad \vec{\mathbf{J}}_{tot} = \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} + 4\pi \sum_i q_i \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \quad (14.59)$$

allora l'equazione sul rotore di $\vec{\mathbf{E}}$ va modificata come segue:

$$\nabla \times \vec{\mathbf{E}} = \frac{1}{c} \vec{\mathbf{J}}_{tot}^M \quad \vec{\mathbf{J}}_{tot}^M = -\frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} + \sum_i g_i \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \quad (14.60)$$

Escludendo i dipoli magnetici:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} = 4\pi \sum_i q_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \\ \nabla \times \vec{\mathbf{E}} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} - \frac{1}{c} \sum_i g_i \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \\ \nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = \sum_i g_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \\ \nabla \times \vec{\mathbf{H}} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \sum_i q_i \vec{\mathbf{v}}_i(t) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \end{cases} \quad (14.61)$$

14.7 Potenziale Vettore di un Monopolo Magnetico

Vogliamo adesso considerare il moto di una particella carica nel campo generato da un monopolo magnetico fermo. Chiaramente in questo caso $\vec{E} = 0$ e dunque le equazioni di Maxwell si riducono a due:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{B} = g\delta(\vec{x}) \\ \nabla \times \vec{B} = 0 \end{cases} \quad (14.62)$$

Queste forniscono la soluzione:

$$\vec{B} = \frac{g}{4\pi r^2} \hat{r} \quad (14.63)$$

L'equazione del moto classica è ben definita:

$$m\ddot{\vec{x}} = \frac{q}{c} \vec{v} \times \vec{B} \quad (14.64)$$

Tuttavia la formulazione hamiltoniana (nella gauge $V = 0$, permessa da $\vec{E} = 0$) è ambigua:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 \quad (14.65)$$

14.7.1 Problema del Potenziale Vettore

Vediamo adesso che non può esistere un potenziale magnetico ben definito in tutto lo spazio fuori dall'origine. Questa è una conseguenza del seguente teorema, che enunciamo solamente:

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 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ è semplicemente connessa se ogni superficie chiusa $\Sigma \subset \Omega$ può essere contratta in maniera continua ad un punto senza uscita da Ω . Pertanto l'esistenza (e assenza) di un potenziale vettore ben definito è dovuta a motivi di carattere **topologico**.

Siccome per un monopolo magnetico il campo è definito in $\Omega = \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$, che non è semplicemente connesso, allora non ammette potenziale vettore ovunque.

Nel nostro semplice caso possiamo dimostrare che il potenziale non esiste direttamente usando il Teorema di Stokes. Supponiamo per assurdo che esista \vec{A} ben definito ovunque. Sia $\gamma \subset \Omega$ una curva chiusa percorsa in un certo senso e Σ_γ una superficie aperta con $\partial\Sigma_\gamma = \gamma$ e normale \hat{n} definita tramite la regola della mano destra rispetto al senso in cui è percorsa γ . Per il teorema di Stokes:

$$\oint_\gamma \vec{A} \cdot d\vec{x} = \int_{\Sigma_\gamma} \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma \quad (14.66)$$

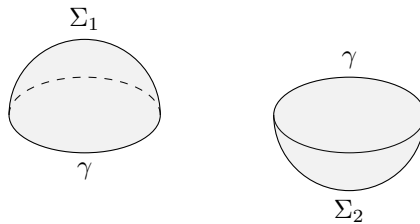
Prendiamo per semplicità come curva una circonferenza di raggio r centrata in O , che fissa il valore dell'integrale di linea di \vec{A} . Scegliamo come superficie la semisfera con normale uscente dal suo centro:

$$\int_{\Sigma_1} \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma = \int_{2\pi} d\Omega r^2 \frac{g}{4\pi r^2} \hat{n} \cdot \hat{n} = \frac{g}{4\pi} \int_{2\pi} d\Omega = \frac{g}{2} \quad (14.67)$$

Se invece prendiamo la semisfera con normale entrante troviamo:

$$\int_{\Sigma_2} \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma = -\frac{g}{2} \quad (14.68)$$

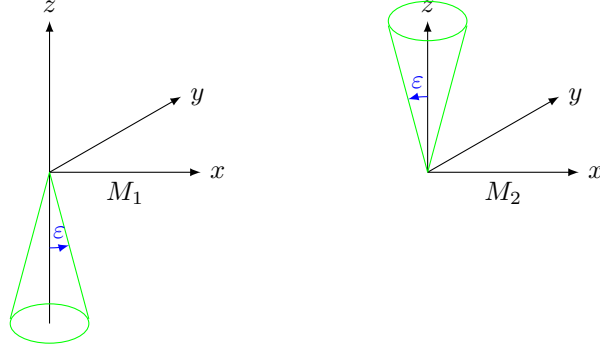
Questo è un assurdo, come volevasi dimostrarsi.



14.7.2 Divisione in Carte

Per poter usare il formalismo hamiltoniano (da cui l'operatore hamiltoniano per la meccanica quantistica) possiamo pensare di definire **due potenziali vettori** su due carte, in modo che ciascuna sia semplicemente connessa. Una possibile scelta è quella in cui in una carta togliamo da \mathbb{R}^3 un cono di piccola apertura e nell'altra togliamo il cono simmetrico con stesso asse. Più precisamente, prendendo i coni con asse lungo z , scegliamo le carte:

$$M_1 = \mathbb{R}^3 \setminus C_1 = \{\vec{x} \in \mathbb{R}^3 : 0 \leq \theta \leq \pi - \varepsilon\} \quad M_2 = \mathbb{R}^3 \setminus C_2 = \{\vec{x} \in \mathbb{R}^3 : \varepsilon \leq \theta \leq \pi\} \quad 0 < \varepsilon < \frac{\pi}{2} \quad (14.69)$$



Chiaramente queste sono semplicemente connesse e la loro unione coincide con Ω :

$$M_1 \cup M_2 = \mathbb{R}^3 \setminus (C_1 \cap C_2) = \mathbb{R}^3 \setminus \{0\} = \Omega \quad (14.70)$$

14.7.3 Calcolo dei Potenziali Vettori

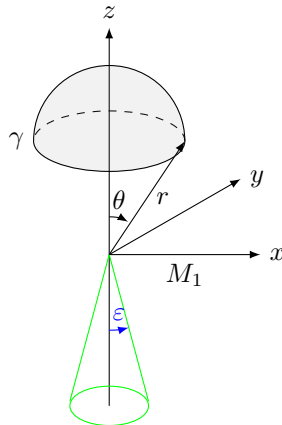
Possiamo ora cercare potenziali \vec{A}_1, \vec{A}_2 tali che:

$$\begin{cases} \vec{B}(\vec{x}) = \nabla \times \vec{A}_1(\vec{x}) & x \in M_1 \\ \vec{B}(\vec{x}) = \nabla \times \vec{A}_2(\vec{x}) & x \in M_2 \end{cases} \quad (14.71)$$

Sfruttando la simmetria del campo magnetico e dei domini facciamo la seguente ansatz:

$$\vec{A}_k(\vec{x}) = f_k(r, \theta) \hat{e}_\phi \quad (14.72)$$

Per trovare le f_k usiamo sempre il Teorema di Stokes. Cerchiamo prima f_1 . Scegliamo come curva la circonferenza di apertura θ percorsa in senso antiorario e distanza r dal centro, mentre come superficie la calotta sferica di raggio r corrispondente.



Troviamo:

$$\begin{aligned} \oint_{\gamma} \vec{A} \cdot d\vec{x} &= \int_0^{2\pi} d\phi r \sin \theta f_1(r, \theta) = 2\pi r \sin \theta f_1(r, \theta) \\ \int_{\Sigma} \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma &= \int_0^{\theta} d\theta' \sin \theta' \int_0^{2\pi} d\phi r^2 \frac{g}{4\pi r^2} = \frac{g}{2} (1 - \cos \theta) \end{aligned} \quad (14.73)$$

da cui:

$$f_1(r, \theta) = \frac{g}{4\pi r} \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \quad (14.74)$$

Per \vec{A}_2 il procedimento è simile, scegliendo la circonferenza percorsa in senso orario a distanza r e apertura θ e come superficie la calotta sferica corrispondenza, che ha normale entrante. In questo modo $\theta \rightarrow \pi - \theta$ ed $\hat{n} \rightarrow -\hat{n}$ troviamo:

$$\vec{A}_2(\vec{x}) = -\frac{g}{4\pi r} \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi \quad (14.75)$$

Verifichiamo che questi sono potenziali opportuni calcolandone il rotore. Ricordiamo l'espressione in coordinate sferiche nel caso di $\vec{A} = A_\phi \hat{e}_\phi$, $\partial_r(rA_\phi) = 0$:

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{A} &= \hat{e}_r \left[\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (A_\phi \sin \theta) - \frac{\partial A_\theta}{\partial \phi} \right] + \hat{e}_\theta \frac{1}{r} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial A_r}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial r} (rA_\phi) \right] + \hat{e}_\phi \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (rA_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial \theta} \right] = \\ &= \hat{e}_r \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (A_\phi \sin \theta) \end{aligned} \quad (14.76)$$

In entrambi i casi troviamo il campo del monopolo:

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{A}_1 &= \hat{e}_r \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{g}{4\pi r} \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \sin \theta \right) = \frac{g}{4\pi r^2} \hat{e}_r \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (1 - \cos \theta) = \vec{B} \\ \nabla \times \vec{A}_2 &= \hat{e}_r \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(-\frac{g}{4\pi r} \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} \sin \theta \right) = -\frac{g}{4\pi r^2} \hat{e}_r \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (1 + \cos \theta) = \vec{B} \end{aligned} \quad (14.77)$$

14.7.4 Intersezione delle Carte

Notiamo adesso che affinché i due potenziali siano compatibili nell'intersezione allora devono essere distinti per una trasformazione di gauge, ossia differiscono di un gradiente:

$$\nabla \Lambda(\vec{x}) = \vec{A}_1(\vec{x}) - \vec{A}_2(\vec{x}) = \frac{g}{4\pi r} \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi + \frac{g}{4\pi r} \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi = \frac{g}{2\pi r \sin \theta} \hat{e}_\phi \quad (14.78)$$

Scriviamo il gradiente in coordinate sferiche:

$$\nabla \phi = \hat{e}_r \frac{\partial \Lambda}{\partial r} + \hat{e}_\theta \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \Lambda}{\partial \theta} + \hat{e}_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial \Lambda}{\partial \phi} \quad (14.79)$$

da cui ricaviamo:

$$\frac{d\Lambda}{d\phi} = r \sin \theta \frac{g}{2\pi r \sin \theta} = \frac{g}{2\pi} \Rightarrow \Lambda(\vec{x}) = \frac{g}{2\pi} \phi \quad (14.80)$$

Vediamo dunque che Λ è **polidroma** in $M_1 \cap M_2$ in quanto fa un salto $\Lambda(2\pi) - \Lambda(0) = -g \neq 0$.

14.8 Monopolo Magnetico in Meccanica Classica

Vediamo adesso cosa succede in meccanica classica in presenza di un monopolo magnetico. In questo caso dobbiamo usare due hamiltoniane ciascuna definita sulla rispettiva carta del potenziale vettore:

$$H_k(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}_k(\vec{x}) \right)^2 \quad \vec{x} \in M_k \quad k = 1, 2 \quad (14.81)$$

Ci chiediamo adesso cosa succede al moto di una particella nell'intersezione $M_1 \cap M_2$. Il moto può essere risolto senza ambiguità, trovando la soluzione "astratta" γ_t . In entrambe le carte lo stato astratto è lo stesso:

$$\gamma_t = \begin{cases} (\vec{x}_1(t), \vec{p}_1(t)) & \vec{x}_1(t) \in M_1 \\ (\vec{x}_2(t), \vec{p}_2(t)) & \vec{x}_2(t) \in M_2 \end{cases} \quad (14.82)$$

Cambiano dunque solo le coordinate secondo la legge di trasformazione di gauge:

$$\begin{cases} \vec{x}_1(t) = \vec{x}_2(t) = \vec{x}(t) \\ \vec{p}_2(t) = \vec{p}_1(t) + \frac{q}{c} \nabla \Lambda(\vec{x}(t)) \end{cases} \quad \vec{x}(t) \in M_1 \cap M_2 \quad (14.83)$$

Supponiamo ad esempio $\vec{x}(0) \in M_1$, così che l'evoluzione è inizialmente dovuta ad H_1 . Se ad un certo istante t_0 l'orbita arriva al bordo di M_1 allora dobbiamo passare alla carta M_2 , con $\vec{x}_1(t_0) \rightarrow \vec{x}_2(t_0)$, $\vec{p}_1(t_0) \rightarrow \vec{p}_2(t_0)$. Pertanto vi è continuità per la posizione ma una discontinuità del momento canonico.

Dall'istante t_0 l'evoluzione temporale segue H_2 con le condizioni iniziali $\vec{x}_2(t_0), \vec{p}_2(t_0)$. Dal punto di vista classico il moto γ_t è dunque ben definito e l'impulso e le coordinate hanno certi valori in ogni istante.

14.9 Monopolo Magnetico in Meccanica Quantistica

In meccanica quantistica l'esistenza del monopolo magnetico, come conseguenza dell'invarianza di gauge. L'esistenza di due hamiltoniane porta a due operatori hamiltoniani:

$$\hat{\mathcal{H}}_k = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}}_k \right)^2 \quad (14.84)$$

L'uso di due carte richiede però di lavorare nello spazio delle configurazioni, dove limitiamo il dominio delle funzioni d'onda alle rispettive carte:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_k(\vec{x}, t) = \hat{\mathcal{H}}_k \psi_k(\vec{x}, t) \quad \psi_k: M_k \rightarrow \mathbb{C} \quad k = 1, 2 \quad (14.85)$$

Nell'intersezione possiamo poi passare dall'una all'altra (ad ogni istante) tramite trasformazione di gauge:

$$\psi_2(\vec{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Lambda(\vec{x}, t)\right) \psi_1(\vec{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} g\phi\right) \psi_1(\vec{x}, t) \quad \vec{x} \in M_1 \cap M_2 \quad (14.86)$$

Richiediamo a questo punto che le **funzioni d'onda** siano ben definite e dunque **monodrome** nell'intersezione. Questo implica che il loro rapporto è monodromo:

$$\frac{\psi_2(\vec{x}, t)}{\psi_1(\vec{x}, t)} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} g\phi\right) = \xi(\vec{x}) \quad (14.87)$$

Questo significa che non vi è un salto tra $\phi = 0$ e $\phi = 2\pi$:

$$\xi(2\pi) = \xi(0) \iff \exp\left(-i \frac{gq}{\hbar c}\right) = 1 \iff \frac{gq}{\hbar c} = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (14.88)$$

Supponiamo esista un singolo monopolo magnetico nell'universo con un certo valore g della carica magnetica. Tutte le cariche dell'universo si muovono nel suo campo magnetico. Ma questo implica il fatto straordinario che tutte le **cariche elettriche sono quantizzate**:

$$\boxed{q = q_0 n} \quad q_0 = \frac{2\pi\hbar c}{g}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (14.89)$$

Questa fu la proposta di Dirac nel 1931, come possibile giustificazione della quantizzazione della carica osservata in tutte le particelle elementari note. In particolare data una carica q questo fornirebbe anche il valore della carica magnetica:

$$g = \frac{2\pi\hbar c}{q_0} n \quad (14.90)$$

L'ipotesi di Dirac si rivela però sostanzialmente non verificabile sperimentalmente in quanto il monopolo magnetico potrebbe non essere mai rivelato. L'approccio di Dirac però è particolarmente importante per aver introdotto considerazioni di **topologia nella meccanica quantistica**.

Parte IV

Integrale dei Cammini di Feynman

Capitolo 15

Formulazione della Meccanica Quantistica con Integrale dei Cammini

In questo capitolo elaboriamo una formulazione alternativa della meccanica quantistica. Studieremo semplici applicazioni, ma il vero uso di questa formulazione sta nella meccanica quantistica dei campi.

15.1 Proprietà dell'Evolutore Temporale

Ricordiamo la definizione e alcune proprietà dell'evolutore temporale.

15.1.1 Definizione

L'equazione di Schrodinger (dipendente dal tempo) con condizione iniziale è data da:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}(t) |\psi(t)\rangle \quad |\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \quad (15.1)$$

In generale $\hat{\mathcal{H}}$ è un operatore illimitato con dominio denso strettamente contenuto nello spazio di Hilbert $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}}) \subset \mathcal{H}$ e dunque deve risultare $|\psi_0\rangle \in \mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$. Siccome per ogni t l'equazione di Schrodinger è lineare in $|\psi(t)\rangle$ allora la soluzione sarà della forma:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle \quad \hat{U}(t): \mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}}) \rightarrow \mathcal{H}, \quad \hat{U}(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \quad (15.2)$$

Questo operatore $\hat{U}(t)$ è detto **evolutore temporale** associato all'hamiltoniana $\hat{\mathcal{H}}$. Più precisamente questa è una famiglia di operatori parametrizzati dai due parametri (t, t_0) .

Possiamo verificare che questo conserva la norma nel dominio iniziale $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$. Infatti:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|\psi(t)\| &= \frac{d}{dt} (\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle) = \langle \psi(t) | \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle - \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\langle \psi(t) | \hat{\mathcal{H}} | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | \hat{\mathcal{H}} | \psi(t) \rangle \right] = 0 \end{aligned} \quad (15.3)$$

Pertanto la norma è conservata nel tempo:

$$\left\| \hat{U}(t, t_0) \psi_0 \right\| = \|\psi(t)\| = \|\psi_0\| \Rightarrow \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} \quad (15.4)$$

Siccome $\hat{U}(t, t_0)$ è limitato su un insieme denso allora ammette un'unica estensione per continuità su tutto \mathcal{H} :

$$\hat{U}(t, t_0): \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad (15.5)$$

Infatti ci aspettiamo che sia possibile descrivere l'evoluzione temporale di ogni stato, non solo quelli appartenenti al dominio naturale di $\hat{\mathcal{H}}$.

15.1.2 Funzione di Green

In questo capitolo siamo in particolare interessati all'espressione dell'evolutore temporale nello spazio delle configurazioni. In questo caso la matrice corrispondente prende il nome di **funzione di Green** dell'equazione di Schrodinger:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t) | \vec{x} \rangle \quad (15.6)$$

La funzione d'onda si può scrivere usando la funzione di Green come nucleo integrale:

$$\begin{aligned}\psi(\vec{x}', t') &= \langle \vec{x}' | \psi(t') \rangle = \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t) | \psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t) | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t)\end{aligned}\quad (15.7)$$

Notiamo che diversamente da quanto suggerisce l'espressione come elemento di matrice, la funzione di Green non fornisce $\psi(\vec{x}', t')$ dato $\psi(\vec{x}, t)$, ma fornisce $\psi(\vec{x}', t)$ data *tutta* la funzione d'onda $\psi(\cdot, t)$ al tempo t .

Se vogliamo poi passare dalla funzione di Green all'evolvente temporale:

$$\hat{U}(t', t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}' \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) \langle \vec{x}' | \vec{x} \rangle \quad (15.8)$$

15.2 Soluzione per l'Equazione di Schrodinger indipendente dal Tempo

Se $\hat{\mathcal{H}}$ è indipendente dal tempo allora in quanto operatore hermitiano ammette una base ortonormale di autovettori per \mathcal{H} e in particolare per $\mathcal{D}(\hat{\mathcal{H}})$:

$$|\psi_0\rangle = \sum_{ns} c_{ns}^0 |u_{ns}\rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW c_{Ws}^0 |u_{Ws}\rangle \quad (15.9)$$

Possiamo dunque cercare una soluzione per variazione delle costanti:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{ns} c_{ns}(t) |u_{ns}\rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW c_{Ws}(t) |u_{Ws}\rangle \quad (15.10)$$

Inserendo questa nell'equazione di Schrodinger troviamo le soluzioni per i coefficienti:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle \\ i\hbar \sum_{ns} \frac{d}{dt} c_{ns}(t) |u_{ns}\rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW \frac{d}{dt} c_{Ws}(t) |u_{Ws}\rangle &= \sum_{ns} c_{ns}(t) W_n |u_{ns}\rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW c_{Ws}(t) W |u_{Ws}\rangle\end{aligned}\quad (15.11)$$

Siccome la base è ortonormale allora i coefficienti devono coincidere per ogni vettore, ossia:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{dc_{ns}}{dt} = W_n c_{ns} & c_{ns}(0) = c_{ns}^0 \\ i\hbar \frac{dc_{Ws}}{dt} = W c_{Ws} & c_{Ws}(0) = c_{Ws}^0 \end{cases} \quad (15.12)$$

che hanno per soluzioni:

$$c_{ns}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_n t\right) c_{ns}^0 \quad c_{Ws}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W t\right) c_{Ws}^0 \quad (15.13)$$

da cui la soluzione:

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \sum_{ns} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_n t\right) c_{ns}^0 |u_{ns}\rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W t\right) c_{Ws}^0 |u_{Ws}\rangle = \\ &= \sum_{ns} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_n t\right) |u_{ns}\rangle \langle u_{ns} | \psi_0 \rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W t\right) |u_{Ws}\rangle \langle u_{Ws} | \psi_0 \rangle = \\ &= \left(\sum_{ns} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_n t\right) |u_{ns}\rangle \langle u_{ns} | + \sum_s \int_{\sigma_c} dW \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W t\right) |u_{Ws}\rangle \langle u_{Ws} | \right) |\psi_0\rangle\end{aligned}\quad (15.14)$$

Pertanto per definizione di operatore di evoluzione temporale:

$$\hat{U}(t, 0) = \sum_{ns} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_n t\right) |u_{ns}\rangle \langle u_{ns} | + \sum_s \int_{\sigma_c} dW \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W t\right) |u_{Ws}\rangle \langle u_{Ws} | \quad (15.15)$$

Notiamo che l'operatore dipende solo dal tempo passato tra stato iniziale e finale, come proprietà degli esponenziali. Infatti se avessimo usato la condizione iniziale a t_0 allora all'istante t troviamo la soluzione traslata di t_0 :

$$\begin{aligned}|\psi(0)\rangle &= |\psi_0\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, 0) |\psi_0\rangle \\ |\psi'(t_0)\rangle &= |\psi_0\rangle \Rightarrow |\psi'(t)\rangle = |\psi(t - t_0)\rangle\end{aligned}\quad (15.16)$$

Ma per definizione di operatore di evoluzione:

$$\begin{aligned} |\psi'(t)\rangle &= |\psi(t-t_0)\rangle \\ \widehat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle &= \widehat{U}(t-t_0, 0) |\psi_0\rangle \\ \widehat{U}(t, t_0) &= \widehat{U}(t-t_0, 0) \end{aligned} \quad (15.17)$$

Siccome questo vale per ogni t, t_0 l'operatore dipende da un solo parametro:

$$\widehat{U}(t, t_0) \rightarrow \widehat{U}(t-t_0) \equiv \widehat{U}(t-t_0, 0) \quad (15.18)$$

Possiamo poi scrivere in maniera semplice l'operatore notando che per definizione di esponenziale di operatore:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t\right) |u_{ns}\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}W_n t\right) |u_{ns}\rangle \quad \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t\right) |u_{Ws}\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}W t\right) |u_{Ws}\rangle \quad (15.19)$$

Pertanto troviamo la seguente espressione compatta:

$$\boxed{\widehat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t\right)} \quad (15.20)$$

Potevamo arrivare a questa direttamente dall'equazione di Schrodinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \widehat{U}(t) |\psi_0\rangle = \widehat{H} \widehat{U}(t) |\psi_0\rangle \Rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} \widehat{U}(t) = \widehat{H} \widehat{U}(t) \\ \widehat{U}(0) = \mathbb{1} \end{cases} \Rightarrow \widehat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t\right) \quad (15.21)$$

Usando queste definizioni troviamo che $\widehat{U}(t)$ è un **gruppo di operatori ad un parametro**. Infatti contiene l'unità, è chiuso rispetto al prodotto e ogni elemento ammette l'inverso, come conseguenza della presenza dell'esponenziale:

$$\begin{aligned} \widehat{U}(0) &= \mathbb{1} \\ \widehat{U}(t_1) \widehat{U}(t_2) &= \widehat{U}(t_1 + t_2) \\ \widehat{U}(t) \widehat{U}(-t) &= \widehat{U}(0) = \mathbb{1} \end{aligned} \quad (15.22)$$

Notiamo che questo implica che $\widehat{U}(t)$ ammette sia inverso destro che sinistro e dunque è anche **unitario**.

15.3 Sviluppo di Dyson

Cerchiamo adesso la soluzione generale anche per hamiltoniane dipendenti dal tempo. In questo caso dobbiamo usare la notazione più generale:

$$|\psi(t)\rangle = \widehat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle \quad |\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \quad (15.23)$$

Continua a valere l'equazione differenziale operatoriale:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} \widehat{U}(t, t_0) = \widehat{H}(t) \widehat{U}(t, t_0) \\ \widehat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1} \end{cases} \quad (15.24)$$

Possiamo ricondurre questa ad un'equazione integrale:

$$\widehat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \widehat{H}(t') \widehat{U}(t', t_0) \quad (15.25)$$

Per risolvere questa facciamo un'ansatz sotto forma di serie (che dovremmo dunque verificare a posteriori essere convergente opportunamente):

$$\widehat{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \widehat{U}_n(t, t_0) \quad (15.26)$$

Se converge allora possiamo immaginare $\widehat{H} = O(\lambda)$ e dunque $\widehat{U}_n = O(\lambda^n)$. Sostituiamo:

$$\begin{aligned} \widehat{U}_0(t, t_0) &= \mathbb{1} \\ \widehat{U}_1(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \widehat{H}(t_1) \\ \widehat{U}_2(t, t_0) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \widehat{H}(t_1) \widehat{H}(t_2) \\ &\dots = \dots \\ \widehat{U}_r(t, t_0) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^r \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{r-1}} dt_r \widehat{H}(t_1) \widehat{H}(t_2) \dots \widehat{H}(t_r) \end{aligned} \quad (15.27)$$

Troviamo dunque:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{r=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^r \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{r-1}} dt_r \hat{\mathcal{H}}(t_1) \hat{\mathcal{H}}(t_2) \cdots \hat{\mathcal{H}}(t_r) \quad (15.28)$$

Introduciamo la seguente funzione ("meta-operatore") definita su famiglie di operatori ad un parametro, detta **prodotto cronologicamente ordinato**:

$$\mathcal{T}[\hat{\mathcal{H}}(t_1) \hat{\mathcal{H}}(t_2)] = \begin{cases} \hat{\mathcal{H}}(t_1) \hat{\mathcal{H}}(t_2) & t_1 \geq t_2 \\ \hat{\mathcal{H}}(t_2) \hat{\mathcal{H}}(t_1) & t_2 > t_1 \end{cases} \quad (15.29)$$

che si estende naturalmente al prodotto di un numero generico di operatori della famiglia. Possiamo dunque scrivere in maniera più compatta:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^r \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_r \mathcal{T}[\hat{\mathcal{H}}(t_1) \cdots \hat{\mathcal{H}}(t_r)] \quad (15.30)$$

Il fattore $1/r!$ emerge dal fatto che è aumentato il dominio di integrazione.

Talvolta si usa la seguente espressione simbolica:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt \hat{\mathcal{H}}(t)\right) \quad (15.31)$$

Anche nel caso generale possiamo dimostrare che gli $\hat{U}(t_2, t_1)$ formano un gruppo:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t) &= \mathbb{1} \\ \hat{U}(t_2, t_0) &= \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) \\ \hat{U}(t, t_0) \hat{U}(t_0, t) &= \mathbb{1} \end{aligned} \quad (15.32)$$

Nuovamente dunque gli operatori sono unitari.

15.4 Funzione di Green per la Particella Libera

Per un hamiltoniana indipendente dal tempo sappiamo scrivere l'operatore di evoluzione temporale come la somma di una serie e un integrale:

$$\begin{aligned} G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) &= \langle \vec{x}' | \hat{U}(t' - t) | \vec{x} \rangle = \\ &= \sum_{ns} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_n(t' - t)\right) \langle \vec{x}' | u_{ns} \rangle \langle u_{ns} | \vec{x} \rangle + \sum_s \int_{\sigma_c} dW \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W(t' - t)\right) \langle \vec{x}' | u_{Ws} \rangle \langle u_{Ws} | \vec{x} \rangle = \\ &= \sum_{ns} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_n(t' - t)\right) u_{ns}(\vec{x}') u_{ns}^*(\vec{x}) + \sum_s \int_{\sigma_c} dW \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W(t' - t)\right) u_{Ws}(\vec{x}') u_{Ws}^*(\vec{x}) \end{aligned} \quad (15.33)$$

A causa della presenza dello spettro continuo non limitato tipicamente l'integrale non è convergente in senso proprio. Si può far convergere nel senso delle distribuzioni oppure aggiungendo una piccola parte immaginaria $t' - t + i\kappa$ con $\kappa \rightarrow 0$, che fa convergere la serie.

Consideriamo adesso l'esempio di una particella libera in una dimensione spaziali, che si generalizza facilmente a tre dimensioni e a sistemi di particelle. L'operatore di evoluzione temporale stavolta è diagonale nella base dei momenti:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Rightarrow \hat{U}_0(t' - t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} (t' - t)\right) \quad (15.34)$$

Calcoliamo la funzione di Green usando l'integrale gaussiano nel caso generale 2.53:

$$\begin{aligned}
G_0(x', t'; x, t) &= \langle x' | \widehat{U}_0(t' - t) | x \rangle = \langle x' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{p}^2}{2m}(t' - t)\right) | x \rangle = \\
&= \int_{\mathbb{R}} dp' \int_{\mathbb{R}} dp \langle x' | p' \rangle \langle p' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{p}^2}{2m}(t' - t)\right) | p \rangle \langle p | x \rangle = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int_{\mathbb{R}} dp' \int_{\mathbb{R}} dp \exp\left(\frac{i}{\hbar} p' x'\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t' - t)\right) \delta(p - p') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p x\right) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int_{\mathbb{R}} dp \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t' - t) + \frac{i}{\hbar} p(x' - x)\right) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)} I\left(\frac{i}{m\hbar}(t' - t) \middle| \frac{i}{\hbar}(x' - x)\right) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \sqrt{\frac{2\pi}{\frac{i}{m\hbar}(t' - t)}} \exp\left(\frac{-\frac{1}{\hbar^2}(x' - x)^2}{\frac{2i}{m\hbar}(t' - t)}\right) = \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar(t' - t)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x' - x)^2}{(t' - t)}\right)
\end{aligned} \tag{15.35}$$

15.4.1 Espressione con Azione Classica

Ricordiamo che adesso che una particella che compie un moto libero tra $x(t) = x, x(t') = x'$ ha velocità costante data da:

$$v(\tilde{t}) = \frac{x' - x}{t' - t} \equiv v \quad \tilde{t} \in (t, t') \tag{15.36}$$

Possiamo dunque calcolare l'azione corrispondente alla soluzione:

$$\begin{aligned}
S_{cl}[x', t'; x, t] &= S[x_{cl}(t)] = \int_t^{t'} d\tilde{t} \mathcal{L}(x_{cl}(\tilde{t}), \dot{x}_{cl}(\tilde{t})) = \\
&= \int_t^{t'} d\tilde{t} \frac{1}{2} m v^2(\tilde{t}) = \frac{1}{2} m v^2(t' - t) = \frac{1}{2} \frac{m(x' - x)^2}{t' - t}
\end{aligned} \tag{15.37}$$

Pertanto possiamo sostituire questa nella funzione di Green per la particella libera:

$$G_0(x', t'; x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar(t' - t)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[x', t'; x, t]\right) \tag{15.38}$$

Questa espressione potrebbe suggerire che nel caso generale la funzione di Green sia della forma:

$$G(x', t'; x, t) = \kappa \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[x', t'; x, t]\right) \quad S_{cl}[x', t'; x, t] = \int_t^{t'} d\tilde{t} \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right]_{x=x_{cl}(\tilde{t})} \tag{15.39}$$

con $x_{cl}(t)$ soluzione delle equazioni del moto classiche con condizioni al contorno $x(t) = x, x(t') = x'$. Sebbene quest'espressione sia falsa, comunque è un primo indizio alla formulazione a cui vogliamo arrivare, che coinvolge strettamente l'azione classica di una particella valutata su un certo *cammino*.

15.4.2 Supporto

Vogliamo adesso trovare quanto è grande il "supporto" della funzione di Green come distribuzione/nucleo integrale rispetto ad x, x' . Estendendo come per l'integrale gaussiano potremmo già aspettarci che la funzione di Green è non nulla all'interno della "deviazione standard":

$$G_0(x', t'; x, t) \neq 0 \iff |x' - x| \approx \frac{\hbar(t' - t)}{m} = O(\sqrt{t' - t}) \tag{15.40}$$

Se $t' - t$ è sufficientemente piccolo in realtà possiamo dimostrare questo ricorrendo al Teorema di Lebesgue, in quanto vediamo che la funzione d'onda "evoluta" è simile ad una trasformata di Fourier della funzione d'onda "iniziale". Esplicitiamo:

$$\psi(x', t') = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar(t' - t)}} \int_{\mathbb{R}} dx \exp\left(\frac{i}{\hbar} m \frac{(x' - x)^2}{(t' - t)}\right) \psi(x, t) \tag{15.41}$$

Quando x ed x' non sono vicini e $t - t'$ è piccolo allora la fase nell'esponenziale oscilla velocemente per piccole variazioni di x , così che per il Teorema di Lebesgue si annulla la funzione d'onda. L'unico contributo per $t' - t$ piccolo è dunque quello per $x' - x$ piccolo. Per capire quanto "vicini" devono essere x', x facciamo un cambio di variabili:

$$z^2 = i \frac{m(x' - x)^2}{\hbar(t' - t)} \Rightarrow x = x' + z \sqrt{\frac{\hbar(t' - t)}{m}} \Rightarrow dx = dz \sqrt{\frac{\hbar(t' - t)}{m}} \quad (15.42)$$

Sostituiamo nell'integrale:

$$\psi(x', t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi i}} \int dz e^{iz^2/2} \psi(x(z), t) \quad (15.43)$$

Analogamente alla gaussiana reale il contributo non nullo è dunque per:

$$|z| \approx 1 \iff |x - x'| \approx \sqrt{\frac{\hbar(t' - t)}{m}} = O(\sqrt{|t' - t|}) \quad (15.44)$$

come ci aspettavamo.

15.5 Integrale dei Cammini

15.5.1 Suddivisione dell'intervallo

Consideriamo adesso una particella immersa in un potenziale scalare generico e "dividiamo" l'intervallo temporale in $N + 1$ intervallo, ossia poniamo $t' - t = (N + 1)\varepsilon$. In particolare siamo interessati al caso $N \gg 1 \iff \varepsilon \approx 0$. Facciamo questa divisione nell'operatore di evoluzione temporale:

$$\widehat{U}(t' - t) = \widehat{U}((N + 1)\varepsilon) = (\widehat{U}(\varepsilon))^{N+1} = \underbrace{\widehat{U}(\varepsilon) \cdots \widehat{U}(\varepsilon)}_{N+1 \text{ volte}} \quad (15.45)$$

Inseriamo questo nella funzione di Green, dove inseriamo N identità espresse nello spazio delle configurazioni (è sottinteso che il dominio di integrazione è sempre \mathbb{R}):

$$\begin{aligned} G(x', t'; x, t) &= \langle x' | \widehat{U}(t' - t) | x \rangle = \langle x' | \widehat{U}(\varepsilon) \cdots \widehat{U}(\varepsilon) | x \rangle = \\ &= \langle x' | \widehat{U}(\varepsilon) \mathbf{1} \widehat{U}(\varepsilon) \cdots \widehat{U}(\varepsilon) \mathbf{1} \widehat{U}(\varepsilon) | x \rangle = \\ &= \langle x' | \widehat{U}(\varepsilon) \int dx_N | x_N \rangle \langle x_N | \widehat{U}(\varepsilon) \cdots \widehat{U}(\varepsilon) \int dx_1 | x_1 \rangle \langle x_1 | \widehat{U}(\varepsilon) | x \rangle = \\ &= \int dx_N \cdots \int dx_1 \langle x' | \widehat{U}(\varepsilon) | x_N \rangle \langle x_N | \widehat{U}(\varepsilon) | x_{N-1} \rangle \cdots \langle x_2 | \widehat{U}(\varepsilon) | x_1 \rangle \langle x_1 | \widehat{U}(\varepsilon) | x \rangle = \\ &= \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \langle x' | \widehat{U}(\varepsilon) | x_N \rangle \langle x_N | \widehat{U}(\varepsilon) | x_{N-1} \rangle \cdots \langle x_1 | \widehat{U}(\varepsilon) | x \rangle \end{aligned} \quad (15.46)$$

Se poi poniamo $x = x_0, x' = x_{N+1}$ e $t_n = n\varepsilon + t, n = 0, \dots, N + 1$ troviamo:

$$\begin{aligned} G(x', t'; x, t) &= \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \langle x_{n+1} | \widehat{U}(\varepsilon) | x_n \rangle \right) = \\ &= \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N G(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n) \right) = \\ &= \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N G(x_{n+1}, t_n + \varepsilon; x_n, t_n) \right) \end{aligned} \quad (15.47)$$

Per $N \rightarrow \infty, \varepsilon \rightarrow 0$ vediamo già che la funzione di Green diventa dunque l'integrale del limite della produttoria delle funzioni di Green infinitesime (ossia per intervalli di tempo infinitesimi).

15.5.2 Funzione di Green per un intervallo infinitesimo

Cerchiamo adesso di esplicitare la funzione di Green infinitesima. Iniziamo con lo scrivere l'evolvente temporale per un tempo infinitesimo approssimo al primo ordine:

$$\begin{aligned}\widehat{U}(\varepsilon) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \widehat{\mathcal{H}} \varepsilon + o(\varepsilon^2) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \widehat{\mathcal{H}}_0 - \frac{i}{\hbar} \widehat{V} \varepsilon + o(\varepsilon^2) = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{V}}{2} \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{\mathcal{H}}_0 \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{V}}{2} \varepsilon\right) + o(\varepsilon^2) = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{V}}{2} \varepsilon\right) \widehat{U}_0(\varepsilon) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{V}}{2} \varepsilon\right) + o(\varepsilon^2)\end{aligned}\tag{15.48}$$

Pertanto riusciamo la funzione di Green infinitesima è uguale a quella libera a meno di una fase:

$$\begin{aligned}\langle x_{n+1} | \widehat{U}(\varepsilon) | x_n \rangle &= \langle x_{n+1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{V}}{2} \varepsilon\right) \widehat{U}_0(\varepsilon) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{V}}{2} \varepsilon\right) | x_n \rangle + o(\varepsilon^2) = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{V(x_{n+1}) + V(x_n)}{2} \varepsilon\right) \langle x_{n+1} | \widehat{U}_0(\varepsilon) | x_n \rangle + o(\varepsilon^2) = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{V(x_{n+1}) + V(x_n)}{2} \varepsilon\right) G_0(x_{n+1}, t_n + \varepsilon; x_n, t_n) + o(\varepsilon^2) = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \frac{V(x_{n+1}) + V(x_n)}{2}\right) + o(\varepsilon^2)\end{aligned}\tag{15.49}$$

Ricordiamo che per ε piccolo vale $|x_{n+1} - x_n| = o(\sqrt{\varepsilon})$. Equivalentemente attorno al punto medio:

$$\bar{x}_n = \frac{x_{n+1} + x_n}{2} \Rightarrow o(x_{n+1} - \bar{x}_n) = o(x_{n+1} - x_n) = o(\sqrt{\varepsilon})\tag{15.50}$$

Espandendo il potenziale attorno al punto medio:

$$\begin{aligned}V(x_{n+1}) &= V(\bar{x}_n) + V'(\bar{x}_n)(x_{n+1} - \bar{x}_n) + o((x_{n+1} - x_n)^2) = \\ &= V(\bar{x}_n) + V'(\bar{x}_n) \frac{x_{n+1} - x_n}{2} + o(\varepsilon) \\ V(x_n) &= V(\bar{x}_n) - V'(\bar{x}_n) \frac{x_{n+1} - x_n}{2} + o(\varepsilon)\end{aligned}\tag{15.51}$$

da cui:

$$\frac{V(x_{n+1}) + V(x_n)}{2} = V(\bar{x}_n) + o(\varepsilon)\tag{15.52}$$

Inserendo questo nella funzione di Green infinitesima:

$$\begin{aligned}\langle x_{n+1} | \widehat{U}(\varepsilon) | x_n \rangle &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\bar{x}_n) + \varepsilon o(\varepsilon)\right) + o(\varepsilon^2) = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\bar{x}_n)\right) e^{o(\varepsilon^2)} + o(\varepsilon^2) = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\bar{x}_n)\right) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} o(\varepsilon^2) + o(\varepsilon^2) = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\varepsilon} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\bar{x}_n)\right) + o(\varepsilon^{3/2})\end{aligned}\tag{15.53}$$

Siccome ε è piccolo allora ha senso anche definire la "velocità" media tra x_{n+1}, x_n come segue:

$$\dot{x}_n = \frac{x_{n+1} - x_n}{\varepsilon}\tag{15.54}$$

Ponendo dunque:

$$L_n = \mathcal{L}(\bar{x}_n, \dot{x}_n) = \frac{m}{2} \dot{x}_n^2 - V(\bar{x}_n)\tag{15.55}$$

troviamo che:

$$G(x_{n+1}, t_n + \varepsilon; x_n, t_n) = \langle x_{n+1} | \widehat{U}(\varepsilon) | x_n \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} L_n \varepsilon\right) + o(\varepsilon^{3/2})\tag{15.56}$$

15.5.3 Definizione dell'Integrale dei Cammini di Feynman

Siamo ora in grado di scrivere una formulazione alternativa della meccanica quantistica tramite la funzione di Green. Inserendo quanto ottenuto per la funzione di Green infinitesima in quella finita:

$$\begin{aligned}
 G(x', t'; x, t) &= \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N G(x_{n+1}, t_n + \varepsilon; x_n, t_n) \right) = \\
 &= \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} L_n \varepsilon\right) + o(\varepsilon^{3/2}) \right) \right) = \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} L_n \varepsilon\right) \right) = \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N+1/2} \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon\right)
 \end{aligned} \tag{15.57}$$

Definiamo ora $x(\tau)$ la spezzata che passa per i punti x_n agli istanti t_n , con condizioni al bordo $x(t) = x, x(t') = x'$ ($\iff x(t_0) = x_0, x(t_{N+1}) = x_{N+1}$). L'integrale su $dx_1 \cdots dx_N$ corrisponde dunque a fare la somma (integrale) su tutte le spezzate che passano per certi punti agli istanti t_n con le condizioni al bordo $x(t) = x, x(t') = x'$, ciascun pesato con una fase complessa:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon\right) \tag{15.58}$$

Il fattore dimensionale è presente per motivi dimensionali (e di convergenza).

