

This is the peer reviewed version of the following article:

Lezioni di fisica classica e quantistica / Battaglia, Francesco. - STAMPA. - (1996), pp. 1-281.

CEDAM (Casa editrice Dott. Antonio Milani)

Terms of use:

The terms and conditions for the reuse of this version of the manuscript are specified in the publishing policy. For all terms of use and more information see the publisher's website.

20/05/2024 12:40

(Article begins on next page)

Lezioni di
FISICA CLASSICA E QUANTISTICA

Franco Battaglia

Università della Basilicata, Potenza

Thomas F. George

Washington State University, Pullman, USA

Emilio Gallicchio

Columbia University, New York, USA

Indice

Introduzione	v
I FISICA CLASSICA	1
1 Meccanica Newtoniana	5
2 Meccanica Lagrangiana	9
2.1 Equazioni di Eulero-Lagrange	9
2.2 Teoremi di conservazione	15
3 Meccanica Hamiltoniana	19
3.1 Equazioni di Hamilton	19
3.2 Teoremi di conservazione	22
3.3 Applicazioni	31
4 Trattazione Canonica dei Campi	39
5 Il Campo Elettromagnetico	43
5.1 Gauges	44
5.2 Il campo nel vuoto	47
5.3 Cariche nel campo	49
II FISICA QUANTISTICA	57
6 Formalismo Matematico	61
6.1 Spazi di Hilbert	61
6.2 Operatori lineari	69
6.3 Equazione agli autovalori	81
6.4 Osservabili	85
6.5 Funzioni di operatori	89
6.6 Prodotto tensoriale	92

7 Interpretazione Fisica	95
7.1 Interpretazione probabilistica	95
7.2 Trasformazioni unitarie	101
7.3 Descrizioni	105
7.4 Teoremi di conservazione	109
7.5 Rappresentazioni	116
7.6 Matrice densità	126
8 Sistemi Unidimensionali	131
9 Momento Angolare	147
9.1 Equazione agli autovalori	147
9.2 Momenti angolari orbitale e di spin	151
9.3 Composizione di momenti angolari	161
9.4 Operatori tensoriali	164
10 Sistemi a Molti Corpi	173
10.1 Degenerazione di scambio	173
10.2 Seconda quantizzazione	179
11 Il Campo Elettromagnetico	195
11.1 Fotoni	196
11.2 Cariche nel campo	208
III APPENDICE	223
A Relatività Ristretta	225
A.1 Cinematica	225
A.2 Dinamica	230
A.3 Equazione di Dirac	234
Indice Analitico	248

Introduzione

Abbiamo scritto questo libro consapevoli del fatto che un'ampia varietà di studenti di branche scientifiche (chimici, matematici, ingegneri elettronici,...) ha la necessità di avere non solo una comprensione delle nozioni della fisica di base, ma anche di alcuni aspetti avanzati della fisica moderna. A differenza degli studenti di fisica, quelli di chimica, matematica, etc., non seguono, di regola, corsi formali, a livello avanzato, di fisica classica o moderna. Piuttosto, essi apprendono le nozioni pertinenti a questi corsi mediante dirette applicazioni a problemi tipici del loro campo di interesse. Di conseguenza, la loro conoscenza, anche se ampia, manca spesso di organizzazione, almeno in termini dei principi di base.

Anche quando vengono loro offerti corsi formali, questi non vanno, di regola, in profondità a causa della necessità di vedere la teoria applicata nella pratica. E così, il formalismo di argomenti più avanzati, come la teoria dei sistemi a molti corpi, la teoria dei campi classici e quantistici, la teoria quantistica del campo elettromagnetico, la relatività, è, al più, accennato. Malgrado ciò, tutte queste teorie sono quotidianamente applicate da molti ricercatori che non sono stati addestrati nei dipartimenti di fisica, e appaiono frequentemente nella letteratura da essi consultata.

Lo scopo di questo libro è allora quello di presentare il formalismo matematico (la cui struttura e i cui fondamenti sono esaminati in dettaglio) di gran parte di quella fisica quantistica nonrelativistica (con enfasi sui principi fondamentali piuttosto che sulle applicazioni) necessaria a molti studenti non fisici. Naturalmente, anche gli studenti di fisica, che di solito sviluppano accuratamente, nei loro corsi avanzati di dottorato, molto del materiale del presente libro, potranno trarre giovamento leggendolo agli ultimi anni del corso di laurea o ai primi del dottorato.

Resistiamo alla tentazione di dichiarare che il libro sia autosufficiente, perché la verità di tale affermazione dipende dalla storia culturale dell'individuo. Tuttavia, in principio, non assumiamo altra conoscenza di fisica oltre quella connessa alle equazioni di Newton e di Maxwell, e nessuna conoscenza di matematica oltre quella necessaria per apprendere i prerequisiti di fisica appena detti. In particolare, siccome abbiamo adottato un punto di vista essenzialmente deduttivo (evitando, quindi, la presentazione e discussione dei fatti sperimentali), assumiamo che il lettore sia stato già esposto alla fenomenologia di base. In questo schema deduttivo, le assunzioni di base introdotte non devono però essere prese come assiomi matematici dai quali tutto può essere dedotto: un approccio assiomatico di questo tipo non crediamo sia possibile in fisica. Comunque molto può essere dedotto da poche assunzioni di base, e noi cercheremo di trarre da esse il massimo possibile.

Il libro è stato scritto per essere letto in sequenza. Il suo valore pedagogico (che, alla fine, deve essere giudicato dal lettore) consiste nel cominciare lentamente, spesso riderivando alcune nozioni note, e nel procedere sempre più

velocemente a mano a mano che si progredisce. Alla fine del libro, il lettore, avendo cominciato con lo studio dell'equazione di Newton $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, sarà stato esposto alle idee fondamentali di molte teorie avanzate.

Un'altro strumento pedagogico che abbiamo usato è quello di presentare ogni concetto separatamente, qualificandolo chiaramente come *definizione*, *teorema* o *commento*. Riteniamo molto importante distinguere in una teoria quel che si assume da quel che si può provare e di ridurre quello al minimo. La separazione di ogni concetto assegnandovi un numero ha il vantaggio di potersi riferire a piacere nel libro, cosa che noi facciamo il più possibile. Il lettore viene allora esposto ad ogni concetto parecchie volte: quando vi si imbatte per la prima volta e quando, successivamente, si fa riferimento a quel concetto nel resto del libro. Vi sono anche alcuni *esempi*, generalmente intesi a chiarire alcuni aspetti della teoria piuttosto che a presentare un'applicazione.

Suggeriamo che alla prima lettura di ogni capitolo vengano evitate le dimostrazioni ai teoremi, sebbene si debbano ben comprendere i loro enunciati, le definizioni e i commenti. Una volta così completato un capitolo, e prima di passare al successivo, il lettore è invitato a rileggerlo seguendo attentamente le dimostrazioni.

A questo punto, è necessaria una precisazione sui teoremi e sulle dimostrazioni. Questo non è un libro di matematica, e il livello di rigore che abbiamo scelto è quello che riteniamo sufficiente per fare da uno studente un ricercatore in grado di padroneggiare i fondamenti della teoria (se non vuole essere un semplice tecnico).

Il libro è diviso in due parti: *Fisica Classica* e *Fisica Quantistica*. La prima è indispensabile per almeno due ragioni: (i) in opportune condizioni, può essere usata nella ricerca attuale al posto della fisica quantistica, e (ii) prepara lo studente a una migliore comprensione della fisica moderna; infatti, uno degli obiettivi della prima parte è di preparare tutto il materiale per la successiva quantizzazione nella seconda parte. La teoria quantistica tradizionale spiega con tale successo una tale quantità di dati sperimentali, che poco dubbio può esistere sulla sua essenziale validità. Malgrado persistenti preoccupazioni con presunti paradossi e limitazioni, e sebbene alcuni problemi concettuali (che nascono quando si cerca di conciliare la relatività con la quantistica) rivelano che la teoria nonrelativistica è strutturalmente incompleta, il punto di vista della scuola di Copenaghen e la quantomeccanica non relativistica fan parte della vita quotidiana di molti ricercatori nelle scienze fisiche.

La struttura del libro è la seguente.

Capitolo 1: questo capitolo prepara la via ad una formulazione della meccanica classica invariante per trasformazioni di coordinate.

Capitolo 2: le equazioni di Eulero-Lagrange del moto sono derivate dal principio di Hamilton. Vengono sottolineati i vantaggi della formulazione Lagrangiana e le relazioni tra proprietà di simmetria e teoremi di conservazione.

Capitolo 3: vi si derivano le equazioni di Hamilton e, usando le parentesi di Poisson, si scrivono le equazioni del moto per le variabili dinamiche. Queste vengono viste come generatori di trasformazioni canoniche infinitesime e le relazioni tra proprietà di simmetria e teoremi di conservazione sono di nuovo

considerate. Gli argomenti presentati si collegheranno direttamente, come si vedrà, alla seconda parte di *Fisica Quantistica*, che può essere ottenuta (ma non si farà uso del principio di corrispondenza fino a quando non si tratterà la teoria quantistica dei campi) sostituendo le parentesi di Poisson tra variabili dinamiche con commutatori tra operatori, e vedendo le variabili dinamiche come generatori di trasformazioni unitarie infinitesime.

Capitolo 4: accenniamo qui alla formulazione variazionale della trattazione canonica dei campi classici. Riteniamo che sia importante offrire una (almeno elementare) descrizione della formulazione Lagrangiana e Hamiltoniana dei campi, sufficiente per comprendere come si possa realizzare la quantizzazione di un campo classico; l'importanza di ciò sarà chiara al momento in cui si presenterà la seconda quantizzazione e la quantizzazione del campo elettromagnetico. Con questo obiettivo in mente, e a titolo di esempio della formulazione canonica di un campo classico, consideriamo il campo di Schrödinger e il campo elettromagnetico, dedicando a quest'ultimo l'intero capitolo successivo.

Capitolo 5: si scrivono la Lagrangiana e l'Hamiltoniano del campo elettromagnetico nel vuoto e di una carica nel campo, completando così la prima parte dedicata alla *Fisica Classica*.

Capitolo 6: iniziamo la parte di *Fisica Quantistica* sviluppando il linguaggio matematico (col quale il lettore potrebbe non avere familiarità) necessario per capire la teoria quantistica. Siccome le nozioni matematiche presentate in questo capitolo devono essere, prima o poi, illustrate, noi preferiamo farlo prima, in modo che il lettore non sia interrotto mentre sta apprendendo la fisica, e in modo che vi possa tornare ogni volta lo ritenga necessario. Cominciando con la nozione primitiva di insieme, procediamo definendo strutture algebriche di crescente difficoltà: gruppoide, semigruppato, anello, corpo, spazio vettoriale, spazio prehilbertiano, spazio di Hilbert separabile, sottolineando che quanto vale per spazi di dimensione finita non vale necessariamente per spazi di dimensione infinita e, a titolo di esempio, vengono discussi gli spazi l^2 e L^2 . Quindi definiamo il concetto di operatore su spazi di Hilbert, distinguendo tra operatori regolari e singolari, limitati e non limitati. Anche ora si sottolineano le rilevanti differenze tra operatori definiti su spazi di dimensione finita e infinita, e si discute l'isomorfismo tra gli operatori del primo tipo e l'insieme delle matrici quadrate. Continuiamo trattando le proprietà dei tipi più importanti di operatori necessari nella teoria quantistica: gli operatori unitari e gli operatori Hermitiani. Quindi si definisce l'equazione agli autovalori per operatori lineari e se ne dà le proprietà e una prescrizione per risolverla per le classi di operatori unitari o Hermitiani. La nozione più importante è infine introdotta: quella di *osservabile*, unitamente con la sua risoluzione spettrale, e si distingue chiaramente tra autovettori appartenenti alla parte discreta e autovettori appartenenti alla parte continua dello spettro di un osservabile. Il capitolo si chiude con alcune nozioni sulle funzioni di operatori e sui prodotti tensoriali di spazi di Hilbert e di operatori lineari definiti su spazi di Hilbert.