Per $N \rightarrow \infty$ i t_n e gli x_n diventano continui, così che la somma è fatta su tutti i *cammini* che vanno da $x(t) = x$ ad $x(t') = x'$. Nel fattore di fase la somma diventa un integrale, che riconosciamo essere l'azione associata al cammino $x(\tau)$ considerato:

$$L_n = \mathcal{L}(\bar{x}_n, \dot{x}_n) \Rightarrow \lim_N \rightarrow \infty \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon = \lim_N \rightarrow \infty \sum_{n=0}^N \mathcal{L}(\bar{x}_n, \dot{x}_n) \varepsilon = \int_t^{t'} \mathcal{L}(x(\tau), \dot{x}(\tau)) d\tau = S[x(\tau)] \tag{15.59}$$

Possiamo inoltre definire la misura di integrazione:

$$\mathcal{D}[x(\tau)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N+1/2} \prod_{n=1}^N dx_n \tag{15.60}$$

Troviamo infine l'integrale dei cammini di Feynman:

$$\boxed{G(x', t'; x, t) = \int_{x(t)=x}^{x(t')=x'} \mathcal{D}[x(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]\right)} \tag{15.61}$$

dove il dominio di integrale è l'insieme dei cammini con condizioni al bordo $x(t) = x, x(t') = x'$. Dal punto di vista dimensionale è interessante verificare che la misura \mathcal{D} ha le stesse dimensioni della funzione di Green per una particella in una dimensione $[G] = [L]^{-1}$. Troviamo infatti:

$$\begin{aligned}
 \left[\frac{m}{\hbar \varepsilon} \right] &= \frac{[M]}{[S][T]} = \frac{[M]}{[E][2]} = \frac{[M]}{[M][V^2][T^2]} = \frac{1}{[L]^2} = [L]^{-2} \\
 [\mathcal{D}] &= \left[\frac{m}{\hbar \varepsilon} \right]^{N+1/2} [L]^N = [L]^{-N-1} [L]^N = [L]^{-1}
 \end{aligned} \tag{15.62}$$

L'integrale dei cammini può essere anche usato per esprimere la funzione d'onda:

$$\begin{aligned}
 \psi(x', t') &= \int dx_0 G(x_{N+1}, t_{N+1}; x_0, t) \psi(x_0, t) = \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N+1/2} \int \left(\prod_{n=0}^N dx_n \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon\right) \psi(x_0, t) = \\
 &= \int_{x(t)=x} \mathcal{D}[x(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]\right) \psi(x_0, t)
 \end{aligned} \tag{15.63}$$

dove stavolta usiamo lo stesso simbolo \mathcal{D} per una diversa misura e il dominio di integrazione include tutti i cammini che passano per x all'istante t .

15.6 Considerazioni sull'Integrale di Feynman

15.6.1 Limite Classico

L'uso dell'azione classica per descrivere la dinamica di una particella in meccanica quantistica si presa molto bene al limite classico, che possiamo immaginare come limite di "grandi valori d'azione". Se i cammini tipici che contribuiscono all'integrale hanno valore grande dell'azione allora l'esponentiale è fortemente oscillante per piccole variazioni dei cammini. Per il principio della fase stazionaria (estesa a questa misura \mathcal{D}), i cammini che contribuiscono più significativamente sono quelli che rendono stazionaria la fase. Ma questi sono proprio i cammini classici, così che per grandi valore dell'azione l'unico cammino che contribuisce è quello classico $x_{cl}(t)$.

15.6.2 Importanza in Fisica

L'integrale di Feynman ha importante non vera e propria formulazione della meccanica quantistica ma come **strumento euristico**. Ancora oggi infatti non è possibile dare una definizione matematica rigorosa, a causa della difficoltà nel definire la misura \mathcal{D} . Come strumento euristico ha comunque grande utilità pratica, specialmente nella **Teoria Quantistica dei Campi** (QFT), in quanto la sua generalizzazione concide ad un metodo efficiente per la deduzione delle regole della teoria delle perturbazioni di una QFT. Queste regole sono tipicamente difficili da ricavare con metodi canonici rigorosi (operatoriali), ma ci si arriva *facilmente* con questo integrale, fornendo risultati esatti che possono essere dimostrati a posteriori.

15.6.3 Problematiche e Soluzioni

Quando Feynman presentò in una conferenza internazionale l'integrale dei cammini, Niels Bohr mosse l'obiezione seguente. In meccanica quantistica, per il principio di indeterminazione di Heisenberg, risulta impossibile attribuire ad una particella valori ben definiti di coordinate e dell'impulso. Nell'integrale dei cammini sembra però che la somma sia fatta su cammini continui e derivabili, contraddicendo questo principio.

In realtà quest'osservazione può essere giustificata notando che anche nel limite di tempo infinitesimo la differenza tra le posizioni non è dello stesso ordine:

$$|x_{n+1} - x_n| = o(\sqrt{\varepsilon}) \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (15.64)$$

Affinchè $x(\tau)$ sia derivabile dovrebbe risultare $|x_{n+1} - x_n| = o(\varepsilon)$. Siccome questo non è verificato allora i cammini non sono derivabili e non ammettono velocità (e dunque momento) istantanea, compatibilmente con il principio di indeterminazione. Questa sottigliezza rende dunque importante l'importante di dare una definizione matematica rigorosa.

15.6.4 Inclusione dello Spin

Ci potremmo adesso chiedere se è possibile considerare un'estensione dell'integrale sui cammini di Feynman a sistemi di particelle dotate di spin. Si trova che una tale formulazione non esiste, almeno per sistemi di particelle a numero fissato. Usando il formalismo della seconda quantizzazione, in cui intervengono campi quantistici di particelle distinguibili e a numero non fissato, risulta tuttavia possibile fare questa generalizzazione. Non discuteremo di questa in quanto parte della Teoria Quantistica dei Campi e dunque la trattazione relativistica della meccanica quantistica.

15.7 Integrale dei Cammini nello Spazio delle Fasi

In più stretta analogia alla formulazione hamiltoniana della meccanica classica, è possibile anche scrivere la funzione di Green come integrale dei cammini nello spazio delle fasi.

Torniamo all'espressione della funzione di Green come integrale del prodotto di funzioni di Green infinitesime:

$$G(x', t'; x, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N G(x_{n+1}, t_n + \varepsilon; x_n, t_n) \right) \quad (15.65)$$

Stavolta esprimiamo la funzione di Green infinitesima senza esplicitare la funzione di Green libera, ma tenendo l'espressione come integrale nello spazio dei momenti:

$$\begin{aligned}
G(x_{n+1}, t_n + \varepsilon; x_n, t_n) &= \langle x_{n+1} | \widehat{U}(\varepsilon) | x_n \rangle = \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(\bar{x}_n) \varepsilon\right) \langle x_{n+1} | \widehat{U}_0(\varepsilon) | x_n \rangle + o(\varepsilon^{3/2}) = \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(\bar{x}_n) \varepsilon\right) \int dp_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m} + \frac{i}{\hbar} p_n (x_{n+1} - x_n)\right) + o(\varepsilon^{3/2}) = \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(p_n \frac{x_{n+1} - x_n}{\varepsilon} - \frac{p_n^2}{2m} - V(\bar{x}_n)\right) \varepsilon\right) + o(\varepsilon^{3/2}) = \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(p_n \dot{x}_n - \frac{p_n^2}{2m} - V(\bar{x}_n)\right) \varepsilon\right) + o(\varepsilon^{3/2})
\end{aligned} \tag{15.66}$$

notiamo a questo punto che nell'argomento dell'esponenziale si trova qualcosa di vicino alla lagrangiana, ossia una "quasi-trasformata di Legendre" dell'hamiltoniana:

$$p_n \dot{x}_n - \frac{p_n^2}{2m} - V(\bar{x}_n) = p_n \dot{x}_n - H(\bar{x}_n, p_n) \equiv \bar{L}(\bar{x}_n, \dot{x}_n, p_n) = \bar{L}_n \tag{15.67}$$

dove abbiamo definito:

$$\bar{L}(\bar{x}_n, \dot{x}_n, p_n) = p \dot{x} - H(x, p) \tag{15.68}$$

Affinchè questa coincida con la lagrangiana dovremmo trovare la relazione $p = p(x, \dot{x})$ e sostituire questa in \bar{L} .

Inserendo questa nell'espressione della funzione di Green e facendo il limite per $N \rightarrow \infty$ troviamo nuovamente che la somma diventa un integrale di un'azione, definita diversamente:

$$\begin{aligned}
G(x', t'; x, t) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_n \exp\left(\frac{i}{\hbar} \bar{L}_n \varepsilon\right) \right) = \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N+1}} \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N dp_n \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N \bar{L}_n \varepsilon\right) = \\
&= \int \mathcal{D}[x(\tau)] \mathcal{D}[p(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} \mathcal{L}(x(\tau), \dot{x}(\tau), p(\tau)) d\tau\right) = \\
&= \int_{x(t)=x}^{x(t')=x'} \mathcal{D}[x(\tau)] \mathcal{D}[p(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(\tau), p(\tau)]\right)
\end{aligned} \tag{15.69}$$

dove stavolta:

$$\begin{aligned}
S[x(\tau), p(\tau)] &= \int_t^{t'} [p(\tau) \dot{x}(\tau) - H(x(\tau), p(\tau))] d\tau \\
\mathcal{D}[x(\tau)] \mathcal{D}[p(\tau)] &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N+1}} \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \left(\prod_{n=0}^N dp_n \right)
\end{aligned} \tag{15.70}$$

Il dominio di integrazione stavolta è per tutti cammini con $x(t) = x$ ed $x(t') = x'$, mentre non ci sono limitazioni per il momento.

15.8 Caso di un Sistema di Particelle in Tre Dimensioni

Cerchiamo adesso di generalizzare al caso di N particelle in tre dimensioni. In questo caso assumiamo un'hamiltoniana del tipo:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^N \frac{\widehat{p}_j^2}{2m_j} + V(\widehat{\mathbf{x}}_1, \dots, \widehat{\mathbf{x}}_N) \tag{15.71}$$

Notiamo che lo spazio di questo sistema è equivalente allo spazio di un sistema di $M = 3N$ particelle in una dimensione:

$$\mathcal{L}(\underbrace{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \dots \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3}_{N \text{ volte}}) = \mathcal{L}(\underbrace{\mathbb{R} \times \mathbb{R} \dots \mathbb{R} \times \mathbb{R}}_{M \text{ volte}}) \tag{15.72}$$

Possiamo infatti associare la collezioni di N operatori vettoriali di posizione e momento ad M operatori scalari di posizione e momento. L'hamiltoniana in questo modo si scrive:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{l=1}^M \frac{\hat{p}_l^2}{2m_l} + V(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_M) \quad (15.73)$$

Usiamo poi la notazione:

$$|\vec{x}\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \cdots |x_{M-1}\rangle \otimes |x_M\rangle = |x_1\rangle \cdots |x_M\rangle \quad (15.74)$$

La funzione di Green e la funzione d'onda sono date poi da:

$$\begin{aligned} G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) &= \langle \vec{x}' | \hat{U}(t' - t) | \vec{x} \rangle = \langle \vec{x}' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t' - t)\right) | \vec{x} \rangle \\ \psi(\vec{x}', t') &= \int d^M x G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (15.75)$$

Ricordando l'espressione (non simbolica) per una particella:

$$G(x', t'; x, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N+1/2} \int \left(\prod_{n=1}^N dx_n \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon \right) \quad (15.76)$$

allora nel caso generale ci possiamo aspettare:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{l=1}^M \frac{m_l}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N+1/2} \int \left(\prod_{n=1}^N \prod_{l=1}^M dx_n^l \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon \right) \quad (15.77)$$

dove:

$$\begin{aligned} \vec{x}_0 &= 0, \quad \vec{x}_{N+1} = \vec{x}' \\ \bar{x}_n^l &= \frac{x_{n+1}^l + x_n^l}{2} \\ \dot{x}_n^l &= \frac{x_{n+1}^l - x_n^l}{\varepsilon} \\ L_n &= \mathcal{L}(\bar{x}_n, \dot{x}_n) = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^M m_l (\dot{x}_n^l)^2 - V(\bar{x}_n^1, \dots, \bar{x}_n^M) \end{aligned} \quad (15.78)$$

Pertanto nella notazione compatta scriviamo:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = \int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t')=\vec{x}'} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau)] \right) \quad (15.79)$$

con:

$$\mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{l=1}^M \frac{m_l}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N+1/2} \left(\prod_{n=1}^N \prod_{l=1}^M dx_n^l \right) \quad (15.80)$$

Senza entrare nei dettagli possiamo comunque scrivere i passaggi principali per arrivare a questo risultato. Come prima possiamo dividere $t' - t$ in $N + 1$ intervalli di valore ε , scrivere l'evolutore temporale come prodotto e approssimare l'evolutore temporale infinitesimo:

$$\hat{U}(\varepsilon) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{V}}{2} \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{K} \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{V}}{2} \varepsilon\right) \quad (15.81)$$

con \hat{V} potenziale ed \hat{K} parte cinetica. Inserendo poi N identità la funzione di Green si scrive come integrale del prodotto delle funzioni di Green infinitesime. Calcolando gli elementi di matrice, la parte relativa al potenziale si approssima calcolandolo al valore medio, mentre la parte cinetica fornisce il prodotto degli elementi di matrice liberi per masse m_l .

$$\begin{aligned} G(\vec{x}_{n+1}, t_{n+1}; \vec{x}_n, t_n) &= \langle \vec{x}_{n+1} | \hat{U}(\varepsilon) | \vec{x}_n \rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(\bar{x}_n^1, \dots, \bar{x}_n^M)\right) \langle \vec{x}_{n+1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{K} \varepsilon\right) | \vec{x}_n \rangle = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(\bar{x}_n^1, \dots, \bar{x}_n^M)\right) \prod_{l=1}^M \langle x_{n+1}^l | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}_l^2}{2m_l} \varepsilon\right) | x_n^l \rangle = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(\bar{x}_n^1, \dots, \bar{x}_n^M)\right) \prod_{l=1}^M \left(\frac{m_l}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m_l}{2} (\dot{x}_n^l)^2 \varepsilon \right) \end{aligned} \quad (15.82)$$

Inserendo questa e facendo il limite per $N \rightarrow \infty$ troviamo infine il risultato cercato.

15.9 Caso in Presenza di un Campo Elettromagnetico

Un'altra generalizzazione da fare è quella nel caso di una particella carica in presenza del campo elettromagnetico. In questo caso non ha senso considerare una sola dimensione spaziale, ma comunque possiamo limitarci ad una singola particella. Ricordiamo che l'espressione a cui vogliamo arrivare è sempre:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = \int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t')=\vec{x}'} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau), \vec{p}(\tau)]\right) \quad (15.83)$$

dove:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{3(N+1)/2} \prod_{n=1}^N d^3 \vec{x}_n \\ \mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) &= \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 + \frac{q}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t) - qV(\vec{x}, t) \\ S[\vec{x}(\tau)] &= \int_t^{t'} \mathcal{L}(\vec{x}(\tau), \dot{\vec{x}}(\tau), \tau) d\tau \end{aligned} \quad (15.84)$$

E analogamente per l'integrale dei cammini nello spazio delle fasi.

L'hamiltoniana si trova nuovamente usando l'ordinamento di Weyl 14.49:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}(t) &= \frac{1}{2m} \hat{\pi}^2 + q\hat{V} = \\ &= \frac{1}{2m} \left[\hat{\vec{p}}^2 - \frac{q}{c} (\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{p}}) + \frac{q^2}{c^2} \hat{\vec{A}}^2 \right] + q\hat{V} \end{aligned} \quad (15.85)$$

Ci potremmo chiedere se la scelta dell'ordinamento fatta possa avere influenza sull'espressione della funzione di Green. Si può dimostrare che questa è l'**unica scelta** compatibile con la forma standard dell'integrale di Feynman. Notiamo poi che l'hamiltoniana è dipendente dal tempo e quindi si sottintende che le varie funzioni sono valutate al tempo t . Siccome l'hamiltoniana dipende dal tempo in generale e dunque l'evolutore non si può scrivere come il prodotto di N evolutori infinitesimi identici. Tuttavia usando le proprietà di gruppo possiamo fare qualcosa di simile:

$$\hat{U}(t', t) = \hat{U}(t', t_N) \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \cdots \hat{U}(t_1, t) = \hat{U}(t_{N+1}, t_N) \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \cdots \hat{U}(t_1, t_0) \quad (15.86)$$

L'evolutore infinitesimo è però della stessa forma, anche se non costante:

$$\hat{U}(t_{n+1}, t_n) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t_n) \varepsilon\right) + o(\varepsilon^2) \quad (15.87)$$

Troviamo dunque:

$$G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) = \langle \vec{x}' | \hat{U}(t', t) | \vec{x} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{n=1}^N d^3 \vec{x}_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \langle \vec{x}_{n+1} | \hat{U}(t_{n+1}, t_n) | \vec{x}_n \rangle \right) \quad (15.88)$$

Per ricondurre la funzione di Green infinitesima all'esponenziale della lagrangiana ci conviene scrivere l'hamiltoniana in forma compatta:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{K} + \frac{1}{2} \left[\hat{\vec{f}}(\vec{x}, t) \cdot \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{f}}(\vec{x}, t) \right] + \hat{V}(\vec{x}, t) \quad (15.89)$$

dove:

$$\begin{aligned} K &= \frac{p^2}{2m} \\ \vec{f} &= -\frac{q}{mc} \vec{A} \\ \tilde{V} &= qV + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 = qV + \frac{m}{2} f^2 \end{aligned} \quad (15.90)$$

In questa notazione la lagrangiana si scrive:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) &= \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - m \dot{\vec{x}} \cdot \vec{f}(\vec{x}, t) - \tilde{V}(\vec{x}, t) + \frac{1}{2} m f^2(\vec{x}, t) = \\ &= \frac{1}{2} m \left(\dot{\vec{x}} - \vec{f}(\vec{x}, t) \right)^2 - \tilde{V}(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (15.91)$$

Approssimiamo ora l'evolvente temporale infinitesimo:

$$\begin{aligned}
\widehat{U}(t_{n+1}, t_n) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{\mathcal{H}}(t_n) \varepsilon\right) + o(\varepsilon^2) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \left[\widehat{K} + \frac{1}{2} \left(\vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \widehat{\vec{p}} + \widehat{\vec{p}} \cdot \vec{f}(\vec{x}, t) \right) + \widehat{V}(\vec{x}, t) \right] \varepsilon + o(\varepsilon^2) = \\
&= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2} \widehat{V}(\vec{x}, t) + \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \widehat{\vec{p}} + \widehat{K} + \frac{1}{2} \widehat{\vec{p}} \cdot \vec{f}(\vec{x}, t) + \frac{1}{2} \widehat{V}(\vec{x}, t) \right] \varepsilon + o(\varepsilon^2) = \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{V}}{2} \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \widehat{\vec{p}} \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{K} \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \widehat{\vec{p}} \cdot \vec{f}(\vec{x}, t) \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{V}}{2} \varepsilon\right) + o(\varepsilon^2)
\end{aligned} \tag{15.92}$$

Si sottintende che le funzioni sono valutate al tempo $t = t_n$.

Possiamo ora esplicitare la parte della funzione di Green relativa al potenziale scalare \widehat{V} :

$$\begin{aligned}
G(\vec{x}_{n+1}, t_{n+1}; \vec{x}_n, t_n) &= \langle \vec{x}_{n+1} | \widehat{U}(t_{n+1}, t_n) | \vec{x}_n \rangle = \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\widehat{V}(x_{n+1}) + \widehat{V}(x_n)}{2} \varepsilon\right) \langle \vec{x}_{n+1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \widehat{\vec{p}} \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{K} \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \widehat{\vec{p}} \cdot \vec{f}(\vec{x}, t) \varepsilon\right) | \vec{x}_n \rangle + o(\varepsilon^2) = \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{V}(\vec{x}_n) \varepsilon\right) \langle \vec{x}_{n+1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \widehat{\vec{p}} \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{K} \varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \widehat{\vec{p}} \cdot \vec{f}(\vec{x}, t) \varepsilon\right) | \vec{x}_n \rangle + o(\varepsilon^2) = \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{V}(\vec{x}_n) \varepsilon\right) \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m} \varepsilon\right) \langle \vec{x}_{n+1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \widehat{\vec{p}} \varepsilon\right) | \vec{p}_n \rangle \langle \vec{p}_n | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \widehat{\vec{p}} \cdot \vec{f}(\vec{x}, t) \varepsilon\right) | \vec{x}_n \rangle + o(\varepsilon^2)
\end{aligned} \tag{15.93}$$

Stavolta il calcolo è complicato dalla presenza del termine di accoppiamento dell'impulso con il potenziale vettore, racchiuso in \vec{f} . Siccome siamo interessati ad un'approssimazione all'ordine $o(\varepsilon^{3/2})$ possiamo però approssimare l'esponenziale, così da fare un calcolo esatto dei due elementi di matrice:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{x}_{n+1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \widehat{\vec{p}} \varepsilon\right) | \vec{p}_n \rangle &= \langle \vec{x}_{n+1} | \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \widehat{\vec{p}} \varepsilon | \vec{p}_n \rangle + o(\varepsilon^2) = \\
&= \langle \vec{x}_{n+1} | \vec{p}_n \rangle - \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \langle \vec{x}_{n+1} | \vec{f}(\vec{x}, t) \cdot \widehat{\vec{p}} | \vec{p}_n \rangle \varepsilon + o(\varepsilon^2) = \\
&= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_{n+1}, t) \cdot \vec{p}_n \varepsilon\right) \langle \vec{x}_{n+1} | \vec{p}_n \rangle + o(\varepsilon^2) = \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_{n+1}, t) \cdot \vec{p}_n \varepsilon\right) \langle \vec{x}_{n+1} | \vec{p}_n \rangle + o(\varepsilon^2) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p}_n \cdot \vec{x}_{n+1} - \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_{n+1}, t) \cdot \vec{p}_n \varepsilon \right)\right) + o(\varepsilon^2) \\
\langle \vec{p}_n | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \widehat{\vec{p}} \cdot \vec{f}(\vec{x}, t) \varepsilon\right) | \vec{x}_n \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(-\vec{p}_n \cdot \vec{x}_n - \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_n, t) \cdot \vec{p}_n \varepsilon \right)\right) + o(\varepsilon^2)
\end{aligned} \tag{15.94}$$

Inserendo questi due nella funzione di Green infinitesima:

$$\begin{aligned}
G(\vec{x}_{n+1}, t_{n+1}; \vec{x}_n, t_n) &= \langle \vec{x}_{n+1} | \widehat{U}(t_{n+1}, t_n) | \vec{x}_n \rangle = \\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{V}(\vec{x}_n) \varepsilon\right) \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m} \varepsilon\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p}_n \cdot (\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n) - \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_{n+1}, t) \cdot \vec{p}_n \varepsilon - \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_n, t) \cdot \vec{p}_n \varepsilon \right)\right) + o(\varepsilon^2) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_n \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p}_n \cdot (\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n) - \frac{p_n^2}{2m} \varepsilon - \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_{n+1}, t) \cdot \vec{p}_n \varepsilon - \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_n, t) \cdot \vec{p}_n \varepsilon - \widehat{V}(\vec{x}_n) \varepsilon \right)\right) + o(\varepsilon^2) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_n \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p}_n \cdot \dot{\vec{x}}_n - \frac{p_n^2}{2m} - \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_{n+1}, t) \cdot \vec{p}_n - \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_n, t) \cdot \vec{p}_n - \widehat{V}(\vec{x}_n) \right) \varepsilon\right) + o(\varepsilon^2)
\end{aligned} \tag{15.95}$$

Se vogliamo scrivere l'integrale dei cammini nello spazio delle fase allora non facciamo l'integrale e ricorriamo alla "quasi-trasformata di Legendre" dell'hamiltoniana \bar{L} , in modo che:

$$G(\vec{x}_{n+1}, t_{n+1}; \vec{x}_n, t_n) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_n \exp\left(\frac{i}{\hbar} \bar{L}_n \varepsilon\right) + o(\varepsilon^2) \tag{15.96}$$

Inserendo questa troviamo quanto atteso:

$$\begin{aligned}
G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{n=1}^N d^3 \vec{x}_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \frac{d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^N \bar{L}_n \varepsilon \right) = \\
&= \int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t')=\vec{x}'} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] \mathcal{D}[\vec{p}(\tau)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau), \vec{p}(\tau)] \right)
\end{aligned} \tag{15.97}$$

Possiamo invece ricondurci all'integrale dei cammini nello spazio delle configurazioni facendo l'integrale gaussiano 2.53:

$$\begin{aligned}
G(\vec{x}_{n+1}, t_{n+1}; \vec{x}_n, t_n) &= \langle \vec{x}_{n+1} | \hat{U}(t_{n+1}, t_n) | \vec{x}_n \rangle = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \tilde{V}(\bar{x}_n) \varepsilon \right) \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_n \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p_n^2}{2m} \varepsilon + \frac{i}{\hbar} \vec{p}_n \cdot \left(\dot{\vec{x}}_n - \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_{n+1}, t) - \frac{1}{2} \vec{f}(\vec{x}_n, t) \right) \varepsilon \right) + o(\varepsilon^2) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \tilde{V}(\bar{x}_n) \varepsilon \right) \prod_{i=1}^3 I \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{m} \left| \frac{i}{\hbar} \left(\dot{x}_n^i - \frac{1}{2} f^i(\vec{x}_{n+1}, t) - \frac{1}{2} f^i(\vec{x}_n, t) \right) \varepsilon \right. \right) + o(\varepsilon^2) = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \tilde{V}(\bar{x}_n) \varepsilon \right) \left(\frac{2\pi}{\frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{m}} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} \left(\dot{\vec{x}}_n - \frac{1}{2} (\vec{f}(\vec{x}_{n+1}, t) + \vec{f}(\vec{x}_n, t)) \right)^2}{2 \frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{m}} \right) + o(\varepsilon^2) = \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left(\dot{\vec{x}}_n - \frac{1}{2} \vec{f}(\bar{x}_n, t) \right)^2 - \tilde{V}(\bar{x}_n) \right) \varepsilon \right) + o(\varepsilon^{3/2}) = \\
&= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} L_n \varepsilon \right) + o(\varepsilon^{3/2})
\end{aligned} \tag{15.98}$$

Inserendo questa espressione troviamo infine quanto atteso.

Capitolo 16

Applicazioni dell'Integrale dei Cammini

Discutiamo adesso di alcune semplici applicazioni dell'integrale dei cammini di Feynman.

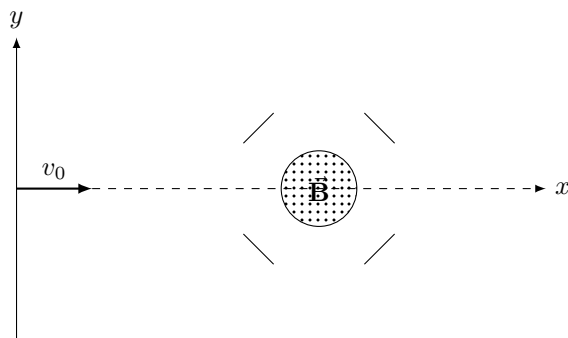
16.1 Effetto di Ahornov-Bohm

La prima applicazione che discutiamo è una basata sull'interferenza e l'interazione tra particelle e campi classicamente non rilevanti al moto di particelle. Questo fenomeno si basa su un noto esperimento di Ahornov e Bohm, che noi discutiamo solo schematicamente.

16.1.1 Esperimento

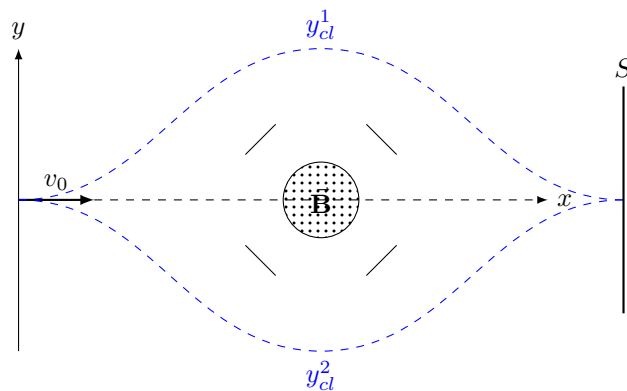
Sia un solenoide attraversato da corrente. Supponiamo che il solenoide abbia lunghezza infinita rispetto al raggio in modo tale che il campo magnetico sia confinato al suo interno, uniforme e diretto lungo l'asse del solenoide, che chiamiamo z .

Fissiamo poi un sistema di riferimento xy come in figura. Nell'origine poniamo una sorgente di elettroni ben collimati lanciati lungo l'asse x . Per semplicità supponiamo il fascio abbia intensità talmente tanto bassa che nella regione considerata vi sia un solo elettrone per volta, in modo da evitare interazioni.

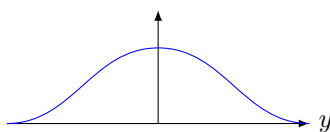


Attorno al solenoide poniamo delle **lenti elettrostatiche**, ossia conduttori di forma opportuna tenuti ad un certo potenziale e in una certa posizione, il cui scopo è quello di impedire agli elettroni di penetrare (dal punto di vista classico) all'interno del solenoide. Poniamo infine uno schermo dal lato opposto del solenoide rispetto al collimatore.

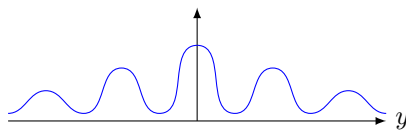
Pertanto a seconda delle coordinate y iniziale gli elettroni potranno percorrere due traiettorie classiche, una che va sopra al solenoide e un'altra che va al di sotto, a causa del campo generato dalle lenti.



Classicamente dunque gli elettroni non interagiscono con il campo magnetico del solenoide. Ci aspettiamo dunque che la distribuzione dei conteggi degli elettroni sullo schermo sia una piccata intorno ad $y = 0$, con una decrescita monotona all'aumentare di $|y|$.



Quantisticamente ci aspettiamo invece una forma di interferenza, che risulta in massimi e minimi. La cosa interessante osservata è che la figura di interferenza dipende dal flusso $\Phi_B = \pi R^2 B$ del campo magnetico attraverso il solenoide. Troveremo in particolare che la figura viene spostata a seconda di questo valore con un certo periodo.



16.1.2 Forma della Funzione d'Onda

Dal punto di vista quantistico la distribuzione dei conteggi coincide con la distribuzione di probabilità, data da:

$$dP = |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x \Rightarrow \frac{dP}{d^3x} = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (16.1)$$

Pertanto per trovare la figura di interferenza, almeno qualitativamente, dobbiamo discutere prima della funzione d'onda degli elettroni che compongono il fascio.

Supponiamo per semplicità che la sorgente emetta elettroni nel medesimo stato.

$$\psi_0(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi_0 \rangle \quad |\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \quad (16.2)$$

Questo sarebbe un problema in meccanica classica in quanto significa che l'elettrone va sempre sotto o sempre sopra, ma siccome la posizione non è univocamente determinata dalla funzione d'onda (normalizzabile) allora non vi è questo problema in meccanica quantistica.

Infatti se vogliamo osservare la figura di interferenza dobbiamo ottenere un **fascio bilanciato** di elettroni, che sia simmetrico rispetto ad $y = 0$, in modo che in media metà degli elettroni "passino sotto" il solenoide e l'altra metà "passi sopra". Sperimentalmente questo si può fare ad esempio mettendo prima dell'esperimento dei rivelatori sopra e sotto il solenoide, che verificano la simmetria del fascio.

Dal punto di vista della funzione d'onda del singolo elettrone, questo equivale a supporre che inizialmente questa sia data dalla sovrapposizione di due funzioni d'onda con supporto nel semipiano superiore ed inferiore rispettivamente:

$$\psi_0(\vec{x}) = \psi_1^0(\vec{x}) + \psi_2^0(\vec{x}) \quad \begin{cases} \text{supp}(\psi_1) \subseteq \{\vec{x}: y > 0\} \\ \text{supp}(\psi_2) \subseteq \{\vec{x}: y < 0\} \end{cases} \iff \begin{cases} \psi_1(\vec{x}) = 0 & y < 0 \\ \psi_2(\vec{x}) = 0 & y > 0 \end{cases} \quad (16.3)$$

Per trovare la dipendenza della funzione d'onda dal campo nel solenoide usiamo adesso l'integrale dei cammini di Feynman. Nel nostro caso possiamo scrivere che a un certo istante la funzione d'onda è l'evoluzione della somma delle

due funzioni d'onda ψ_1^0, ψ_2^0 :

$$\psi(\vec{x}', t) = \psi_1(\vec{x}', t) + \psi_2(\vec{x}', t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x G(\vec{x}', t; \vec{x}, t_0) \psi_1^0(\vec{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3x G(\vec{x}', t; \vec{x}, t_0) \psi_2^0(\vec{x}) \quad (16.4)$$

Pertanto sullo schermo troviamo la seguente distribuzione di probabilità:

$$\begin{aligned} dP &= |\psi(\vec{x}', t)|^2 d^3x' = |\psi_1(\vec{x}', t) + \psi_2(\vec{x}', t)|^2 d^3x' = \\ &= \left[|\psi_1(\vec{x}', t)|^2 + |\psi_2(\vec{x}', t)|^2 + 2 \operatorname{Re}\{\psi_1(\vec{x}', t) \psi_2^*(\vec{x}', t)\} \right] d^3x' \end{aligned} \quad (16.5)$$

16.1.3 Potenziale Vettore

Ci serve dunque esplicitare la funzione di Green tramite l'integrale dei cammini:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) &= \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 + \frac{q}{c} \vec{A} \cdot \dot{\vec{x}} - qV(\vec{x}) \\ S[\vec{x}(\tau)] &= \int_t^{t'} \mathcal{L}(\vec{x}(\tau), \dot{\vec{x}}(\tau), \tau) d\tau \\ G(\vec{x}', t'; \vec{x}, t) &= \int_{\vec{x}(t)=\vec{x}}^{\vec{x}(t')=\vec{x}'} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau)]\right) \end{aligned} \quad (16.6)$$

dove \vec{A} è il potenziale vettore del campo magnetico generato dal solenoide. Per calcolare questo ci poniamo per semplicità nella gauge che ha simmetria cilindrica $\vec{A}(\vec{x}) = f(\rho) \hat{e}_\phi$. Grazie queste possiamo trovare f usando il Teorema di Stokes lungo una circonferenza C di raggio ρ con stesso asse del solenoide percorsa in modo tale che il cerchio corrispondente Σ abbia normale parallela al campo magnetico. Per $\rho \geq R$ raggio del solenoide troviamo:

$$\begin{aligned} \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{x} &= \int_\Sigma \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma \\ 2\pi\rho f(\rho) &= B\pi R^2 = \Phi(\vec{B}) \\ f(\rho) &= \frac{\Phi(\vec{B})}{2\pi\rho} \\ \vec{A} &= \frac{\Phi(\vec{B})}{2\pi\rho} \hat{e}_\phi \end{aligned} \quad (16.7)$$

Verifichiamo che questo è un opportuno potenziale vettore:

$$\nabla \times \vec{A} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho A_\phi) \hat{e}_z = 0 \quad (16.8)$$

Mentre all'interno del solenoide:

$$\int_{\Sigma(\rho)} \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma = \pi\rho^2 B \Rightarrow f(\rho) = \frac{B}{2}\rho \Rightarrow \vec{B} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{B}{2} \right) \hat{e}_z = \frac{1}{\rho} \rho B \hat{e}_z = B \hat{e}_z \quad (16.9)$$

come deve essere.

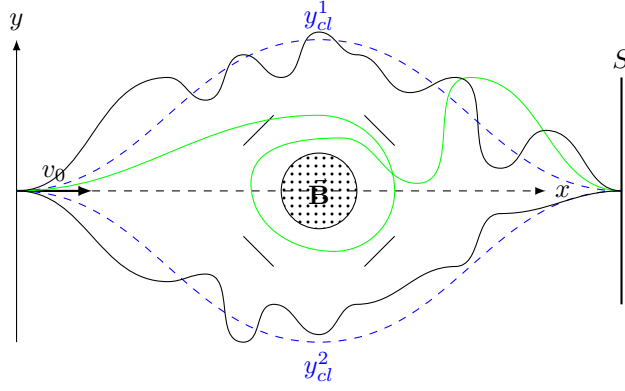
Notiamo che non esiste una gauge tale che il potenziale vettore sia nullo al di fuori del cilindro, così che è non nullo ovunque in ogni gauge (eccetto per $\rho = 0$ e $\rho \rightarrow \infty$).

16.1.4 Calcolo dell'Azione

Per trovare la funzione di Green dovremmo adesso calcolare l'azione lungo ogni possibile percorso che da $\vec{x}(t_0) = \vec{x}$ ad $\vec{x}(t) = \vec{x}'$. In realtà il problema si semplifica notevolmente se notiamo che l'estensione spaziale di $\psi_0(\vec{x})$, e dunque di $\psi(\vec{x}, t)$ è molto piccola rispetto alle dimensioni dell'apparato.

Questo significa che l'azione di una traiettoria tipica sarà grande rispetto ad \hbar e quindi è ragionevole supporre che i nell'integrale funzionale contribuiscano maggiormente i moti vicini a quelli classici, che vanno sopra o sotto il solenoide. In particolare per ogni valore di \vec{x} "iniziale" e punto "finale" \vec{x}' , i contributi maggiori sono i corrispondenti moti classici, rispettivamente sopra e sotto il solenoide. Ancora, siccome supponiamo il pacchetto molto stretto rispetto alle dimensioni dell'apparato, allora all'istante t_0 dobbiamo considerare solo $\vec{x} = 0$ come punto iniziale del percorso classico e all'istante t dobbiamo considerare solo il centro dello schermo. Pertanto i cammini principali saranno i due cammini classici con questi estremi, uno sopra e l'altro sotto il solenoide, che indichiamo rispettivamente con γ_{cl}^1 e γ_{cl}^2 .

I moti "irregolari", come quelli che si avvolgono attorno al solenoide, o quelli che si allontanano molto dall'apparato, forniranno invece un contributo trascurabile alla funzione di Green e dunque alla funzione d'onda.



Quest'ipotesi ci permette dunque di scrivere l'evoluzione temporale dei due pacchetti nel seguente modo:

$$\psi_k(\vec{x}', t) = \int_{I_k} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau)]\right) \psi_k^0(\vec{x}(\tau)) \quad k = 1, 2 \quad (16.10)$$

dove I_k è l'insieme dei cammini vicini alle traiettorie classiche γ_{cl}^k . In particolare I_1 include tutti i cammini interamente sopra ed I_2 quelli interamente sotto.