Capitolo 7: sfruttiamo quel che si è appreso nel capitolo precedente per esporre il formalismo della teoria quantistica usando la teoria degli spazi di Hilbert e degli operatori lineari definiti su essi, adottando sin dall'inizio la no-

tazione, a questo punto familiare, di Dirac. Ciò evita l'inutile ripetizione che consegue dal presentare il più generale formalismo in termini di *bra* e *ket* solo dopo aver sviluppato la meccanica ondulatoria in termini esclusivamente di funzioni d'onda. Non seguiamo la tradizione di sforzarci di usare concetti di meccanica classica per spiegare i fatti della quantistica, come il cosiddetto principio di corrispondenza o la dualità onda-particella (sebbene questi concetti vengano indicati come conseguenza della teoria). L'idea di base è quindi quella di sviluppare la disciplina dai suoi postulati, da uno dei quali, il *postulato fondamentale*, enunciato all'inizio del capitolo, può essere dedotta una gran quantità di conseguenze. La più importante di esse è forse quella che stabilisce che un operatore che rappresenta una grandezza fisica deve essere un osservabile, nel senso definito nel capitolo 6. Sebbene il modo con cui noi deriviamo l'equazione di Schrödinger implica un Hamiltoniano totale indipendente dal tempo, la generalizzazione a quelle situazioni in cui forze esterne variano esplicitamente col tempo è immediata, poiché un'equazione del tipo di quella di Schrödinger, con un operatore energia dipendente dal tempo, viene discussa nel contesto della *descrizione di interazione* che (insieme alla *descrizione di Heisenberg*) viene presentata sin dall'inizio del capitolo, permettendo così l'introduzione dell'importante operatore di ordinamento temporale. Gli osservabili sono visti come generatori di trasformazioni unitarie infinitesime, e la relazione tra proprietà di simmetria e teoremi di conservazione vengono discusse e confrontate con lo stesso tipo di relazioni in meccanica classica. In particolare, il momento angolare è visto come generatore di rotazioni unitarie infinitesime, e le relazioni di commutazione tra le sue componenti sono viste essere una conseguenza della non commutatività delle rotazioni nello spazio ordinario. Si presenta quindi la teoria delle rappresentazioni, e le rappresentazioni delle coordinate e degli impulsi sono trattate sullo stesso piano, mentre l'uso dell'una o dell'altra risulta motivato esclusivamente dalla convenienza pratica. Scriviamo quindi l'Hamiltoniano per una particella in un potenziale e per una carica in un campo elettromagnetico nella gauge di Coulomb, e dimostriamo l'invarianza dell'equazione di Schrödinger per trasformazioni di gauge. Infine, definiamo l'operatore densità e precisiamo che la necessità di farne uso si ha non solo in meccanica statistica, ma anche nella descrizione di sistemi aperti.

Capitolo 8: in questo capitolo descriviamo alcune proprietà generali dell'equazione di Schrödinger unidimensionale, e siccome la quantomeccanica è più della (eccessivamente enfatizzata) dualità onda-particella presentata con la familiare matematica delle equazioni differenziali, l'oscillatore armonico lineare è risolto con metodi algebrici, il cui uso è spesso molto conveniente. Inoltre, il lettore familiarizza, già a questo stadio, con l'algebra degli operatori necessari per descrivere sistemi di molti bosoni. Si coglie infine l'occasione di mostrare che un operatore non commuta a tempi distinti neanche con sé stesso.

Capitolo 9: la presentazione qui offerta della teoria del momento angolare è più o meno standard. Si risolve l'equazione agli autovalori per gli operatori associati al momento angolare, si discutono i momenti angolari orbitale e di spin e si introduce il concetto di spinore. Il capitolo conclude con l'accoppiamento di due momenti angolari, il teorema di Wigner-Eckart e con un esempio sulle

matrici di rotazione.

Capitolo 10: Questo capitolo discute dettagliatamente il problema della degenerazione di scambio e mostra come l'intero spazio di Hilbert di un sistema di molte particelle identiche può essere ripartito in settori, ad uno solo dei quali gli stati dei sistemi fisici possono appartenere (regola di superselezione). Successivamente costruiamo, dal principio di corrispondenza, una procedura per quantizzare i campi classici. Il campo di Schrödinger classico, la cui descrizione canonica è stata data nel capitolo 4, viene quindi quantizzato, offrendo così una trattazione alternativa per i sistemi di molti bosoni identici. Si fa quindi vedere come l'analoga trattazione alternativa per sistemi di molti fermioni identici si possa ottenere alterando opportunamente le relazioni di commutazione canoniche. Sia per bosoni che per fermioni ci limitiamo al caso del campo libero, perché le interazioni sono meglio trattate con tecniche perturbative, che però vanno oltre gli scopi del presente libro.