Per un cammino generico $\vec{x}(\tau)$ l'azione sarà data da:

$$\begin{aligned} S[\vec{x}(\tau)] &= \int_{t_0}^t \mathcal{L}(\vec{x}(\tau), \dot{\vec{x}}(\tau), \tau) d\tau = \int_{t_0}^t \left(\frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2(\tau) + \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{x}(\tau)) \cdot \dot{\vec{x}}(\tau) - qV(\vec{x}(\tau)) \right) d\tau = \\ &= \int_{t_0}^t \left(\frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2(\tau) - qV(\vec{x}(\tau)) \right) d\tau + \frac{q}{c} \int_{t_0}^t \vec{A}(\vec{x}(\tau)) \cdot \dot{\vec{x}}(\tau) d\tau = \\ &= S_0[\vec{x}(\tau)] + \frac{q}{c} \int_{\gamma} \vec{A}(\vec{x}) \cdot d\vec{x} \end{aligned} \quad (16.11)$$

dove γ è la curva tracciata da $\vec{x}(\tau)$ e orientata da $\vec{x}(t)$ ad $\vec{x}(t')$. Se $\vec{x}(\tau) \in I_k$ allora γ è vicina a γ_{cl}^k . Pertanto entrambe le curve sono sopra o sotto il solenoide, ossia il campo tra la curva $\gamma \cup (-\gamma_{cl}^k)$ (che è una curva chiusa) è nullo. Possiamo dunque scrivere:

$$\begin{aligned} \oint_{\gamma \cup (-\gamma_{cl}^k)} \vec{A} \cdot d\vec{x} &= \int_{\Sigma} \vec{B} \cdot \hat{n} d\Sigma = 0 \\ \int_{\gamma} \vec{A} \cdot d\vec{x} &= \int_{\gamma_{cl}^k} \vec{A} \cdot d\vec{x} \end{aligned} \quad (16.12)$$

Ma questo significa che il contributo alla funzione di Green (e funzione d'onda) è una fase costante che dipende unicamente da k , ossia dal pacchetto "parziale" ψ_k .

$$S[\vec{x}(\tau)] = S_0[\vec{x}(\tau)] + \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^k} \vec{A} \cdot d\vec{x} \quad (16.13)$$

Questo ci permette di scrivere l'evoluzione dei pacchetti ψ_k^0 nel seguente modo:

$$\begin{aligned} \psi_k(\vec{x}', t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^k} \vec{A} \cdot d\vec{x}\right) \int_{I_k} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0[\vec{x}(\tau)]\right) \psi_k^0(\vec{x}) = \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^k} \vec{A} \cdot d\vec{x}\right) \psi_k^0(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (16.14)$$

dove $\psi_k^0(\vec{x}, t)$ indica il pacchetto ψ_k^0 evoluto da t_0 a t usando solo la parte libera e del potenziale dovuto alle lenti elettrostatiche. Nell'approssimazione fatta di "grande azione" pertanto il campo magnetico risulta solo in una fase costante nella funzione d'onda.

16.1.5 Spettro di Interferenza

Siamo ora in grado di scrivere la dipendenza della distribuzione di probabilità, ossia dello spettro di interferenza misurato nello schermo, dal campo magnetico. Troviamo:

$$\begin{aligned}
 \frac{dp}{dd^3x}(\vec{x}', t) &= |\psi_1(\vec{x}', t)|^2 + |\psi_2(\vec{x}', t)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left\{ \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^1} \vec{A} \cdot d\vec{x} \right) \psi_1^0(\vec{x}, t) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^2} \vec{A} \cdot d\vec{x} \right) \psi_2^0(\vec{x}, t)^* \right\} = \\
 &= |\psi_1^0(\vec{x}', t)|^2 + |\psi_2^0(\vec{x}', t)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left\{ \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \int_{\gamma_{cl}^1 \cup (-\gamma_{cl}^2)} \vec{A} \cdot d\vec{x} \right) \psi_1^0(\vec{x}, t) \psi_2^0(\vec{x}, t)^* \right\} = \\
 &= |\psi_1^0(\vec{x}', t)|^2 + |\psi_2^0(\vec{x}', t)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left\{ \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Phi_B \right) \psi_1^0(\vec{x}, t) \psi_2^0(\vec{x}, t)^* \right\}
 \end{aligned} \tag{16.15}$$

Confrontiamo dunque questa in presenza e in assenza di campo magnetico. Notiamo che i valori assoluti di ψ_1^0, ψ_2^0 non sono influenzati da questo, in quanto è una fase costante (non dipende da \vec{x} o da t).

In assenza di campo magnetico ($B = 0$) i massimi si hanno quando ψ_1^0, ψ_2^0 fanno interferenza costruttiva, ossia hanno le stesse fasi:

$$2 \operatorname{Re} \{ \psi_1^0(\vec{x}, t) \psi_2^0(\vec{x}, t)^* \} = 2 \operatorname{Re} \{ |\psi_1^0(\vec{x}, t)| |\psi_2^0(\vec{x}, t)| \} = 2 |\psi_1^0 \psi_2^0| \tag{16.16}$$

Notiamo ora l'importanza che il fascio sia bilanciato. Se così non fosse infatti l'interferenza non si noterebbe, risultando in uno spettro analogo a quello classico, dovuto al fascio di elettroni che viaggiano sopra piuttosto che sotto ($|\psi_2^0| \ll |\psi_1^0|$) o viceversa.

In presenza di campo magnetico questo contributo cambia, risultando in una modulazione dei massimi (e dunque dell'intero spettro):

$$2 \operatorname{Re} \left\{ \psi_1^0(\vec{x}, t) \psi_2^0(\vec{x}, t)^* \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Phi_B \right) \right\} = 2 \operatorname{Re} \left\{ |\psi_1^0(\vec{x}, t) \psi_2^0(\vec{x}, t)| \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} \Phi_B \right) \right\} = 2 |\psi_1^0 \psi_2^0| \cos \left[\frac{q}{\hbar c} \Phi_B \right] \tag{16.17}$$

Pertanto troviamo che ϕ_B modula i massimi con periodo:

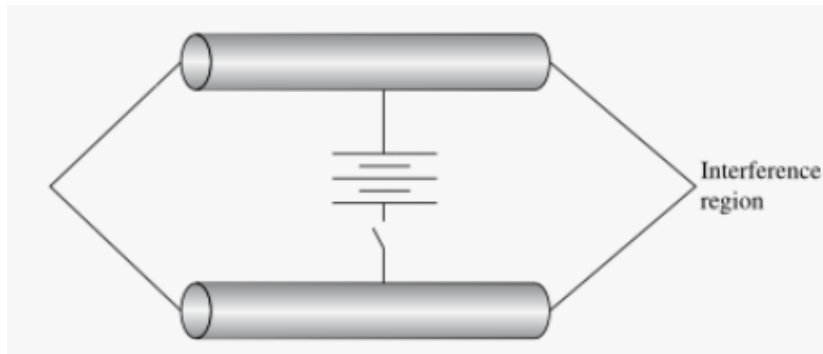
$$\frac{q\Phi}{\hbar c} = 2n\pi \Rightarrow \Phi_B \sim \Phi_B + \frac{2\pi\hbar c}{q} \tag{16.18}$$

Questo fenomeno, in cui una particella interagisce con il campo magnetico anche dove è assente, prende il nome di **Effetto di Ahornov-Bohm** (Effetto AB).

16.2 Variante Elettrostatica dell'Effetto AB

16.2.1 Descrizione del Sistema

Consideriamo una variante dell'Effetto AB. Sia un cannone elettronico che viene separato in due da un sistema di lenti elettrostatiche. I fasci vengono fatti attraversare due griglie metalliche cilindriche (tubi), tenute a potenziali V_2, V_1 da una batteria, a cui sono collegati tramite un interruttore. I fasci uscenti dalle griglie vengono poi fatti ricongiungere in uno schermo attraverso altre lenti elettrostatiche.



Nell'esperimento l'interruttore I viene chiuso ad un istante di tempo successivo all'ingresso di ciascun elettrone (supponiamo sempre un elettrone per volta) e rimane chiuso fino a poco prima che esca dal tubo, per un tempo T (che

supponiamo lo stesso per ogni elettrone se la velocità di ogni elettrone è la stessa).

Quando I è chiuso, siccome le griglie sono conduttori allora al loro interno il potenziale è costante e il campo elettrico è nullo. Vi sarà comunque un campo elettrico non nullo tra i due conduttori, diretto in particolare da V_1 a V_2 se $\Delta V = V_1 - V_2 = \mathcal{E} > 0$. Quando è aperto invece non vi è campo dovuto alle griglie e la batteria.

Classicamente siccome le griglie sono accese solo quando sono attraversate da elettroni allora gli elettroni non risentono mai del campo e dunque non interagiscono con queste.

Quantisticamente ci aspettiamo come prima che vi sia un'interazione tra il campo e l'elettrone sotto forma di una fase, che risulta in un'interferenza misurabile per l'intero fascio, se questo è bilanciato.

Indichiamo con t_1 l'istante in cui un elettrone arriva ad una delle due griglie, t_2 l'istante in cui esce dalla griglia e con $T' = t_2 - t_1$ il tempo impiegato. Per quanto detto deve risultare $T \leq T'$.

16.2.2 Spettro di Interferenza

Come prima la presenza di un fascio bilanciato risulta nella divisione della funzione d'onda in due, la cui evoluzione studiamo con l'integrale dei cammini. Di nuovo i cammini principali saranno quelli classici γ_{cl}^k , così che dobbiamo integrare solo sui cammini vicini, appartenenti ad I_k :

$$\begin{aligned}\psi(\vec{x}, t) &= \psi_1(\vec{x}, t) + \psi_2(\vec{x}, t) \\ \psi(\vec{x}', t') &= \psi_1(\vec{x}', t') + \psi_2(\vec{x}', t') \\ \psi_k(\vec{x}', t') &= \int_{I_k} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\vec{x}(\tau)]\right) \psi_k^0(\vec{x}, t)\end{aligned}\tag{16.19}$$

La lagrangiana è data poi da:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t) &= \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - qV(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - qV_l(\vec{x}) - qV_t(\vec{x}, t) = \\ &= \mathcal{L}_0(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) - q_t V_t(\vec{x}, t)\end{aligned}\tag{16.20}$$

con V_l potenziale delle lenti e V_t potenziale dei tubi metallici.

L'azione corrispondente per un certo cammino sarà data da:

$$S[\vec{x}(\tau)] = S_0[\vec{x}(\tau)] - q \int_t^{t'} V_t(\vec{x}(\tau), \tau) d\tau\tag{16.21}$$

con la suddivisione come prima.

Supponiamo per semplicità che il tubo possa essere considerato infinito rispetto all'estensione della funzione d'onda, in modo tale che sia uniforme al suo interno:

$$V_t(\vec{x}, t) = V_k(t) \quad k = 1, 2\tag{16.22}$$

dove $V_k(t)$ è il potenziale dovuto alla batteria, che vale dunque V_k in un intervallo (t'_1, t'_2) (istanti di chiusura e apertura di I , con $t'_2 - t'_1 = T$) e nullo al di fuori:

$$V_1(t) = V_1 \theta(t - t'_1) \theta(t'_2 - t) \quad V_2(t) = V_2 \theta(t - t'_1) \theta(t'_2 - t)\tag{16.23}$$

Questo semplice modello permette di calcolare facilmente il contributo del potenziale all'azione a seconda che il cammino appartenga ad I_1 o I_2 :

$$S[\vec{x}(\tau)] = S_0[\vec{x}(\tau)] - qV_k T\tag{16.24}$$

Il contributo del potenziale all'azione è dunque indipendente dallo specifico cammino, così che si porta fuori dal resto dell'integrale dei cammini:

$$\psi_k(\vec{x}', t') = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} qV_k T\right) \psi_k^0(\vec{x}, t)\tag{16.25}$$

Pertanto la distribuzione di probabilità è data da:

$$\frac{dP}{d^3x} = |\psi_1^0| + |\psi_2^0| + 2 \operatorname{Re} \left\{ \psi_1^0 (\psi_2^0)^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} q\mathcal{E}T\right) \right\}\tag{16.26}$$

Troviamo dunque lo stesso effetto di prima, con la corrispondenza:

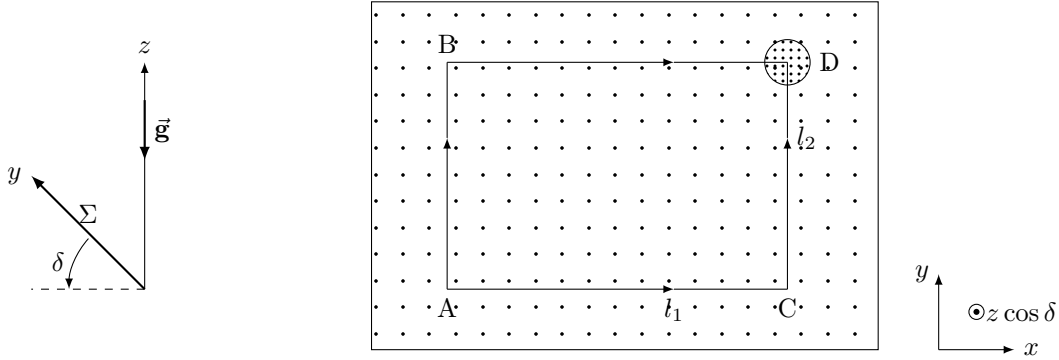
$$\frac{q\Phi}{\hbar c} \iff \frac{q\mathcal{E}T}{\hbar}\tag{16.27}$$

16.3 Variante Gravitazionale dell'Effetto AB

16.3.1 Descrizione del Sistema

Possiamo considerare ancora un'altra variante dell'Effetto AB, basata sull'interazione gravitazionale (classica). Consideriamo stavolta un fascio di neutroni emessi ad una certa velocità \vec{v} in un cristallo di silicio, che assumiamo approssimativamente bidimensionale, un piano che chiamiamo Σ e identifichiamo con xy . Classicamente i neutroni possono essere diffusi $\pi/2$, così che i moti classici sono due, uno che viaggia prima "orizzontalmente" (lungo x) e poi "verticalmente" (lungo y) e un altro che fa il viceversa.

Il piano Σ è libero di ruotare attorno ad un estremo parallelo all'asse x (che identifichiamo proprio con l'asse x), in modo da avere un'inclinazione δ rispetto alla posizione orizzontale. Se il piano è orizzontale allora non vi è differenza tra i due moti dal punto di vista gravitazionale, mentre nel caso inclinato cambia il potenziale nei moti orizzontali. Classicamente questo non influenza il moto ma ci aspettiamo nel caso quantistico una differenza di fase che risulta nell'interferenza.



Identifichiamo l'asse z con quello verticale, in modo che $z = y \sin \delta$. La lagrangiana si scrive dunque:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}mv^2 - mgy \sin \delta \quad (16.28)$$

da cui l'azione lungo un percorso:

$$S[\vec{x}(\tau)] = S_0[\vec{x}(\tau)] - mg \sin \delta \int_t^{t'} y(\tau) d\tau \quad (16.29)$$

16.3.2 Spettro di Interferenza

All'ordine più basso i moti che contribuiscono all'azione sono quelli vicini a quelli classici I_k , ossia:

$$\int_t^{t'} y(\tau) d\tau = \int_t^{t'} y_{cl}^l(\tau) d\tau \quad (16.30)$$

Calcoliamo ora l'azione relativa a questi cammini. La parte relativa ai tratti AB e CD è identica in quanto cambia solo la coordinata orizzontale, ma non quella verticale e la velocità non cambia nel tratto orizzontale (così che non vi è differenza se viene prima o dopo). Ci riferiamo dunque a questa parte con \bar{S} . La parte relativa ai tratti verticali è invece distinta. Infatti per AC il moto avviene a quota nulla (nel nostro sistema di riferimento), mentre per BD avviene ad una quota diversa se δ è non nullo. Troviamo in particolare:

$$\begin{aligned} mg \sin \delta \int_t^{t'} y_{cl}^1(\tau) d\tau &= \bar{S} + mg \sin \delta \int_0^{l_1} l_2 \frac{dy}{v} = mg \sin \delta \frac{l_1 l_2}{v} \\ mg \sin \delta \int_t^{t'} y_{cl}^2(\tau) d\tau &= \bar{S} \end{aligned} \quad (16.31)$$

In questo caso v è la velocità con il neutrone arriva in B dopo il tratto AB , che non sarà la stessa velocità con cui parte da A .

Come prima usiamo un fascio bilanciato in modo che la funzione d'onda iniziale di un neutrone sia:

$$\psi_0(\vec{x}) = \psi_1^0(\vec{x}) + \psi_2^0(\vec{x}) \quad (16.32)$$

da cui quella finale:

$$\frac{dP}{d^3x} = |\psi_1^0|^2 + |\psi_2^0|^2 + 2 \operatorname{Re} \left\{ \psi_1^0(\psi_2^0)^* \exp \left(\frac{i}{\hbar} mg \sin \delta \frac{l_1 l_2}{v} \right) \right\} \quad (16.33)$$

Troviamo dunque la corrispondenza:

$$\frac{q\Phi}{\hbar c} \Longleftrightarrow \frac{q\mathcal{E}T}{\hbar} \Longleftrightarrow mg \sin \delta \frac{l_1 l_2}{\hbar v} \quad (16.34)$$

Nell'esperimento di sono usati neutroni termici, ossia provenienti da una sorgente a temperatura T , in modo tale che avessero velocità media:

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}k_B T \quad (16.35)$$

L'apparato usato era poi caratterizzato da:

$$\frac{mgl_1 l_2}{\hbar v} \approx 50 \quad (16.36)$$

in modo tale che l'escursione della fase tra piano orizzontale e verticale è dell'ordine di:

$$\Delta\phi \approx 100 \Rightarrow \frac{\Delta\phi}{2\pi} \approx 9 \quad (16.37)$$

Ci aspettiamo dunque una decina di massimi al variare di δ tra $-\pi/2$ e $\pi/2$.

16.4 Funzione di Partizione con Integrale dei Cammini

L'ultima applicazione che consideriamo è la possibilità di scrivere la funzione di partizione di un ensemble canonico di \mathcal{N} particelle usando una forma dell'integrale dei cammini di Feynman. Ricordiamo che questo sistema sta in uno stato miscela, descritto dall'operatore statistico che massimizza l'entropia ad energia media fissata:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad Z = \text{Tr } e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \quad (16.38)$$

Supponiamo l'hamiltoniana sia della seguente forma:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \hat{K} + \hat{V} \\ K &= \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \frac{p_i^2}{2m_i} \\ V(\vec{\mathbf{x}}_1, \dots, \vec{\mathbf{x}}_{\mathcal{N}}) &= \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} U_0(\vec{\mathbf{x}}_i) + U_{int}(\vec{\mathbf{x}}_1, \dots, \vec{\mathbf{x}}_{\mathcal{N}}) \end{aligned} \quad (16.39)$$

Definiamo ora il **tempo euclideo**:

$$t_E \equiv \beta \hbar \Rightarrow t_E \hbar = k_B T \quad (16.40)$$

Se facciamo una rotazione di Wick:

$$t_E = i\tau \Rightarrow \tau = -it_E \quad (16.41)$$

allora l'operatore statistico si vede essere proporzionale all'evolutore temporale con hamiltoniana $\hat{\mathcal{H}}$ dopo un tempo τ :

$$\hat{\rho} \propto \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}) = \exp\left(-\frac{t_E}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (-it_E) \hat{\mathcal{H}}\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} \tau\right) \quad (16.42)$$

Questo è quello che suggerisce di usare l'integrale dei cammini. In particolare la traccia, ossia la funzione di partizione, si potrà scrivere nella base delle configurazioni come integrale della "funzione di Green" associata all'operatore statistico:

$$\text{Tr } e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} = \int d^M x \langle \vec{\mathbf{x}} | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | \vec{\mathbf{x}} \rangle \quad (16.43)$$

dove $M = 3\mathcal{N}$ ed $\vec{\mathbf{x}}$ vettore che include tutte le posizioni delle \mathcal{N} particelle.

Tornando all'espressione con t_E , possiamo infatti "dividere" t_E in $N + 1$ "intervalli":

$$t_E = (N + 1)\varepsilon \quad (16.44)$$

In questo modo possiamo scrivere l'operatore statistico (ci dimentichiamo di Z per semplicità) come prodotto di $N + 1$ operatori statistici:

$$e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} = \prod_{n=0}^N \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}\right) \quad (16.45)$$

In questo modo inserendo N identità troviamo la seguente espressione per l'elemento di matrice:

$$\langle \vec{x}' | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | \vec{x} \rangle = \int \left(\prod_{n=1}^N d^M x_n \right) \left(\prod_{n=0}^N \langle \vec{x}_{n+1} | \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}\right) | \vec{x}_n \rangle \right) \quad \vec{x}_0 = \vec{x}, \vec{x}_{N+1} = \vec{x}' \quad (16.46)$$

Per $N \rightarrow \infty, \varepsilon \rightarrow 0$ possiamo approssimare al primo ordine l'evolutore temporale:

$$\exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}\right) = \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \frac{\hat{V}}{2}\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{K}\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \frac{\hat{V}}{2}\right) + o(\varepsilon^2) \quad (16.47)$$

da cui l'elemento di matrice:

$$\langle \vec{x}_{n+1} | \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}\right) | \vec{x}_n \rangle = \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} V(\vec{x}_n)\right) \langle \vec{x}_{n+1} | \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{K}\right) | \vec{x}_n \rangle \quad (16.48)$$

L'elemento di matrice della parte cinetica si può calcolare fattorizzato:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_{n+1} | \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{K}\right) | \vec{x}_n \rangle &= \prod_{k=1}^M \langle x_{n+1}^k | \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \frac{\hat{p}_k^2}{2m}\right) | x_n^k \rangle \\ \langle x_{n+1}^k | \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \frac{\hat{p}_k^2}{2m}\right) | x_n^k \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dp_n^k \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \frac{(p_n^k)^2}{2m_k} + \frac{i}{\hbar} p_n^k (x_{n+1}^k - x_n^k)\right) = I\left(\frac{\varepsilon}{m_k \hbar} \left| \frac{i}{\hbar} (x_{n+1}^k - x_n^k) \right.\right) = \\ &= \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left(-\frac{(x_{n+1}^k - x_n^k)^2}{\hbar^2} \frac{m_k \hbar}{2\varepsilon}\right) = \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left(-\frac{m_k (\dot{x}_n^k)^2}{2\hbar} \varepsilon\right) \end{aligned} \quad (16.49)$$

dove abbiamo definito la velocità "euclidea". Definiamo poi la **lagrangiana euclidea**:

$$\mathcal{L}^E = \sum_{k=1}^M \frac{1}{2} m_k \dot{x}_k^2 + V(\vec{x}) \quad (16.50)$$

da cui l'**azione euclidea**:

$$S_E[\vec{x}(\tau_E)] = \int_0^{\tau_E} \mathcal{L}^E(\vec{x}(\tau_E), \dot{\vec{x}}(\tau_E)) d\tau_E \quad (16.51)$$

Troviamo dunque:

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} V(\vec{x}_n)\right) \langle \vec{x}_{n+1} | \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \hat{K}\right) | \vec{x}_n \rangle &= \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} V(\vec{x}_n)\right) \prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left(-\frac{m_k (\dot{x}_n^k)^2}{2\hbar} \varepsilon\right) = \\ &= \prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{1}{2} m_k (\dot{x}_n^k)^2 + V(\vec{x}_n)\right)\right) = \\ &= \prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} L_n\right) \end{aligned} \quad (16.52)$$

con $L_n = \mathcal{L}^E(\vec{x}_n, \dot{\vec{x}}_n)$. Inserendo questo nell'elemento di matrice (analogo funzione di Green):

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}' | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | \vec{x} \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_{n=1}^N d^M x_n \right) \left[\prod_{n=0}^N \left(\prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} L_n\right) \right) \right] = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \right) \int \left(\prod_{n=1}^N d^M x_n \right) \prod_{n=0}^N \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\hbar} L_n\right) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{m_k}{2\pi\hbar\varepsilon}} \right) \int \left(\prod_{n=1}^N d^M x_n \right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \sum_{n=0}^N L_n \varepsilon\right) = \\ &= \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}}^{\vec{x}(t_E)=\vec{x}'} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau_E)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E[\vec{x}(\tau_E)]\right) \end{aligned} \quad (16.53)$$

Questo ci permette infine di scrivere la funzione di partizione come integrale su tutti i cammini chiusi:

$$Z = \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}(t_E)} \mathcal{D}[\vec{x}(\tau_E)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E[\vec{x}(\tau_E)]\right) \quad (16.54)$$

Si può dimostrare che l'integrale così scritto può essere reso matematicamente rigoroso in termini dell'**integrale sui cammini di Wiener**, definito per processi stocastici.

Possiamo adesso vedere un cammino su cui si integra come una funzione periodica di periodo t_E , in modo che si possa espandere in serie di Fourier:

$$\vec{x}(\tau_E) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \vec{c}_j \exp\left(\frac{2\pi i}{t_E} j \tau_E\right) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \vec{c}_j \exp(i \omega_j \tau_E) \quad (16.55)$$

dove le ω_j sono le **frequenza di Matsubara**, determinate dalla temperature del sistema:

$$\omega_j = \frac{2\pi}{t_E} j = \frac{2\pi k_B T}{\hbar} j \quad (16.56)$$

Parte V

Struttura Iperfine

Capitolo 17

Struttura Iperfine

In questo capitolo studiamo l'effetto del momento magnetico di un nucleo sull'hamiltoniana degli elettroni con esso interagenti, e dunque autovalori ed autostati.

17.1 Momento Magnetico Nucleare

La struttura iperfine degli atomi è dovuta all'interazione degli elettroni con il momento magnetico dei nuclei. In questo modo il nucleo non è più descritto unicamente da massa, carica e posizione ma anche dallo spin e dunque momento magnetico.

Ricordiamo che ad un elettrone è associato un momento magnetico legato allo spin:

$$\vec{\mu} = g_S \frac{-e}{2m_e c} \vec{S} \quad (17.1)$$

dove g_S è detto **fattore giromagnetico** dell'elettrone. Per i nucleoni si trova analogamente un momento magnetico associato allo spin:

$$\vec{\mu}_N = g_N \frac{e}{2m_p c} \vec{S} \quad m_p \approx m_n \quad (17.2)$$

Queste definizioni sono spesso riformulate in termini del **magnetone di Bohr** e del **magnetone nucleare**:

$$\begin{cases} \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \\ \mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \vec{\mu}_e = -g_S \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} \\ \vec{\mu}_e = g_N \mu_N \frac{\vec{S}}{\hbar} \end{cases} \quad (17.3)$$

Se g_S, g_N sono dello stesso ordine di grandezza, questo significa che il momento magnetico nucleare è circa 2000 volte più piccolo di quello elettronico:

$$\frac{\mu_N}{\mu_B} = \frac{m_p}{m_e} \approx 2000 \quad (17.4)$$

Questo giustifica come l'effetto del momento magnetico nucleare sia molto minore non solo rispetto all'interazione elettrostatica ma anche rispetto alle correzioni relativistiche.

Siccome siamo interessati al momento magnetico dell'intero nucleo, allora il momento totale sarà la somma dei momenti dei singoli nucleoni. In realtà ci conviene parlare del momento magnetico diretto lungo l'asse nucleare, ossia la direzione del momento angolare nucleare (somma dei momenti angolari di spin ed orbitali), in quanto questo è una costante del moto:

$$\vec{\mu} \propto \vec{I} \quad \vec{I} = \sum_i (\vec{S}_i + \vec{L}_i) \quad (17.5)$$

In particolare definiamo il fattore giromagnetico nucleare in modo tale che:

$$\vec{\mu} = g \frac{e}{2m_p c} \vec{I} = g \mu_N \frac{\vec{I}}{\hbar} \quad (17.6)$$

Ad esempio:

1. Per ^{87}Rb si trova $I = 3/2$ e $g = 1.833$;
2. Per ^{85}Rb si trova $I = 5/2$ e $g = 0.54$;

3. Per ^{133}Cs si trova $I = 7/2$ e $g = 0.73$.

Pertanto il momento magnetico dovuto ad un nucleo è sempre dell'ordine del momento magnetico del singolo nucleone, indicando che i momenti magnetici dei nucleoni si cancellano l'un l'altro.

17.2 Hamiltoniana Imperturbata e Fine

In questo studio ci limiteremo solo agli **atomi ad un elettrone**, ossia gli atomi (o ioni) che hanno un solo elettrone nella shell di valenza. Questi includono gli atomi idrogenoidi, che hanno un solo elettrone, e gli atomi alcalini, che hanno più elettroni. In questo caso l'energia di prima ionizzazione è molto maggiore di quella di (eventuale) seconda ionizzazione, così che l'elettrone è debolmente legato all'atomo rispetto agli elettroni interni. La transizione (che sarà ottica) si può dunque approssimare come se avvenga ad elettroni interni fissati e il problema si limita a considerare un **singolo elettrone**.

In questo caso iniziamo col ricordare i termini principali, relativi all'interazione elettrostatica e le correzioni relativistiche.

17.2.1 Hamiltoniana Imperturbata

In prima approssimazione l'elettrone si trova in un potenziale scalare centrale:

$$H_e(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + qV(r) \quad V(r) = \frac{Ze}{r} + V_{Z-1}(r) \quad (17.7)$$

dove $V_{Z-1}(r)$ è un potenziale scalare efficace ottenuto per "media" dei potenziali (non centrali) degli altri elettroni (ad esempio con il metodo di Hartree-Fock).

Trascurando lo spin lo spazio di Hilbert dell'elettrone è (equivalente a) $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, lo spazio delle funzioni a quadrato integrabile.

Quest'hamiltoniana è invariante per rotazioni della posizione e del momento e dunque conserva il modulo del momento angolare orbitale e le sue componenti (scegliamo la z). Insieme all'hamiltoniana questi formano un CSCO, così che specificano univocamente un autostato. In particolare siccome l'hamiltoniana dipende solo da L^2 allora gli autovalori propri sono indicizzati da un numero discreto n e il numero quantico orbitale l :

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{H}}_e |n, l, m\rangle = W_{nl} |n, l, m\rangle \\ \hat{L}^2 |n, l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |n, l, m\rangle \\ \hat{L}_z |n, l, m\rangle = \hbar m |n, l, m\rangle \end{cases} \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, \quad l = 0, \dots, n-1, \quad m = -l, \dots, l \quad (17.8)$$

Nel caso dell'atomo idrogenoide in particolare lo spettro si trova esattamente:

$$W_{nl}^0 = W_n^0 = -w_0 \frac{Z^2}{n^2} \quad w_0 = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{e^4 m_e}{2\hbar^2} = 13.6\text{eV} \quad (17.9)$$

Gli autovalori hanno dunque degenerazione $2l+1$.

Se poi vogliamo tenere conto dello spin allora dobbiamo usare $|n, l, m, m_s\rangle$, con $m_s = \pm 1/2$ numero quantico associato ad S_z e lo spazio diventa (equivalente a) $\mathcal{H}_e = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$. Gli autovalori W_n^0 hanno poi degenerazione $2(2l+1)$.

17.2.2 Hamiltoniana Fine

La correzione maggiore a questa hamiltoniana viene dalle correzioni relativistiche, all'ordine $1/c^2$:

$$H_{\text{fine}} = -\frac{q}{2m_e^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{E}(r) \times \vec{p} \quad (17.10)$$

dove $\vec{E}(r)$ è il campo elettrico generato da $V(r)$, che ha direzione radiale:

$$\vec{E}(r) = -\nabla V(r) = -\frac{\vec{x}}{r} \frac{dV}{dr} \quad (17.11)$$

In questo modo si semplifica l'espressione della correzione fine, che diventa di accoppiamento tra momento angolare di spin ed orbitale dell'elettrone (infatti detto accoppiamento spin-orbita):

$$H_{\text{fine}} = -\frac{q}{2m_e^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{E}(r) \times \vec{p} = \frac{q}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{S} \cdot \vec{x} \times \vec{p} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (17.12)$$

con $U(r) = qV(r)$. Trascuriamo le altre correzioni relativistiche di ordine $1/c^2$, ossia il termine di variazione di massa e il termine di Darwin, in quanto non si accoppiano allo spin e dunque la struttura fine non risulta in splitting dei loro livelli, ma solo una variazione assoluta.

L'accoppiamento spin-orbita implica che L_z, S_z non sono più costanti del moto, mentre L^2, S^2 lo sono ancora. Possiamo dunque considerare come costanti del moto il modulo del momento angolare totale e una sua componente J^2, J_z , che sono sempre conservate in un sistema isolato. Pertanto troveremo:

$$(\hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}_{\text{fine}}) |n, l, j, m_j\rangle = W_{nlj} |n, l, j, m_j\rangle \quad (17.13)$$

Facciamo cioè il cambio di base $|m, m_s\rangle \rightarrow |j, m_j\rangle$ (con l, s fissati, quindi tramite coefficienti di Clebsch-Gordan, almeno all'ordine zero). In questo modo i livelli energetici hanno degenerazione minore $2(2l+1) \rightarrow 2j+1$. In particolare siccome $s = 1/2$ risulta $j = l \pm 1/2$, così che $(2l-1) + 1 + (2l+1) + 1 = 2(2l+1)$, come deve essere.

Possiamo fare anche una semplice stima dell'ordine di grandezza della correzione iperfine, usando la teoria delle perturbazioni al primo ordine. Troviamo:

$$\begin{aligned} \langle nljm_j | \vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\mathbf{S}} | nljm_j \rangle &= \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \\ \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle &\approx \frac{1}{a_0^2} \langle V \rangle \approx \frac{w_0}{a_0^2} \\ W_{nlj}^{(1)} = \langle \hat{\mathcal{H}}_{\text{fine}} \rangle &= \frac{g_s - 1}{2m_e^2 c^2} \langle \vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\mathbf{S}} \rangle \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle \approx \\ &\approx \frac{g_s - 1}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \frac{w_0}{a_0^2} \approx \\ &\approx \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2} \frac{w_0}{a_0^2} = w_0 \alpha^2 = O(\alpha^2) \end{aligned} \quad (17.14)$$

Pertanto la correzione di struttura fine è dell'ordine di 10^{-4} rispetto ai livelli imperturbati, giustificando l'uso della teoria delle perturbazioni e l'approssimazione delle correzioni relativistiche.

17.2.3 Inclusione dello Spin Nucleare

Se vogliamo discutere dello spin nucleare allora dobbiamo ulteriormente espandere lo spazio di Hilbert del sistema, a seconda di quanto valga I . Lo spazio totale sarà dato da $\mathcal{H}_e \otimes \mathcal{H}_N \cong \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^{2I+1}$. Una base su \mathcal{H}_N è data ad esempio da quella comune ad I^2 ed I_z . Trascurando eventuali interazioni ed energia dovuta allo spin nucleare da solo allora l'hamiltoniana e gli autovalori sono gli stessi. La base di autostati è invece il prodotto tensoriale:

$$(\hat{\mathcal{H}}_e + \hat{\mathcal{H}}_{\text{fine}}) |n, l, j, m_j; I, m_I\rangle = W_{nlj} |n, l, j, m_j; I, m_I\rangle \quad |n, l, j, m_j; I, m_I\rangle = |n, l, j, m_j\rangle \otimes |I, m_I\rangle \quad (17.15)$$

Notiamo che siccome I è una costante del moto in realtà potremmo escluderlo dalla notazione, come fatto per lo spin elettronico S , ma lo teniamo in quanto vogliamo considerare la possibilità di diversi nuclei con diversi valori di I . L'estensione dello spazio aumenta dunque la degenerazione dei livelli energetici da $2j+1$ a $(2I+1)(2j+1)$.

Se includiamo l'hamiltoniana iperfine, che a breve discutiamo, allora l'effetto dell'interazione tra momento magnetico nucleare ed elettronico si tradurrà in un accoppiamento del tipo $\vec{\mathbf{J}} \cdot \vec{\mathbf{I}}$. Questo significa che neppure I_z nella struttura iperfine è una costante del moto (già sapevamo che S_z, L_z non lo erano per la correzione fine) e dunque dovremo usare il momento angolare totale sia dell'elettrone che del nucleo:

$$\vec{\mathbf{F}} = \vec{\mathbf{J}} + \vec{\mathbf{I}} \quad (17.16)$$

Useremo infine i seguenti numeri quantici:

$$|n, l, j, I, F, m_F\rangle \quad (17.17)$$

Facciamo dunque il cambio di base $|m_j, m_I\rangle \rightarrow |F, m_F\rangle$ (come prima a j, I fissati).

17.3 Forma Esplicita dell'Hamiltoniana Iperfine

Possiamo ora iniziare a scrivere l'hamiltoniana iperfine, nella sua forma **implicita**. Questa è data da una particella in un potenziale elettrostatico $V(r)$ con correzione relativistica, che è immersa nel campo magnetico dovuto al momento magnetico del nucleo. Questo campo si accoppia alla carica tramite il potenziale vettore e al momento magnetico

elettronico tramite il campo stesso. Teniamo infine conto dell'interazione tra il campo interno al nucleo e il momento magnetico elettronico:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + qV(r) - \frac{q}{2m_e^2 c^2} (g_s - 1) \vec{S} \cdot \vec{E} \times \vec{p} - \vec{\mu}_e \cdot \vec{B}_{ext} - \vec{\mu}_e \cdot \vec{B}_{int} =$$

$$= \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + qV(r) + \frac{g_s - 1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L} - \vec{\mu}_e \cdot \vec{B}_{ext} - \vec{\mu}_e \cdot \vec{B}_{int}$$
(17.18)

dove:

$$\vec{E} = -\nabla V(r) \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$
(17.19)

Ricordiamo che nell'esplicitare questi termini noi siamo interessati solo a quelli di ordine $1/c^2$, e trascuriamo quelli eventuali di ordine superiore. Vogliamo adesso esplicitare il campo magnetico dovuto al nucleo e i relativi termini nell'hamiltoniana.

17.3.1 Accoppiamento al Campo Magnetico e Potenziale Vettore

Nella gauge trasversa $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ si può dimostrare che il potenziale vettore dovuto ad un momento di dipolo magnetico è dato da:

$$\vec{A} = \frac{\vec{\mu}_N \times \vec{x}}{r^3}$$
(17.20)

da cui il campo magnetico risultante:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \frac{1}{r^3} \left[\frac{3}{r^2} (\vec{\mu}_N \cdot \vec{x}) \vec{x} - \vec{\mu}_N \right]$$
(17.21)

dove ricordiamo:

$$\vec{\mu}_N = g_N \frac{e}{2m_p c} \vec{I} \Rightarrow \vec{A} = O(c^{-1})$$
(17.22)

Possiamo ora calcolare l'accoppiamento del potenziale vettore all'impulso/carica, ricordando di fermarci all'ordine $O(1/c^2) = O(\alpha^2)$. Troviamo ($q = -e$):

$$K = \frac{1}{2m_e} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{e}{2m_e c} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2}{2m_e c^2} A^2 =$$

$$\approx \frac{p^2}{2m_e} + \frac{e}{2m_e c} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{e}{m_e c} \vec{p} \cdot \vec{A} =$$

$$= \frac{p^2}{2m_e} + \frac{e}{m_e c} \vec{p} \cdot \left(\frac{\vec{\mu}_N \times \vec{x}}{r^3} \right) =$$

$$= \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e}{m_e c} \vec{\mu}_N \cdot \left(\frac{\vec{p} \times \vec{x}}{r^3} \right) = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{e}{m_e c} \frac{\vec{\mu}_N \cdot \vec{L}}{r^3} =$$

$$= \frac{p^2}{2m_e} + \frac{e}{m_e c} g_N \mu_N \frac{1}{r^3} \frac{1}{\hbar} \vec{I} \cdot \vec{L}$$
(17.23)

Per semplicità usiamo $g_s = 2$, in modo che:

$$K = \frac{p^2}{2m_e} - g_s g_N \frac{e}{2m_e c} \mu_N \frac{1}{r^3} \frac{1}{\hbar} \vec{I} \cdot \vec{L} =$$

$$= \frac{p^2}{2m_e} + g_s g_N \mu_B \mu_N \frac{1}{r^3} \frac{1}{\hbar^2} \vec{I} \cdot \vec{L}$$
(17.24)

Notiamo che questa hamiltoniana ha una diretta corrispondenza all'operatore in quanto come conseguenza della scelta della gauge. Nella gauge trasversa troviamo infatti:

$$\nabla \cdot (\vec{A} \psi) = (\nabla \cdot \vec{A}) \psi + (\nabla \psi) \cdot \vec{A} =$$

$$= (\nabla \psi) \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot (\nabla \psi)$$
(17.25)

Siccome questo vale per ogni ψ , allora in termini operatoriali astratti questo equivale a dire che $\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{A}} = \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{p}}$, così che senza ambiguità vale $\vec{p} \cdot \vec{A} \rightarrow \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{A}}$. Inoltre nel prodotto triplo pure non vi è ambiguità in quanto il commutatore di \vec{p}

ed $\vec{\mathbf{x}}$ è simmetrico e il prodotto vettoriale è antisimmetrico:

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathbf{p}} \cdot (\widehat{\vec{\mu}}_N \times \widehat{\vec{\mathbf{x}}}) &= \widehat{\pi}_i (\widehat{\vec{\mu}}_N \times \widehat{\vec{\mathbf{x}}})_i = \varepsilon^{ijk} \widehat{p}_i \widehat{\mu}_N^j \widehat{x}_k = \varepsilon^{ijk} \widehat{\mu}_N^j \widehat{p}_i \widehat{x}_k = \\
&= \varepsilon^{ijk} \widehat{\mu}_N^j \widehat{x}_k \widehat{p}_i - \varepsilon^{ijk} \widehat{\mu}_N^j [\widehat{x}_k, \widehat{p}_i] = \\
&= \varepsilon^{ijk} \widehat{\mu}_N^j \widehat{x}_k \widehat{p}_i - i\hbar \widehat{\mu}_N^j \varepsilon^{ijk} \delta_{ki} = \\
&= \varepsilon^{jki} \widehat{\mu}_N^j \widehat{x}_k \widehat{p}_i = \widehat{\vec{\mu}}_N \cdot (\widehat{\vec{\mathbf{x}}} \times \widehat{\mathbf{p}}) \\
&= \varepsilon^{ijk} \widehat{\mu}_N^j \widehat{x}_k \widehat{p}_i = (\widehat{\vec{\mu}}_N \times \widehat{\vec{\mathbf{x}}}) \cdot \widehat{\mathbf{p}} \\
&= -\varepsilon^{kji} \widehat{x}_k \widehat{\mu}_N^j \widehat{p}_i = -\widehat{\vec{\mathbf{x}}} \cdot (\widehat{\vec{\mu}}_N \times \widehat{\mathbf{p}})
\end{aligned} \tag{17.26}$$

Gode dunque delle stesse proprietà del prodotto triplo ordinario.