Capitolo 11: in questo capitolo trattiamo la quantizzazione del campo elettromagnetico. Dopo una discussione sulle difficoltà che nascono quando si tenta di quantizzare il campo di Maxwell, mostriamo come le stesse possono essere superate limitandosi a sviluppare la procedura di quantizzazione nella gauge di Coulomb. (La costruzione di una teoria quantistica manifestamente covariante del campo elettromagnetico va oltre gli scopi del presente libro.) Infine, trattiamo l'interazione tra materia e radiazione, e mostriamo come l'emissione spontanea è una conseguenza della trattazione quantistica del campo elettromagnetico.

Appendice: sebbene lo scopo del libro sia quello di trattare solo la teoria non relativistica, riteniamo che alcuni elementi di relatività devono far parte del bagaglio culturale di ogni ricercatore nel campo della fisica moderna. Purtroppo, una trattazione completa degli strumenti rilevanti della relatività occuperebbe più spazio di quello programmato per questo libro. Tuttavia, abbiamo cercato di trattare almeno i punti cardine nell'appendice. Qui il ritmo è molto più sostenuto che nel resto del libro perché il materiale è presentato in modo conciso e si assume che il lettore sia già familiare con le trasformazioni di Lorentz e con l'invarianza delle equazioni di Maxwell per trasformazioni di Lorentz. Si introducono i concetti di *tempo proprio* e di *tetra-vettore*, si definiscono alcuni importanti tetra-vettori, come la tetra-velocità, la tetra-accelerazione, la tetra-forza e il tetra-momento, e si derivano, dalle equazioni del moto, la Lagrangiana e l'Hamiltoniano relativistico per una particella libera. Si discutono le difficoltà che sorgono quando si tenta di costruire un'equazione quantistico-relativistica per una singola particella, quale l'equazione di Klein-Gordon o l'equazione di Dirac. Infine, uno sviluppo in serie dell'equazione di Dirac mostra come sorgono le correzioni relativistiche negli Hamiltoniani dei sistemi atomici o molecolari.

Nel libro non vi sono esercizi come tali, né si troverà una dettagliata discussione dell'equazione differenziale di Schrödinger per potenziali più o meno standard. Esistono molti libri di meccanica quantistica, alcuni eccellenti, che colmano questa lacuna. Questo non è un libro di meccanica quantistica (abbiamo evitato di toccare argomenti importanti come, ad esempio, la teoria della misura), ma piuttosto è un libro che intende offrire sufficienti basi per compren-

dere in modo consapevole gran parte dei concetti di fisica moderna col linguaggio usato nella letteratura corrente di ricerca.

La notazione usata è abbastanza standard e non dovrebbe dare alcuna difficoltà al lettore. Così, i vettori sono indicati in grassetto, le loro componenti sono etichettate da indici in lettere latine ($j, k, \dots = 1, 2, 3$), i tetra-vettori sono indicati in caratteri normali e le loro componenti sono etichettate da lettere greche ($\mu, \nu, \dots = 1, 2, 3, 4$). La somma su indici ripetuti è, se non indicato diversamente, sempre sottintesa. Per esempio, per il tetra-vettore p scriviamo

$$p^2 = p \cdot p = p_\mu p_\mu = p_j p_j + p_4 p_4,$$

e per il vettore \mathbf{p} scriviamo

$$\mathbf{p}^2 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = p_j p_j,$$

con

$$\mathbf{p} = p \hat{p}.$$

(Non dovrebbe nascere confusione tra scalari e tetra-vettori, entrambi indicati in caratteri normali.)

Per evitare la ripetizione, nei calcoli, delle \hbar , poniamo, se non diversamente specificato, $\hbar = 1$, dove $2\pi\hbar$ è la costante di Planck. Con questa scelta per le unità, l'energia e la quantità di moto hanno, apparentemente le dimensioni inverse del tempo e della lunghezza, e il momento angolare è apparentemente adimensionato. Semplici considerazioni permettono di riscrivere le espressioni generali.

Parte I

FISICA CLASSICA

La fisica teorica classica distingue nell'Universo due elementi costituenti: la materia e la radiazione. La materia consiste di particelle localizzate il cui stato, definito dalle coordinate della loro posizione e velocità, evolve nel tempo secondo le leggi della Meccanica Newtoniana. Lo stato della radiazione ad ogni istante di tempo è dato invece dalle componenti, in ogni punto dello spazio, dei campi elettrico e magnetico (che soddisfano le equazioni di Maxwell). L'interazione fra materia e radiazione è descritta dalla forza di Lorentz.

Capitolo 1

Meccanica Newtoniana

L'equazione del moto per una particella classica di massa m , è l'equazione di Newton

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}(t), \quad (1.1)$$

dove \mathbf{F} , la forza che agisce sulla particella, è in generale una funzione nota della posizione \mathbf{r} , della velocità $\mathbf{v} \equiv \dot{\mathbf{r}}$ della particella ed, eventualmente, anche del tempo t . L'equazione (1.1) è un'equazione differenziale del secondo ordine ed ammette una ed una sola soluzione se sono note le condizioni iniziali, cioè la posizione $\mathbf{r}(0)$ e velocità $\mathbf{v}(0)$ della particella all'istante iniziale $t = 0$.