Il termine di accoppiamento del momento magnetico elettronico al campo magnetico del momento magnetico nucleare è dato invece da:

$$\begin{aligned}
-\vec{\mu}_e \cdot \vec{\mathbf{B}} &= \frac{1}{r^3} \left[\vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_N - \frac{3}{r^2} (\vec{\mu}_N \cdot \vec{\mathbf{x}}) (\vec{\mu}_e \cdot \vec{\mathbf{x}}) \right] = \\
&= -g_s g_N \mu_B \mu_N \frac{1}{r^3} \frac{1}{\hbar^2} \left[\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{I}} - \frac{3}{r^2} (\vec{\mathbf{I}} \cdot \vec{\mathbf{x}}) (\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{x}}) \right]
\end{aligned} \tag{17.27}$$

Anche per questo non vi è ambiguità in quanto $\widehat{\mathbf{S}}, \widehat{\mathbf{I}}, \widehat{\vec{\mathbf{x}}}$ commutano tutti tra di loro.

17.3.2 Termine di Contatto

Dobbiamo infine includere il termine dovuto all'interazione tra il campo magnetico interno al nucleo e il momento magnetico elettronico. Il nucleo può essere immaginato in prima approssimazione come una sfera di raggio dell'ordine di $\rho_0 \approx 1\text{fm} = 10^{-13}\text{cm} \ll a_0 \approx 0.5 \cdot 10^{-8}\text{cm}$. Pertanto questo contribuisce solo quando la funzione d'onda è non nulla vicina all'origine, che accade solo per stati di tipo s . Per questo motivo tale termine è detto anche di **contatto**, in quanto è rilevante solo quando elettrone e nucleo sono sovrapposti, ossia *a contatto*.

In prima approssimazione questo campo interno può essere uniforme parallelo al momento magnetico nucleare:

$$\vec{\mathbf{B}} = B_0 \frac{\vec{\mu}_N}{|\vec{\mu}_N|} \tag{17.28}$$

Il valore di B_0 si trova imponendo la condizione di raccordo alla superficie, ossia continuità per le componenti normali:

$$\vec{\mathbf{B}}_n^+ = \vec{\mathbf{B}}_n^- \quad \forall \vec{\mathbf{x}}: |\vec{\mathbf{x}}| = \rho_0 \tag{17.29}$$

Detto θ l'angolo formato da $\vec{\mathbf{x}}$ con $\vec{\mu}_N$ allora:

$$\begin{aligned}
\lim_{r \rightarrow \rho_0^+} B_r(r) &= \lim_{r \rightarrow \rho_0} \frac{1}{r^3} \left[\frac{3}{r^2} (\vec{\mu}_N \cdot \vec{\mathbf{x}}) r - \frac{1}{r} \vec{\mu}_N \cdot \vec{\mathbf{x}} \right] = \\
&= \lim_{r \rightarrow \rho_0^+} \frac{1}{r^3} \frac{2}{r} (\vec{\mu}_N \cdot \vec{\mathbf{x}}) = \frac{2\mu_N \cos \theta}{\rho_0^3} \\
\lim_{r \rightarrow \rho_0^-} B_r(r) &= B_0 \cos \theta
\end{aligned} \tag{17.30}$$

Per confronto ricaviamo:

$$B_0 = \frac{2\mu_N}{\rho_0^3} \Rightarrow \vec{\mathbf{B}}(r < \rho_0) = \frac{2\vec{\mu}_N}{\rho_0^3} \tag{17.31}$$

Questo significa che:

$$\vec{\mathbf{B}}_{int} = \frac{2\vec{\mu}_N}{\rho_0^3} \chi_{\rho_0}(\vec{\mathbf{r}}) \tag{17.32}$$

con χ_{ρ_0} funzione caratteristica della sfera di raggio ρ_0 centrata nell'origine. Siccome ρ_0 è molto piccolo allora possiamo approssimare questa ad una delta di Dirac:

$$\lim_{\rho_0 \rightarrow 0} \frac{1}{\rho_0^3} \chi_{\rho_0}(r) = A \delta^3(\vec{\mathbf{x}}) \tag{17.33}$$

con A una certa costante di normalizzazione:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \frac{1}{\rho_0^3} \chi_{\rho_0}(r) = \frac{4}{3}\pi \Rightarrow A = \frac{4}{3}\pi \quad (17.34)$$

Il termine di contatto ha dunque la forma:

$$H_{\text{iperf},C} = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B}_{\text{int}} = -\frac{8}{3}\pi\delta^3(\vec{x})\vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_N \quad (17.35)$$

17.3.3 Hamiltoniana Risultante

Riassumiamo ora l'hamiltoniana totale. Abbiamo trovato che:

$$H = H_e + H_{\text{fine}} + H_{\text{iperf}} + H_{\text{iperf},C} \quad (17.36)$$

dove:

$$\begin{aligned} H_e &= \frac{p^2}{2m_e} + qV(r) \\ H_{\text{fine}} &= -\frac{e}{2m_e^2c^2}(g_s - 1)\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{S} \cdot \vec{L} \\ H_{\text{iperf}} &= g_s g_N \mu_B \mu_N \frac{1}{r^3} \frac{1}{\hbar^2} \left[\vec{L} \cdot \vec{I} - \vec{S} \cdot \vec{I} + \frac{3}{r^2}(\vec{I} \cdot \vec{x})(\vec{S} \cdot \vec{x}) \right] = \\ &= g_s g_N \mu_B \mu_N \frac{1}{r^3} \frac{1}{\hbar^2} \left[\vec{L} - \vec{S} + \frac{3}{r^2}(\vec{S} \cdot \vec{x})\vec{x} \right] \cdot \vec{I} \\ H_{\text{iperf},C} &= \frac{8}{3}\pi g_s g_N \mu_B \mu_N \delta^3(\vec{x}) \frac{\vec{S} \cdot \vec{I}}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (17.37)$$

Il termine H_{iperf} si può vedere come la parte relativa all'accoppiamento tra momento magnetico orbitale e di spin elettronico con il momento magnetico nucleare, mentre il termine $H_{\text{iperf},C}$ è dovuto alla sovrapposizione di momento magnetico di spin elettronico e momento magnetico nucleare.

Come detto dunque l'hamiltoniana (totale, e in particolare quella iperfine) commuta con L^2, S^2, J^2, F^2, F_z , che formano un CSCO per lo spazio di Hilbert del sistema e determinano univocamente autostati ed autovalori.

$$\hat{\mathcal{H}}|nljFm_F\rangle = W_{nljF}|nljFm_F\rangle \quad (17.38)$$

Notiamo poi come per la struttura iperfine il valore atteso delle correzioni iperfine è molto piccolo, e permette di usare la teoria delle perturbazioni. In particolare ogni termine è dello stesso ordine di grandezza, e per semplicità prendiamo quello che va come $\vec{S} \cdot \vec{I}$

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{H}}_{\text{iperf}} \rangle &\approx -\left\langle g_N g_s \frac{e^2}{4m_e m_p c^2} \frac{1}{r^3} \vec{S} \cdot \vec{I} \right\rangle \approx \\ &\approx \frac{e^2}{m_e m_p c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \langle \vec{S} \cdot \vec{I} \rangle \approx \\ &\approx \frac{\hbar^2}{a_0^2 m_e m_p c^2} \frac{e^2}{a_0} \approx \frac{\hbar^2 m_e^2 c^2 \alpha^2}{\hbar^2 m_e m_p c^2} \alpha^2 w_0 = \\ &= \frac{m_e}{m_p} \alpha^2 w_0 \approx \frac{m_e}{m_p} W_{nlj,\text{fine}}^{(1)} \end{aligned} \quad (17.39)$$

Pertanto le correzioni iperfine sono di circa 2000 volte inferiori rispetto a quelle fine, come già ci aspettavamo d'altra parte.

Applicando la teoria delle perturbazioni prima alla struttura e poi alla struttura iperfine troveremo dunque:

$$W_{nljF} = W_{nl} + W_{nlj,\text{fine}}^{(1)} + W_{nljF,\text{iperf}}^{(1)} \quad (17.40)$$

dove W_{nl} sono gli autovalori (possibilmente esatti) di $\hat{\mathcal{H}}_e$ (parte cinetica ed elettrostatica) e gli altri sono le correzioni perturbative al primo ordine:

$$\begin{aligned} W_{nlj,\text{fine}}^{(1)} &= \langle nljFm_F | \hat{\mathcal{H}}_{\text{fine}} | nljFm_F \rangle \\ W_{nljF,\text{iperf}}^{(1)} &= \langle nljFm_F | \hat{\mathcal{H}}_{\text{iperf}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{iperf},C} | nljFm_F \rangle \end{aligned} \quad (17.41)$$

Troveremo dunque degli splitting degli autovalori nel numero quantico F , momento angolare totale di elettrone e nucleo.

17.4 Struttura Iperfine degli Stati s

17.4.1 Scelta della Base

Discutiamo adesso degli stati s in cui tipicamente si trovano atomi ad un elettrone (nella shell di valenza) e i più semplici da considerare. Lo spazio relativo a questo livello è generato dalla base imperturbata:

$$\mathcal{D} = \text{span}(|n, l = 0, m = 0, m_s\rangle |I, m_I\rangle) \quad (17.42)$$

Su \mathcal{D} vale $\vec{L} = 0$, così che la perturbazione dell'hamiltoniana iperfine si riduce a:

$$\begin{aligned} H_{\text{iperf}} &= -g_N g_s \frac{e}{2m_e c} \frac{e}{2m_p c} \frac{1}{r^3} \left[\vec{S} \cdot \vec{I} - \frac{3}{r^2} (\vec{I} \cdot \vec{r})(\vec{S} \cdot \vec{r}) \right] \\ H_{\text{iperf}, C} &= \frac{8}{3} \pi g_s g_N \frac{e}{2m_e c} \frac{e}{2m_p c} \delta^3(\vec{r}) \vec{S} \cdot \vec{I} \end{aligned} \quad (17.43)$$

Si perde poi anche la correzione di struttura fine. In questo caso dunque troviamo che il momento angolare di spin totale coincide con il momento angolare totale dell'atomo:

$$\hat{K} = \vec{I} + \vec{S} = \vec{F} \quad (17.44)$$

Inoltre K^2, K_z commutano con l'hamiltoniana e dunque possiamo usare come base:

$$|n, 0, 0\rangle |K, m_K\rangle \quad K = I \pm \frac{1}{2} \quad m_K = -K, \dots, K \quad (17.45)$$

A questo punto la correzione ai livelli energetici è data dal valore atteso su questi stati:

$$\langle n00 | K m_K \rangle \hat{\mathcal{H}}_{\text{iperf}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{iperf}, C} |n00\rangle |K m_K\rangle \quad (17.46)$$

17.4.2 Calcolo della Correzione Iperfine al Primo Ordine

Calcoliamo prima il contributo di $\hat{\mathcal{H}}_{\text{iperf}}$, che troviamo annullarsi per la simmetria. Questa si scrive in maniera compatta (su \mathcal{D}):

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{iperf}} = \frac{A}{r^3} \left[-\vec{S} + \frac{3}{r^2} (\vec{S} \cdot \vec{r}) \vec{r} \right] \cdot \vec{I} \quad (17.47)$$

Il valore atteso si scrive poi:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{H}}_{\text{iperf}} \rangle_{l=0} &= \langle n00 | K m_K \rangle \frac{A}{r^3} \left[\frac{3}{r^2} (\vec{S} \cdot \vec{r})(\vec{I} \cdot \vec{r}) - \vec{S} \cdot \vec{I} \right] |n00\rangle |K m_K\rangle = \\ &= \langle n00 | K m_K \rangle \frac{A}{r^3} \left[\frac{3}{r^2} S_q x_q I_p x_p - \vec{S} \cdot \vec{I} \right] |n00\rangle |K m_K\rangle = \\ &= 3A \langle n00 | \frac{x_p x_q}{r^5} |n00\rangle \langle K m_K | S_q I_p |K m_K\rangle - A \langle n00 | \frac{1}{r^3} |n00\rangle \langle K m_K | \vec{S} \cdot \vec{I} |K m_K\rangle \end{aligned} \quad (17.48)$$

Siccome gli stati $n00$ sono a simmetria sferica si dimostra che (come vedremo con il Teorema di Wigner-Eckart):

$$\langle n00 | \frac{1}{r^5} x_p x_q |n00\rangle = \langle n00 | \frac{1}{r^5} \frac{\delta_{pq} r^2}{3} |n00\rangle = \frac{\delta_{pq}}{3} \langle n00 | \frac{1}{r^3} |n00\rangle \quad (17.49)$$

Pertanto i due termini si cancellano, ossia su \mathcal{D} il proiettore su \vec{r} coincide con l'identità:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{H}}_{\text{iperf}} \rangle_{l=0} &= 3A \langle n00 | \frac{x_p x_q}{r^5} |n00\rangle \langle K m_K | S_q I_p |K m_K\rangle - A \langle n00 | \frac{1}{r^3} |n00\rangle \langle K m_K | \vec{S} \cdot \vec{I} |K m_K\rangle = \\ &= A \langle n00 | \frac{1}{r^3} |n00\rangle \langle K m_K | \vec{S} \cdot \vec{I} |K m_K\rangle - A \langle n00 | \frac{1}{r^3} |n00\rangle \langle K m_K | \vec{S} \cdot \vec{I} |K m_K\rangle \end{aligned} \quad (17.50)$$

La correzione dovuta al termine di contatto è invece non nulla:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{H}}_{\text{iperf}, C} \rangle &= B \langle K m_K | \vec{S} \cdot \vec{I} |K m_K\rangle \langle n00 | \delta^3(\vec{r}) |n00\rangle = \\ &= B \frac{\hbar^2}{2} \left[K(K+1) - I(I+1) - \frac{3}{4} \right] |\psi_{n00}(0)|^2 \end{aligned} \quad (17.51)$$

da cui infine la forma dei livelli energetici di tipo s ($l = 0$):

$$W_{nljF}|_{l=0} = W_{n0} + W_{n0,1/2}^{\text{fine}} + W_{nIK}^c \quad (17.52)$$

Vi sarà dunque un ulteriore splitting in $K = I \pm 1/2$, con uno spostamento che dipende dallo spin nucleare I .

Il caso più semplice da considerare è quello dell'idrogeno $I = 1/2$, dove $F = K = 0, 1$. Lo stato fondamentale $1s^{1/2}$ subisce dunque uno splitting in $F = 0$ ed $F = 1$. Possiamo ricavare una buona stima della separazione dei livelli usando l'espressione analitica delle autofunzioni (imperturbate):

$$|\psi_{100}(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} \quad (17.53)$$

Si trova infine:

$$\Delta W \propto \frac{m_e}{m_p} \alpha^2 w_0 \quad \begin{cases} \lambda = 21.1 \text{ cm} \\ \nu = 1.42 \text{ GHz} \end{cases} \quad (17.54)$$

Pertanto una transizione tra livelli di struttura iperfine emette nelle onde radio. Nota la variazione di energia e la lunghezza d'onda/frequenza corrispondente a questa transizione vogliamo adesso sapere qual'è il rate di transizione, e dunque la vita media, di uno stato eccitato iperfine.

17.5 Emissione Spontanea

La possibilità di uno stato eccitato di avere una vita media finita è dovuto al fenomeno di **emissione spontanea**. Usando l'argomento statistico di Einstein, facciamo una breve ricapitolazione del fenomeno.

Sia $W_m > W_n$ due livelli energetici di un atomo (e in generale un sistema quantistico). Se questo è posto in un campo di radiazione incoerente, caratterizzata da una densità di energia spettrale $u(\nu)$, allora i rate di transizione tra W_m a W_n in approssimazione lineare sono dati da:

$$\pi_{n \rightarrow m} = B_{n \rightarrow m} u(\nu_{mn}) \quad \pi_{m \rightarrow n} = B_{m \rightarrow n} u(\nu_{mn}) + A_{m \rightarrow n} \quad (17.55)$$

dove $B_{n \rightarrow m}$ è il coefficiente di assorbimento, $B_{m \rightarrow n}$ coefficiente di emissione stimolata e $A_{m \rightarrow n}$ coefficiente di emissione spontanea. All'equilibrio termico un ensemble di atomi identici segue la distribuzione di Boltzmann:

$$N_m = \frac{e^{-\beta W_m}}{Z} \quad N_n = \frac{e^{-\beta W_n}}{Z} \quad (17.56)$$

con N_m, N_n frazione degli atomi che stanno nei rispettivi stati. Inoltre si dimostra che la densità spettrale di radiazione è universale ed è data dalla **formula di Planck**:

$$u(\nu) = u(\nu; T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(\beta h \nu) - 1} \quad (17.57)$$

Usando il principio di equilibrio dettagliato $\pi_{n \rightarrow m} = \pi_{m \rightarrow n}$ e la formula di Planck, Einstein dimostrò che:

$$\boxed{B_{n \rightarrow m} = B_{m \rightarrow n} \quad A_{m \rightarrow n} = \frac{16\pi^2 \hbar \nu_{mn}^3}{c^3} B_{m \rightarrow n}} \quad (17.58)$$

Possiamo poi definire la **vita media** di uno stato eccitato come:

$$\frac{1}{\tau_m} = \sum_{W_n < W_m} A_{m \rightarrow n} \quad (17.59)$$

Per calcolare questi coefficienti noi useremo l'approssimazione semiclassica dell'elettromagnetismo, motivata da un'alta intensità (ma non troppo alta da dover considerare effetti quadratici). Questo ci permette poi di applicare la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo (e dunque regola d'oro di Fermi) per la stima dei coefficienti di emissione stimolata e dunque emissione spontanea.

17.6 Campo Elettromagnetico Incoerente

Come fatto per la struttura iperfine ci poniamo nella gauge trasversa anche per il campo di radiazione:

$$\nabla \cdot \vec{A}_{\text{rad}} = 0 \quad V_{\text{rad}} = 0 \quad (17.60)$$

In assenza di sorgenti la soluzione è una combinazione lineare di onde piane:

$$\vec{A}_{\text{rad}} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha=1}^2 a_{\alpha}(\vec{k}) \hat{e}_{\alpha}(\vec{k}) \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)) + \text{c.c.} \quad (17.61)$$

Siccome siamo nel vuoto:

$$\omega = ck \quad \hat{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{\mathbf{k}}) \cdot \vec{\mathbf{k}} = 0 \quad \hat{\mathbf{e}}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{e}}_\alpha = \delta_{\alpha\beta} \quad (17.62)$$

Nel caso di **campo di radiazione incoerente**, possiamo pensare il potenziale vettoriale come un ensemble di onde piane modulate da coefficienti scorrelati:

$$\begin{aligned} \langle a_\alpha(\vec{\mathbf{k}}) a_\beta(\vec{\mathbf{k}}') \rangle &= 0 \\ \langle a_\alpha^*(\vec{\mathbf{k}}) a_\beta^*(\vec{\mathbf{k}}') \rangle &= 0 \\ \langle a_\alpha(\vec{\mathbf{k}}) a_\beta^*(\vec{\mathbf{k}}') \rangle &= g(\omega) \delta_{\alpha\beta} (2\pi)^3 \delta^3(\vec{\mathbf{k}} - \vec{\mathbf{k}}') \end{aligned} \quad (17.63)$$

Il campo di radiazione sarà dunque caratterizzato univocamente dalla funzione $g(\omega)$. Siccome nella discussione di Einstein questo era caratterizzato dalla densità spettrale $u(\nu)$ allora ci aspettiamo un stretto legame tra le due funzioni. Siccome nell'atomo l'accoppiamento è anche direttamente ai campi, dobbiamo calcolare anche questi:

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{E}}_{\text{rad}} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}}{\partial t} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{i\omega}{c} \sum_{\alpha=1}^2 a_\alpha(\vec{\mathbf{k}}) \hat{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{\mathbf{k}}) \exp(i(\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{x}} - \omega t)) + \text{c.c.} \\ \vec{\mathbf{E}}_{\text{rad}} &= \nabla \times \vec{\mathbf{A}} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha=1}^2 a_\alpha(\vec{\mathbf{k}}) (\vec{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{\mathbf{k}})) \exp(i(\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{x}} - \omega t)) + \text{c.c.} = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{i\omega}{c} \sum_{\alpha=1}^2 a_\alpha(\vec{\mathbf{k}}) \tilde{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{\mathbf{k}}) \exp(i(\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{x}} - \omega t)) + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (17.64)$$

dove abbiamo definito:

$$\tilde{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{\mathbf{k}}) = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{\mathbf{k}}) \quad (17.65)$$

Per ricavare la relazione tra $g(\omega)$ e $u(\nu)$ bisogna calcolare la densità di energia elettromagnetica, che è legata alla densità spettrale tramite:

$$u = \int_0^\infty d\nu u(\nu) \quad (17.66)$$

In realtà per calcolare la densità di energia elettromagnetica bisogna fare la media sull'ensemble, che non calcoliamo, ma di cui riportiamo il risultato:

$$\begin{aligned} \langle u \rangle &= \frac{1}{8\pi} (\langle E^2 \rangle + \langle B^2 \rangle) = \dots = \frac{1}{2\pi} \sum_\alpha \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2}{c^2} g(\omega) = \\ &= \frac{1}{2\pi} 4\pi \sum_\alpha \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2}{c^2} g(\omega) = \\ &= 2 \sum_\alpha \int_0^\infty \frac{\omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} \frac{\omega^2}{c^2} g(\omega) = \\ &= 2 \sum_\alpha \int_0^\infty \frac{\nu^2 d\nu}{c^3} 4\pi^2 \frac{\nu^2}{c^2} g(\omega) = \\ &= \frac{8\pi^2}{c^5} \sum_\alpha \int_0^\infty d\nu \nu^4 g(\omega) \end{aligned} \quad (17.67)$$

da cui:

$$\frac{8\pi^2}{c^5} \nu^4 g(\omega) = u(\nu) \iff g(\omega) = \frac{c^5}{8\pi^2 \nu^4} u(\nu) \quad (17.68)$$

17.7 Rate di Transizione con Perturbazione Elettromagnetica

17.7.1 Forma dell'Hamiltoniana

Vogliamo ora scrivere l'hamiltoniana, trascurando i termini di ordine c^{-2} . Il campo di radiazione si accoppia all'atomo tramite il potenziale vettore con l'impulso e la carica dell'elettrone e tramite il campo magnetico allo spin elettronico. Come prima trascuriamo i termini quadratici così che l'effetto del campo esterno è dato da:

$$H_I(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{p}}, t) = -\frac{q}{m_e c} \vec{\mathbf{A}}_{\text{rad}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \cdot \vec{\mathbf{p}} - g_s \frac{q}{2m_e c} \vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{B}}_{\text{rad}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \quad (17.69)$$

Non vi è ambiguità in $\vec{\mathbf{A}}_{\text{rad}} \cdot \vec{\mathbf{p}}$ in quanto ancora siamo nella gauge trasversa. Esplicitando $\vec{\mathbf{A}}_{\text{rad}}, \vec{\mathbf{B}}_{\text{rad}}$ come integrali troviamo:

$$\hat{\mathcal{H}}_I(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \left[a_{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) e^{-i\omega t} + a_{\alpha}^{*}(\vec{\mathbf{k}}) \hat{T}_{-}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) e^{i\omega t} \right] \quad (17.70)$$

dove:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) &= -\frac{q}{m_e c} \left[\hat{\mathbf{e}}_{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \cdot \hat{\vec{\mathbf{p}}} + i \frac{g_s}{2} \frac{\omega}{c} \hat{\vec{\mathbf{S}}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right] e^{i\vec{\mathbf{k}} \cdot \hat{\vec{\mathbf{x}}}} = \\ &= -\frac{q}{m_e c} \left[\hat{\mathbf{e}}_{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \cdot \hat{\vec{\mathbf{p}}} + i k \hat{\vec{\mathbf{S}}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right] e^{i\vec{\mathbf{k}} \cdot \hat{\vec{\mathbf{x}}}} \\ \hat{T}_{-}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) &= \left(\hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right)^{\dagger} \end{aligned} \quad (17.71)$$

17.7.2 Espressione Generale dei Rate di Transizione

Supponiamo adesso inizialmente l'atomo sia nello stato ad energia W_n . Vogliamo calcolare il coefficiente $c_m(t)$ dello stato rispetto all'autostato di energia W_m , usando la teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo:

$$\begin{aligned} c_m(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \langle m | \hat{\mathcal{H}}_I(t') | n \rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} (W_m - W_n) t'\right) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[\hat{\mathcal{H}}_I(t') \right]_{mn} \exp(i\omega_{mn} t') = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \left[a_{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \left[\hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right]_{mn} e^{-i\omega t'} + a_{\alpha}^{*}(\vec{\mathbf{k}}) \left[\hat{T}_{-}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right]_{mn} e^{i\omega t'} \right] e^{i\omega_{mn} t'} = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \left\{ a_{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \left[\hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right]_{mn} \int_0^t dt' e^{i(\omega_{mn} - \omega) t'} + a_{\alpha}^{*}(\vec{\mathbf{k}}) \left[\hat{T}_{-}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right]_{mn} \int_0^t dt' e^{i(\omega_{mn} + \omega) t'} \right\} \end{aligned} \quad (17.72)$$

Usiamo poi:

$$\int_0^t dt' e^{i\omega t'} = \frac{1}{i\omega} [e^{i\omega t} - 1] = \frac{1}{i\omega} e^{i\omega t/2} [e^{i\omega t/2} - e^{-i\omega t/2}] = 2e^{i\omega t/2} \frac{\sin(\omega t/2)}{\omega} \quad (17.73)$$

da cui:

$$\begin{aligned} c_m(t) &= -\frac{2i}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \left\{ a_{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \left[\hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right]_{mn} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t/2} \frac{\sin((\omega_{mn} - \omega)t/2)}{(\omega_{mn} - \omega)} + \right. \\ &\quad \left. + a_{\alpha}^{*}(\vec{\mathbf{k}}) \left[\hat{T}_{-}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right]_{mn} e^{i(\omega_{mn} + \omega)t/2} \frac{\sin((\omega_{mn} + \omega)t/2)}{(\omega_{mn} + \omega)} \right\} \end{aligned} \quad (17.74)$$

Per trovare la probabilità di transizione bisogna poi fare il modulo quadro e prendere la media di ensemble. In questo modo non ci sono termini "misti", ma solo i moduli quadri dei due termini, con la sostituzione $|a_{\alpha}(\vec{\mathbf{k}})|^2 \rightarrow g(\omega)$:

$$\begin{aligned} P_{n \rightarrow m}(t) &= \langle |c_m(t)|^2 \rangle = \\ &= \frac{4}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} g(\omega) \sum_{\alpha} \left\{ \left| \left[\hat{T}_{+}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right]_{mn} \right|^2 \frac{\sin^2((\omega_{mn} - \omega)t/2)}{(\omega_{mn} - \omega)^2} + \left| \left[\hat{T}_{-}^{\alpha}(\vec{\mathbf{k}}) \right]_{mn} \right|^2 \frac{\sin^2((\omega_{mn} + \omega)t/2)}{(\omega_{mn} + \omega)^2} \right\} \end{aligned} \quad (17.75)$$

Ricordando il limite nel senso delle distribuzioni:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(xt)}{\pi t x^2} = \delta(x) \quad (17.76)$$

allora nel limite di grandi tempi vale l'approssimazione:

$$\frac{\sin^2((\omega_{mn} \pm \omega)t/2)}{(\omega_{mn} \pm \omega)^2} = \frac{1}{4} \frac{\sin^2((\omega_{mn} \pm \omega)t/2)}{((\omega_{mn} \pm \omega)/2)^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\pi}{4} t \delta(\omega \pm \omega_{mn}) \quad (17.77)$$

Questo ci porta a dire immediatamente che non contribuisce il secondo termine in quanto $W_m > W_n \iff \omega_{mn} > 0$, così che non esistono ω tali che $\omega + \omega_{mn}$. Questo significa che l'unica frequenza che effettivamente contribuisce alla transizione a lunghi tempi è la frequenza di Bohr dei due livelli, e in particolare contribuisce solo l'assorbimento (come

deve essere, in quanto l'elettrone deve aumentare l'energia di una quantità quantizzata per passare da W_n a W_m). Troviamo ora, usando la relazione tra $g(\omega)$ ed $u(\nu)$:

$$\begin{aligned}
P_{n \rightarrow m}(t) &= \frac{4}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} g(\omega) \sum_{\alpha} \left| \left[\hat{T}_+^{\alpha}(\vec{k}) \right]_{mn} \right|^2 \frac{\pi}{4} t \delta(\omega - \omega_{mn}) = \\
&= \frac{\pi t}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int_{4\pi} d\Omega \int_0^{\infty} dk k^2 \left| \left[\hat{T}_+^{\alpha}(\vec{k}) \right]_{mn} \right|^2 g(\omega) \delta(\omega - \omega_{mn}) = \\
&= \frac{\pi t}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{c^3} \sum_{\alpha} \int_{4\pi} d\Omega \int_0^{\infty} d\omega \omega^2 \left| \left[\hat{T}_+^{\alpha}(\vec{k}) \right]_{mn} \right|^2 g(\omega) \delta(\omega - \omega_{mn}) = \\
&= \frac{\pi t}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{c^3} \omega_{mn}^2 g(\omega_{mn}) \sum_{\alpha} \int_{4\pi} d\Omega \left| \left[\hat{T}_+^{\alpha}\left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}}\right) \right]_{mn} \right|^2 = \\
&= t \frac{1}{2\hbar^2 c^3} \nu_{mn}^2 g(\omega_{mn}) \sum_{\alpha} \int_{4\pi} d\Omega \left| \left[\hat{T}_+^{\alpha}\left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}}\right) \right]_{mn} \right|^2 = \\
&= t \frac{1}{2\hbar^2 c^3} \nu_{mn}^2 \frac{c^5}{8\pi^2 \nu_{mn}^4} u(\nu_{mn}) \sum_{\alpha} \int_{4\pi} d\Omega \left| \left[\hat{T}_+^{\alpha}\left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}}\right) \right]_{mn} \right|^2 = \\
&= t \frac{c^2}{16\pi^2 \hbar^2} \frac{u(\nu_{mn})}{\nu_{mn}^2} \sum_{\alpha} \int_{4\pi} d\Omega \left| \left[\hat{T}_+^{\alpha}\left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}}\right) \right]_{mn} \right|^2
\end{aligned} \tag{17.78}$$

Per definizione di coefficiente di assorbimento troviamo:

$$B_{n \rightarrow m} = \frac{1}{u(\nu_{mn})} \pi_{n \rightarrow m} = \frac{1}{u(\nu_{mn})} \frac{dP_{n \rightarrow m}}{dt} = \frac{c^2}{16\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{\nu_{mn}^2} \sum_{\alpha} \int_{4\pi} d\Omega \left| \left[\hat{T}_+^{\alpha}\left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}}\right) \right]_{mn} \right|^2 \tag{17.79}$$

E infine per le relazione di Einstein 17.58 troviamo i coefficienti $A_{m \rightarrow n}$:

$$A_{m \rightarrow n} = \frac{\nu_{mn}}{\hbar c} \sum_{\alpha} \int_{4\pi} d\Omega \left| \left[\hat{T}_+^{\alpha}\left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}}\right) \right]_{mn} \right|^2 \tag{17.80}$$

Notiamo dunque che questi hanno andamento sostanzialmente universale per un campo incoerente, con l'unica dipendenza in \hat{T}_+^{α} dalla polarizzazione.

17.7.3 Approssimazione di Dipolo

Consideriamo la riga $n = 3 \rightarrow n = 2$ dell'idrogeno, che si osserva per $\lambda = 0.656 \mu\text{m}$. Chiaramente $\lambda \gg a_0 \approx 0.05 \text{nm}$. In generale per le transizioni atomiche, e a maggior ragione quelle tra livelli iperfini, questo ci porta ad approssimare un'onda piana come costante sull'atomo:

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = 1 + o(\lambda^{-1}) \tag{17.81}$$

da cui:

$$\hat{T}_+^{\alpha}(\vec{k}) \approx -\frac{q}{m_e c} \hat{\mathbf{e}}_{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} \tag{17.82}$$

Il secondo termine infatti presenta già un termine che va come $k \propto 1/\lambda$ e dunque in quest'approssimazione va ignorato. Come vedremo quest'approssimazione non è soddisfacente per considerare transizioni tra livelli iperfini, ma è comunque importante citarla.

Trascurando la struttura fine ed iperfine l'hamiltoniana dipende da \vec{p} solo dal termine cinetico, così che:

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{x}}, \hat{H}] = \nabla_{\vec{p}} H(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \tag{17.83}$$

In questo modo troviamo una semplice espressione per l'elemento di matrice che determina il coefficiente di emissione spontanea:

$$\left[\hat{T}_+^{\alpha} \right] \approx -\frac{q}{m_e c} \hat{\mathbf{e}}_{\alpha} \cdot \langle m | \vec{p} | n \rangle = i \frac{q}{\hbar c} \hat{\mathbf{e}}_{\alpha} \cdot \langle m | [\hat{\mathbf{x}}, \hat{H}] | n \rangle = i \frac{q}{\hbar c} (W_m - W_n) \langle m | \hat{\mathbf{e}}_{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{x}} | n \rangle = i \frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{e}}_{\alpha} \cdot \vec{\mathbf{D}}_{mn} \tag{17.84}$$

dove $\vec{\mathbf{D}} = q\vec{\mathbf{x}}$ è il **momento di dipolo** dell'elettrone rispetto al nucleo. Per questo motivo l'approssimazione ad $o(\lambda^{-1})$ è detta **approssimazione di dipolo**.

In realtà per calcolare gli elementi di matrice del dipolo dobbiamo tenere conto del fatto che gli stati non sono descritti da un solo indice discreto, ma da un insieme di indici. Nel caso della struttura iperfine di atomi ad un elettrone:

$$|n\rangle \rightarrow |nljIFm_F\rangle \tag{17.85}$$

In approssimazione di dipolo le uniche transizioni possibili sono quelle per $\Delta l = \pm 1$. Chiaramente se non sono possibili transizioni a quest'ordine allora dovremo tenere conto anche di ordini superiori. In questo caso la transizione sarà fortemente soppressa, come in realtà si trova per i livelli iperfini.

17.8 Vite Medie di Stati Eccitati Iperfini

17.8.1 Formula per Stati s

Ci limitiamo come al solito a stati s di atomi ad un elettrone e assumiamo per semplicità $I = 1/2$. In questo modo l'unica transizione spontanea possibile è quella $F = 1 \rightarrow F = 0$, o equivalentemente $K = 1 \rightarrow K = 0$, con degenerazione in m_K . Gli stati da considerare sono dunque:

$$|n00\rangle |Km_K\rangle \quad K = 0, 1 \quad m_K = -K, \dots, K \quad (17.86)$$

Ricordiamo prima di tutto la piena espressione degli operatori che determinano $A_{m \rightarrow n}$:

$$\hat{T}_+^\alpha(\vec{k}) = -\frac{q}{m_e c} \left[\hat{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}} + ik \hat{\mathbf{S}} \cdot \tilde{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{k}) \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad (17.87)$$

Noi vogliamo calcolare l'elemento di matrice seguente, che dividiamo nella parte dipendente dall'impulso e quella dipendente dallo spin:

$$\langle n00 | \langle 1, m_K | \hat{T}_+^\alpha(\vec{k}) | n00 \rangle | 0, 0 \rangle = T_1 + T_2 \quad (17.88)$$

Troviamo che il primo immediatamente si annulla in quanto non dipende dallo spin e dunque non accoppia stati con spin diversi:

$$T_1 = \langle n00 | -\frac{q}{m_e c} \hat{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} | n00 \rangle \langle 1, m_K | 0, 0 \rangle = 0 \quad (17.89)$$

Notiamo che questo è valido ad ogni ordine di multipolo.

Per calcolare il secondo consideriamo ci fermiamo all'ordina $o(\lambda^{-2})$, approssimando l'esponenziale a costante, così che la parte configurazionale non contribuisce:

$$\begin{aligned} T_2 &= \langle n00 | n00 \rangle \langle 1, m_K | \left(-\frac{q}{m_e c} ik \hat{\mathbf{S}} \cdot \tilde{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{k}) \right) | 0, 0 \rangle = \\ &= -i \frac{q}{m_e c} k \tilde{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{k}) \cdot \langle 1, m_K | \hat{\mathbf{S}} | 0, 0 \rangle \end{aligned} \quad (17.90)$$

17.8.2 Calcolo Esplicito

Calcoliamo adesso il contributo T_2 (che in realtà comunque dipende da m_K e da \vec{k}).

Notiamo che questo elemento di matrice appare in un integrale su tutte le direzioni di \vec{k} , così che possiamo fare il cambio di variabile $\hat{\mathbf{k}} \rightarrow \tilde{\mathbf{e}}_\alpha(\vec{k})$. Questo è un possibile cambio di variabile in quanto il campo è incoerente e dunque $\tilde{\mathbf{e}}_\alpha$ deve assumere ogni direzione possibile al variare di $\hat{\mathbf{k}}$. Troviamo dunque:

$$T_2 = -i \frac{q}{m_e c} k \langle 1, m_K | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | 0, 0 \rangle \quad (17.91)$$

Esplicitiamo ora i vettori nella base fattorizzata di I_z, S_z , così che l'operatore agisce solo su una parte:

$$\begin{aligned} \langle 1, 1 | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | 0, 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle +, + | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} \left(|+, -\rangle - |-, +\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | - \rangle \\ \langle 1, -1 | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | 0, 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle -, - | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} \left(|+, -\rangle - |-, +\rangle \right) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \langle - | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | + \rangle \\ \langle 1, 0 | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | 0, 0 \rangle &= \frac{1}{2} \left(\langle +, - | + \langle -, + | \right) \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} \left(|+, -\rangle - |-, +\rangle \right) = \frac{1}{2} \left(\langle - | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | - \rangle - \langle + | \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} | + \rangle \right) \end{aligned} \quad (17.92)$$

Passiamo ora alle coordinate sferiche, che ci permettono di calcolare a vista l'elemento di matrice:

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} = \hat{S}_x \sin \theta \cos \phi + \hat{S}_y \sin \theta \sin \phi + \hat{S}_z \cos \theta \quad (17.93)$$

dove ricordiamo che nella base degli autostati di \hat{S}_z :

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (17.94)$$

da cui:

$$\begin{aligned}
\langle +|\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}}|-\rangle &= \langle +|\hat{S}_x|-\rangle \sin \theta \cos \phi + \langle +|\hat{S}_y|-\rangle \sin \theta \sin \phi = \\
&= \sin \theta \cos \phi - i \sin \theta \sin \phi = \frac{\hbar}{2} \sin \theta e^{-i\phi} \\
\langle +|\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}}|+\rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta \\
\langle -|\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}}|-\rangle &= -\frac{\hbar}{2} \cos \theta
\end{aligned} \tag{17.95}$$

Per trovare il coefficiente bisogna poi fare la somma su m_K :

$$\left| \left[\hat{T}_+^\alpha \left(\frac{\omega_{mn}}{c} \hat{\mathbf{k}} \right) \right]_{mn} \right|^2 \rightarrow \sum_{m_k} \left| \left[\hat{T}_+^\alpha \left(\frac{\omega_{10}}{c} \hat{\mathbf{k}} \right) \right]_{1m_K,00} \right|^2 \tag{17.96}$$

Sostituendo tutto si trova infine:

$$\tau = \frac{1}{A} = 1.09 \cdot 10^7 \text{ anni} \tag{17.97}$$

Questo significa che la riga spettrale iperfine sarà 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) a questa radiazione.

La lunga vita media di questo stato notiamo essere dovuta al fatto non solo della grande lunghezza d'onda (piccola differenza di energia), ma il fatto che l'impulso non contribuisce a questa transizione, in cui cambia solo la parte di spin. Questo significa che solo l'interazione del campo con lo spin influenza la transizione, che è molto debole e dunque risulta in lunghe vite medie.

Parte VI

Simmetrie in Meccanica Quantistica

Capitolo 18

Teorema di Wigner

In questo capitolo iniziamo la discussione delle trasformazioni di simmetria in un sistema quantistico e un fondamentale teorema che permette di classificare queste trasformazioni in due semplici classi di operatori.

18.1 Simmetrie in Meccanica Quantistica

Siano due osservatori O, O' che dispongono degli stessi strumenti, che si trovano in quiete relativa in un certo sistema di riferimento inerziale e i cui assi coordinati sono ruotati e traslati gli uni rispetto agli altri. Una tale trasformazione di coordinate è detta **passiva** in quanto riguarda solo il sistema di riferimento e non il sistema fisico stesso. Nel qual caso in cui il sistema di riferimento è lo stato e si cambia il sistema fisico allora parliamo di una trasformazione di coordinate **attiva**.

Il primo osservatore è identificato dall'origine O e da tre assi ortogonali diretti come la terna $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3$ (che ha origine in O). Il secondo osservatore è invece identificato dall'origine O' e la terna $\hat{\mathbf{e}}'_1, \hat{\mathbf{e}}'_2, \hat{\mathbf{e}}'_3$. Per definizione di rotazione, le terne sono legate l'un l'altra tramite la relazione:

$$\hat{\mathbf{e}}'_i = R_{ji} \hat{\mathbf{e}}_j \quad R^T R = R R^T = \mathbb{1} \quad (18.1)$$

dove R è una matrice ortogonale. Mentre le coordinate spaziali cambiano secondo la legge:

$$x'^i = R_{ij} x^j + a^i \quad (18.2)$$

Spesso ci limitiamo solo a trasformazioni proprie, ossia non consideriamo l'inversione/riflessione di almeno un asse. Questo è equivalente alla condizione $\det(R) > 0$. Talvolta daremo per scontato di limitarci solo a rotazioni e traslazioni, ma molte delle discussioni che faremo valgono anche per le riflessioni.

Nelle nostre considerazioni supponiamo che lo spazio fisico goda delle proprietà di **omogeneità** e di **isotropia**. In questo modo due osservatori distinti per una rotazione e traslazione sono **osservatori equivalenti**. Chiariamo ora cosa significa questa proprietà.

Siano due grandezza fisiche A, B misurate da O su un certo sistema fisico. Esisteranno certe grandezze A', B' osservate da O' corrispondenti a queste. Indichiamo poi con \mathcal{H} lo spazio di Hilbert del sistema considerato, che è indipendente dall'operatore. Possiamo dunque indicare con \hat{A}, \hat{B} gli operatori corrispondenti ad A, B e con \hat{A}', \hat{B}' gli operatori corrispondenti ad A', B' .

Due osservatori O, O' si dicono *equivalenti* se per ogni coppia di grandezze A, B in O ed A', B' in O' gli operatori \hat{A}, \hat{B} hanno lo **stesso spettro** di \hat{A}', \hat{B}' e i loro autostati hanno le **stesse probabilità di overlap**.

Infatti deve risultare che nei due sistemi O, O' i risultati delle misure sono gli stessi. Siccome in meccanica quantistica i risultati delle misure sono i possibili valori e le probabilità di misura allora questa è una definizione naturale per l'*equivalenza* di osservatori.

Esplicitiamo questa condizione scrivendo l'equazione agli autovalori per questi quattro operatori:

$$\begin{cases} \hat{A} |\phi_r\rangle = \alpha_r |\phi_r\rangle \\ \hat{B} |\chi_s\rangle = \beta_s |\chi_s\rangle \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{A}' |\phi'_m\rangle = \alpha'_m |\phi'_m\rangle \\ \hat{B}' |\chi'_n\rangle = \beta'_n |\chi'_n\rangle \end{cases} \quad (18.3)$$

Deve dunque risultare:

$$\begin{cases} \{\phi_r\} = \{\phi'_m\} \\ \{\chi_s\} = \{\chi'_n\} \end{cases} \quad (18.4)$$

Questo ci permette di indicizzare entrambi gli spettri con lo stesso indice, con l'unica differenza dei loro autostati:

$$\begin{cases} \hat{A} |\phi_r\rangle = \alpha_r |\phi_r\rangle \\ \hat{B} |\chi_s\rangle = \beta_s |\chi_s\rangle \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{A}' |\phi'_r\rangle = \alpha_r |\phi'_r\rangle \\ \hat{B}' |\chi'_s\rangle = \beta_s |\chi'_s\rangle \end{cases} \quad (18.5)$$

Questo implica tra l'altro che vi è una corrispondenza biunivoca tra autostati di osservabili tra un osservatore e un altro. Notiamo come vi è corrispondenza solo tra autostati, e non *autovettori*.

La seconda parte dell'equivalenza è data dalla richiesta che è conservata la probabilità di overlap tra i due osservatori:

$$|\langle \chi_s | \phi_r \rangle|^2 = |\langle \chi'_s | \phi'_r \rangle|^2 \quad (18.6)$$

Siccome $\hat{A}, \hat{B}, \hat{A}', \hat{B}'$ sono operatori hermitiani generici allora queste condizioni sono equivalenti a richiedere che vi sia una corrispondenza tra stati "visti" da O e stati "visti" da O' e che la probabilità di overlap sia conservata:

$$\forall |f\rangle, |g\rangle \in \mathcal{H}, \exists! |f'\rangle, |g'\rangle \quad |\langle f | g \rangle| = |\langle f' | g' \rangle| \quad (18.7)$$

In realtà siccome uno stato è determinato a meno di una fase dobbiamo definire un nuovo oggetto. Chiamiamo **raggio** l'insieme di vettori che differiscono di una fase (escludiamo vettori non normalizzabili e il vettore nullo):

$$\{|f\rangle\} = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \exists \phi \in \mathbb{R} : |\psi\rangle = e^{i\phi} |f\rangle\} \quad |f\rangle \in \mathcal{H} \setminus \{0\} \quad (18.8)$$

Sui raggi è ancora ben definita l'operazione di "probabilità di overlap" (una forma di prodotto scalare per i raggi). Notiamo che ha senso parlare anche di raggi "unitari" (o "normalizzati") se includono vettori a norma unitaria.

Pertanto più precisamente due osservatori sono equivalenti se esiste una corrispondenza biunivoca tra raggi che conserva la probabilità di overlap:

$$\forall \{|f\rangle\}, \exists! \{|f'\rangle\} \quad |\langle f | g \rangle| = |\langle f' | g' \rangle| \quad (18.9)$$

Una tale corrispondenza è dunque descritta da una funzione \mathcal{F} biunivoca, che prende il nome di **trasformazione di simmetria** (o semplicemente simmetria):

$$\mathcal{F}: \{|f\rangle\} \mapsto \{|f'\rangle\} \quad |\langle u | v \rangle| = |\langle u' | v' \rangle|, \forall |u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\}), |v'\rangle \in \mathcal{F}(\{|v\rangle\}) \quad (18.10)$$

Diciamo infine che due osservatori sono equivalenti se sono distinti per una trasformazione di simmetria. Notiamo che una trasformazione di simmetria è più generale dei moti rigidi dello spazio, così che due osservatori possono essere equivalenti anche se le leggi di trasformazione non sono semplici moti rigidi.

Inoltre la specifica forma della trasformazione di simmetria dipende dal sistema fisico considerato, ossia questa varia a seconda della coppia di osservatori e del sistema fisico osservato. In meccanica quantistica questo è caratterizzato ad esempio dallo spazio di Hilbert e dagli operatori posizione e momento.

18.2 Enunciato del Teorema di Wigner

In meccanica quantistica lavoriamo direttamente con i vettori e non con i raggi, che non ammettono la stessa struttura dei vettori di uno spazio di Hilbert (come conseguenza del principio di sovrapposizione). Pertanto una trasformazione di simmetria non è sufficiente da sola a fare corrispondenze tra i due osservatori di vettori, elementi di matrice e così via. È dunque naturale chiedersi se sia possibile trovare una corrispondenza tra vettori, ossia un operatore invertibile su spazio di Hilbert:

$$\exists \hat{\Omega}: |f\rangle \rightarrow |f'\rangle \quad |f'\rangle \in \mathcal{F}(\{|f\rangle\}), \quad \Omega^{-1} \circ \Omega = \Omega \circ \Omega^{-1} = \mathbb{1} ? \quad (18.11)$$

In realtà come conseguenza del fatto che il prodotto scalare è sesquilineare e definito positivo è possibile dimostrare che esiste un tale operatore $\hat{\Omega}$, e che è unitario o antiunitario.

Questo è quanto affermato dal **Teorema di Wigner**:

Teorema 7 (Teorema di Wigner). *Sia data una corrispondenza biunivoca \mathcal{F} tra raggi di uno spazio di Hilbert che conserva il modulo del prodotto scalare dai raggi:*

$$\{|f\rangle\} \xleftrightarrow{\mathcal{F}} \{|f'\rangle\} \quad |\langle u | v \rangle| = |\langle u' | v' \rangle|, \forall |u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\}), |v'\rangle \in \mathcal{F}(\{|v\rangle\}) \quad (18.12)$$

È sempre possibile scegliere rappresentanti $|u\rangle, |u'\rangle$ in $\{|u\rangle\}, \mathcal{F}(\{|u\rangle\})$ tali che esiste un operatore unitario o antiunitario $\hat{\Omega}$ per cui $|u'\rangle = \hat{\Omega} |u\rangle$.

18.2.1 Operatori Unitari e Antiunitari

Ricordiamo adesso che un operatore unitario è un operatore lineare invertibile che conserva il prodotto scalare:

$$\widehat{\Omega}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad \widehat{\Omega}(c_1 |f_1\rangle + c_2 |f_2\rangle) = c_1 \widehat{\Omega} |f_1\rangle + c_2 \widehat{\Omega} |f_2\rangle \quad \mathcal{R}(\Omega) = \mathcal{H} \quad \langle \widehat{\Omega} f | \widehat{\Omega} g \rangle = \langle f | g \rangle \quad (18.13)$$

Un operatore **antiunitario** è invece un operatore antilineare invertibile che coniuga il prodotto scalare:

$$\widehat{\Omega}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad \widehat{\Omega}(c_1 |f_1\rangle + c_2 |f_2\rangle) = c_1^* \widehat{\Omega} |f_1\rangle + c_2^* \widehat{\Omega} |f_2\rangle \quad \mathcal{R}(\Omega) = \mathcal{H} \quad \langle \widehat{\Omega} f | \widehat{\Omega} g \rangle = \langle f | g \rangle^* \quad (18.14)$$

Per gli operatori antilineari si può definire l'aggiunto come segue:

$$\langle \widehat{\Omega} \psi | \phi \rangle = \langle \psi | \widehat{\Omega}^\dagger \phi \rangle^* \quad (18.15)$$

Con questa si definisce continua a valere che un operatore antiunitario ha per inverso il suo operatore aggiunto:

$$\widehat{\Omega}^\dagger \widehat{\Omega} = \widehat{\Omega} \widehat{\Omega}^\dagger = \mathbb{1} \quad (18.16)$$

Un esempio semplice di operatore antilineare è quello di coniugazione complessa puntuale su $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$:

$$(\widehat{\Omega} \psi)(\vec{x}) = \psi^*(\vec{x}) \quad (18.17)$$

Infatti:

$$\begin{aligned} (\widehat{\Omega}(c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2))(\vec{x}) &= (c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2)^*(\vec{x}) = c_1^* \phi_1^*(\vec{x}) + c_2^* \phi_2^*(\vec{x}) = \\ &= c_1^* (\widehat{\Omega} \phi_1)(\vec{x}) + c_2^* (\widehat{\Omega} \phi_2)(\vec{x}) \end{aligned} \quad (18.18)$$

È poi anche antiunitario in quanto banalmente il suo range è tutto $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ e coniuga il prodotto scalare:

$$\begin{aligned} \langle \widehat{\Omega} f | \widehat{\Omega} g \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} d^n x (\widehat{\Omega} f)^*(\vec{x}) (\widehat{\Omega} g)(\vec{x}) = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^n x (f^*)^*(\vec{x}) (g^*)(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^n x g^*(\vec{x}) f(\vec{x}) = \\ &= \langle g | f \rangle = \langle f | g \rangle^* \end{aligned} \quad (18.19)$$

Possiamo in realtà definire un operatore di coniugazione a partire da una qualunque base ortonormale:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle \quad \widehat{\Omega} |\psi\rangle = \sum_n c_n^* |\phi_n\rangle \quad (18.20)$$

Come prima questo si può verificare essere un operatore antiunitario.

18.3 Dimostrazione del Teorema di Wigner

Procediamo adesso alla dimostrazione del teorema di Wigner. Siccome questa è piuttosto lunga, anticipiamo i passi principali della dimostrazione:

1. Per ogni base ortonormale è possibile scegliere una base ortonormale fatta di rappresentanti dei raggi ottenuti tramite \mathcal{F} dai raggi della base ortonormale iniziale;
2. Per un dato vettore possiamo scegliere un rappresentante corrispondente che ha per coefficienti di Fourier nella base dei rappresentanti (ottenuta al primo punto) gli stessi del vettore oppure i suoi coniugati;
3. È possibile trovare per ogni vettore un tale rappresentante, dato il vettore del punto precedente;
4. Questa scelta definisce un operatore unitario o antiunitario.

18.3.1 Base dei Rappresentanti

Sia $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ una base ortonormale per \mathcal{H} . Per ogni $n \in \mathbb{N}$ possiamo scegliere un rappresentante $|n'\rangle \in \mathcal{F}(\{|n\rangle\})$. Dimostriamo che il sistema $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ è ancora una base ortonormale. Per definizione di \mathcal{F} è immediato dimostrare che sono ortonormali:

$$\begin{cases} |\langle i' | j' \rangle| = |\langle i | i \rangle| = 1 & i = j \\ |\langle i' | j' \rangle| = |\langle i | j \rangle| = 0 & i \neq j \end{cases} \quad (18.21)$$

Questo dimostra che i vettori sono linearmente indipendenti. Se \mathcal{H} è finito dimensionale allora questa è automaticamente una base in quanto è in numero pari alla dimensione di \mathcal{H} . Se invece \mathcal{H} è infinito dimensionale (ma separabile) allora dobbiamo dimostrare la completezza. Possiamo fare questo per assurdo. Supponiamo che $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ sia un sistema ortonormale non completo. Esiste dunque un $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ non nullo tale che:

$$\langle \psi' | i' \rangle = 0 \quad \forall i, \quad |\psi'\rangle \neq \vec{0} \quad (18.22)$$

Siccome \mathcal{F} è suriettiva allora esiste un $|\psi\rangle$ il cui raggio è mandato nel raggio di $|\psi'\rangle$:

$$\exists |\psi\rangle \in \mathcal{H} : \{|\psi'\rangle\} = \mathcal{F}(\{|\psi\rangle\}) \quad (18.23)$$

Ma per definizione di \mathcal{F} :

$$|\langle \psi | i \rangle| = |\langle \psi' | i' \rangle| = 0 \quad \forall i \quad (18.24)$$

Questo implica che $|\psi\rangle$ è necessariamente il vettore nullo in quanto $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ è una base ortonormale. Abbiamo dunque raggiunto l'assurdo, dimostrando che $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ è una base ortonormale per \mathcal{H} .

18.3.2 Scelte dei Coefficienti Trasformati per un Vettore

Sia adesso un $|u\rangle \in \mathcal{H}$ e $|u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\})$. Poniamo:

$$u_n = \langle n | u \rangle \quad u'_n = \langle n' | u' \rangle \quad (18.25)$$

Vogliamo dimostrare che vale una delle seguenti proposizioni:

$$(a) \quad |u'\rangle = \sum_n u_n |n'\rangle \quad \vee \quad (b) \quad |u'\rangle = \sum_n u_n^* |n'\rangle \quad (18.26)$$

Iniziamo col notare che i moduli coincidono, così che differiscono per una fase:

$$|u_n| = |\langle n | u \rangle| = |\langle n' | u' \rangle| = |u'_n| \quad \forall n \quad (18.27)$$

Consideriamo adesso i seguenti vettori:

$$|1, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |n\rangle) \quad n = 2, 3, \dots \quad (18.28)$$

Per comodità trascuriamo la normalizzazione, che può essere re-inserita in ogni passaggio dividendo per $\sqrt{2}$:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |n\rangle) \rightarrow |1\rangle + |n\rangle \quad (18.29)$$

Vogliamo verificare che:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\{|1\rangle + |n\rangle\}) &= \{|1'\rangle + |n'\rangle\} \\ \left\{ \left(|1\rangle + |n\rangle \right)' \right\} &= \{|1'\rangle + |n'\rangle\} \end{aligned} \quad (18.30)$$

Usiamo l'apice per indicare come al solito un vettore scelto dal raggio corrispondente tramite \mathcal{F} al vettore di cui si prende l'apice. Notiamo che un vettore $(|1\rangle + |n\rangle)'$ appartiene allo spazio generato da $|1'\rangle, |n'\rangle$:

$$\forall m \neq 1, n \quad \left| \langle m' | (|1\rangle + |n\rangle)' \right| = \left| \langle m' | (|1\rangle + |n\rangle) \right| = 0 \quad (18.31)$$

Questo significa che:

$$\left(|1\rangle + |n\rangle \right)' = c_1 |1'\rangle + c_n |n'\rangle \quad (18.32)$$

dove per la normalizzazione $|c_1| = |c_n| = 1$:

$$\begin{aligned} |c_1| &= \left| \langle 1' | (|1\rangle + |n\rangle)' \right| = \left| \langle 1' | (|1\rangle + |n\rangle) \right| = |\langle 1' | 1 \rangle| = 1 \\ |c_n| &= \left| \langle n' | (|1\rangle + |n\rangle)' \right| = 1 \end{aligned} \quad (18.33)$$

così che i due coefficienti coincidono con certe fasi:

$$|1, n'\rangle = e^{i\phi_1} |1'\rangle + e^{i\phi_n} |n'\rangle \quad (18.34)$$

Siccome $(|1\rangle + |n\rangle)'$ è definito a meno di una fase allora possiamo sceglierlo in modo tale che $\phi_1 = 0$:

$$|1, n'\rangle = |1'\rangle + e^{i\phi_n} |n'\rangle \quad (18.35)$$

D'altra parte anche ogni vettore che compone la base dei rappresentanti $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ è definito a meno di una fase, così che per ogni n possiamo scegliere $\phi_n = 0$ (ossia $e^{i\phi_n} |n'\rangle \rightarrow |n'\rangle$). Abbiamo dimostrato dunque che è sempre possibile scegliere una base di rappresentanti $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ tale che:

$$(|1\rangle + |n\rangle)' = |1'\rangle + |n'\rangle \iff \mathcal{F}(\{|1\rangle + |n\rangle\}) = \{|1'\rangle + |n'\rangle\} \quad (18.36)$$

Torniamo adesso al generico vettore $|u\rangle$. Iniziamo col considerare un vettore "reale" nella base $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$:

$$|u\rangle = \sum_n u_n |n\rangle \quad u_n^* = u_n \quad (18.37)$$

Scegliamo poi un rappresentante del raggio corrispondente tramite \mathcal{F} :

$$|u'\rangle = \sum_n u'_n |n'\rangle \Rightarrow |u'_n| = |u_n| \quad (18.38)$$

Nella scelta fatta della base dei rappresentanti $\{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ troviamo:

$$\begin{aligned} |u_1 + u_n| &= |\langle 1|u\rangle + \langle n|u\rangle| = |(\langle 1| + \langle n|) |u\rangle| = |(\langle 1| + \langle n|)' |u'\rangle| = \\ &= |(\langle 1'| + \langle n'|) |u'\rangle| = |u'_1 + u'_n| \end{aligned} \quad (18.39)$$

Scegliamo ora $|u'\rangle$ in modo tale che u'_1 abbia la stessa fase di u_1 , e dunque coincidano:

$$\begin{cases} |u'_1| = |u_1| \\ \arg(u'_1) = \arg(u_1) \end{cases} \Rightarrow u'_1 = u_1 \quad (18.40)$$

L'identità precedente conduce a:

$$\begin{aligned} |u_1 + u_n| &= |u'_1 + u'_n| \\ u_1^2 + u_n^2 + 2u_1 u_n &= |u'_1|^2 + |u'_n|^2 + 2 \operatorname{Re}\{u_1^* u'_n\} \\ u_1 u_n &= u_1 \operatorname{Re}\{u'_n\} \\ u_n &= \operatorname{Re}\{u'_n\} \end{aligned} \quad (18.41)$$

Siccome i moduli devono coincidere allora la parte immaginaria di u'_n deve essere nulla, ossia coincidono anche tutti i coefficienti di Fourier:

$$\begin{cases} |u_n| = |u'_n| \\ u_n = \operatorname{Re}\{u'_n\} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} |u_n|^2 = |\operatorname{Re}\{u'_n\}|^2 + |\operatorname{Im}\{u'_n\}|^2 \\ u_n = \operatorname{Re}\{u'_n\} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \operatorname{Im}\{u'_n\} = 0 \\ u'_n = u_n \end{cases} \quad (18.42)$$

Notiamo che implicitamente nell'equazione $u_1 u_n = u_1 \operatorname{Re}\{u'_n\}$ abbiamo usato che $u_1 \neq 0$. In caso contrario $u_1 = 0$ possiamo scegliere il primo coefficiente p -esimo non nullo e porre $u'_p = u_p$, considerare i vettori $|p\rangle + |n\rangle$ e ripetere la dimostrazione (scegliere un'opportuna base di rappresentanti e un opportuno rappresentante di $\mathcal{F}(\{|u\rangle\})$).

Questa dimostrazione è valida dunque per tutti i vettori reali. Vogliamo dimostrare che ogni vettore ricade in.

Definiamo i seguenti vettori:

$$|\psi_{j,k}\rangle = |j\rangle + |j+1\rangle + \dots + |j+k\rangle = \sum_{s=0}^k |j+s\rangle \quad (18.43)$$

I coefficienti di questi sono reali e dunque vale la dimostrazione di prima, ossia per una certa coppia j, k possiamo scegliere una base di rappresentanti e un rappresentante $|\psi'_{j,k}\rangle$ tale che:

$$|\psi'_{j,k}\rangle = \sum_{s=0}^k |(j+s)'\rangle \quad (18.44)$$

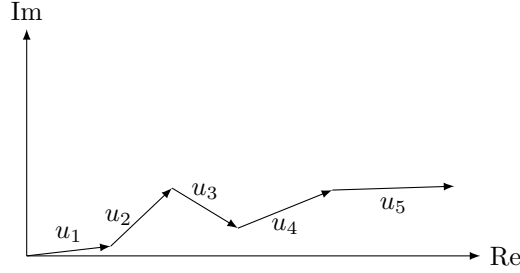
Pertanto possiamo sempre scegliere una base di rappresentanti tale che somme di vettori della base iniziale corrispondono a somme di vettori della base di rappresentanti.

Per ogni $|u\rangle$ possiamo scegliere dunque una base di rappresentanti tale che per *ogni* rappresentante $|u'\rangle$:

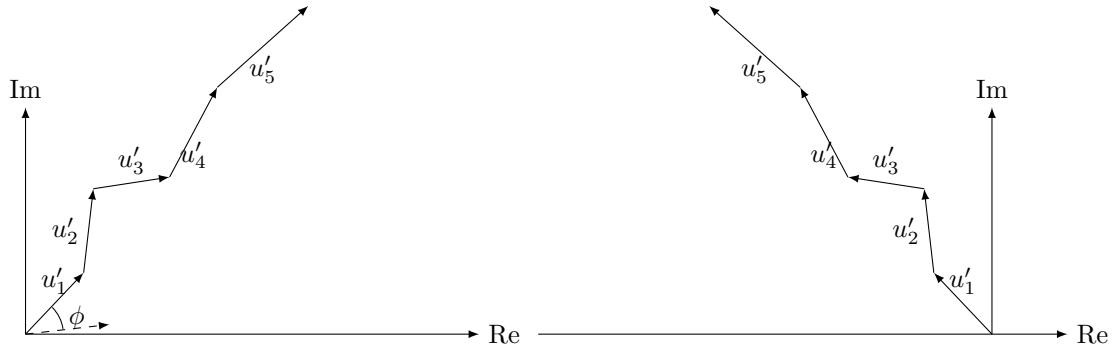
$$\left| \sum_{s=0}^k u_{j+s} \right| = |\langle \psi_{j,k} | u \rangle| = |\langle \psi'_{j,k} | u' \rangle| = \left| \sum_{s=0}^k u'_{j+s} \right| \iff \left| \sum_{s=0}^k u_{j+s} \right| = \left| \sum_{s=0}^k u'_{j+s} \right| \quad (18.45)$$

Notiamo che possiamo adesso rappresentare i coefficienti u_n ed u'_n come i tratti di una poligonale uscente dall'origine. Indichiamo con Γ la poligonale formata da u_1, u_2, \dots e con Γ' quella formata da u'_1, u'_2, \dots . L'identità appena scritta afferma per ogni coppia di vertici di posizione j, k in Γ e in Γ' la distanza è la stessa. Siccome questo è vero per ogni tratto delle due curve allora da un punto di vista geometrico è immediato pensare che Γ' è distanza da Γ a meno di una rotazione generica e un eventuale riflessione.

Facciamo prima un disegno per Γ .



Pertanto gli unici casi possibili sono i seguenti.



In termini dei coefficienti sono dunque possibili i seguenti casi:

$$u'_n = e^{i\phi} u_n \quad u'_n = e^{i\phi} u_n^* \quad (18.46)$$

Scelta la base opportuna, ricordiamo che questo vale per *ogni* rappresentante.

In entrambi i casi possiamo scegliere $|u'\rangle$ tale che $u'_1 = u_1$ oppure $u'_1 = u_1^*$ rispettivamente, che implica $\phi = 0$. Abbiamo dunque dimostrato che ogni $|u\rangle$ sta nel caso (a) oppure nel caso (b):

$$(a) \quad |u'\rangle = \sum_n u_n |n'\rangle \quad \vee \quad (b) \quad |u'\rangle = \sum_n u_n^* |n'\rangle \quad (18.47)$$

18.3.3 Generalizzazione ad ogni Vettore

Dobbiamo ora generalizzare ad ogni vettore, ossia dimostrare che tutti i vettori stanno nel caso (a) oppure tutti i vettori stanno nel caso (b). Data la solita base $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$, definiamo il vettore $|v\rangle$:

$$|v\rangle = |j\rangle + e^{i\alpha} |k\rangle \quad \alpha \neq 0, \pi \quad (18.48)$$

Supponiamo che $|v\rangle$ sia nel caso (a):

$$|v'\rangle = |j'\rangle + e^{i\alpha} |k'\rangle \quad (18.49)$$

Dovremmo poi fare una simile dimostrazione nel caso (b), in cui i coefficienti sono coniugati. Come prima possiamo evitare di inserire il fattore di normalizzazione.

Consideriamo un vettore $|u\rangle$ i cui coefficienti j, k sono non nulli e hanno una fase relativa non banale:

$$u_j, u_k \neq 0 \quad u_j u_k^* = |u_j u_k| e^{i\gamma}; \gamma \neq 0, \pi \iff u_j \neq \pm u_k \quad (18.50)$$

Vogliamo dimostrare che se $|v\rangle$ sta nel caso (a) allora anche $|u\rangle$ sta in questo caso. Supponiamo per assurdo che non sia così, ossia:

$$u'_n = u_n^* \quad \forall n \quad (18.51)$$

Usando le proprietà di \mathcal{F} calcoliamo il modulo quadro del loro prodotto scalare:

$$\begin{aligned} |\langle v|u\rangle|^2 &= |\langle v'|u'\rangle|^2 \\ |(\langle j| + e^{-i\alpha}\langle k|)|u\rangle|^2 &= |(\langle j'| + e^{-i\alpha}\langle k'|)|u'\rangle|^2 \\ |u_j + e^{-i\alpha}u_k|^2 &= |u'_j + e^{-i\alpha}u'_k|^2 \\ 2\operatorname{Re}\{u_j u_k^* e^{i\alpha}\} &= 2\operatorname{Re}\{u'_j u'^*_k e^{i\alpha}\} \\ 2\operatorname{Re}\{u_j u_k^* e^{i\alpha}\} &= 2\operatorname{Re}\{u_j^* u_k e^{i\alpha}\} \\ \operatorname{Re}\{|u_j u_k| e^{i\gamma} e^{i\alpha}\} &= \operatorname{Re}\{|u_j u_k| e^{-i\gamma} e^{i\alpha}\} \\ \operatorname{Re}\{e^{i(\alpha+\gamma)}\} &= \operatorname{Re}\{e^{i(\alpha-\gamma)}\} \\ \cos(\alpha + \gamma) &= \cos(\alpha - \gamma) \end{aligned} \quad (18.52)$$

Questo però conduce all'assurdo:

$$\cos(\alpha + \gamma) = \cos(\alpha - \gamma) \iff \begin{cases} \alpha + \gamma = \alpha - \gamma + 2m\pi \\ \alpha + \gamma = -\alpha + \gamma + 2m\pi \end{cases} \iff \begin{cases} \gamma = m\pi \\ \alpha = m\pi \end{cases} \quad (18.53)$$

Dovremmo adesso dimostrare che questo continua ad essere valido anche per i vettori $|u\rangle$ per cui non vale più $u_j, u_k \neq 0, u_j \neq \pm u_k$. I possibili casi speciale sono quattro:

1. $u_j = u_k = 0$;
2. $u_j = 0, u_k \neq 0$;
3. $u_n \neq 0, u_k = 0$;
4. $u_j, u_k \neq 0; u_j = \pm u_k$

Ci limitiamo a considerare il primo caso. In questo caso è inclusa la possibilità che il vettore appartenga alla base (o proporzionale ad un suo elemento), nel qual caso abbiamo già dimostrato la validità della proposizione (a). Escludendo questo allora esistono almeno altri due indici $p, q \neq j, k$ tali che $u_p, u_q \neq 0$. In questo caso vi è ancora la possibilità che i due abbiano fase relativa banale $0, \pi$, che non consideriamo. Siamo dunque nella situazione:

$$u_j = u_k = 0 \quad u_p, u_q \neq 0 \quad u_p \neq \pm u_q \quad (18.54)$$

Definiamo adesso il vettore $|w\rangle$ con i seguenti coefficienti:

$$\langle n|w\rangle = w_n = \begin{cases} w_j = w_p = 1 \\ w_k = e^{i\beta} & \beta \neq 0, \pi \\ w_q = e^{i\alpha} & \alpha \neq 0, \pi \\ 0 & n \neq j, k, q, p \end{cases} \quad (18.55)$$

ossia:

$$|w\rangle = |j\rangle + e^{i\beta}|k\rangle + |p\rangle + e^{i\alpha}|q\rangle \quad (18.56)$$

Notiamo che $|w\rangle$ soddisfa $w_j, w_k \neq 0, w_j \neq \pm w_k$ e dunque sta nel caso (a) per quanto appena dimostrato:

$$|w'\rangle = \sum_n w_n |n'\rangle \quad (18.57)$$

Dimostriamo adesso per assurdo che $|u\rangle$ sta nel caso (a), ossia supponiamo che stia nel caso (b):

$$|u'\rangle = \sum_n u_n^* |n'\rangle \quad (18.58)$$

Per le proprietà di \mathcal{F} , scelto un rappresentante $|u'\rangle$:

$$\begin{aligned} |\langle w|u\rangle|^2 &= |\langle w'|u'\rangle|^2 \\ |w_j^* u_j + w_k^* u_k + w_p^* u_p + w_q^* u_q|^2 &= |w_j'^* u'_j + w_k'^* u'_k + w_p'^* u'_p + w_q'^* u'_q|^2 \\ |w_p^* u_p + w_q^* u_q|^2 &= |w_p'^* u'_p + w_q'^* u'_q|^2 \\ |w_p^* u_p + w_q^* u_q|^2 &= |w_p^* u_p^* + w_q^* u_q^*|^2 \\ |u_p + e^{-i\alpha} u_q|^2 &= |u_p^* + e^{-i\alpha} u_q^*|^2 \end{aligned} \quad (18.59)$$

Come prima questo porta ad un assurdo. La dimostrazione degli sottocasi e del caso (b) con i relativi sottocasi è simile e la lasciamo per scontata.

18.3.4 Definizione dell'Operatore di Simmetria

Abbiamo dunque dimostrato che, data una base ortonormale $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$, è possibile trovare una singola base di rappresentanti tale che tutti i vettori dello spazio di Hilbert ammettono rappresentanti (appartenenti al raggio corrispondente tramite \mathcal{F} del raggio del vettore iniziale) che hanno gli stessi coefficienti di Fourier:

$$\forall \{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}, \forall |u\rangle \in \mathcal{H} \quad \begin{cases} \exists! |n'\rangle \in \mathcal{F}(\{|n\rangle\}), \forall n \in \mathbb{N}: \{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}} \text{ ONB} \\ \exists! |u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\}): |u'\rangle = \sum_n u_n |n'\rangle \end{cases} \quad (18.60)$$

oppure che hanno i coefficienti coniugati:

$$\forall \{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}, \forall |u\rangle \in \mathcal{H} \quad \begin{cases} \exists! |n'\rangle \in \mathcal{F}(\{|n\rangle\}), \forall n \in \mathbb{N}: \{|n'\rangle\}_{n \in \mathbb{N}} \text{ ONB} \\ \exists! |u'\rangle \in \mathcal{F}(\{|u\rangle\}): |u'\rangle = \sum_n u_n^* |n'\rangle \end{cases} \quad (18.61)$$

Questa relazione biunivoca definisce dunque un operatore invertibile $\hat{\Omega}$:

$$\forall |u\rangle \in \mathcal{H} \quad \hat{\Omega} |u\rangle \equiv |u'\rangle \quad (18.62)$$

Nel primo caso questo è un operatore unitario, in quanto è lineare (se è lineare su una base è lineare in generale) e conserva il prodotto scalare:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} |u\rangle &= \sum_n u_n |n'\rangle = \sum_n u_n \hat{\Omega} |n\rangle \\ \langle v|u\rangle &= \langle v'|u'\rangle = \langle \hat{\Omega} v | \hat{\Omega} u \rangle \end{aligned} \quad (18.63)$$

Nel secondo caso è invece antiunitario:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} |u\rangle &= \sum_n u_n^* |n'\rangle = \sum_n u_n^* \hat{\Omega} |n\rangle \\ \langle v|u\rangle &= \langle v'|u'\rangle^* = \langle \hat{\Omega} v | \hat{\Omega} u \rangle^* \end{aligned} \quad (18.64)$$

Notiamo come questo l'operatore $\hat{\Omega}$ è definito a meno di una fase, che vedremo essere importante per caratterizzare *insiemi* di trasformazioni di simmetria.

Capitolo 19

Isometrie dello Spazio Euclideo

In questo capitolo vediamo più in dettaglio i moti rigidi dello spazio fisico e cerchiamo le espressioni degli operatori di simmetria associati a queste trasformazioni. Per fare questo sono però necessari alcuni preliminari sulla teoria dei gruppi e in particolare su gruppi *continui*.

19.1 Gruppo E(3)

Ricordiamo che in una rototraslazione ogni punto $P = x^i e_i$ viene mandato in un punto $P' = x'^i e'_i$ tale che:

$$\hat{e}'_j = R_{ji} \hat{e}_i \quad x'^i = R_{ij} x^j + a^i \quad (19.1)$$

dove R è una matrice ortogonale, che può essere identificata da una direzione $\vec{\omega}$ con $\vec{0} \leq |\vec{\omega}| \leq \pi$; mentre a^i è un qualunque vettore di \mathbb{R}^3 . Le leggi di trasformazione di coordinate sono non lineari non omogenee, che suggerisce di usare lo spazio affine, in cui punti sono della forma:

$$\bar{y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \bar{y}' = \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (19.2)$$

In questo modo la legge di trasformazione assume una forma più compatta tramite solo una matrice:

$$y'^i = A_{ij} y^j \quad A = \begin{pmatrix} R & \vec{a} \\ \vec{0} & 1 \end{pmatrix} \quad (19.3)$$

Ricordiamo adesso la definizione di **gruppo**. Un gruppo è un insieme G su cui è definita un'operazione associativa che ammette identità ed inverso per ogni elemento:

$$\because G \times G \rightarrow G \begin{cases} g'' \cdot (g' \cdot g) = (g'' \cdot g') \cdot g \\ g \cdot e = e \cdot g = g \\ g^{-1} \cdot g = g \cdot g^{-1} = e \end{cases} \quad (19.4)$$

Ci si riferisce a questa operazione tipicamente come prodotto o composizione degli elementi.

Gli spostamenti rigidi del piano formano un gruppo, che chiamiamo $E(3)$ ¹, detto **gruppo euclideo**. In maniera astratta possiamo indicare un elemento di questo insieme come la coppia $g = (R, \vec{a})$. L'operazione di prodotto si trova in maniera naturale come composizione delle due trasformazioni. Guardiamo cosa succede puntualmente in una trasformazione "doppia":

$$\begin{aligned} \vec{x} &\xrightarrow{g_1} \vec{x}' = R_1 \cdot \vec{x} + \vec{a}_1 \\ \vec{x}' &\xrightarrow{g_2} \vec{x}'' = R_2 \cdot \vec{x}' + \vec{a}_2 = R_2 \cdot (R_1 \cdot \vec{x} + \vec{a}_1) + \vec{a}_2 = \\ &= R_2 \cdot R_1 \cdot \vec{x} + R_2 \cdot \vec{a}_1 + \vec{a}_2 \equiv R_3 \vec{x} + \vec{a}_3 \end{aligned} \quad (19.5)$$

Siccome il prodotto di matrici ortogonali è ancora ortogonale e la combinazione lineare di vettori è ancora un vettore allora la composizione di due rototraslazioni è ancora una rototraslazione:

$$g_3 = (R_3, \vec{a}_3) = (R_2 \cdot R_1, \vec{a}_2 + R_2 \cdot \vec{a}_1) \equiv g_2 \cdot g_1 \quad (19.6)$$

¹In realtà $E(3)$ include anche le riflessioni, mentre le rototraslazioni formano un sottogruppo, detto gruppo euclideo speciale $SE(3)$

Quest'operazione si poteva trovare tramite la *rappresentazione* del gruppo come matrici 4×4 , dove coincide con il prodotto riga per colonna:

$$g_2 \cdot g_1 = \begin{pmatrix} R_2 & \vec{a}_2 \\ \vec{0} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 & \vec{a}_1 \\ \vec{0} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_2 R_1 & R_2 \vec{a}_1 + \vec{a}_2 \\ \vec{0} & 1 \end{pmatrix} \quad (19.7)$$

Siccome le matrici formano un gruppo con il prodotto e i vettori formano un gruppo con l'addizione è adesso banale verificare che le rototraslazioni formano a loro volta un gruppo con quest'operazione. Iniziamo col verificare l'associatività:

$$\begin{aligned} g_3 \cdot (g_2 \cdot g_1) &= (R_3, \vec{a}_3) \cdot (R_2 R_1, \vec{a}_2 + R_2 \vec{a}_1) = (R_3(R_2 R_1), \vec{a}_3 + R_3(\vec{a}_2 + R_2 \vec{a}_1)) = \\ &= ((R_3 R_2) R_1, (\vec{a}_3 + R_2 \vec{a}_2) + (R_3 R_2) \vec{a}_1) = (g_3 \cdot g_1) \cdot g_1 = g_3 g_2 g_1 \end{aligned} \quad (19.8)$$

L'identità è data dalla rotazione e traslazione nulle $e = (\mathbb{1}, 0)$:

$$\begin{cases} g \cdot e = (R, \vec{a}) \cdot (\mathbb{1}, 0) = (R\mathbb{1}, \vec{a} + 0) = (R, \vec{a}) = g \\ e \cdot g = (\mathbb{1}, 0) \cdot (R, \vec{a}) = (1 \cdot R, 0 + \vec{a}) = (R, \vec{a}) = g \end{cases} \quad (19.9)$$

L'inverso è dato invece dalla rotazione inversa e dalla traslazione (ruotata) inversa:

$$g^{-1} = (R^T, -R^T \vec{a}) \Rightarrow g^{-1} g = (R^T R, -R^T \vec{a} + R^T \vec{a}) = (\mathbb{1}, 0) = e \quad (19.10)$$

Notiamo che separatamente le rotazioni e le traslazioni ancora formano un gruppo, ossia sono un sottogruppo (sottoinsieme che formano un gruppo rispetto alla stessa operazione ristretta al sottoinsieme), che indichiamo come segue:

$$\begin{aligned} SO(3) &= \{g \in E(3): \vec{a} = 0\} = \{R \equiv (R, 0): R \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, RR^T = R^T R = \mathbb{1}\} \\ T_3 &= \{g \in E(3): R = \mathbb{1}\} = \{t_{\vec{a}} \equiv (\mathbb{1}, \vec{a}): \vec{a} \in \mathbb{R}^3\} \end{aligned} \quad (19.11)$$

Usiamo dunque la notazione $t_{\vec{a}} \in T_3, R \in SO(3)$ per riferirci a pure traslazioni e pure rotazioni rispettivamente. Notiamo che ogni rototraslazione (come suggerisce il nome) può essere scritta univocamente come il prodotto di una traslazione per una rotazione:

$$t_{\vec{a}} \cdot R = (\mathbb{1}, \vec{a}) \cdot (R, 0) = (\mathbb{1}R, \vec{a} + \mathbb{1} \cdot 0) = (R, \vec{a}) \quad (19.12)$$

Vale anche per il prodotto di una rotazione e una traslazione ma in maniera non banale:

$$R \cdot t_{\vec{a}} = (R, 0) \cdot (\mathbb{1}, \vec{a}) = (R \cdot \mathbb{1}, 0 + R \cdot \vec{a}) = (R, R\vec{a}) \iff (R, \vec{a}) = R \cdot t_{R^T \vec{a}} \quad (19.13)$$

19.2 Rappresentazione di $E(3)$ sugli Operatori su Spazio di Hilbert

Ricordiamo adesso la definizione di **rappresentazione** di gruppo su uno spazio vettoriale V . Questa è una mappa invertibile (col range) S che va dal gruppo a $\mathcal{L}(V)$ e conserva il prodotto:

$$S: G \rightarrow \mathcal{L}(V) \quad S(g_1 \cdot g_2) = S(g_1) \cdot S(g_2) \quad (19.14)$$

Chiaramente affinché questo sia possibile il range $G' = \mathcal{R}(S)$ deve essere un sottogruppo di $\mathcal{L}(V)$. In particolare potrà essere al più $GL(V)$, l'insieme degli operatori invertibili su V .