Esempio 1.1 (Oscillatore armonico) La forza che agisce su un oscillatore armonico che si muove su un segmento di linea retta è

$$\mathbf{F} = -kx\hat{x} \quad (1.2)$$

con $k > 0$. L'equazione del moto (1.1) è in questo caso

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) = 0, \quad (1.3)$$

dove

$$\omega^2 \equiv k/m. \quad (1.4)$$

L'equazione (1.3) è un'equazione differenziale lineare a coefficienti costanti la cui soluzione generale è

$$x(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t}, \quad (1.5)$$

dove c_1 e c_2 sono costanti arbitrarie e λ_1 e λ_2 sono le soluzioni dell'equazione algebrica associata all'equazione differenziale (1.3),

$$\lambda^2 + \omega^2 = 0. \quad (1.6)$$

Quindi,

$$\lambda = \pm i\omega \quad (1.7)$$

e

$$x(t) = c_1 e^{i\omega t} + c_2 e^{-i\omega t}, \quad (1.8)$$

che può essere riscritta

$$\begin{aligned} x(t) &= (c_1 + c_2) \cos(\omega t) + i(c_1 - c_2) \sin(\omega t) \\ &= A \cos \omega t + B \sin \omega t \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} &= C(\cos \phi \cos \omega t + \sin \phi \sin \omega t) \\ &= C \sin(\omega t + \phi), \end{aligned} \quad (1.10)$$

dove A , B , C e ϕ sono nuove costanti. Dall'espressione della soluzione (1.10) è evidente che la particella si muove con moto oscillatorio di frequenza

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (1.11)$$

Come vedremo nel prossimo esempio, l'equazione di Newton mantiene la forma (1.1) soltanto in coordinate Cartesiane.

Esempio 1.2 (Potenziale centrale) Consideriamo una particella che si muove su di un piano (il piano xy) e sulla quale agisce una forza centrale,

$$\mathbf{F} = f(r)\hat{r} \quad (1.12)$$

dove

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}. \quad (1.13)$$

Le equazioni del moto sono

$$m\ddot{x} = f(r)x/r \quad (1.14a)$$

$$m\ddot{y} = f(r)y/r. \quad (1.14b)$$

In termini delle coordinate polari (r, φ) possiamo scrivere

$$x = r \cos \varphi \quad y = r \sin \varphi \quad (1.15)$$

dalle quali si ricava

$$\ddot{x} = \ddot{r} \cos \varphi - 2\dot{r}\dot{\varphi} \sin \varphi - r\ddot{\varphi} \sin \varphi - r\dot{\varphi}^2 \cos \varphi \quad (1.16a)$$

$$\ddot{y} = \ddot{r} \sin \varphi + 2\dot{r}\dot{\varphi} \cos \varphi + r\ddot{\varphi} \cos \varphi - r\dot{\varphi}^2 \sin \varphi \quad (1.16b)$$

Sostituendo le equazioni (1.15) e (1.16) nelle equazioni (1.14) si ottengono due uguaglianze che, dopo aver moltiplicato la prima per $\cos \varphi$ e la seconda per $\sin \varphi$, possono essere sottratte e sommate membro a membro per ottenere le seguenti equazioni:

$$mr\ddot{\varphi} + 2m\dot{r}\dot{\varphi} = 0 \quad (1.17a)$$

e

$$m(\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2) - f(r) = 0 \quad (1.17b)$$

che sono più facili da risolvere delle equazioni (1.15). Infatti, l'equazione (1.17a) può essere riscritta

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dt}(mr^2\dot{\varphi}) = 0, \quad (1.18)$$

la cui soluzione è

$$mr^2\dot{\varphi} = \ell = \text{costante} \quad (1.19)$$

che, una volta inserita nell'eq. (1.17b), dà

$$m\ddot{r} = f(r) + \frac{\ell^2}{mr^3}. \quad (1.20)$$

La quantità ℓ , essendo una costante del moto, può essere determinata una volta per tutte dalle condizioni iniziali che si suppone essere note. L'equazione (1.20) è perciò un'equazione solamente in $r(t)$ ed è di solito risolta numericamente, a meno che $f(r)$ non abbia una forma che consenta una risoluzione analitica. La funzione $r(t)$ così determinata è poi inserita nell'equazione (1.19) per ottenere $\varphi(t)$.

Commento 1.1 Si noti che la quantità ℓ è il modulo del momento angolare della particella. Infatti, dalle equazioni (1.15) si ottiene

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\ell} &= \mathbf{r} \times \mathbf{p} = m\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ x & y & z \\ \dot{x} & \dot{y} & \dot{z} \end{vmatrix} = m\hat{z}(x\dot{y} - y\dot{x}) \\ &= \hat{z}mr^2\dot{\varphi} = \hat{z}\ell \end{aligned}$$

Questo dimostra che durante il moto in un potenziale centrale il momento angolare è costante. Come vedremo in seguito, ciò è vero in un qualsiasi sistema invariante rispetto a rotazioni nello spazio.

Commento 1.2 Osserviamo, infine, che l'equazione (1.20) non ha la forma $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}$. In particolare, passando alle coordinate polari, nell'equazione radiale (1.20) compare una forza addizionale che, nel nostro caso, è la forza centrifuga ℓ^2/mr^3 . Nel prossimo capitolo sarà presentata una formulazione della meccanica classica nella quale le equazioni del moto assumono una forma invariante rispetto a trasformazioni di coordinate.

Capitolo 2

Meccanica Lagrangiana

2.1 Equazioni di Eulero-Lagrange

Definizione 2.1 Il numero di variabili indipendenti necessarie per definire univocamente la posizione di un sistema fisico nello spazio tridimensionale ordinario è chiamato il *numero di gradi di libertà* del sistema. Tali variabili, che per un sistema con f gradi di libertà possono essere indicate q_1, q_2, \dots, q_f o, in modo collettivo, semplicemente q , sono chiamate *coordinate generalizzate*, e lo spazio Cartesiano da esse definito prende il nome di *spazio delle configurazioni*. Le derivate rispetto al tempo delle coordinate generalizzate sono chiamate *velocità generalizzate*. L'insieme delle coordinate e delle velocità generalizzate ad un dato istante definisce lo *stato* del sistema in quell'istante. La meccanica Lagrangiana si fonda sul seguente postulato.

Principio di Hamilton: *Per ogni sistema fisico esiste una quantità L funzione delle coordinate e delle velocità generalizzate ed, eventualmente, del tempo, chiamata la Lagrangiana del sistema, tale che l'integrale di azione*

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t), \quad (2.1)$$

calcolato lungo la traiettoria realmente percorsa dal sistema nell'intervallo di tempo fra t_1 e t_2 , è un estremo nello spazio di tutte le possibili traiettorie continue che connettono i punti $q(t_1)$ e $q(t_2)$.