Una rappresentazione manda elemento neutro in elemento neutro (che è l'identità su V) ed elemento inverso in elemento inverso:

$$\begin{aligned} S(e) \cdot S(g) &= S(e \cdot g) = S(g) = S(g \cdot e) = S(g) \cdot S(e) \Rightarrow S(e) = \mathbb{1}_V \\ S(g^{-1}) \cdot S(g) &= S(g^{-1}g) = S(e) = \mathbb{1}_V \end{aligned} \quad (19.15)$$

Se la mappa è invertibile ma conserva il prodotto a meno di una fase allora si dice una **rappresentazione proiettiva**:

$$S(g_1 \cdot g_2) = e^{i\phi(g_1, g_2)} S(g_1) S(g_2) \quad (19.16)$$

Per distinguere "rappresentazione proiettiva" da "rappresentazione" ci riferiremo spesso a "rappresentazione" come rappresentazione **propria**.

Dimostriamo adesso che la mappa $g \in E(3) \mapsto \hat{\Omega}(g) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ è una rappresentazione proiettiva del gruppo euclideo sullo spazio di Hilbert di un sistema quantistico, con $\hat{\Omega}(g)$ l'operatore ottenuto dal Teorema di Wigner rispetto alla trasformazione di simmetria g , che ricordiamo essere definito a meno di una fase.

Siano tre osservatori O, O', O'' separati per rototraslazioni. La rototraslazione che va da O ad O'' è equivalente alla composizione della rototraslazione da O ad O' con quella da O' ad O'' :

$$\begin{cases} O \xrightarrow{g} O' & O' \xrightarrow{g'} O'' \\ O \xrightarrow{g''} O'' \end{cases} \Rightarrow g'' = g' \cdot g \quad (19.17)$$

Ad ognuna di queste trasformazioni di osservatori è dunque associata una trasformazione di simmetria $\mathcal{F}_g, \mathcal{F}_{g'}, \mathcal{F}_{g''}$:

$$\begin{aligned} \{|u\rangle\} &\rightarrow \{|u'\rangle\} = \mathcal{F}_g(\{|u\rangle\}) \\ \{|u'\rangle\} &\rightarrow \{|u''\rangle\} = \mathcal{F}_{g'}(\{|u'\rangle\}) = (\mathcal{F}_{g'} \circ \mathcal{F}_g)(\{|u\rangle\}) \\ \{|u\rangle\} &\rightarrow \{|u''\rangle\} = \mathcal{F}_{g''}(\{|u\rangle\}) \end{aligned} \quad (19.18)$$

Per il Teorema di Wigner questo equivale a dire che riusciamo a trovare operatori $\hat{\Omega}(g), \hat{\Omega}(g'), \hat{\Omega}(g'')$ tali che:

$$\begin{cases} \{|u'\rangle\} = \{\hat{\Omega}(g) |u\rangle\} \\ \{|u''\rangle\} = \{\hat{\Omega}(g') |u'\rangle\} = \{\hat{\Omega}(g') \hat{\Omega}(g) |u\rangle\} \\ \{|u''\rangle\} = \{\hat{\Omega}(g'') |u\rangle\} \end{cases} \quad (19.19)$$

da cui:

$$\{\hat{\Omega}(g'') |u\rangle\} = \{\hat{\Omega}(g') \hat{\Omega}(g) |u\rangle\} \iff \hat{\Omega}(g'') = e^{i\phi(g'', g', g)} \hat{\Omega}(g') \hat{\Omega}(g) \quad (19.20)$$

In realtà siccome $g'' = g'g$ è funzione degli altri due troviamo che $\hat{\Omega}$ è una rappresentazione proiettiva di $E(3)$ su \mathcal{H} :

$$\hat{\Omega}(g'g) = e^{i\phi(g', g)} \hat{\Omega}(g') \hat{\Omega}(g) \quad (19.21)$$

Sfruttiamo adesso la proprietà per cui sul gruppo euclideo è definita l'operazione di "radice", ossia per ogni rotazione e traslazione:

$$R_{\vec{\omega}} = R_{\vec{\omega}/2} \cdot R_{\vec{\omega}/2} = R_{\vec{\omega}/2}^2 \quad t_{\vec{a}} = t_{\vec{a}/2} t_{\vec{a}/2} = t_{\vec{a}/2}^2 \quad \forall \vec{\omega}, \vec{a} \quad (19.22)$$

Usando il fatto che $\hat{\Omega}$ è una rappresentazione proiettiva questo permette infatti di trovare se gli operatori di simmetria sono unitari o antiunitari (per ogni g).

Notiamo che per definizione di rappresentazione proiettiva nel caso delle pure rotazioni:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) &= \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) \\ \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) &= \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}/2} R_{\vec{\omega}/2}) \\ \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) &= e^{i\phi(\vec{\omega})} \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}/2}) \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}/2}) \\ \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) &= e^{i\phi(\vec{\omega})} \hat{\Omega}^2(R_{\vec{\omega}/2}) \end{aligned} \quad (19.23)$$

e analogamente per le traslazioni:

$$\hat{\Omega}(t_{\vec{a}}) = e^{i\phi(\vec{a})} \hat{\Omega}^2(t_{\vec{a}/2}) \quad (19.24)$$

Gli operatori di rotazione e traslazione sono dunque unitari se e solo se il quadrato di (altri) operatori di rotazione e traslazione sono unitari. A priori sappiamo che ogni operatore $\hat{\Omega}(g)$ è unitario o antiunitario. Tuttavia il quadrato di operatori unitari o antiunitari è sempre unitario. Nel caso di operatori unitari questo è banale in quanto il prodotto di operatori unitari è unitario. Dato invece \hat{U} antiunitario:

$$\begin{aligned} \hat{U}^2(\alpha |u\rangle + \beta |v\rangle) &= \hat{U}(\alpha^* \hat{U} |u\rangle + \beta^* \hat{U} |v\rangle) = \alpha \hat{U}^2 |u\rangle + \beta \hat{U}^2 |v\rangle \\ \langle \hat{U}^2 v | \hat{U}^2 u \rangle &= \langle \hat{U} u | \hat{U} v \rangle = \langle v | u \rangle \end{aligned} \quad (19.25)$$

Affinchè le identità siano valide per ogni $\vec{a}, \vec{\omega}$:

$$\hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) = e^{i\phi(\vec{\omega})} \hat{\Omega}^2(R_{\vec{\omega}/2}) \quad \hat{\Omega}(t_{\vec{a}}) = e^{i\phi(\vec{a})} \hat{\Omega}^2(t_{\vec{a}/2}) \quad (19.26)$$

allora tutti gli operatori $\hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}})$ e $\hat{\Omega}(t_{\vec{a}})$ devono essere unitari. Infatti se ci fosse un certo $\vec{\omega}$ per cui $\hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}})$ è antiunitario allora anche $\hat{\Omega}^2(R_{\vec{\omega}/2})$ sarebbe antiunitario, ma ciò è un assurdo.

Siccome poi ogni rototraslazione si scrive come prodotto di una traslazione per una rotazione allora questo vale per ogni rototraslazione:

$$\hat{\Omega}(g) = \hat{\Omega}(t_{\vec{a}} R_{\vec{\omega}}) = e^{i\phi} \hat{\Omega}(t_{\vec{a}}) \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) \quad (19.27)$$

Abbiamo dunque dimostrato che gli operatori di rototraslazione formano una **rappresentazione unitaria proiettiva** del gruppo euclideo sullo spazio di Hilbert di un qualunque sistema fisico.

19.3 Determinazione degli Operatori di Rototraslazione

Per trovare esplicitamente le $\hat{\Omega}(g)$ abbiamo adesso bisogno di informazioni sullo sistema quantistico misurato dagli osservatori. Come fatto per le trasformazioni di gauge partiamo da considerazioni classiche e usiamo il principio di corrispondenza per postulare l'effetto di una trasformazione di simmetria su operatori e vettori dello spazio di Hilbert. Ci poniamo nel caso di un sistema di N particelle, il cui stato è descritto da un punto γ nello spazio delle fasi Γ . Su questo spazio sono definite le funzioni di posizione e momento che per un dato stato definiscono posizione e momento di ciascuna particella:

$$\vec{x}_\alpha = \vec{X}_\alpha(\gamma) \quad \vec{p}_\alpha = \vec{P}_\alpha(\gamma) \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (19.28)$$

diversamente dalle trasformazioni di gauge, le rototraslazioni sono indipendenti dal tempo e quindi basta considerare queste da un punto di vista statico.

Nel sistema O' lo stato γ corrisponde allo stato $\gamma' = G_g(\gamma)$ che ha le seguenti coordinate:

$$\begin{cases} \vec{X}_\alpha(\gamma') = R \cdot \vec{X}_\alpha(\gamma) + \vec{a} \\ \vec{P}_\alpha(\gamma') = R \cdot \vec{P}_\alpha(\gamma) \end{cases} \quad (19.29)$$

Applichiamo il principio di corrispondenza:

$$\begin{aligned} \Gamma &\Longleftrightarrow \mathcal{H} \\ \gamma &\Longleftrightarrow |u\rangle \\ \vec{X}_\alpha &\Longleftrightarrow \hat{\vec{x}}_\alpha \\ \vec{P}_\alpha &\Longleftrightarrow \hat{\vec{p}}_\alpha \\ \vec{X}_\alpha(\gamma) &\Longleftrightarrow \langle u | \hat{\vec{x}}_\alpha | u \rangle \\ \vec{P}_\alpha(\gamma) &\Longleftrightarrow \langle u | \hat{\vec{p}}_\alpha | u \rangle \\ \gamma' = G_g(\gamma) &\Longleftrightarrow |u'\rangle = \hat{\Omega}(g) |u\rangle \end{aligned} \quad (19.30)$$

Troviamo che gli operatori di rototraslazione devono soddisfare certe scalari per ogni vettore $|u\rangle$:

$$\begin{cases} \vec{X}_\alpha(\gamma') = R \cdot \vec{X}_\alpha(\gamma) + \vec{a} \\ \vec{P}_\alpha(\gamma') = R \cdot \vec{P}_\alpha(\gamma) \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} \langle u' | \hat{\vec{x}}_\alpha | u' \rangle = R \cdot \langle u | \hat{\vec{x}}_\alpha | u \rangle + \vec{a} \\ \langle u' | \hat{\vec{p}}_\alpha | u' \rangle = R \cdot \langle u | \hat{\vec{p}}_\alpha | u \rangle \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} \langle u | \hat{\Omega}^\dagger(g) \hat{\vec{x}}_\alpha \hat{\Omega}(g) | u \rangle = R \cdot \langle u | \hat{\vec{x}}_\alpha | u \rangle + \vec{a} \\ \langle u | \hat{\Omega}^\dagger(g) \hat{\vec{p}}_\alpha \hat{\Omega}(g) | u \rangle = R \cdot \langle u | \hat{\vec{p}}_\alpha | u \rangle \end{cases} \quad (19.31)$$

Come al solito questa diventa un'identità operatoriale (per 2.10):

$$\begin{cases} \hat{\Omega}^\dagger(g) \hat{\vec{x}}_\alpha \hat{\Omega}(g) = R \cdot \hat{\vec{x}}_\alpha + \vec{a} \\ \hat{\Omega}^\dagger(g) \hat{\vec{p}}_\alpha \hat{\Omega}(g) = R \cdot \hat{\vec{p}}_\alpha \end{cases} \quad (19.32)$$

Possiamo poi aggiungere lo spin, che ci aspettiamo seguire le stesse leggi di trasformazione del momento:

$$\begin{cases} \hat{\Omega}^\dagger(g) \hat{\vec{x}}_\alpha \hat{\Omega}(g) = R \cdot \hat{\vec{x}}_\alpha + \vec{a} \\ \hat{\Omega}^\dagger(g) \hat{\vec{p}}_\alpha \hat{\Omega}(g) = R \cdot \hat{\vec{p}}_\alpha \\ \hat{\Omega}^\dagger(g) \hat{\vec{S}}_\alpha \hat{\Omega}(g) = R \cdot \hat{\vec{S}}_\alpha \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} \hat{\Omega}^\dagger(g) \hat{x}_\alpha^i \hat{\Omega}(g) = R_{ij} \cdot \hat{x}_\alpha^j + \vec{a} \\ \hat{\Omega}^\dagger(g) \hat{p}_\alpha^i \hat{\Omega}(g) = R_{ij} \cdot \hat{p}_\alpha^j \\ \hat{\Omega}^\dagger(g) \hat{S}_\alpha^i \hat{\Omega}(g) = R_{ij} \cdot \hat{S}_\alpha^j \end{cases} \quad \alpha = 1, \dots, N; \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (19.33)$$

Gli operatori di posizione, momento e spin formano un sistema irriducibile per lo spazio di Hilbert, ossia gli unici operatori che commutano contemporaneamente con questi sono l'identità o multipli dell'identità. Come fatto per le trasformazioni di gauge, date due soluzioni per la stessa g troviamo:

$$\left[\hat{\Omega}'(g) \hat{\Omega}^\dagger(g), \hat{x}_\alpha^i \right] = \left[\hat{\Omega}'(g) \hat{\Omega}^\dagger(g), \hat{p}_\alpha^i \right] = \left[\hat{\Omega}'(g) \hat{\Omega}^\dagger(g), \hat{S}_\alpha^i \right] = 0 \Longleftrightarrow \hat{\Omega}'(g) \hat{\Omega}^\dagger(g) = c \mathbf{1} \quad (19.34)$$

Per unitarietà di entrambi gli operatori troviamo che $|c| = 1$ e dunque differiscono di una fase:

$$\hat{\Omega}'(g) = c \hat{\Omega}(g) = e^{i\phi(g)} \hat{\Omega}(g) \quad (19.35)$$

19.4 Gruppi e Algebre di Lie

Prima di continuare le nostre considerazioni sugli operatori di rototraslazione risulta necessario fare alcuni preliminari matematici sui gruppi *continui* o più precisamente *differenziabili*.

19.4.1 Definizione di Gruppo di Lie

Chiamiamo **gruppo di Lie** una varietà differenziabile su cui è definita un'operazione di prodotto di gruppo che è differenziabile rispetto alla struttura della varietà. In particolare noi ci limitiamo ai gruppi di Lie formati da matrici che sono diffeomorfi ad una sottovarietà \mathbb{C}^m (tipicamente \mathbb{R}^n), che contiene l'origine. Pertanto questi sono caratterizzati da una sola carta A , ossia una funzione analitica invertibile che dipende da n parametri (che individuano un punto di X) e ha valori nel gruppo G :

$$A: (a^1, \dots, a^n) \in X \mapsto A(a^1, \dots, a^n) \in \mathbb{C}^{M \times M} \quad X \subset \mathbb{C}^m \quad (19.36)$$

Data la funzione A il gruppo è definito dunque dal suo range:

$$G = \mathcal{R}(A) = \{A(a^1, \dots, a^n): (a^1, \dots, a^n) \in X\} \quad (19.37)$$

Chiaramente una condizione necessaria affinché G formi un gruppo è che $G = \mathcal{R}(A)$ sia un sottogruppo di $\mathbb{C}^{M \times M}$. Questo è il caso del gruppo euclideo, i cui elementi possono essere visti come matrici 4×4 reali, ossia appartenenti ad $\mathbb{R}^{4 \times 4}$. In questo caso poi i parametri sono 6, anche se X non è tutto \mathbb{R}^6 in quanto $0 \leq |\vec{\omega}| \leq 2\pi$ (ma si può estendere a tutto \mathbb{R}^6 usando la periodicità, anche se perdiamo l'invertibilità chiaramente).

In sintesi, siamo interessati ai gruppi di Lie di matrici che sono diffeomorfi ad una sottovarietà di \mathbb{R}^n (tipicamente tutto \mathbb{R}^n). Questo permette di caratterizzare ogni elemento del gruppo con un n -upla di parametri reali.

Diamo per scontato verificare che tali insiemi formino sempre un gruppo di Lie in quanto il prodotto di matrici permette la struttura di gruppo ed è differenziabile.

19.4.2 Generatori Infinitesimali del Gruppo

Non perdiamo di generalità se supponiamo che l'elemento neutro corrisponde all'origine:

$$A(0, \dots, 0) = \mathbb{1} \iff A_{ij}(0, \dots, 0) = \delta_{ij} \quad (19.38)$$

Siccome A è differenziabile (e siamo considerando gruppi di matrici, su cui sono definite anche le operazioni di addizione, prodotto scalare esterno oltre che il prodotto stesso) allora possiamo fare uno sviluppo di Taylor intorno all'origine lungo una certa direzione $\delta a^\alpha = \varepsilon v^\alpha$, che fornisce dunque gli elementi vicino all'elemento neutro:

$$A_{ij}(\varepsilon v^1, \dots, \varepsilon v^n) = \delta_{ij} + \varepsilon v^\alpha \left. \frac{\partial A_{ij}}{\partial v^\alpha} \right|_0 = \delta_{ij} + \varepsilon v^\alpha (T_\alpha)_{ij} \quad \alpha = 1, \dots, n; i, j = 1, \dots, M \quad (19.39)$$

oppure in forma matriciale:

$$A(\varepsilon v) = \mathbb{1} + \varepsilon v^\alpha T_\alpha \quad (19.40)$$

Le matrici T_α sono dette **generatori infinitesimali** del gruppo di Lie, in quanto "generano" le trasformazioni *infinitesime* (vicine all'identità).

$$T_\alpha = \left. \frac{\partial A}{\partial v^\alpha} \right|_0 \quad (19.41)$$

L'invertibilità di A garantisce in realtà che questi sono anche linearmente indipendenti (e dunque formano una "base"):

$$\lambda^\alpha T_\alpha = 0 \iff \delta_{ij} + \varepsilon \lambda^\alpha T_\alpha = A_{ij}(\varepsilon \lambda^\alpha) = \delta_{ij} = A_{ij}(0) \iff \lambda^\alpha = 0 \quad (19.42)$$

Chiaramente i generatori infinitesimali dipendono dalla parametrizzazione A , ossia dalla scelta della carta. Possiamo però cambiare la carta, ossia fare un cambio di coordinate $\vec{b} = \vec{b}(\vec{a})$ con la condizione $\vec{b}(\vec{0}) = \vec{0}$, in modo che $B = A \circ \vec{b}: Y \rightarrow G$ sia ancora una parametrizzazione con le stesse proprietà di A e certi generatori infinitesimali \tilde{T} . Usiamo la notazione $A(\vec{b})$ ed $A(\vec{a})$ per intendere due diverse parametrizzazioni. I nuovi generatori, rispetto ai precedenti, saranno dati da:

$$(\tilde{T}_\alpha)_{ij} = \left. \frac{\partial A_{ij}}{\partial b^\alpha} \right|_{\vec{b}=\vec{0}} = \left. \frac{\partial A_{ij}}{\partial a^\beta} \right|_{\vec{a}=\vec{0}} \left. \frac{\partial a^\beta}{\partial b^\alpha} \right|_{\vec{b}=\vec{0}} = (T_\beta)_{ij} m_\alpha^\beta \quad (19.43)$$

Pertanto i generatori infinitesimali in una qualunque parametrizzazione sono combinazioni lineari di generatori infinitesimali di un'altra parametrizzazione. Pertanto i generatori infinitesimali definiscono uno spazio vettoriale $\text{span}\{T_\alpha\}$ di cui formano una base. Questo è un sottospazio vettoriale sempre dello stesso spazio di matrici a cui appartengono gli elementi del gruppo, anche se in generale i generatori infinitesimali stessi non appartengono a questi.

19.4.3 Algebra di Lie

Vogliamo adesso dimostrare che il **commutatore** di due generatori infinitesimali è ancora un generatore infinitesimale. In generale un elemento infinitesimo del gruppo si scrive:

$$A(\varepsilon \vec{v}) = \mathbb{1} + \varepsilon T + o(\varepsilon^2) \quad (19.44)$$

Inoltre all'ordine $o(\varepsilon^2)$ l'inverso di un elemento infinitesimo è dato da:

$$A^{-1}(\varepsilon \vec{v}) = A(-\varepsilon \vec{v}) \quad (19.45)$$

Infatti:

$$A^{-1}A = (\mathbb{1} - \varepsilon T + o(\varepsilon^2))(\mathbb{1} + \varepsilon T + o(\varepsilon^2)) = \mathbb{1} + \cancel{\varepsilon T} - \cancel{\varepsilon T} - \varepsilon^2 T^2 + o(\varepsilon^2) = \mathbb{1} + o(\varepsilon^2) \quad (19.46)$$

Notiamo che il prodotto è ben definito in quanto sia A che T appartengono allo stesso spazio di matrici $\mathbb{C}^{M \times M}$.

Prendiamo adesso due elementi infinitesimi $A(\varepsilon' \vec{v}')$, $A(\varepsilon \vec{v})$ e definiamo:

$$B(\varepsilon, \varepsilon') = A^{-1}(\varepsilon' \vec{v}') A^{-1}(\varepsilon \vec{v}) A(\varepsilon' \vec{v}') A(\varepsilon \vec{v}) \quad (19.47)$$

Notiamo che:

$$\begin{aligned} B(0, \varepsilon') &= A^{-1}(\varepsilon' \vec{v}') A^{-1}(\vec{0}) A(\varepsilon' \vec{v}') A(\vec{0}) = A^{-1}(\varepsilon' \vec{v}') A(\varepsilon' \vec{v}') = \mathbb{1} \\ B(\varepsilon, 0) &= \mathbb{1} \end{aligned} \quad (19.48)$$

Pertanto B non contiene termini dell'ordine di ε o ε' :

$$B(\varepsilon, \varepsilon') = o(\varepsilon \varepsilon') \quad (19.49)$$

Pertanto, detto T'' il generatore infinitesimo di B :

$$B(\varepsilon, \varepsilon') = \mathbb{1} + \varepsilon \varepsilon' T'' \quad (19.50)$$

Possiamo però trovare questo a partire dai generatori di $A(\varepsilon \vec{v})$ e $A(\varepsilon' \vec{v}')$:

$$\begin{aligned} B(\varepsilon, \varepsilon') &= (\mathbb{1} - \varepsilon' T')(\mathbb{1} - \varepsilon T)(\mathbb{1} + \varepsilon' T')(\mathbb{1} + \varepsilon T) = \\ &= \mathbb{1} + \varepsilon \varepsilon' (T' T - T T') = \\ &= \mathbb{1} + \varepsilon \varepsilon' [T', T] \end{aligned} \quad (19.51)$$

Pertanto il commutatore è un'operazione ben definita sullo spazio dei generatori infinitesimali:

$$T'' = [T', T] \in \text{span}\{T_\alpha\} \quad (19.52)$$

Lo spazio vettoriale formato dai generatori insieme all'operazione di commutatore è definito **Algebra di Lie** (sottintendiamo dunque addizione e prodotto scalare esterno):

$$\mathcal{L}_G = \text{span}\{T_\alpha\} \quad [\cdot, \cdot]: \mathcal{L}_G \times \mathcal{L}_G \rightarrow \mathcal{L}_G \quad (19.53)$$

Il commutatore è un'operazione bilineare, antisimmetrica e soddisfa l'identità di Jacobi. In maniera astratta possiamo dunque definire un'algebra di Lie come uno spazio vettoriale equipaggiato con un commutatore.

Sia adesso una base T_α per l'algebra di Lie. Allora il commutatore di due elementi della base è ancora un generatore infinitesimale e dunque è combinazione lineare degli elementi della base:

$$[T_\alpha, T_\beta] = c_{\alpha\beta}^\gamma T_\gamma \quad (19.54)$$

Notiamo che siccome il commutatore è bilineare allora il commutatore di due elementi della base determina l'azione del commutatore su tutta l'algebra di Lie. Pertanto le costanti $c_{\alpha\beta}^\gamma$ sono dette **costanti di struttura** dell'Algebra di Lie. Queste variano a seconda della base usata ma risultano nella stessa algebra di Lie. Troviamo la legge di trasformazione (suggerita dagli indici):

$$\begin{aligned} [\tilde{T}_\mu, \tilde{T}_\nu] &= \tilde{c}_{\mu\nu}^\sigma \tilde{T}_\sigma \\ [m_\mu^\alpha T_\alpha, m_\nu^\beta T_\beta] &= \tilde{c}_{\mu\nu}^\sigma m_\sigma^\gamma T_\gamma \\ m_\mu^\alpha m_\nu^\beta [T_\alpha, T_\beta] &= \tilde{c}_{\mu\nu}^\sigma m_\sigma^\gamma T_\gamma \\ m_\mu^\alpha m_\nu^\beta c_{\alpha\beta}^\gamma T_\gamma &= \tilde{c}_{\mu\nu}^\sigma m_\sigma^\gamma T_\gamma \\ m_\mu^\alpha m_\nu^\beta c_{\alpha\beta}^\gamma &= \tilde{c}_{\mu\nu}^\sigma m_\sigma^\gamma \\ m_\mu^\alpha m_\nu^\beta c_{\alpha\beta}^\gamma (m^{-1})_\gamma^\rho &= \tilde{c}_{\mu\nu}^\sigma m_\sigma^\gamma (m^{-1})_\gamma^\rho \\ m_\mu^\alpha m_\nu^\beta c_{\alpha\beta}^\gamma (m^{-1})_\gamma^\rho &= \tilde{c}_{\mu\nu}^\sigma \delta_\sigma^\rho \\ \tilde{c}_{\mu\nu}^\rho &= m_\mu^\alpha m_\nu^\beta (m^{-1})_\gamma^\rho c_{\alpha\beta}^\gamma \end{aligned} \quad (19.55)$$

Diciamo che due gruppi di Lie ammettono la stessa algebra di Lie se ammettono ciascuno una base di generatori con le stesse costanti di struttura.

19.4.4 Mappa Esponenziale

Ci possiamo adesso chiedere se i generatori infinitesimali "generano" non solo gli elementi vicini all'identità ma *ogni* elemento del gruppo. Accenniamo alla possibilità di dimostrare questo.

Consideriamo la composizione di un numero N dello stesso elemento infinitesimo $(\mathbb{1} + \varepsilon T)$ con $\varepsilon = 1/N$. Questo è ancora un elemento del gruppo:

$$\underbrace{(\mathbb{1} + \varepsilon T) \cdots (\mathbb{1} + \varepsilon T)}_N = \left(\mathbb{1} + \frac{1}{N} T \right)^N \in G \quad (19.56)$$

Per $N \rightarrow \infty$ vale il limite notevole, che si estende naturalmente su insieme di matrici:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} + \frac{1}{N} T \right)^N = e^T = \exp(v_\alpha T_\alpha) \in G \quad (19.57)$$

Pertanto è ben definita la **mappa esponenziale** come applicazione tra l'algebra di Lie e il gruppo di Lie corrispondente:

$$e^T : \mathcal{L}_G \rightarrow G \quad (19.58)$$

Si può dimostrare che la mappa esponenziale è **suriettiva** e dunque permette di **ricostruire il gruppo di Lie a partire solo dalla sua algebra**.

In particolare è sufficiente solo una base. Notiamo infatti che essendo una carta differenziabile allora la funzione ϕ tale che:

$$A(\vec{a})A(\vec{a}') = A(\vec{a}'') \Rightarrow \vec{a}'' = \phi(\vec{a}, \vec{a}') \quad (19.59)$$

è analitica. Questo implica anche che analogamente per i coefficienti dei generatori infinitesimi in una certa base:

$$A(\vec{a})A(\vec{a}') = A(\vec{a}''), \vec{a}'' = \phi(\vec{a}, \vec{a}') \iff \begin{cases} T = v^\alpha T_\alpha \\ T' = v'^\alpha T_\alpha \\ T'' = v''^\alpha T_\alpha \end{cases} \Rightarrow \vec{v}'' = \phi(\vec{v}, \vec{v}') \quad (19.60)$$

La funzione $\vec{v}'' = \phi(\vec{v}, \vec{v}')$ è dunque ancora analitica e in particolare si può dimostrare che è individuata dalle costanti di struttura del gruppo. Pertanto le costanti di struttura del gruppo sono sufficienti a ricostruire l'intero gruppo di Lie.

19.4.5 Rappresentazioni di Gruppi di Lie

L'obiettivo del nostro studio è quello di determinare gli operatori di rototraslazione, che formano una rappresentazione proiettiva unitaria del gruppo euclideo su uno spazio di Hilbert. Siamo dunque interessati alle rappresentazioni di gruppi di Lie.

Ricordiamo che una rappresentazione di un gruppo G su uno spazio vettoriale V è una mappa invertibile che va dal gruppo allo spazio degli operatori lineari su V :

$$S: g \in G \rightarrow S(g) \in \mathcal{L}(V) \quad S(g_1 g_2) = S(g_1) S(g_2) \quad (19.61)$$

Uno spazio vettoriale e lo spazio dei suoi operatori lineari ammette una struttura differenziabile naturale rispetto a cui il prodotto tra operatori è differenziabile.

In particolare l'algebra di Lie di $GL(V)$ coincide con tutto $\mathcal{L}(V)$ e la indichiamo con $\mathfrak{gl}(V)$. Come insieme o spazio vettoriale risulta chiaramente $\mathfrak{gl}(V) \cong \mathcal{L}(V)$, ma va considerato come algebra di Lie grazie all'ulteriore struttura del commutatore.

Pertanto ha senso richiedere che S sia differenziabile. Se la rappresentazione è differenziabile allora parliamo di una rappresentazione di gruppi di Lie.

Ricordando che una rappresentazione manda l'identità nell'identità allora troviamo che manda elementi vicini all'identità ad elementi vicini all'identità:

$$S(g) = S(\mathbb{1} + \varepsilon T) = \mathbb{1} + \varepsilon \hat{T}' + o(\varepsilon^2) \quad (19.62)$$

Questo significa che **la rappresentazione** manda elementi dell'algebra di Lie ad elementi dell'algebra di Lie, ossia **induce un omeomorfismo di algebre di Lie**:

$$T \hat{T}, T' \xrightarrow{S} \hat{T}' \Rightarrow [T, T'] \xrightarrow{S} [\hat{T}, \hat{T}'] \quad (19.63)$$

In particolare questo significa che nella rappresentazione sono conservate le costanti di struttura:

$$[T_\alpha, T_\beta] = c_{\alpha\beta}^\gamma T_\gamma \xrightarrow{S} [\hat{T}_\alpha, \hat{T}_\beta] = c_{\alpha\beta}^\gamma \hat{T}_\gamma \quad (19.64)$$

Non solo, una rappresentazione di gruppi di Lie manda anche la mappa esponenziale nella corrispondenza mappa esponenziale:

$$e^T: \mathcal{L}_G \rightarrow G \xrightarrow{S} e^{\widehat{T}}: \mathfrak{gl}(V) \rightarrow \mathcal{L}(V) \quad (19.65)$$

Pertanto troviamo anche una mappa esponenziale (che non è suriettiva su $\mathcal{L}(V)$ ma un suo sottoinsieme) che va dagli operatori su V agli operatori (invertibili) su V .

Fissata una carta e dunque una base per l'algebra di Lie l'esponenziale diventa poi una funzione di n parametri:

$$X \subset \mathbb{R}^n \xrightarrow{A} \mathfrak{gl}(V) \xrightarrow{\exp} \mathcal{L}(V) \quad (19.66)$$

19.5 Algebra di Lie di E(3)

Il gruppo Euclideo come gruppo di matrici forma un gruppo di Lie rispetto alla struttura differenziabile naturale e il prodotto riga per colonna. In particolare abbiamo già dato la carta naturale:

$$g(\vec{\omega}, \vec{a}) = \begin{pmatrix} R_{\vec{\omega}} & \vec{a} \\ \vec{0} & 1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}, \vec{\omega} \in \mathbb{R}^3 \quad (19.67)$$

Vediamo dunque che il gruppo euclideo ha dimensione 6 come varietà e dunque anche la sua algebra di Lie.

Da questa vogliamo adesso ricavare le rototraslazioni infinitesime (vicine all'identità), e in particolare una base per l'algebra di Lie e le costanti di struttura. Da questi ricaviamo tutti gli elementi del gruppo grazie alla mappa esponenziale. Nota questa troveremo poi la rappresentazione sul nostro spazio di Hilbert.

La traslazione infinitesima è banale, mentre la rotazione infinitesima in termini dei versori ricordiamo essere data da:

$$\hat{\mathbf{e}}'_i = \hat{\mathbf{e}}_i + \delta\vec{\omega} \wedge \hat{\mathbf{e}}_i = \hat{\mathbf{e}}_i + \delta\omega^k \hat{\mathbf{e}}_k \wedge \hat{\mathbf{e}}_i = \hat{\mathbf{e}}_i + \varepsilon_{kij} \delta\omega^j \hat{\mathbf{e}}_j = (\delta_{ij} + \varepsilon_{kij} \delta\omega^k) \hat{\mathbf{e}}_j = (R_{\delta\vec{\omega}})_{ij} \hat{\mathbf{e}}_j \quad (19.68)$$

da cui:

$$R_{\delta\vec{\omega}} = \mathbb{1} + \delta\omega^k I_k \quad (I_k)_{ij} = \varepsilon_{kij} \quad (19.69)$$

Esplicitiamo gli I_k :

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad I_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad I_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (19.70)$$

Il generico elemento vicino all'identità è dato da:

$$g(\delta\vec{\omega}, \delta\vec{a}) = \begin{pmatrix} \mathbb{1} + \delta\omega^k I_k & \delta a^k \hat{\mathbf{e}}_k \\ \vec{0} & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1} + \delta\omega \tilde{I}_k + \delta a^k \pi_k \quad (19.71)$$

dove:

$$\tilde{I}_k = \begin{pmatrix} I_k & \vec{0} \\ \vec{0} & 0 \end{pmatrix} \quad \pi_k = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\mathbf{e}}_k \\ \vec{0} & 0 \end{pmatrix} \quad (19.72)$$

Pertanto una base per l'algebra di Lie di $E(3)$ è data da \tilde{I}_k, π_k con $k = 1, 2, 3$ per un totale di sei, come ci aspettavamo. In particolare una base dell'algebra di Lie è data dall'insieme delle basi per le algebre di Lie di rotazioni $SO(3)$ e traslazioni T_3 . Questi soddisfano la seguente algebra:

$$[\tilde{I}_k, \tilde{I}_l] = \varepsilon_{klm} \tilde{I}_m \quad [\pi_\alpha, \pi_\beta] = 0 \quad [\tilde{I}_k, \pi_l] = \varepsilon_{klm} \pi_m \quad (19.73)$$

Tramite la mappa esponenziale troviamo dunque il generico elemento come composizione di una traslazione finita e una rotazione finita:

$$g(\vec{\omega}, \vec{a}) = t_{\vec{a}} R_{\vec{\omega}} = e^{\vec{a} \cdot \vec{\pi}} e^{\vec{\omega} \cdot \vec{I}} \quad (19.74)$$

19.6 Espressione degli Operatori di Rototraslazione

19.6.1 Rototraslazioni Infinitesime

Torniamo adesso alla rappresentazione proiettiva del gruppo euclideo sullo spazio di Hilbert. Se la fase dipende analiticamente dai due elementi del gruppo allora comunque ci possiamo aspettare che $\hat{\Omega}$ manda elementi vicini all'identità ad elementi vicini all'identità, ossia:

$$g = 1 + \delta\omega^k \tilde{I}_k + \delta a^k \pi_k \Rightarrow \hat{\Omega}(g) = \mathbb{1} + \delta\omega^k \hat{I}^k + \delta a^k \hat{\pi}_k \quad (19.75)$$

In realtà per motivi che a breve ci saranno chiari preferiamo usare dei generatori con dimensione diversa:

$$\widehat{\Omega}(g) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k - \frac{i}{\hbar} \delta a^k \widehat{P}_k \quad (19.76)$$

I generatori dell'algebra di Lie della rappresentazione ricordiamo essere a loro volta degli operatori lineari su \mathcal{H} .

19.6.2 Significato Fisico dei Generatori delle Rototraslazioni

Notiamo che affinché l'operatore infinitesimo sia unitario allora:

$$\begin{aligned} \mathbb{1} &= \widehat{\Omega}(g) \widehat{\Omega}^\dagger(g) = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k - \frac{i}{\hbar} \delta a^k \widehat{P}_k \right) \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k^\dagger + \frac{i}{\hbar} \delta a^k \widehat{P}_k^\dagger \right) = \\ &= \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k (\widehat{J}_k^\dagger - \widehat{J}_k) + \frac{i}{\hbar} \delta a^k (\widehat{P}_k^\dagger - \widehat{P}_k) + o(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (19.77)$$

Questo è verificato infatti se e solo se **i generatori sono autoaggiunti** (grazie al fattore $-i$):

$$\boxed{\widehat{J}_k = \widehat{J}_k^\dagger \quad \widehat{P}_k = \widehat{P}_k^\dagger} \quad (19.78)$$

Pertanto questi sono osservabili, che come suggerito dalla notazione vedremo coincidere con il momento angolare totale e l'impulso.

La rappresentazione "trasporta" anche le relazioni di commutazione:

$$\begin{aligned} [\widetilde{I}_k, \widetilde{I}_l] &= \varepsilon_{klm} \widetilde{I}_m & [\pi_\alpha, \pi_\beta] &= 0 & [\widetilde{I}_k, \pi_l] &= \varepsilon_{klm} \pi_m \\ \left[-\frac{i}{\hbar} \widehat{J}_k, -\frac{i}{\hbar} \widehat{J}_l \right] &= -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_{klm} \widehat{J}_m & \left[-\frac{i}{\hbar} \widehat{P}_k, -\frac{i}{\hbar} \widehat{P}_l \right] &= 0 & \left[-\frac{i}{\hbar} \widehat{J}_k, -\frac{i}{\hbar} \widehat{P}_l \right] &= -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_{klm} \widehat{P}_m \\ [\widehat{J}_k, \widehat{J}_l] &= i\hbar \varepsilon_{klm} \widehat{J}_m & [\widehat{P}_k, \widehat{P}_l] &= 0 & [\widehat{J}_k, \widehat{P}_l] &= i\hbar \varepsilon_{klm} \widehat{P}_m \end{aligned}$$

Queste sono proprie le relazioni di commutazione degli operatori momento angolare e impulso, che suggeriscono quanto accennato. Per verificare questo vogliamo adesso ricondurre le relazioni di commutazione agli operatori di posizione, momento e spin delle particelle del sistema che stiamo considerando, in quanto determinano (a meno di una costante) i corrispondenti operatori.

Ricordiamo che le rototraslazioni finite devono soddisfare:

$$\begin{aligned} \widehat{\Omega}^\dagger(g) \widehat{x}_\alpha^i \widehat{\Omega}(g) &= R_{ij} \widehat{x}_\alpha^j + a^i \\ \widehat{\Omega}^\dagger(g) \widehat{p}_\alpha^i \widehat{\Omega}(g) &= R_{ij} \widehat{p}_\alpha^j \\ \widehat{\Omega}^\dagger(g) \widehat{S}_\alpha^i \widehat{\Omega}(g) &= R_{ij} \widehat{S}_\alpha^j \end{aligned} \quad (19.79)$$

Consideriamo separatamente rotazioni e traslazioni infinitesime, così che possiamo considerare separatamente i generatori \widehat{J}_k e i generatori \widehat{P}_k :

$$\widehat{\Omega}(R_{\delta\vec{\omega}}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k \quad \widehat{\Omega}(t_{\delta\vec{a}}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta a^k \widehat{P}_k \quad (R_{\delta\vec{\omega}})_{ij} = \delta_{ij} + \delta\omega^k \varepsilon_{kij} \quad (19.80)$$

Vediamo prima le rotazioni, in questo caso le tre identità sono identiche se sostituiamo per posizione, momento e spin:

$$\begin{aligned} \widehat{\Omega}^\dagger(R_{\delta\vec{\omega}}) \widehat{x}_\alpha^i \widehat{\Omega}(g) &= R_{ij} \widehat{x}_\alpha^j \\ \widehat{\Omega}^\dagger(R_{\delta\vec{\omega}}) \widehat{p}_\alpha^i \widehat{\Omega}(g) &= R_{ij} \widehat{p}_\alpha^j \\ \widehat{\Omega}^\dagger(R_{\delta\vec{\omega}}) \widehat{S}_\alpha^i \widehat{\Omega}(g) &= R_{ij} \widehat{S}_\alpha^j \end{aligned} \quad (19.81)$$

Basta dunque trovare l'espressione della prima e cambiare gli operatori per le altre (ricordiamo che trascuriamo termini di ordine $o(\varepsilon^2)$):

$$\begin{aligned} \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k \right) \widehat{x}_\alpha^i \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k \right) &= \widehat{x}_\alpha^i + \delta\omega^k \varepsilon_{kij} \widehat{x}_\alpha^j \\ \left(\widehat{x}_\alpha^i + \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k \widehat{x}_\alpha^i \right) \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k \right) &= \widehat{x}_\alpha^i + \delta\omega^k \varepsilon_{kij} \widehat{x}_\alpha^j \\ \widehat{\mathcal{P}}_\alpha^i + \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{J}_k \widehat{x}_\alpha^i - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k \widehat{x}_\alpha^i \widehat{J}_k &= \widehat{\mathcal{P}}_\alpha^i + \delta\omega^k \varepsilon_{kij} \widehat{x}_\alpha^j \\ \frac{i}{\hbar} \delta\omega^k [\widehat{J}_k, \widehat{x}_\alpha^i] &= \delta\omega^k \varepsilon_{kij} \widehat{x}_\alpha^j \end{aligned} \quad (19.82)$$

Siccome questo è valido per ogni $\delta\omega^k$ allora troviamo (sostituendo per operatori impulso e spin):

$$\begin{cases} \frac{i}{\hbar} [\hat{J}_k, \hat{x}_\alpha^i] = \varepsilon_{kij} \hat{x}_\alpha^j \\ \frac{i}{\hbar} [\hat{J}_k, \hat{p}_\alpha^i] = \varepsilon_{kij} \hat{p}_\alpha^j \\ \frac{i}{\hbar} [\hat{J}_k, \hat{S}_\alpha^i] = \varepsilon_{kij} \hat{S}_\alpha^j \end{cases} \quad (19.83)$$

Siccome posizione, momento e spin formano un set irriducibile di operatori allora determinano \hat{J}_k a meno di una costante, che si traduce nell'operatore di rotazione come una fase che può essere ignorata.

$$\hat{J}_k + c_k \Rightarrow \hat{\Omega}(R_{\vec{\omega}}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \omega^k (\hat{J}_k + c_k)\right) = e^{-\frac{i}{\hbar} \omega^k c_k} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \omega^k \hat{J}_k\right) \cong \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \omega^k \hat{J}_k\right) \quad (19.84)$$

Si può adesso verificare facilmente una soluzione, che è quella che scegliamo, è il **momento angolare totale**, ossia la somma dei momenti angolari orbitali e di spin delle singole particelle:

$$\hat{J}_k = \sum_{\alpha} (\hat{L}_k^{\alpha} + \hat{S}_k^{\alpha}) = \varepsilon_{kij} \sum_{\alpha} \hat{x}_{\alpha}^i \hat{p}_{\alpha}^j + \sum_{\alpha} \hat{S}_k^{\alpha} \quad (19.85)$$

Analogamente per rotazioni si trova:

$$\begin{cases} \frac{i}{\hbar} [\hat{J}_k, \hat{x}_{\alpha}^i] = \delta_{ki} \\ \frac{i}{\hbar} [\hat{J}_k, \hat{p}_{\alpha}^i] = 0 \\ \frac{i}{\hbar} [\hat{J}_k, \hat{S}_{\alpha}^i] = 0 \end{cases} \quad (19.86)$$

La soluzione che scegliamo è invece l'**impulso totale**, ossia la somma degli impulsi delle singole particelle:

$$\hat{P}_k = \sum_{\alpha} \hat{p}_k^{\alpha} \quad (19.87)$$

Pertanto il **momento angolare** e l'**impulso** sono rispettivamente i generatori infinitesimali di rotazioni e traslazioni (nello spazio di Hilbert considerato).