Commento 2.1 L'integrale di azione non è una funzione ordinaria, bensì un funzionale, il cui dominio è l'insieme di tutte le possibili traiettorie continue nello spazio delle configurazioni che passano attraverso $q(t_1)$ e $q(t_2)$. Il problema di trovare un estremo di un funzionale è un problema di calcolo variazionale, e nel nostro caso consiste nel trovare $q(t)$ tale che

$$\delta S \equiv \int_{t_1}^{t_2} dt [L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) - L(q, \dot{q}, t)] = 0 \quad (2.2a)$$

$$\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0. \quad (2.2b)$$

Teorema 2.1 Una Lagrangiana che soddisfa il principio di Hamilton, soddisfa anche le equazioni di Eulero-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}. \quad (2.3)$$

Dimostrazione: dall'equazione (2.2a) si ha

$$\begin{aligned} 0 &= \delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q} \delta q \right] + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right] \delta q \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right] \delta q \end{aligned}$$

dove si è integrato per parti e fatto uso dell'equazione (2.2b). Siccome la variazione δq è arbitraria, la funzione integranda deve essere nulla; ciò prova le equazioni di Eulero-Lagrange.

Definizione 2.2 Una trasformazione di coordinate nello spazio delle configurazioni, cioè una trasformazione del tipo

$$Q_j = Q_j(q_1, \dots, q_f), \quad j = 1, \dots, f,$$

o, in notazione abbreviata,

$$Q = Q(q), \quad (2.4)$$

prende il nome di *trasformazione puntuale*.

Commento 2.2 Si noti che le equazioni (2.3) conservano la loro forma in ogni sistema di coordinate, cioè sono invarianti per trasformazioni puntuali. La ragione è la seguente: le equazioni di Eulero-Lagrange sono la conseguenza del fatto che l'integrale di azione è un estremo. Perciò, in due sistemi di coordinate diversi, benché ci siano due diverse definizioni, $q(t)$ e $Q(t)$, delle coordinate generalizzate e due diverse espressioni delle corrispondenti Lagrangiane, $L(q, \dot{q}, t)$ e $\Lambda(Q, \dot{Q}, t)$, sia L che Λ debbono soddisfare le equazioni di Eulero-Lagrange,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q} \quad \text{e} \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{Q}} = \frac{\partial \Lambda}{\partial Q}.$$

Commento 2.3 Un altro vantaggio della formulazione Lagrangiana è che può essere applicata alla descrizione di sistemi non meccanici come i campi. In seguito sarà mostrata la trattazione Lagrangiana di due importanti campi: il campo elettromagnetico ed il campo di materia di Schrödinger.

Commento 2.4 In meccanica Newtoniana la forma della forza $\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ definisce il sistema ed \mathbf{F} deve essere determinata da esperimenti da effettuare sul sistema stesso. In meccanica Lagrangiana, invece, è la forma di L che definisce il sistema ed L è determinata in modo tale che, una volta inserita nelle equazioni (2.3), riproduca equazioni del moto che siano consistenti con gli esperimenti. Benché non esistano metodi completamente generali per determinare L , nel seguito sarà mostrato che, per sistemi conservativi, L è la differenza fra l'energia cinetica e l'energia potenziale. In ogni caso, bisogna tener presente che non esiste un'unica Lagrangiana accettabile, come mostra il seguente teorema.

Teorema 2.2 *Due Lagrangiane che differiscono per la derivata totale di una funzione $f(q, t)$ delle coordinate generalizzate q e del tempo t soddisfano le medesime equazioni di Eulero-Lagrange.*

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{d}{dt} f(q, t) \right] &= \delta f [q(t_2), t_2] - \delta f [q(t_1), t_1] \\ &= \left[\frac{\partial f}{\partial q} \right]_{q(t_2), t_2} \delta q(t_2) - \left[\frac{\partial f}{\partial q} \right]_{q(t_1), t_1} \delta q(t_1). \end{aligned}$$

Dall'equazione (2.2b) è evidente che ogni termine è nullo. Perciò se

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) = 0,$$

si ha anche

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L'(q, \dot{q}, t) = 0,$$

dove

$$L' = L + \frac{d}{dt} f(q, t). \quad (2.5)$$

Teorema 2.3 *Il lavoro W_{12} , compiuto da una forza \mathbf{F} su una particella di massa m che si muove dal punto 1 al punto 2, è pari alla differenza delle energie cinetiche della particella ai punti 1 e 2.*

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} W_{12} &= \int_1^2 \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = m \int_{t_1}^{t_2} dt (\ddot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}}) = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{d}{dt} (\dot{\mathbf{r}}^2) \right] \\ &= \frac{m}{2} [\dot{\mathbf{r}}^2(t_2) - \dot{\mathbf{r}}^2(t_1)] = \frac{m}{2} \mathbf{v}_2^2 - \frac{m}{2} \mathbf{v}_1^2 = T_2 - T_1. \end{aligned}$$

Teorema 2.4 *Vale la seguente identità*

$$\epsilon_{jkl} \epsilon_{lpq} = \delta_{jp} \delta_{kq} - \delta_{jq} - \delta_{kp}, \quad (2.6)$$

dove δ_{jk} e ϵ_{jkl} sono, rispettivamente, i simboli di Kronecker e di Levi-Civita, definiti da

$$\delta_{jk} = \begin{cases} +1 & \text{se } j = k \\ 0 & \text{se } j \neq k \end{cases}$$

e

$$\epsilon_{jkl} = \begin{cases} +1 & \text{per una permutazione pari degli indici} \\ -1 & \text{per una permutazione dispari degli indici} \\ 0 & \text{in ogni altro caso} \end{cases}$$

essendo $(1, 2, 3)$ la permutazione fondamentale.

Teorema 2.5 *Il rotore di un gradiente è nullo.*

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla f &= \epsilon_{jkl} \partial_k (\nabla f)_l \hat{x}_j &= \hat{x}_j \epsilon_{jkl} \partial_k \partial_l f \\ &= \hat{x}_j \epsilon_{jkl} \partial_l \partial_k f \\ &= -\hat{x}_j \epsilon_{jlk} \partial_l \partial_k f \\ &= -\hat{x}_j \epsilon_{jkl} \partial_k \partial_l f. \end{aligned}$$

Dal confronto tra la prima e l'ultima riga si ha

$$\nabla \times \nabla f = 0. \quad (2.7)$$

Definizione 2.3 Una forza \mathbf{F} è definita conservativa se una delle seguenti condizioni è soddisfatta:

1. Il lavoro W_{12} compiuto da \mathbf{F} non dipende dal percorso che unisce i punti 1 e 2.
2. Per ogni percorso chiuso \mathcal{C} ,

$$\int_{\mathcal{C}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = 0. \quad (2.8)$$

3. Esiste una funzione scalare $V(\mathbf{r})$ delle coordinate di posizione tale che

$$\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

- 4.

$$\nabla \times \mathbf{F} = 0. \quad (2.10)$$

Teorema 2.6 *Le definizioni appena enunciate sono tutte equivalenti tra loro.*

Dimostrazione: La (1) implica ovviamente la (2) e viceversa. La (3) implica la (2) perchè

$$\int_{\mathcal{C}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = - \int_{\mathcal{C}} \nabla V(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = - \int_{\mathcal{S}} \nabla \times \nabla V(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s} = 0,$$

dove sono stati usati il teorema 2.5 ed il teorema di Stokes. Per dimostrare che la (1) implica la (3), definiamo

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= - \int_0^{\mathbf{r}} [F_x dx' + F_y dy' + F_z dz'] \\ &= - [f_x(\mathbf{r}) + f_y(\mathbf{r}) + f_z(\mathbf{r}) - f_x(0) - f_y(0) - f_z(0)] , \end{aligned}$$

dove f_x , f_y e f_z sono le primitive di F_x , F_y e F_z , rispettivamente. Il gradiente di $V(\mathbf{r})$ è perciò

$$-\nabla V(\mathbf{r}) = \hat{x}\partial_x f_x + \hat{y}\partial_y f_y + \hat{z}\partial_z f_z = \hat{x}F_x + \hat{y}F_y + \hat{z}F_z = \mathbf{F}(\mathbf{r}) .$$

La (3) implica la (4) a causa del teorema 2.5 (il rotore di un gradiente è nullo). Infine, la (4) implica la (2) poiché dal teorema di Stokes si ha

$$\int_C \mathbf{F} \cdot \mathbf{r} = \int_S \nabla \times \mathbf{F} \cdot d\mathbf{s} = 0 \quad \text{se} \quad \nabla \times \mathbf{F} = 0 .$$

Esempio 2.1 (Forze centrali) I campi di forza centrali, per i quali

$$\mathbf{F} = \mathbf{r}f(r) , \tag{2.11}$$

sono campi conservativi. Infatti, è facile dimostrare che il loro rotore è nullo. Per fare ciò, notiamo che

$$\begin{aligned} \nabla \times (f\mathbf{V}) &= \hat{x}_j \epsilon_{jkl} \partial_k (f\mathbf{V}_l) \\ &= \hat{x}_j \epsilon_{jkl} (\partial_k f) \mathbf{V}_l + \hat{x}_j \epsilon_{jkl} f \partial_k \mathbf{V}_l \\ &= \hat{x}_j \epsilon_{jkl} (\nabla f)_k \mathbf{V}_l + \hat{x}_j \epsilon_{jkl} f \partial_k \mathbf{V}_l \\ &= \nabla f \times \mathbf{V} + f \nabla \times \mathbf{V} , \end{aligned} \tag{2.12}$$

e che

$$\nabla f(r) = \hat{x}_j \partial_j f = \hat{x}_j \frac{\partial f}{\partial r} \partial_j r = \hat{x}_j \frac{\partial f}{\partial r} \frac{x_j}{r} = f'(r) \frac{\mathbf{r}}{r} . \tag{2.13}$$

Dall' equazione (2.13) si ha

$$[\nabla f(r)] \times \mathbf{r} = \left[f'(r) \frac{\mathbf{r}}{r} \right] \times \mathbf{r} = 0 .$$

Si ha inoltre

$$\nabla \times \mathbf{r} = \hat{x}_j \epsilon_{jkl} \partial_k x_l = \hat{x}_j \epsilon_{jkl} \delta_{kl} = \hat{x}_j \epsilon_{jkk} = 0 , \tag{2.14}$$

e quindi, per un campo di forze del tipo (2.11), si ottiene

$$\nabla \times \mathbf{F} = \nabla \times [f(r)\mathbf{r}] = (\nabla f) \times \mathbf{r} + (\nabla \times \mathbf{r})f = 0 ,$$

cioè i campi di forza centrali sono conservativi.

Commento 2.5 Esempi di campi conservativi sono i campi gravitazionale, elastico e di Coulomb.

Teorema 2.7 *In un campo conservativo la somma dell'energia cinetica e dell'energia potenziale non varia nel tempo.*

Dimostrazione: dal teorema 2.3 si ha $W_{12} = T_2 - T_1$. Si è anche visto, nella definizione 2.3 e nel teorema 2.6, che in un campo conservativo W_{12} è pari alla differenza di energia potenziale $V_1 - V_2$. Perciò si ha $T_2 - T_1 = V_1 - V_2$, cioè, $T_1 + V_1 = T_2 + V_2$.