19.7 Rappresentazione di E(3) per un Sistema di Particelle

I discorsi precedenti valevano sia che la rappresentazione $\hat{\Omega}(g)$ di $E(3)$ sullo spazio di Hilbert fosse proiettiva che *propria*, ma ci chiediamo adesso in quali condizioni la rappresentazione diventa propria e in quali rimane solo proiettiva. Troveremo che questo dipende dal numero di particelle a spin semintero (fermioni) che appartengono al sistema. Per semplicità iniziamo a considerare il caso di una singola particella a spin s . I generatori di traslazioni e rotazioni sono dati dalle due terne (operatori vettoriali):

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}} \quad \hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \quad [\hat{L}_k, \hat{S}_l] = 0 \quad (19.88)$$

Siccome momento angolare di spin ed orbitale commutano possiamo scrivere la rotazione in una parte di spin e una parte configurazionale, mentre le traslazioni agiscono già solo sulla parte configurazionale:

$$\hat{\Omega}(t_{\vec{a}} R_{\vec{\omega}}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{S}}\right) \quad (19.89)$$

Ci poniamo ora nella rappresentazione delle configurazioni:

$$\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s+1} \quad (19.90)$$

In questo modo gli stati saranno della forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{m_s} \psi_{m_s}(\vec{x}) |m_s\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \vdots \\ \psi_{2s+1}(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad m_s = -s, \dots, s \quad (19.91)$$

mentre quelli fattorizzati:

$$|\psi\rangle = \psi(\vec{x}) |m_s\rangle \quad (19.92)$$

dove $|m_s\rangle$ è la base di autostati di \hat{S}_z (ed \hat{S}^2).

Siccome lo spazio di Hilbert si scrive come prodotto tensoriale della parte configurazionale e quella di spin e analogamente anche le rototraslazioni allora queste possono essere considerate separatamente:

$$\hat{\Omega}(t_{\vec{a}} R_{\vec{\omega}}) |\psi\rangle = \left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right) \psi \right)(\vec{x}) \otimes \left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{S}}\right) |m_s\rangle \right) \quad (19.93)$$

19.7.1 Parte di Spin per una Particella

Per la parte di spin facciamo lo studio direttamente sulla base $|m_s\rangle$ e iniziamo a studiare il caso di rotazione attorno all'asse z , ossia $\vec{\omega} = \omega_z \hat{\mathbf{e}}_z$:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\omega_z \hat{S}_z\right) |m_s\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hbar\omega_z m_s\right) |m_s\rangle = \exp(-i\omega_z m_s) |m_s\rangle \quad (19.94)$$

Una condizione sufficiente affinché la rappresentazione sia propria è che la rotazione di $\omega_z = 2\pi$ coincida con l'identità. Troviamo che questo è vero solo per certi valori di s :

$$e^{-i2\pi m_s} = e^{-i\pi(2m_s)} = (-1)^{2m_s} = \begin{cases} (-1)^{2m_s} & s \text{ semintero} \\ 1 & s \text{ intero} \end{cases} \quad (19.95)$$

Infatti se s è intero lo è anche m_s , così che $2m_s$ è pari, mentre se s è semintero anche m_s è semintero e $2m_s$ può essere sia pari che dispari. Questo significa che per un bosone (spin intero) la rotazione di 2π coincide con l'identità e la rappresentazione di $SO(3)$ sullo spin è una rappresentazione propria. Viceversa per un fermione la rappresentazione di $SO(3)$ sullo spin è una rappresentazione proiettiva.

19.7.2 Parte Configurazionale per una Particella

Vediamo adesso cosa succede alla parte configurazionale. In questo caso il momento angolare può assumere solo valori interi perciò ci aspettiamo in realtà che questa sia una rappresentazione propria. Per verificarlo ci poniamo come detto nella base delle posizioni, dove la condizione di rappresentazione propria diventa:

$$\hat{\Omega}(g'g) = \hat{\Omega}(g')\hat{\Omega}(g) \iff \langle \vec{\mathbf{x}} | \hat{\Omega}(g'g) | \psi \rangle = \langle \vec{\mathbf{x}} | \hat{\Omega}(g') \hat{\Omega}(g) | \psi \rangle \quad \forall \vec{\mathbf{x}}, |\psi\rangle \quad (19.96)$$

Iniziamo col trovare la rotazione infinitesima:

$$\begin{aligned} \langle \vec{\mathbf{x}} | \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} | \psi \rangle &= \langle \vec{\mathbf{x}} | \mathbb{1} - \delta\vec{\omega} \cdot (\hat{\mathbf{x}} \wedge \hat{\mathbf{p}}) | \psi \rangle = \psi(\vec{\mathbf{x}}) - \delta\vec{\omega} \cdot (\vec{\mathbf{x}} \wedge \langle \vec{\mathbf{x}} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle) = \\ &= \psi(\vec{\mathbf{x}}) - \delta\vec{\omega} \cdot (\vec{\mathbf{x}} \wedge \nabla \psi(\vec{\mathbf{x}})) = \psi(\vec{\mathbf{x}}) - \varepsilon_{kij} \delta\omega^k x_i \partial_j \psi(\vec{\mathbf{x}}) = \\ &= \psi(\vec{\mathbf{x}}) - \delta y^j \partial_j \psi(\vec{\mathbf{x}}) = \psi(\vec{\mathbf{x}} - \delta\vec{\mathbf{y}}) = \psi(\vec{\mathbf{x}} - \delta\omega^k I_k \vec{\mathbf{x}}) = \\ &= \psi(R(-\delta\vec{\omega}) \cdot \vec{\mathbf{x}}) = \psi(R^{-1}(\delta\vec{\omega}) \cdot \vec{\mathbf{x}}) \end{aligned} \quad (19.97)$$

Consideriamo adesso una rotazione finita che dividiamo in $N \rightarrow \infty$ trasformazioni finite:

$$\langle \vec{\mathbf{x}} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right) | \psi \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \vec{\mathbf{x}} | \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \frac{\vec{\omega}}{N} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right)^N | \psi \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \psi(R^{-1}(\vec{\omega}/N)^N \cdot \vec{\mathbf{x}}) = \psi(R^{-1}(\vec{\omega}) \cdot \vec{\mathbf{x}}) \quad (19.98)$$

Pertanto una rotazione passiva risulta nella rotazione inversa nell'argomento della funzione d'onda. Analogamente per la traslazione si trova:

$$\langle \vec{\mathbf{x}} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right) | \psi \rangle = \psi(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{a}}) \quad (19.99)$$

Pertanto per una rototraslazione (l'ordine va invertito):

$$\langle \vec{\mathbf{x}} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right) | \psi \rangle = \psi(R^{-1}(\vec{\omega}) \cdot (\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{a}})) \quad (19.100)$$

Possiamo usare anche la notazione compatta:

$$\langle \vec{\mathbf{x}} | \hat{\Omega}(g) | \psi \rangle = \psi(g^{-1}(\vec{\mathbf{x}})) \quad (19.101)$$

Dimostriamo ora che la rappresentazione del prodotto coincide con il prodotto delle rappresentazioni attraverso le funzioni d'onda, in cui è chiaro (ordine sempre invertito):

$$\begin{aligned} \langle \vec{\mathbf{x}} | \hat{\Omega}(g'g) | \psi \rangle &= \psi((g'g)^{-1}(\vec{\mathbf{x}})) = \psi(g^{-1}g'^{-1}(\vec{\mathbf{x}})) \\ \langle \vec{\mathbf{x}} | \hat{\Omega}(g') \hat{\Omega}(g) | \psi \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \langle \vec{\mathbf{x}} | \hat{\Omega}(g') | \vec{\mathbf{x}}' \rangle \langle \vec{\mathbf{x}}' | \hat{\Omega}(g) | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \delta(g'^{-1}(\vec{\mathbf{x}}) - \vec{\mathbf{x}}') \psi(g^{-1}(\vec{\mathbf{x}}')) = \\ &= \psi(g^{-1}g'^{-1}(\vec{\mathbf{x}})) \end{aligned} \quad (19.102)$$

Pertanto la rappresentazione di $E(3)$ relativa alla parte configurazionale è sempre una rappresentazione propria, così che è solo la parte di spin a determinare se la rappresentazione complessiva è propria o proiettiva.

19.7.3 Sistema di Particelle

Vediamo adesso come estendere le considerazioni precedenti ad un sistema di N particelle. In questo caso i relativi operatori di impulso, momento angolare e spin commutano tra loro così che comunque possiamo ridurre l'operatore di rototraslazione globale al prodotto di rototraslazioni sulle singole particelle:

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}(g) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot \hat{\vec{P}}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \hat{\vec{L}}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \hat{\vec{S}}\right) = \\ &= \prod_{\alpha=1}^N \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot \hat{\vec{P}}_{\alpha}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \hat{\vec{L}}_{\alpha}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \hat{\vec{S}}_{\alpha}\right) \right]\end{aligned}\tag{19.103}$$

Analogamente per lo spazio di Hilbert:

$$\hat{\mathcal{H}} = \bigotimes_{\alpha=1}^N \hat{\mathcal{H}}_{\alpha} = \bigotimes_{\alpha=1}^N (\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s_{\alpha}+1})\tag{19.104}$$

Troviamo dunque che il sistema possiede un numero pari di particelle a spin semintero allora la fase si "cancella" così che la rappresentazione di $E(3)$ su \mathcal{H} è propria. Viceversa se il sistema contiene un numero dispari di particella la rappresentazione è proiettiva.

19.8 Rotazioni di Spin 1/2

19.8.1 Espressione Matriciale

19.8.2 Angoli di Eulero

"Veri" Angoli di Eulero

19.8.3 Probabilità di Overlap per Stati Ruotati di un angolo infinitesimo

19.9 Rotazioni di Spin 1

Capitolo 20

Operatori Tensoriali Irriducibili

In questo capitolo vogliamo considerare una particolare classe di collezioni di operatori invarianti rispetto alla rotazioni, che godono di notevoli proprietà utili al calcolo dei rate di transizione di stati di un sistema quantistico.

20.1 Invarianza di Grandezze Fisiche per Rototraslazioni

Diciamo che un sistema fisico è invariante per una trasformazione di simmetria se la sua hamiltoniana soddisfa:

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \langle \psi | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle = \langle \psi' | \hat{\mathcal{H}} | \psi' \rangle \quad |\psi'\rangle = \hat{\Omega} |\psi\rangle \quad (20.1)$$

con $\hat{\Omega}$ operatore di simmetria associato alla trasformazione tramite il Teorema di Wigner.

Questa è equivalente alla richiesta che l'hamiltoniana commuta con l'operatore di simmetria:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle &= \langle \psi' | \hat{\mathcal{H}} | \psi' \rangle \\ \langle \psi | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{\Omega}^\dagger \hat{\mathcal{H}} \hat{\Omega} | \psi \rangle \\ \hat{\mathcal{H}} &= \hat{\Omega}^\dagger \hat{\mathcal{H}} \hat{\Omega} \\ [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\Omega}] &= 0 \end{aligned} \quad (20.2)$$

Nel caso in cui stiamo considerando un gruppo di simmetria allora:

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\Omega}(g)] = 0 \quad \forall g \in G \quad (20.3)$$

Nel caso di un gruppo di Lie possiamo ricondurci ai generatori considerando generiche trasformazioni infinitesime:

$$0 = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\Omega}(g)] = [\hat{\mathcal{H}}, \mathbb{1} + \delta\lambda^\alpha T_\alpha] = \delta\lambda^\alpha [\hat{\mathcal{H}}, T_\alpha] \quad (20.4)$$

Questo è equivalente a richiedere che l'hamiltoniana commuta con la base dell'algebra di Lie:

$$\boxed{[\hat{\mathcal{H}}, T_\alpha] = 0} \quad (20.5)$$

Nel caso delle rototraslazioni troviamo dunque:

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{P}_i] = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{J}_i] = 0 \quad (20.6)$$

Questo implica che **per un sistema invariante per rototraslazioni l'impulso totale e il momento angolare totale sono quantità conservate** nella dinamica.

In generale la legge di trasformazione di un osservabile è data da:

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi' | \hat{A}' | \psi' \rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (20.7)$$

Questo ci porta a:

$$\hat{A} = \hat{\Omega}^\dagger \hat{A}' \hat{\Omega} \iff \boxed{\hat{A}' = \hat{\Omega} \hat{A} \hat{\Omega}^\dagger} \quad (20.8)$$

20.2 Definizione di Operatori Tensoriali

Una collezione di operatori linearmente indipendenti $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n$ tali che gli operatori trasformati in una generica rotazione $\hat{A}'_1, \dots, \hat{A}'_n$ sono combinazioni lineari degli $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n$ è detta **operatore tensoriale**:

$$\hat{A}'_i = M_{ji}(R)\hat{A}_j \quad \forall R \in SO(3) \quad (20.9)$$

Questo equivale a richiedere che la collezione $(\hat{A}_i)_{i=1}^n$ di operatori linearmente indipendenti soddisfa l'identità:

$$\boxed{\hat{\Omega}(R)\hat{A}_i\hat{\Omega}^\dagger(R) = M_{ji}(R)\hat{A}_j} \quad \forall R \in SO(3) \quad (20.10)$$

Indichiamo con n la **dimensione** dell'operatore con k tale che $n = 2k + 1$ il **rango** dell'operatore, che dunque può essere sia intero che semintero.

20.2.1 Rappresentazione di $SO(3)$

Notiamo adesso che le matrici $M(R) \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^n) = \mathbb{C}^{n \times n}$ relative ad un operatore tensoriale sono una rappresentazione di $SO(3)$ su \mathbb{C}^n . Verifichiamo questo considerando due trasformazioni $R_1, R_2 \in SO(3)$ e poniamo $R_2 R_1 = R_2 R_1$. Ricordiamo che la rappresentazione su \mathcal{H} è in generale proiettiva, ossia:

$$\hat{\Omega}(R_3) = e^{i\phi} \hat{\Omega}(R_2) \hat{\Omega}(R_1) \quad (20.11)$$

Usiamo l'identità caratterizzante l'operatore tensoriale \hat{A} :

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}(R_3)\hat{A}_i\hat{\Omega}^\dagger(R_3) &= \sum_j M_{ji}(R_3)\hat{A}_j \\ e^{i\phi}\hat{\Omega}(R_2)\hat{\Omega}(R_1)\hat{A}_i e^{-i\phi}\hat{\Omega}^\dagger(R_1)\hat{\Omega}^\dagger(R_2) &= M_{ji}(R_2 R_1)\hat{A}_j \\ \hat{\Omega}(R_2)\hat{\Omega}(R_1)\hat{A}_i\hat{\Omega}^\dagger(R_1)\hat{\Omega}^\dagger(R_2) &= M_{ji}(R_2 R_1)\hat{A}_j \\ \hat{\Omega}(R_2)M_{ki}(R_1)\hat{A}_k\hat{\Omega}^\dagger(R_2) &= M_{ji}(R_2 R_1)\hat{A}_j \\ M_{ki}(R_1)M_{jk}(R_2)\hat{A}_j &= M_{ji}(R_2 R_1)\hat{A}_j \end{aligned} \quad (20.12)$$

Siccome le \hat{A}_j sono linearmente indipendenti allora:

$$M_{jk}(R_2)M_{ki}(R_1) = M_{ji}(R_2 R_1) \iff \boxed{M(R_2)M(R_1) = M(R_2 R_1)} \quad (20.13)$$

Pertanto $M: R \in SO(3) \rightarrow M(R) \in \mathbb{C}^{n \times n}$ è effettivamente una rappresentazione di $SO(3)$, indipendentemente da quale sistema siamo considerando.

Siccome l'operatore tensoriale \hat{A} è caratterizzato dal fatto che le sue componenti sono linearmente indipendenti allora possiamo considerare il sottospazio vettoriale V^n di $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ generato dagli operatori \hat{A}_i :

$$V^n = \text{span}\{\hat{A}_i\} = \left\{ \hat{v} \in \mathcal{H} : \hat{v} = \sum_{i=1}^n c_i \hat{A}_i, ; c_i \in \mathbb{C} \right\} \quad (20.14)$$

Pertanto ha senso anche parlare di $M(R)$ come una rappresentazione di $SO(3)$ su $V^n \subset \mathcal{L}(\mathcal{H})$, ossia $M(R) \in \mathcal{L}(V^n)$:

$$M(R)\hat{A}_i \equiv M_{ji}(R)\hat{A}_j \Rightarrow M(R)\hat{\mathbf{v}} = \sum_{i=1}^n c_i M_{ji}(R)\hat{A}_j \quad (20.15)$$

Un'equivalente definizione di operatore tensoriale $(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n)$ è che lo spazio V^n generato da questi operatori è invariante per rotazioni, ossia le rotazioni mandano elementi di V^n in elementi di V^n :

$$\hat{v}' = \hat{\Omega}(R)\hat{v}\hat{\Omega}^\dagger(R) = \sum_i c_i \hat{\Omega}(R)\hat{A}_i\hat{\Omega}^\dagger(R) = \sum_{ij} c_i M_{ji}(R)\hat{A}_j = \sum_i c'_i \hat{A}_i \in V^n \quad (20.16)$$

20.2.2 Caratterizzazione in termini dei Generatori Infinitesimali

Siccome $M(R)$ è una rappresentazione di $SO(3)$ sullo spazio generato dagli operatori tensoriali allora i generatori infinitesimali soddisfano la stessa algebra di Lie. Abbiamo dunque per rotazioni infinitesime:

$$\begin{aligned} R &= \mathbb{1} + \delta\omega^a I_a & [I_a, I_b] &= \varepsilon_{abc} I_c \\ \hat{\Omega}(R) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^a \hat{J}_a & [\hat{J}_a, \hat{J}_b] &= i\hbar \varepsilon_{abc} \hat{J}_c \\ M(R) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\omega^a J_a^{(k)} & [J_a^{(k)}, J_b^{(k)}] &= i\hbar \varepsilon_{abc} J_c^{(k)} \end{aligned}$$

Le matrici $J_a^{(k)}$ sono una terna di matrici di dimensione $n \times n$ che soddisfano l'algebra del momento angolare, che identifichiamo con il rango dell'operatore. Possiamo ora caratterizzare gli operatori tensoriali usando questi generatori:

$$\begin{aligned}\widehat{\Omega}(R)\widehat{A}_i\widehat{\Omega}^\dagger(R) &= M_{ji}(R)\widehat{A}_j \\ \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\omega^a\widehat{J}_a\right)\widehat{A}_i\left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\omega^a\widehat{J}_a\right) &= \left(\delta_{ji} - \frac{i}{\hbar}\delta\omega^a(J_a^{(k)})_{ji}\right)\widehat{A}_j \\ \widehat{A}_i - \frac{i}{\hbar}\delta\omega^a[\widehat{J}_a, \widehat{A}_i] &= \widehat{A}_i - \frac{i}{\hbar}\delta\omega^a(J_a^{(k)})_{ji}\widehat{A}_j\end{aligned}\quad (20.17)$$

Siccome le $\delta\omega^a$ sono arbitrarie allora troviamo che un operatore $\widehat{A}_1, \dots, \widehat{A}_n$ è tensoriale se:

$$\boxed{[\widehat{J}_a, \widehat{A}_i] = (J_a^{(k)})_{ji}\widehat{A}_j} \quad (20.18)$$

con $J_a^{(k)}$ terna di matrici di dimensione $n \times n$ che soddisfa l'algebra del momento angolare, ossia i generatori infinitesimali dell'algebra di Lie della rappresentazione di $SO(3)$ su V^n .

20.3 Definizione di Operatore Tensoriale Irriducibile

Tra gli operatori tensoriali noi siamo in realtà interessati ad una particolare sottoclasse che presenta notevoli proprietà. Iniziamo col definire una **rappresentazione irriducibile** $S: G \rightarrow \mathcal{L}(V)$ come una rappresentazione (la cui immagine) che non ammette sottospazi propri (tutti eccetto quello nullo e l'intero spazio) invarianti rispetto alle trasformazioni $S(g)$:

$$\nexists X \subset \mathcal{R}(S): S(g)X \subseteq X \quad \forall g \in G \quad (20.19)$$

Nel nostro caso diciamo che $M(R)$ è irriducibile se:

$$\nexists W \subset V^n: M(R)W \subseteq W \quad \forall R \in SO(3) \quad (20.20)$$

Un operatore tensoriale $(\widehat{A}_1, \dots, \widehat{A}_n)$ è detto **operatore tensoriale irriducibile** se la rappresentazione $M(R)$ su V^n è irriducibile.

Un caso semplice è quello dei generatori infinitesimali delle traslazioni, ossia il momento:

$$\widehat{\Omega}(R)\widehat{p}_i\widehat{\Omega}^\dagger(R) = R_{ij}^{-1}\widehat{p}_j = M_{ji}(R)\widehat{p}_j \quad (20.21)$$

Infatti R_{ij}^{-1} non ammette un sottospazio invariante proprio (tutte le rette e i piani devono variare sotto rotazioni generiche, anche se per specifiche rotazioni sono invarianti). Analogamente questo vale per la posizione, momento angolare totale, il momento angolare orbitale totale e il momento angolare di spin totale, che ammettono le stesse leggi di trasformazione di $(\widehat{p}_1, \widehat{p}_2, \widehat{p}_3)$ sotto una rotazione.

20.3.1 Possibili Dimensioni di Operatori Tensoriali Irriducibili

Avendo caratterizzato gli operatori tensoriali tramite relazioni di commutazione con i generatori delle rotazioni su \mathcal{H} :

$$[\widehat{J}_a, \widehat{A}_i] = (J_a^{(k)})_{ji}\widehat{A}_j \quad (20.22)$$

allora è possibile caratterizzare gli operatori tensoriali irriducibili tramite i generatori $J_a^{(k)}$. Si può dimostrare che una condizione necessaria e sufficiente affinché $M(R)$ sia una rappresentazione irriducibile è che i $J_a^{(k)}$ siano una rappresentazione irriducibile dell'algebra del momento angolare.

Senza entrare nei dettagli della rappresentazioni irriducibili. Conosciamo già delle rappresentazioni irriducibili date dalle restrizioni dei momenti angolari ai sottospazi con momento angolare fissato j . Queste sono tre matrici di dimensione $2j+1$ e dunque di rango j , così che le indichiamo con $(\widehat{J}_x^{(j)}, \widehat{J}_y^{(j)}, \widehat{J}_z^{(j)})$. Gli elementi di matrici sono definiti tramite l'azione di $\widehat{J}_z^{(j)}$ e degli operatori gradino sugli elementi diagonali:

$$\begin{aligned}\widehat{J}_z^{(j)}|j, m\rangle &\equiv \widehat{J}_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle \\ \widehat{J}_\pm^{(j)} &= \widehat{J}_x^{(j)} \pm i\widehat{J}_y^{(j)} \\ \widehat{J}_\pm^{(j)}|j, m\rangle &\equiv \widehat{J}_\pm|j, m\rangle = \hbar C_\pm(j, m)|j, m \pm 1\rangle\end{aligned}\quad (20.23)$$

dove:

$$C_{\pm}(j, m) = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \quad (20.24)$$

Tramite la mappa esponenziale ci riconduciamo poi ad ogni matrice di rotazione di V^n :

$$M(R) = M(R_{\vec{\omega}}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \hat{\mathbf{J}}^{(j)}\right) \quad (20.25)$$

In realtà come abbiamo visto per lo spin queste costituiscono una rappresentazione solo per j intero o $n = 2j + 1$ dispari. Questo significa che le rappresentazioni irriducibili di $SO(3)$ sono di rango intero.

Notiamo come queste non sono le uniche rappresentazioni, in quanto a meno di un isomorfismo troviamo sempre rappresentazioni equivalenti, che però hanno sempre stesso rango.

Possiamo ora caratterizzare un operatore tensoriale irriducibile $\hat{T}_q^{(k)}$ come un operatore tensoriale di rango k intero per cui esiste una rappresentazione (ossia una scelta di $\hat{T}_q^{(k)}$ e di $J_a^{(k)}$ opportuna) i cui generatori infinitesimali coincidono con le restrizioni dei momenti angolari al sottospazio di momento angolare $j = k$:

$$(J_a^{(k)})_{q'q} = \langle k, q' | \hat{J}_a | k, q \rangle \Rightarrow \boxed{[\hat{J}_a, \hat{T}_q^{(k)}] = \langle k, q' | \hat{J}_a | k, q \rangle T_{q'}^{(k)}} \quad (20.26)$$

Questa può essere scritta esplicitamente facendo la sostituzione $(\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z) \rightarrow (\hat{J}_z, \hat{J}_+, \hat{J}_-)$:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z, \hat{T}_q^{(k)}] &= \hbar q \hat{T}_q^{(k)} \\ [\hat{J}_{\pm}, \hat{T}_q^{(k)}] &= \hbar C_{\pm}(k, q) \hat{T}_{q\pm 1}^{(k)} \end{aligned} \quad (20.27)$$

In realtà questa condizione afferma implicitamente che l'operatore è anche tensoriale di rango k .

Il caso $k = 0 \iff n = 1$ corrisponde ad un singolo operatore invariante per rotazioni, che dunque prende il nome di **operatore scalare**:

$$\hat{\Omega}(R) \hat{A} \hat{\Omega}^\dagger(R) = \hat{A} \iff [\hat{\Omega}(R), \hat{A}] = 0 \iff [\hat{J}_a, \hat{A}] = 0 \quad (20.28)$$

Infatti su $j = k = 0$ tutte le componenti del momento angolare sono nulle. Questo è ad esempio il caso di un'hamiltoniana invariante per rotazioni. Il caso più banale è l'identità, che commuta con ogni operatore.

Nel caso $k = 1 \iff n = 3$ vi è invece una terna di operatori e dunque parliamo di **operatore vettoriale**:

$$\hat{\Omega}(R) \hat{V}_q \hat{\Omega}^\dagger(R) = \langle 1, q' | \hat{J}_a | 1, q \rangle \hat{V}_{q'} \iff \begin{cases} [\hat{J}_z, \hat{V}_q] &= \hbar q \hat{V}_q \\ [\hat{J}_{\pm}, \hat{V}_q] &= \hbar \sqrt{(1 \mp q)(1 \pm q + 1)} \hat{V}_{q\pm 1} \end{cases} \quad (20.29)$$

Come detto, questo è il caso di posizione, impulso e momento angolare totale (orbitale, spin e "semplicemente" totale). Notiamo che questi non soddisfano automaticamente le relazioni di commutazione (cioè le componenti cartesiane del vettore, dove risulta infatti $q = 1, 2, 3$), ma dobbiamo passare alle **componenti sferiche**, con $q = -1, 0, 1$:

$$V_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x \pm i V_y) \quad V_0 = V_z \quad (20.30)$$

20.3.2 Esistenza di Operatori Tensoriali Irriducibili di Qualunque Rango

Ci possiamo adesso chiedere se esistono operatori tensoriali irriducibili di qualunque rango. Possiamo costruire degli esempi esplicitamente nella rappresentazione delle configurazioni per una particella senza spin $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. In questo caso data un'opportuna funzione $g(r)$, definiamo il seguente operatore tensoriale, come operatore di moltiplicazione:

$$(\hat{T}_q^{(k)} \psi)(r, \theta, \phi) = g(r) Y_{kq}(\theta, \phi) \psi(r, \theta, \phi) \quad (20.31)$$

Questo è lineare in quanto il prodotto è bilineare. Verifichiamo che soddisfa le relazioni di commutazione con $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}$, ricordando che il momento angolare è un operatore differenziale che agisce solo sulle coordinate angolari e dunque vale la regola del prodotto:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{T}_q^{(k)}] \psi &= \hat{L}_z(g Y_{kq} \psi) - g Y_{kq} \hat{L}_z \psi = \cancel{g Y_{kq} \hat{L}_z \psi} + g(\hat{L}_z Y_{kq}) \psi - \cancel{g Y_{kq} \hat{L}_z \psi} = \hbar q (g Y_{kq} \psi) = \hbar q \hat{T}_q^{(k)} \psi \\ [\hat{L}_{\pm}, \hat{T}_q^{(k)}] \psi &= \hat{L}_{\pm}(g Y_{kq} \psi) - g Y_{kq} \hat{L}_{\pm} \psi = \cancel{g Y_{kq} \hat{L}_{\pm} \psi} + g(\hat{L}_{\pm} Y_{kq}) \psi - \cancel{g Y_{kq} \hat{L}_{\pm} \psi} = \\ &= \hbar C_{\pm}(k, q) g Y_{k, q\pm 1} \psi = \hbar C_{\pm}(k, q) (\hat{T}_{q\pm 1}^{(k)} \psi) \end{aligned} \quad (20.32)$$

Pertanto esistono operatori tensoriali irriducibili di rango arbitrario, come ci aspettavamo.

20.4 Coefficienti di Clebsch-Gordan

Quando si considera un sistema composto da due sottosistemi di momento angolare $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2$ rispettivamente, la parte angolare relativa allo stato del sistema (specificata da questi operatori) può essere espressa in due basi naturali. La prima è quella prodotto degli autostati dei singoli $\hat{J}_i^2, \hat{J}_{iz}$:

$$|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad \begin{cases} \hat{J}_1^2 |j_1, m_1\rangle = \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, m_1\rangle \\ \hat{J}_{1z} |j_1, m_1\rangle = \hbar m_1 |j_1, m_1\rangle \\ \hat{J}_2^2 |j_2, m_2\rangle = \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_2, m_2\rangle \\ \hat{J}_{2z} |j_2, m_2\rangle = \hbar m_2 |j_2, m_2\rangle \end{cases} \quad (20.33)$$

La seconda base possibile è quella degli autostati comuni a $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2$ con $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$ momento angolare totale del sistema:

$$\begin{cases} \hat{J}^2 |j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar^2 j(j + 1) |j_1, j_2; j, m\rangle \\ \hat{J}_{1z} |j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar m |j_1, j_2; j, m\rangle \\ \hat{J}_1^2 |j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, j_2; j, m\rangle \\ \hat{J}_2^2 |j_1, j_2; j, m\rangle = \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_1, j_2; j, m\rangle \end{cases} \quad (20.34)$$

Spesso ci troviamo nell'ipotesi di j_1, j_2 fissati e si usa la notazione ridotta $|m_1, m_2\rangle$ e $|j, m\rangle$.

Per passare dalla base prodotto a quella non prodotto introduciamo i **coefficienti di Clebsch-Gordon** (CG):

$$c_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} = \langle j_1, m_2; j_2, m_2 | j, m \rangle \equiv \langle j_1, m_2; j_2, m_2 | j_1, j_2; j, m \rangle \quad (20.35)$$

In questo modo:

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1, m_2; j_2, m_2 | j, m \rangle |j_1, m_2; j_2, m_2\rangle \quad (20.36)$$

Valgono inoltre le seguenti regole di selezione:

$$m = m_1 + m_2 \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (20.37)$$

20.4.1 Prime Proprietà

I coefficienti CG possono essere scelti tutti **reali**. Inoltre come conseguenza dell'ortonormalizzazione degli stati $|m_1, m_2\rangle$ e $|j, m\rangle$ anche i "vettori" formati dai coefficienti sono **ortonormali**:

$$\begin{aligned} \sum_{j, m} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j, m \rangle &= \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \\ \sum_{m_1, m_2} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j, m \rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j', m' \rangle &= \delta_{j j'} \delta_{m m'} \end{aligned} \quad (20.38)$$

20.4.2 Ricorsività

Una prima fondamentale proprietà dei coefficienti CG è quella di **ricorsività** (variando solo m_1, m_2, m), che scriviamo in notazione compatta:

$$C_{\pm}(j, m) c_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j, m \pm 1} = C_{\pm}(j_1, m_1 \mp 1) c_{j_1 m_1 \mp 1, j_2 m_2}^{j, m} + C_{\pm}(j_2, m_2 \mp 1) c_{j_1 m_1, j_2 m_2 \mp 1}^{j, m} \quad (20.39)$$

Questo significa che, fissati j_1, j_2, j , i coefficienti CG $m \pm 1$ ed m_1, m_2 sono dati da combinazioni lineari di coefficienti CG con m ed $m_1 \mp 1, m_2 \mp 1$.

Per dimostrare questo chiaramente ricorriamo agli operatori gradino:

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle = \hbar C_{\pm}(j, m) |j, m \pm 1\rangle \quad (20.40)$$

Applichiamo questi agli autostati considerati:

$$\begin{aligned} J_{\pm} |j_1, j_2; j, m\rangle &= (J_{1\pm} + J_{2\pm}) |j_1, j_2; j, m\rangle \\ \hbar C_{\pm}(j, m) |j_1, j_2; j, m \pm 1\rangle &= \sum_{m_1 m_2} (J_{1\pm} + J_{2\pm}) c_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j, m} |j_1, m_2; j_1, m_2\rangle \\ C_{\pm}(j, m) |j_1, j_2; j, m \pm 1\rangle &= \sum_{m_1 m_2} c_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j, m} \left(C_{\pm}(j_1, m_1) |j_1, m_1 \pm 1; j_2, m_2\rangle + C_{\pm}(j_2, m_2) |j_1, m_1; j_2, m_2 \pm 1\rangle \right) \end{aligned} \quad (20.41)$$

Facciamo adesso il prodotto scalare di entrambi i membri con $\langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 |$, che ci conduce al risultato atteso:

$$C_{\pm}(j, m) \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j, m \pm 1 \rangle = \sum_{m_1 m_2} c_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} \left(C_{\pm}(j_1, m_1) \delta_{m'_1, m_1 \pm 1} \delta_{m'_2, m_2} + C_{\pm}(j_2, m_2) \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m'_2, m_2 \pm 1} \right) \quad (20.42)$$

$$C_{\pm}(j, m) c_{j_1 m'_1 j_2 m'_2}^{j, m \pm 1} = c_{j_1 m'_1 \mp 1, j_2 m'_2}^{jm} C_{\pm}(j_1, m'_1 \mp 1) + c_{j_1 m'_1, j_2 m'_2 \mp 1}^{jm} C_{\pm}(j_2, m'_2 \mp 1)$$

Facendo adesso la sostituzione $m'_1 \rightarrow m_1, m'_2 \rightarrow m_2$ troviamo quanto atteso.

20.5 Teorema di Wigner-Eckart

20.5.1 Enunciato

Vogliamo adesso enunciare e dimostrare un fondamentale teorema valido per gli operatori irriducibili e ne caratterizza gli elementi di matrice. Vediamo prima l'enunciato:

Teorema 8 (Teorema di Wigner-Eckart). *Siano $\{|\alpha, j, m\rangle\}_{j,m}$ e $\{|\alpha', j, m\rangle\}_{j,m}$ due sistemi di autovettori di \hat{J}^2, \hat{J}_z . Sia $\hat{T}_q^{(k)}$ un operatore tensoriale irriducibile di rango k , allora:*

$$\boxed{\langle \alpha, j, m | \hat{T}_q^{(k)} | \alpha', j', m' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha, j | | \hat{T}^{(k)} | | \alpha', j' \rangle \langle j', m'; k, q | j, m \rangle} = \quad (20.43)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha, j | | \hat{T}^{(k)} | | \alpha', j' \rangle c_{j' m' k q}^{j m}$$

La quantità:

$$\langle \alpha, j | | \hat{T}^{(k)} | | \alpha', j' \rangle \quad (20.44)$$

prende il nome di **elemento di matrice ridotto** e rappresenta semplicemente una quantità dipendenza dall'intero operatore tensoriale e dagli indici α, j, α', j' ma non dagli indici q, m, m' . Questo è dunque un termine **dinamico**, che dipende solo dalla base scelta e dall'operatore tensoriale considerato. I coefficienti CG sono invece un termine **geometrico**, che dipende dalla specifica orientazione del sistema (fissata da q, m, m').

Questo ha come conseguenza immediata che gli elementi di matrice di $\hat{T}_q^{(k)}$ sono nulli se non soddisfano le seguenti di selezione:

$$q = m - m' \quad |j - j'| \leq k \leq j + j' \quad (20.45)$$

Notiamo che i due stati $|\alpha, j, m\rangle$ e $|\alpha', j, m\rangle$ non devono essere necessariamente ortogonali, nè devono formare una base ortonormale al variare anche di α .

20.5.2 Dimostrazione

Dimostrazione. Definiamo i seguenti vettori al variare di j'', m'' :

$$|\sigma, j'', m''\rangle = \sum_{m' q} c_{j' m' k q}^{j'' m''} \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \quad (20.46)$$

L'indice σ implicitamente dipende dall'operatore tensoriale $\hat{T}^{(k)}$ e dagli indici α', j', k .

Come suggerisce dalla notazione vogliamo verificare che questi stati siano ancora autostati di \hat{J}^2, \hat{J}_z . In questo modo troveremmo:

$$\langle \alpha, j, m | \sigma, j'', m'' \rangle \propto \delta_{jj''} \delta_{mm''} \quad (20.47)$$

Vediamo infatti che questo ci avvicina al risultato. Iniziamo col notare che una combinazione lineare di questi vettori con i coefficienti CG ci riporta all'azione dell'operatore sferico sulla base:

$$\begin{aligned} \sum_{j'' m''} c_{j' \bar{m}, k \bar{q}}^{j'' m''} |\sigma, j'', m''\rangle &= \sum_{j'' m''} \sum_{m' q} c_{j' \bar{m}, k \bar{q}}^{j'' m''} c_{j' m' k q}^{j'' m''} \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle = \\ &= \sum_{m' q} \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \sum_{j'' m''} c_{j' \bar{m}, k \bar{q}}^{j'' m''} c_{j' m' k q}^{j'' m''} = \\ &= \sum_{m' q} \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle \delta_{m' \bar{m}} \delta_{q \bar{q}} = T_q^k |\alpha', j', \bar{m}\rangle \end{aligned} \quad (20.48)$$

Facciamo la sostituzione $\bar{q} \rightarrow q, \bar{m} \rightarrow m'$:

$$\hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle = \sum_{j'' m''} c_{j' m' k q}^{j'' m''} |\sigma, j'', m''\rangle \quad (20.49)$$

Facendo il prodotto scalare con $\langle \alpha, j, m |$:

$$\langle \alpha, j, m | \hat{T}_q^{(k)} | \alpha', j', m' \rangle = \sum_{j'' m''} c_{j' m' k q}^{j'' m''} \langle \alpha, j, m | \sigma, j'', m'' \rangle \quad (20.50)$$

Pertanto se questi vettori sono autostati di \hat{J}^2, \hat{J}_z l'espressione si riduce *quasi* a quella attesa, in quanto contribuiscono solo i termini $j = j'', m = m''$:

$$\langle \alpha, j, m | \hat{T}_q^{(k)} | \alpha', j', m' \rangle = c_{j' m' k q}^j \langle \alpha, j, m | \sigma, j, m \rangle \quad (20.51)$$

Rimarrebbe poi da dimostrare che questo prodotto scalare non dipende da m .

Per dimostrare $|\sigma, j, m\rangle$ è un autostato di \hat{J}^2, \hat{J}_z è necessario e sufficiente che l'azione di \hat{J}_z, \hat{J}_\pm sia la stessa che sugli autostati:

$$\hat{J}_z |\sigma, j'', m''\rangle = \hbar m'' |\sigma, j'', m''\rangle \quad \hat{J}_\pm |\sigma, j'', m''\rangle = \hbar C_\pm(j'', m'') |\sigma, j'', m'' \pm 1\rangle \quad (20.52)$$

Verifichiamo per \hat{J}_+ e analogamente vale per gli altri. Per fare questo usiamo la caratterizzazione di operatori tensoriali irriducibili tramite relazioni di commutazione con \hat{J}_z, \hat{J}_\pm 20.27:

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ |\sigma, j'', m''\rangle &= \sum_{m' q} c_{j' m' k q}^{j'' m''} \hat{J}_+ \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle = \\ &= \sum_{m' q} c_{j' m' k q}^{j'' m''} \left(\hat{T}_q^{(k)} \hat{J}_+ + [\hat{J}_+, \hat{T}_q^{(k)}] \right) |\alpha', j', m'\rangle = \\ &= \sum_{m' q} c_{j' m' k q}^{j'' m''} \left(\hat{T}_q^{(k)} \hat{J}_+ + \hbar C_+(k, q) T_{q+1}^k \right) |\alpha', j', m'\rangle = \\ &= \sum_{m' q} c_{j' m' k q}^{j'' m''} \hat{T}_q^{(k)} \hat{J}_+ |\alpha', j', m'\rangle + \hbar \sum_{m' q} c_{j' m' k q}^{j'' m''} C_+(k, q) T_{q+1}^k |\alpha', j', m'\rangle = \\ &= \hbar \sum_{m' q} c_{j' m' k q}^{j'' m''} C_+(j', m') \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m' + 1\rangle + \hbar \sum_{m' q} C_{j' m' k q}^{j'' m''} C_+(k, q) T_{q+1}^k |\alpha', j', m'\rangle = \left[\begin{matrix} m' \rightarrow m' - 1 \\ q \rightarrow q - 1 \end{matrix} \right] \quad (20.53) \\ &= \hbar \sum_{m' q} c_{j' m' - 1 k q}^{j'' m''} C_+(j', m' - 1) \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle + \hbar \sum_{m' q} C_{j' m' k q - 1}^{j'' m''} C_+(k, q - 1) \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle = \\ &= \hbar \sum_{m' q} \left[c_{j' m' - 1 k q}^{j'' m''} C_+(j', m' - 1) + C_{j' m' k q - 1}^{j'' m''} C_+(k, q - 1) \right] \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle = \\ &= \hbar C_+(j'', m'') \sum_{m' q} C_{j' m' k q}^{j'' m'' + 1} \hat{T}_q^{(k)} |\alpha', j', m'\rangle = \hbar C_+(j'', m'') |\sigma, j'', m'' + 1\rangle \end{aligned}$$

come ci aspettavamo.

Per completare il teorema dobbiamo adesso dimostrare che il prodotto scalare seguente è indipendente da m :

$$\langle \alpha, j, m | \sigma, j, m \rangle \quad (20.54)$$

Sapendo che entrambi questi vettori sono autostati del momento angolare allora applicando l'operatore gradino \hat{J}_+ :

$$\begin{cases} \hat{J}_+ |\alpha, j, m - 1\rangle = \hbar C_+(j, m - 1) |\alpha, j, m\rangle \\ \hat{J}_+ |\sigma, j, m - 1\rangle = \hbar C_+(j, m - 1) |\sigma, j, m\rangle \end{cases} \iff \begin{cases} |\alpha, j, m\rangle = \frac{1}{\hbar C_+(j, m - 1)} \hat{J}_+ |\alpha, j, m - 1\rangle \\ |\sigma, j, m\rangle = \frac{1}{\hbar C_+(j, m - 1)} \hat{J}_+ |\sigma, j, m - 1\rangle \end{cases} \quad (20.55)$$

Questo ci porta a:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, j, m | \sigma, j, m \rangle &= \left(\frac{1}{\hbar C_+(j, m - 1)} \langle \alpha, j, m - 1 | \hat{J}_+^\dagger \right) \left(\frac{1}{\hbar C_+(j, m - 1)} \hat{J}_+ |\sigma, j, m - 1\rangle \right) = \\ &= \frac{1}{\hbar^2 (C_+(j, m - 1))^2} \langle \alpha, j, m - 1 | \hat{J}_- \hat{J}_+ |\sigma, j, m - 1\rangle \end{aligned} \quad (20.56)$$

Tuttavia:

$$\begin{aligned} \hat{J}_- \hat{J}_+ |\sigma, j, m - 1\rangle &= \hbar C_+(j, m - 1) \hat{J}_- |\sigma, j, m\rangle = \\ &= \hbar^2 C_-(j, m) C_+(j, m - 1) |\sigma, j, m\rangle = \\ &= \hbar^2 (C_+(j, m - 1))^2 |\sigma, j, m\rangle \end{aligned} \quad (20.57)$$

dove abbiamo usato che:

$$C_-(j, m) = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} = \sqrt{(j-(m-1))(j+(m-1)+1)} = C_+(j, m-1) \quad (20.58)$$

Troviamo dunque:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, j, m | \sigma, j, m \rangle &= \frac{1}{\hbar^2 (C_+(j, m-1))^2} \langle \alpha, j, m-1 | \hat{J}_- \hat{J}_+ | \sigma, j, m-1 \rangle = \\ &= \langle \alpha, j, m-1 | \sigma, j, m-1 \rangle \end{aligned} \quad (20.59)$$

Chiaramente questo continua ad essere vero per induzione e dunque troviamo che vale anche:

$$\langle \alpha, j, m | \sigma, j, m \rangle = \langle \alpha, j, j | \sigma, j, j \rangle \quad (20.60)$$

Questo ci permette di fare infine l'identificazione:

$$\frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha, j | \hat{T}^{(k)} | \alpha', j' \rangle \equiv \langle \alpha, j, j | \sigma, j, j \rangle \quad (20.61)$$

dove la dipendenza da \hat{T}, α', j', k è contenuta in σ , come già detto.

Questo dimostra infine il Teorema di Wigner-Eckart:

$$\langle \alpha, j, m | \hat{T}_q^{(k)} | \alpha', j', m' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha, j | \hat{T}^{(k)} | \alpha', j' \rangle c_{j'm'kq}^{jm} \quad (20.62)$$

□

20.5.3 Operatori Scalari e Vettoriali

Il Teorema di Wigner-Eckart ha particolari conseguenze nel caso di operatori scalari ($k=0$) e vettoriali ($k=1$).

Nel primo caso:

$$\langle \alpha, j, m | \hat{S} | \alpha', j', m' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha, j | \hat{S} | \alpha', j' \rangle c_{j'm'00}^{jm} \quad (20.63)$$

In questo caso le regole di selezione prendono la forma

$$m = m' \quad j = j' \quad (20.64)$$

da cui:

$$\langle \alpha, j, m | \hat{S} | \alpha', j', m' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha, j | \hat{S} | \alpha', j' \rangle \delta_{mm'} \delta_{jj'} \quad (20.65)$$

Nel secondo caso invece:

$$\langle \alpha, j, m | \hat{V}_q | \alpha', j', m' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha, j | \hat{V}_q | \alpha', j' \rangle c_{j'm'1q}^{jm} \quad (20.66)$$

con le regole di selezione:

$$\begin{cases} 0, \pm 1 = m - m' \\ |j - j'| \leq 1 \leq j + j' \end{cases} \iff \begin{cases} \Delta m = 0, \pm 1 \\ \Delta j = \pm 1 \quad j + j \geq 1 \end{cases} \quad (20.67)$$

La condizione ulteriore su Δj serve solo a proibire la transizione $j=0 \rightarrow j'=0$.

20.6 Teorema di Proiezione

Gli operatori vettoriali sono i primi operatori tensoriali non banali ma godono di un utile proprietà che permette di calcolare facilmente gli elementi di matrici e in particolare esplicitare l'elemento di matrice ridotto. Questo è limitato al caso $j' = j$. Questo ci permette di usare i coefficiente CG "massimali"¹:

$$c_{jj10}^{jj} = \langle jj; 10 | jj \rangle = \frac{j}{\sqrt{j(j+1)}} = \sqrt{\frac{j}{j+1}} \quad (20.68)$$

Più precisamente, dimostriamo adesso il seguente teorema.

¹<https://w.wiki/rEH>

Teorema 9 (Teorema di Proiezione). *Sia un operatore vettoriale $\hat{\mathbf{V}}$, allora:*

$$\langle \alpha, j, m | V_q | \alpha', j, m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j, j | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, j \rangle}{\hbar j(j+1)} \langle j, m | \hat{J}_q | j, m' \rangle \quad (20.69)$$

Inoltre:

$$\langle \alpha, j | |\hat{\mathbf{V}}| | \alpha', j \rangle = \frac{\langle \alpha, j, j | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, j \rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1)}} \quad (20.70)$$

Dimostrazione. La dimostrazione si basa sul Teorema di Wigner-Eckart e in particolare il fattore geometrico comune di operatori scalari e vettoriali (coefficienti CG). Siccome vogliamo ricondurci al prodotto scalare iniziamo col scrivere questo in componenti sferiche:

$$\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} = J_z V_z + J_y V_y + J_x V_x = J_0 V_0 - J_{+1} V_{-1} - J_{-1} V_{+1} \quad (20.71)$$

dove $J_{\pm} = \sqrt{2} J_{\pm 1}$. Troviamo dunque immediatamente gli elementi di matrice di $\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}}$:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, j, m | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, m \rangle &= \langle \alpha, j, m | J_0 V_0 - J_{+1} V_{-1} - J_{-1} V_{+1} | \alpha', j, m \rangle = \\ &= m \hbar \langle \alpha, j, m | V_0 | \alpha', j, m \rangle - \hbar \sqrt{2} C_{-}(j, m) \langle \alpha, j, m-1 | V_{-1} | \alpha', j, m \rangle + \\ &- \hbar \sqrt{2} C_{+}(j, m) \langle \alpha, j, m+1 | V_{+1} | \alpha', j, m \rangle = \\ &= \langle \alpha, j | |\hat{\mathbf{V}}| | \alpha', j \rangle c_{jm} \end{aligned} \quad (20.72)$$

dove c_{jm} sono combinazioni lineari di certi coefficienti CG, che sono indipendenti da $\hat{\mathbf{V}}$. Analogamente per J^2 , ossia per $\hat{\mathbf{V}} = \hat{\mathbf{J}}$:

$$\langle \alpha, j, m | \hat{J}^2 | \alpha, j, m \rangle = \langle \alpha, j | |\hat{\mathbf{J}}| | \alpha, j \rangle c_{jm} \quad (20.73)$$

Per le componenti degli operatori vettoriali si trova direttamente dal Teorema di Wigner-Eckart:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, j, m | \hat{V}_q | \alpha', j, m' \rangle &= \langle \alpha, j | |\hat{\mathbf{V}}| | \alpha', j \rangle \bar{c}_{jm'1q}^{jm} \\ \langle \alpha, j, m | \hat{J}_q | \alpha, j, m' \rangle &= \langle \alpha, j | |\hat{\mathbf{L}}| | \alpha, j \rangle \bar{c}_{jm'1q}^{jm} \end{aligned} \quad (20.74)$$

dove i \bar{c} sono i coefficienti CG divisi per $\sqrt{2j+1}$. In questo facendo il rapporto tra gli elementi di matrice delle componenti e dei prodotti scalari troviamo:

$$\frac{\langle \alpha, j, m | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, m \rangle}{\langle \alpha, j, m | \hat{J}^2 | \alpha, j, m \rangle} = \frac{\langle \alpha, j | |\hat{\mathbf{V}}| | \alpha', j \rangle}{\langle \alpha, j | |\hat{\mathbf{J}}| | \alpha, j \rangle} = \frac{\langle \alpha, j, m | \hat{V}_q | \alpha', j, m' \rangle}{\langle \alpha, j, m | \hat{J}_q | \alpha, j, m' \rangle} \quad (20.75)$$

Siccome \hat{J}^2, \hat{J}_q agiscono solo sulla parte angolare allora:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, j, m | \hat{J}^2 | \alpha, j, m \rangle &= \langle j, m | \hat{J}^2 | j, m \rangle = \hbar^2 j(j+1) \\ \langle \alpha, j, m | \hat{J}_q | \alpha, j, m' \rangle &= \langle j, m | \hat{J}_q | j, m' \rangle \end{aligned} \quad (20.76)$$

Otteniamo dunque:

$$\langle \alpha, j, m | \hat{V}_q | \alpha', j, m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j, m | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j, m | \hat{J}_q | j, m' \rangle \quad (20.77)$$

Usando poi che un operatore scalare commuta con gli operatori gradino (il cui prodotto *normalizzato* è uguale all'identità per j fissato) troviamo la **prima parte del teorema**, quella di valore pratico:

$$\langle \alpha, j, m | \hat{V}_q | \alpha', j, m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j, j | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, j \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j, m | \hat{J}_q | j, m' \rangle \quad (20.78)$$

Per ricondurci all'elemento di matrice ridotto dobbiamo esplicitare l'elemento di matrice di \hat{J}_q tramite Wigner-Eckart:

$$\langle j, m | \hat{J}_q | j, m' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j | |\hat{\mathbf{J}}| | j \rangle c_{jm'1q}^{jm} \quad (20.79)$$

Calcoliamo l'elemento di matrice ridotto di $\hat{\mathbf{J}}$ per $m = m' = j$ e $q = z$, dove usiamo l'espressione dei coefficienti CG "massimali":

$$\begin{aligned}\langle j, j | J_z | j, j \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j | | \hat{\mathbf{J}} | | j \rangle c_{jj10}^{jj} \\ \hbar j &= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j | | \hat{\mathbf{J}} | | j \rangle \sqrt{\frac{j}{j+1}} \\ \langle j | | \hat{\mathbf{J}} | | j \rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1)(2j+1)}\end{aligned}\quad (20.80)$$

Troviamo infine:

$$\begin{aligned}\langle \alpha, j, m | \hat{V}_q | \alpha', j, m' \rangle &= \frac{\langle \alpha, j, j | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, j \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \hbar \sqrt{j(j+1)(2j+1)} \frac{1}{\sqrt{2j+1}} c_{jm'1q}^{jm} = \\ &= \frac{\langle \alpha, j, j | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, j \rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1)}} c_{jm'1q}^{jm}\end{aligned}\quad (20.81)$$

che equivale a:

$$\langle \alpha, j | | \hat{\mathbf{V}} | | \alpha', j \rangle = \frac{\langle \alpha, j, j | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, j \rangle}{\hbar \sqrt{j(j+1)}} \quad (20.82)$$

□

Il teorema può essere scritto anche in una maniera più intuitiva, ma meno utile praticamente. Per fare questo notiamo che per le regole di selezione per gli operatori scalari:

$$\langle \alpha, j, m, | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j', m' \rangle \propto \delta_{jj'} \delta_{mm'} \Rightarrow \langle \alpha, j, m, | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j', m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \langle \alpha, j, m, | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j', m' \rangle \quad (20.83)$$

Pertanto, usando anche che gli operatori scalari commutano con il momento angolare

$$\begin{aligned}\langle j, m | \hat{J}_q | j, m' \rangle \langle \alpha, j, m' | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, m' \rangle &= \sum_{j'', m''} \delta_{jj''} \delta_{m'm''} \langle j, m | \hat{J}_q | j'', m'' \rangle \langle \alpha, j'', m'' | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, m' \rangle = \\ &= \langle \alpha, j, m | \hat{J}_q \left(\sum_{j'', m''} |\alpha, j'', m'' \rangle \langle \alpha, j'', m''| \right) \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, m' \rangle = \\ &= \langle \alpha, j, m | \hat{J}_q (\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) | \alpha', j, m' \rangle = \\ &= \langle \alpha, j, m | (\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}}) \hat{J}_q | \alpha', j, m' \rangle\end{aligned}\quad (20.84)$$

Se poi ri-esprimiamo $\hbar^2 j(j+1)$ come elemento di matrice di \hat{J}^2 possiamo fare lo stesso per l'operatore $1/\hat{J}^2$ (che agisce in maniera naturale sugli autostati di \hat{J}^2):

$$\frac{\langle \alpha, j, j | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, j \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j, m | \hat{J}_q | j, m' \rangle = \frac{\langle \alpha, j, m' | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, m' \rangle}{\langle j, m' | \hat{J}^2 | j, m' \rangle} \langle j, m | \hat{J}_q | j, m' \rangle = \left\langle \alpha, j, m \left| \frac{\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}}}{\hat{J}^2} \hat{J}_q \right| \alpha', j, m' \right\rangle \quad (20.85)$$

Pertanto in forma vettoriale il Teorema di Proiezione prende la forma:

$$\boxed{\langle \alpha, j, m | \hat{\mathbf{V}} | \alpha', j, m' \rangle = \left\langle \alpha, j, m \left| \left(\frac{\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}}}{\hat{J}^2} \right) \hat{\mathbf{J}} \right| \alpha', j, m' \right\rangle} \quad (20.86)$$

Pertanto in questo forma è chiaro che "proiezione" si riferisce al fatto che l'elemento di matrice di un operatore vettoriale (a $j = j'$) è pari a quello della proiezione sul momento angolare.

Questo risultato può essere inteso dunque come il risultato del fatto che (classicamente) in una media sul momento angolare tutte le componenti non parallele al momento angolare si cancellano, così che sopravvive solo la proiezione su questo.

Parte VII

Sistemi a due Livelli

Capitolo 21

Esempi di Sistemi a due Livelli

21.1 Spin in un Campo Magnetico Costante

Consideriamo l'interazione di una particella non relativistica di carica q e spin s con un campo magnetico classico. A questa particella è associato un momento di dipolo magnetico dato da (unità SI):

$$\vec{\mu} = g \frac{q}{2m} \hat{\vec{S}} = \gamma \hat{\vec{S}} \quad (21.1)$$

In particolare siamo interessati solo ai gradi di libertà relativi allo spin:

$$\hat{\mathcal{H}}_S = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B} \quad (21.2)$$

Nell'ipotesi $\vec{B} = B\hat{e}_z$ troviamo:

$$\hat{\mathcal{H}}_S = -\gamma B \hat{S}_z \quad (21.3)$$

da cui l'evolutore temporale:

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_S t\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \gamma B \hat{S}_z t\right) \quad (21.4)$$

Siccome $\hat{\mathcal{H}}_S$ è proporzionale ad \hat{S}_z allora è diagonale nella sua base $|\pm\rangle$:

$$\hat{S}_z |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \Rightarrow \hat{\mathcal{H}}_S |\pm\rangle = \mp \gamma B \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \quad (21.5)$$

Ricordiamo adesso la decomposizione di un autostato di spin lungo $+\hat{n}$ negli autostati $|\pm\rangle$:

$$|+\rangle_n = |\hat{n}, +\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |-\rangle \quad \cos \theta = \hat{n} \cdot \hat{e}_z, \sin \phi = \hat{n} \cdot \hat{e}_x \quad (21.6)$$

Supponiamo che all'istante iniziale il sistema si trovi in uno stato di spin lungo \hat{n}_0 :

$$|\psi(0)\rangle = \cos \frac{\theta_0}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi_0} |-\rangle \quad (21.7)$$

Applicando l'evolutore temporale troviamo:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_S t\right) |\psi(0)\rangle = \cos \frac{\theta_0}{2} \exp(i\gamma B t/2) |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi_0} \exp(-i\gamma B t/2) |-\rangle = \\ &= e^{i\gamma B t/2} \left[\cos \frac{\theta_0}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi_0} \exp(-i\gamma B t) |-\rangle \right] = \\ &= e^{i\gamma B t/2} \left[\cos \frac{\theta_0}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta_0}{2} e^{i\phi(t)} |-\rangle \right] = \\ &= e^{i\gamma B t/2} |\hat{n}(t), +\rangle \end{aligned} \quad (21.8)$$

dove:

$$\phi(t) = \phi_0 - \gamma B t = \phi + \omega t \quad \hat{n}(t) = R(\omega t \hat{e}_z) \hat{n}_0 \quad (21.9)$$

Troviamo dunque che uno spin in un campo magnetico costante ruota con velocità angolare $\omega = -\gamma B$. Questo è analogo al caso classico, ma con diversa origine della frequenza di Larmor responsabile per la rotazione di un momento magnetico.

$$\omega_L = -\gamma B \quad (21.10)$$

In generale troveremo:

$$\vec{\omega}_L = -\gamma \vec{B} \quad \hat{\mathcal{H}}_S = \vec{\omega}_L \cdot \vec{S} \quad U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega}_L \cdot \vec{S} t\right) \quad (21.11)$$

Pertanto in generale lo spin ruoterà attorno ad una qualunque direzione (con variazione anche di θ).

21.2 Generico Sistema a due Livelli

Chiamiamo **sistema a due livelli** un sistema quantistico il cui spazio di Hilbert ha dimensione 2. Possiamo dunque individuare una base $|1\rangle, |2\rangle$ e un'hamiltoniana data da una matrice hermitiana 2×2 generica. Questa può essere scritta come combinazione lineare delle matrici di Pauli (più l'identità):

$$\hat{\mathcal{H}} = g_0 \mathbb{1} + g_1 \sigma_1 + g_2 \sigma_2 = \vec{g}_0 \mathbb{1} + \vec{g} \cdot \vec{\sigma} = g_0 \mathbb{1} + g \hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma} \quad (21.12)$$

con $g = \sqrt{g_1^2 + g_2^2 + g_3^2}$.

Siccome le matrici di Pauli sono idempotenti $\sigma_i^2 = 1$ lo è anche una loro combinazione lineare normalizzata:

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma})^2 &= \sum_{ij} n_i \sigma_i n_j \sigma_j = \sum_{ij} n_i n_j \sigma_i \sigma_j = \sum_{ij} n_i n_j (\delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k) = \\ &= \sum_{ij} n_i n_j (\delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k) = \sum_i n_i^2 + i \left(\sum_{ij} n_i n_j \varepsilon_{ijk} \right) \sigma_k = \\ &= \sum_i n_i^2 = 1 \end{aligned} \quad (21.13)$$

Pertanto anche gli operatori $\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma}$ (con $\hat{\mathbf{n}}$ normalizzato) hanno autovalori ± 1 sui rispettivi autostati:

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma}) |\psi\rangle &= \lambda |\psi\rangle \\ (\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma})^2 |\psi\rangle &= \lambda (\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma}) |\psi\rangle \\ |\psi\rangle &= \lambda (\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma}) |\psi\rangle \\ |\psi\rangle &= \lambda^2 |\psi\rangle \\ \lambda^2 &= 1 \\ \lambda &= \pm 1 \end{aligned} \quad (21.14)$$

Poniamo dunque:

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{\sigma} |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle = \pm |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle \quad (21.15)$$

Pertanto riusciamo a trovare facilmente autostati e autovalori di $\hat{\mathcal{H}}$ per un generico sistema a due livelli:

$$\hat{\mathcal{H}} |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle = (g_0 \pm g) |\hat{\mathbf{n}}, \pm\rangle \quad (21.16)$$

Equivalentemente, in termini di **spin fittizio**:

$$\hat{\mathcal{H}} = g_0 \mathbb{1} + \frac{2}{\hbar} g \hat{\mathbf{n}} \cdot \vec{S} \quad (21.17)$$

con velocità angolare di precessione:

$$\vec{\omega}_L = \frac{2}{\hbar} \vec{g} \quad (21.18)$$

21.3 MASER

21.3.1 Molecola di Ammoniaca

Un tipico sistema a due livelli è l'ammoniaca NH_3 . Per simmetria questa si pone in una struttura a piramide, con l'idrogeno che fa da base e l'azoto da vertice. Siccome il sistema è invariante per inversione della posizione dell'azoto allora questo si può immaginare immerso in un potenziale a doppia buca sferica. Se le buche sono infinitamente lontane allora il livello fondamentale è doppiamente degenere nei due livelli fondamentali $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ delle due buche:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = E_0 \mathbb{1} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} \quad (21.19)$$

Siccome la distanza tra le buche è finita allora vi è un accoppiamento e in particolare un'energia di interazione tra i due livelli. Questo risulta nella seguente hamiltoniana:

$$\hat{\mathcal{H}} = E_0 \mathbb{1} - \Delta \sigma_1 = \begin{pmatrix} E_0 & -\Delta \\ -\Delta & E_0 \end{pmatrix} \quad \vec{g} = (-\Delta, 0, 0) \quad (21.20)$$

Pertanto questa ha autovalori:

$$E = E_0 \pm \Delta \quad (21.21)$$

Si trovano poi lo stato fondamentale (G) e lo stato eccitato (E) per combinazione rispettivamente simmetrica e antisimmetrica:

$$|G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad |E\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \quad (21.22)$$

Se il sistema sta inizialmente nello stato $|\uparrow\rangle$ allora troviamo che vi è un'oscillazione tra i due livelli $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ con una certa frequenza:

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|G\rangle + |E\rangle) \\ |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_0 - \Delta)t\right) |G\rangle + \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_0 + \Delta)t\right) |E\rangle \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_0 t/\hbar} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta t\right) |G\rangle + \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t\right) |E\rangle \right] = \\ &= \frac{1}{2} e^{-iE_0 t/\hbar} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta t\right) (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) + \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta t\right) (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \right] = \\ &= e^{-iE_0 t/\hbar} \left[\cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) |\uparrow\rangle + i \sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) |\downarrow\rangle \right] \end{aligned} \quad (21.23)$$

Rispetto allo spin fittizio:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_0 t/\hbar} \left[\cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) |\uparrow\rangle + \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) e^{i\pi/2} |\downarrow\rangle \right] = e^{-iE_0 t/\hbar} |\hat{\mathbf{n}}(t), +\rangle \quad \hat{\mathbf{n}}(t) = R(\omega t \hat{\mathbf{e}}_x) \hat{\mathbf{e}}_z \quad (21.24)$$

come già ci aspettavamo da:

$$\vec{\omega}_L = \frac{2}{\hbar} \vec{g} = -\frac{2}{\hbar} \Delta \hat{\mathbf{e}}_x = -\omega \hat{\mathbf{e}}_x \quad (21.25)$$

21.3.2 Sistema a due Livelli con Dipolo Elettrico

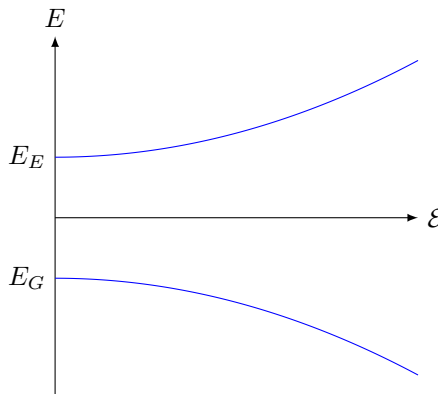
Questo sistema diventa particolarmente interessante quando l'inseriamo in un campo elettrico. In questo caso infatti vi è interazione dovuta al momento di dipolo elettrico con il campo elettrico, che è diretto verso l'alto o verso il basso a seconda che l'azoto sia nel vertice di sopra o di sotto. Equivalentemente lo spin fittizio è $|\uparrow\rangle$ o $|\downarrow\rangle$:

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{\mathbf{E}} \Rightarrow \hat{\mathcal{H}} = E_0 \mathbb{1} - \Delta \sigma_1 + \mu \mathcal{E} \sigma_3 = \begin{pmatrix} E_0 + \mu \mathcal{E} & -\Delta \\ -\Delta & E_0 - \mu \mathcal{E} \end{pmatrix} \quad (21.26)$$

da cui gli autovalori esatti e in particolare nell'approssimazione $\mu \mathcal{E} \ll \Delta$ (campo di piccola intensità o piccolo dipolo elettrico):

$$E_{G,E} = E_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + \mu^2 \mathcal{E}^2} \approx E_0 \pm \left(\Delta + \frac{1}{2} \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2}{\Delta} \right) \quad (21.27)$$

Rispetto al campo elettrico troviamo dunque i seguenti andamenti dei due livelli energetici più bassi.



Notiamo dunque che il campo magnetico aumenta la differenza tra i due, ossia l'energia di stato fondamentale diminuisce all'aumentare di \mathcal{E} e l'energia di stato eccitato aumenta.

Questo fenomeno permette la selezione spaziale di particelle in stati eccitati rispetto a quelle in stati fondamentali. Immaginiamo infatti di mandare un gas di ammoniaca in una regione di spazio con campo elettrico non uniforme. Per minimizzare l'energia, le molecole di ammoniaca nello stato eccitato andranno nelle zone dove il campo è minimo, mentre le molecole nello stato fondamentale andranno nelle zone dove il campo è massimo. Questo ad esempio avviene mandando un fascio di ammoniaca attraverso un campo, che devia diversamente i due tipi di molecole e permette una selezione spaziale del gas. Dopo questa selezione possiamo l'hamiltoniana del sistema torna ad essere quella libera, che nella base $|E\rangle, |G\rangle$ è data da:

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} E_0 + \Delta & 0 \\ 0 & E_0 - \Delta \end{pmatrix} \quad (21.28)$$

Usando questo gas di ammoniaca in stati eccitati vogliamo produrre radiazione elettromagnetica ad una specifica frequenza tramite l'emissione spontanea, pari a quella di Bohr dei due livelli:

$$\omega_0 = \frac{E_E - E_G}{\hbar} = \frac{2\Delta}{\hbar} \quad (21.29)$$

Questo si può ottenere in una cavità risonante applicando un campo elettrico variante nel tempo $\mathcal{E}(t)$. In questo modo l'hamiltoniana (sempre nella base $|E\rangle, |G\rangle$) diventa:

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \begin{pmatrix} E_0 + \Delta & \mu\mathcal{E}(t) \\ \mu\mathcal{E}(t) & E_0 - \Delta \end{pmatrix} \quad (21.30)$$

Per semplicità poniamo $E_0 = 0$, che non cambia la dinamica del sistema:

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \begin{pmatrix} \Delta & \mu\mathcal{E}(t) \\ \mu\mathcal{E}(t) & -\Delta \end{pmatrix} \quad (21.31)$$

Vogliamo adesso calcolare la legge di evoluzione dello stato eccitato in modo da prendere la radiazione quando è massima la probabilità di transizione allo stato fondamentale.

Per risolvere questo problema ridefiniamo i coefficienti dello stato generico $\psi(t)$ nella base $|E\rangle, |G\rangle$:

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} C_E(t) \\ C_G(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t/2} \beta_E(t) \\ e^{-i\omega_0 t/2} \beta_G(t) \end{pmatrix} \quad (21.32)$$

Inseriamo nell'equazione di Schrodinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = \hat{\mathcal{H}}(t) \psi(t) \iff i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \beta_E(t) \\ \beta_G(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega_0 t} \mu\mathcal{E}(t) \\ e^{-i\omega_0 t} \mu\mathcal{E}(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_E(t) \\ \beta_G(t) \end{pmatrix} \quad (21.33)$$

Consideriamo il caso di un'onda piana a frequenza ω_0 , ossia in condizioni di risonanza:

$$\mathcal{E}(t) = 2\mathcal{E}_0 \cos(\omega_0 t) = \mathcal{E}_0 (e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}) \quad (21.34)$$

In questo modo le equazioni del moto diventano:

$$\begin{cases} i\dot{\beta}_E(t) = \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar} (1 + e^{2i\omega_0 t}) \beta_G(t) \\ i\dot{\beta}_G(t) = \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar} (1 + e^{-2i\omega_0 t}) \beta_E(t) \end{cases} \quad (21.35)$$

Il sistema può essere risolto esattamente ma ci limitiamo per semplicità all'ipotesi di debole accoppiamento $\mu\mathcal{E}_0 \ll \Delta \propto \omega_0$:

$$\begin{cases} i\dot{\beta}_E(t) = \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar} \beta_G(t) \\ i\dot{\beta}_G(t) = \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar} \beta_E(t) \end{cases} \quad (21.36)$$

Facendo la derivata possiamo disaccoppiare le equazioni e renderle a coefficienti reali:

$$\begin{cases} \ddot{\beta}_E(t) = -\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)^2 \beta_E(t) \\ \ddot{\beta}_G(t) = -\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)^2 \beta_G(t) \end{cases} \quad (21.37)$$

Con condizione iniziale $\beta_E(0) = 1, \beta_G(0) = 0$ (da cui $\dot{\beta}_E(0) = 0, \dot{\beta}_G(0) = -i\mu_0\mathcal{E}_0/\hbar$):

$$\beta_E(t) = \cos\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right) \quad \beta_G(t) = -i\sin\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right) \quad (21.38)$$

Pertanto la probabilità di transizione oscilla armonicamente:

$$P_G(t) = |C_G(t)|^2 = |\beta_G(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right) \quad (21.39)$$

La probabilità di transizione vale 1 ai seguenti istanti, ai quali avviene l'amplificazione:

$$T_n \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar} = n\frac{\pi}{2} \Rightarrow T_n = \frac{\pi\hbar}{2\mu\mathcal{E}_0}n \quad n \in \mathbb{Z} \quad (21.40)$$

Siccome la frequenza di emissione sta nelle microonde allora questo fenomeno è detto **MASER**, ossia **Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation**.

21.4 Risonanza Magnetica Nucleare

Consideriamo adesso un fenomeno legato all'interazione tra un spin di $1/2$ (sistema a due livelli) e il campo magnetico. In particolare siamo interessati ad un campo magnetico con una componente fissa lungo $\hat{\mathbf{z}}$ e una ruotante attorno a $\hat{\mathbf{z}}$:

$$\vec{\mathbf{B}}(t) = B_0\hat{\mathbf{z}} + B_1(\hat{\mathbf{x}}\cos(\omega t) - \hat{\mathbf{y}}\sin(\omega t)) \quad (21.41)$$

Pertanto l'hamiltoniana è pure dipendente dal tempo:

$$\hat{\mathcal{H}}_S(t) = -\gamma\hat{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{B}}(t) = -\gamma[B_0\hat{S}_z + B_1(\hat{S}_x\cos(\omega t) - \hat{S}_y\sin(\omega t))] \quad (21.42)$$

Notiamo che l'hamiltoniana a due istanti diversi non commuta con se stessa (in generale) e dunque non esistono stati stazionari:

$$[\hat{\mathcal{H}}_S(t_1), \hat{\mathcal{H}}_S(t)] \neq 0 \quad (21.43)$$

In realtà cambiando sistema di riferimento possiamo perdere la dipendenza temporale. Chiaramente siccome il campo ruota attorno a $\hat{\mathbf{z}}$ possiamo pensare di fare una rotazione dipendente dal tempo con frequenza angolare ω attorno a $\hat{\mathbf{z}}$. Stavolta i sistemi non sono equivalenti in quanto vi è dipendenza dal tempo e dunque non possiamo assumere la solita legge di trasformazione (?):

$$\hat{\mathcal{H}}_R \neq U(t)\hat{\mathcal{H}}_S U^\dagger(t) \quad U(t) = \hat{\Omega}(R(\omega t\hat{\mathbf{z}})) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\omega t\hat{S}_z\right) \quad (21.44)$$

Possiamo però usare l'invarianza dell'equazione di Schrodinger:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_R(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}_R|\psi_R(t)\rangle \quad (21.45)$$

dove lo stato invece varia con la legge:

$$|\psi_R(t)\rangle = U(t)|\psi(t)\rangle \iff |\psi(t)\rangle = U^\dagger(t)|\psi_R(t)\rangle \quad (21.46)$$

con $|\psi(t)\rangle$ evoluzione dello stato con hamiltoniana $\hat{\mathcal{H}}_S$ nel sistema iniziale. Sostituiamo questa nell'equazione di Schrodinger per trovare $\hat{\mathcal{H}}_R$:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_R(t)\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[U(t)|\psi(t)\rangle\right] = i\hbar\partial_t U(t)|\psi(t)\rangle + i\hbar U(t)\partial_t|\psi(t)\rangle = \\ &= i\hbar(\partial_t)U^\dagger(t)|\psi_R(t)\rangle + U(t)\hat{\mathcal{H}}_S|\psi(t)\rangle = \\ &= i\hbar(\partial_t)U^\dagger(t)|\psi_R(t)\rangle + U(t)\hat{\mathcal{H}}_S U^\dagger(t)|\psi_R(t)\rangle \end{aligned} \quad (21.47)$$

Pertanto troviamo:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_R &= U(t)\hat{\mathcal{H}}_S U^\dagger(t) + i\hbar(\partial_t U)U^\dagger = \\ &= U(t)\hat{\mathcal{H}}_S U^\dagger(t) + i\hbar(\partial_t \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\omega t\hat{S}_z\right))\exp\left(\frac{i}{\hbar}\omega t\hat{S}_z\right) = \\ &= U(t)\hat{\mathcal{H}}_S U^\dagger(t) - i\hbar\frac{i}{\hbar}\omega\hat{S}_z \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\omega t\hat{S}_z\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\omega t\hat{S}_z\right) = \\ &= U(t)\hat{\mathcal{H}}_S U^\dagger(t) + \omega\hat{S}_z \end{aligned} \quad (21.48)$$

Verifichiamo adesso che $\hat{\mathcal{H}}_R$ è effettivamente indipendente dal tempo. Iniziamo con l'esplicitare l'azione degli operatori di rotazione su $\hat{\mathcal{H}}_S$:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_R &= \omega \hat{S}_z + U(t) \left[-\gamma \left(B_0 \hat{S}_z + B_1 (\hat{S}_x \cos(\omega t) - \hat{S}_y \sin(\omega t)) \right) \right] U^\dagger(t) = \\ &= \omega \hat{S}_z - \gamma B_0 \hat{S}_z - \gamma B_1 U(t) (\hat{S}_x \cos(\omega t) - \hat{S}_y \sin(\omega t)) U^\dagger(t)\end{aligned}\quad (21.49)$$

D'altra parte siccome:

$$\begin{cases} \hat{S}_x \cos(\omega t) - \hat{S}_y \sin(\omega t) = R_{1i}(\omega t \hat{\mathbf{z}}) \hat{S}_i \\ U^\dagger(t) \hat{S}_i U(t) = R_{ij}(\omega t \hat{\mathbf{z}}) \hat{S}_j \end{cases} \Rightarrow U(t) R_{1i}(\omega t \hat{\mathbf{z}}) \hat{S}_i U^\dagger(t) = R_{1i}(\omega t \hat{\mathbf{z}}) R_{ij}^{-1}(\omega t \hat{\mathbf{z}}) \hat{S}_j = \delta_{1j} \hat{S}_j = \hat{S}_x \quad (21.50)$$

Allora:

$$\hat{\mathcal{H}}_R = \omega \hat{S}_z - \gamma B_0 \hat{S}_z - \gamma B_1 \hat{S}_x = -\gamma B_0 \left(1 - \frac{\omega}{\gamma B_0} \right) \hat{S}_z - \gamma B_1 \hat{S}_x = -\gamma \left[B_0 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0} \right) \hat{S}_z + B_1 \hat{S}_x \right] \quad (21.51)$$

Pertanto l'hamiltoniana coincide con quella di uno spin che interagisce con un campo magnetico efficace, dato da quello ruotato:

$$\vec{\mathbf{B}}_R = B_1 \hat{\mathbf{x}} + B_0 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0} \right) \hat{\mathbf{z}} \Rightarrow \hat{\mathcal{H}}_R = -\gamma \hat{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{B}}_R \quad (21.52)$$

Nota l'hamiltoniana ruotata possiamo dunque tornare al sistema effettivo (usando $|\psi_R(0)\rangle = |\psi(0)\rangle$):

$$|\psi(t)\rangle = U^\dagger(t) |\psi_R(t)\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega t \hat{S}_z\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \gamma t \hat{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{B}}_R\right) |\psi(0)\rangle \quad (21.53)$$

da cui l'effettivo evolutore temporale nel sistema iniziale:

$$U(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega t \hat{S}_z\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \gamma t \hat{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{B}}_R\right) \quad (21.54)$$

Ci poniamo nel caso risonanza $\omega = \omega_0$, in modo che $\vec{\mathbf{B}}_R = B_1 \hat{\mathbf{x}}$, con stato iniziale di spin lungo $\hat{\mathbf{z}}$:

$$\begin{aligned}|\psi(0)\rangle = |\hat{\mathbf{z}}, +\rangle &\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega_0 t \hat{S}_z\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \gamma B_1 t \hat{S}_x\right) |\hat{\mathbf{z}}, +\rangle = \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega_0 t \hat{S}_z\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \omega_1 t \hat{S}_x\right) |\hat{\mathbf{z}}, +\rangle\end{aligned}\quad (21.55)$$

Pertanto il primo operatore compie una rotazione attorno all'asse x con frequenza $\omega_1 = \gamma B_1$ e il secondo compie una rotazione attorno all'asse z con frequenza $\omega_0 = \gamma B_0$. Nel caso $B_1 \ll B_0$ in particolare la rotazione attorno all'asse z è molto più veloce rispetto a quella attorno all'asse x . Lo spin determina dunque una spirale con asse z che è percorsa dall'alto verso il basso tra spin \pm lungo $\hat{\mathbf{z}}$.

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.