Teorema 2.8 *La Lagrangiana di una particella in un campo conservativo è data da*

$$L = T - V. \quad (2.15)$$

Dimostrazione: se scriviamo l'espressione della Lagrangiana (2.15) in coordinate Cartesiane si ottiene

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 - V(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

che, una volta inserita nelle equazioni di Eulero-Lagrange ($j = 1, 2, 3$)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} = \frac{\partial L}{\partial x_j},$$

fornisce la corretta equazione di Newton per la j -esima coordinata Cartesiana

$$m\ddot{x}_j = -\partial_j V = F_j.$$

L'espressione per la Lagrangiana (2.15) è valida anche in coordinate generalizzate (commento 2.2) perciò è un'accettabile Lagrangiana per una particella in un campo conservativo (commento 2.4).

Commento 2.6 L'energia cinetica dipende in generale sia dalle velocità generalizzate che dalle coordinate generalizzate.

Teorema 2.9 *Se le equazioni di trasformazione da coordinate generalizzate a coordinate Cartesiane non contengono esplicitamente la variabile temporale, allora l'energia cinetica è una funzione omogenea di secondo grado delle velocità generalizzate.*

Dimostrazione: siano

$$\begin{aligned} x_1 &= x_1(q_1, \dots, q_f; t) \\ &\vdots \\ &\vdots \\ x_f &= x_f(q_1, \dots, q_f; t) \end{aligned} \quad (2.17)$$

le equazioni di trasformazione da coordinate generalizzate a Cartesiane. L'energia cinetica è

$$T = \frac{1}{2} \sum_j m_j \dot{x}_j^2 = \frac{1}{2} \sum_j m_j \left[\sum_k \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \dot{q}_k + \partial_t x_j \right]^2$$

e, se le equazioni (2.17) non contengono esplicitamente t ,

$$T = \frac{1}{2} \sum_j \sum_{kl} \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \frac{\partial x_j}{\partial q_l} \dot{q}_k \dot{q}_l,$$

cioè

$$T = \frac{1}{2} \sum_{kl} M_{kl} \dot{q}_k \dot{q}_l, \quad (2.18)$$

che è una funzione omogenea di secondo grado delle velocità generalizzate, dove

$$M_{kl} \equiv \sum_j m_j \frac{\partial x_j}{\partial q_k} \frac{\partial x_j}{\partial q_l} \quad (2.19)$$

dipende solo dalle coordinate generalizzate.

Esempio 2.2 (Potenziale centrale) Ripetiamo l'esempio 1.2 nel formalismo Lagrangiano. Dall'esempio 2.1 e dal teorema 2.8 la Lagrangiana può essere scritta

$$L = T - V = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - V(r) = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - V(r),$$

dove si è fatto uso delle equazioni (1.15). Le equazioni di Eulero-Lagrange sono

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m \ddot{r} = \frac{\partial L}{\partial r} = m r \dot{\varphi}^2 - \partial_r V$$

e

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \frac{d}{dt} (m r^2 \dot{\varphi}) = \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0,$$

cioè,

$$m \ddot{r} = m r \dot{\varphi}^2 - \partial_r V$$

e

$$m r^2 \dot{\varphi} = \ell,$$

che è identica alle equazioni (1.17b) e (1.19) dell'esempio 1.2. Sostituendo quest'ultima equazione nella precedente si ottiene

$$m \ddot{r} = \frac{\ell^2}{m r^3} - \partial_r V,$$

che coincide con l'equazione (1.20).

2.2 Teoremi di conservazione

Definizione 2.4 La funzione

$$h = h(q, \dot{q}, t) \equiv \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L(q, \dot{q}, t) \quad (2.20)$$

è chiamata *funzione energia*.

Teorema 2.10 *Se la Lagrangiana L non dipende esplicitamente dal tempo, allora h è una costante del moto.*

Dimostrazione: siccome, in generale, L è funzione delle coordinate generalizzate, delle velocità generalizzate e del tempo, si ha

$$\begin{aligned} \frac{dL}{dt} &= \sum_j \frac{\partial L}{\partial q_j} \dot{q}_j + \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \ddot{q}_j + \partial_t L \\ &= \sum_j \left[\left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) \dot{q}_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \ddot{q}_j \right] + \partial_t L \\ &= \sum_j \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right] + \partial_t L, \end{aligned}$$

cioè,

$$\frac{d}{dt} \left[\sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L \right] + \partial_t L = 0,$$

o anche

$$\frac{dh}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (2.21)$$

Perciò, se $\partial_t L = 0$, si ha $d_t h = 0$, cioè h è una costante del moto.

Teorema 2.11 (Eulero) *Se $f = f(x_1, x_2, \dots)$ è una funzione omogenea di grado n , allora*

$$\sum_j x_j \frac{\partial f}{\partial x_j} = n f. \quad (2.22)$$

Dimostrazione: Se

$$g \equiv f(\lambda x_1, \lambda x_2, \dots) = \lambda^n f(x_1, x_2, \dots) = \lambda^n f,$$

allora

$$\frac{dg}{d\lambda} = \sum_j \frac{\partial g}{\partial \lambda x_j} \frac{\partial \lambda x_j}{\partial \lambda} = \frac{1}{\lambda} \sum_j \frac{\partial g}{\partial x_j} x_j,$$

ma anche

$$\frac{dg}{d\lambda} = n \lambda^{n-1} f(x_1, x_2, \dots),$$

perciò

$$\frac{1}{\lambda^n} \sum_j \frac{\partial g}{\partial x_j} x_j = \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_j} x_j = n f.$$

Teorema 2.12 *Se $L = T - V$, dove l'energia cinetica T è una funzione omogenea di secondo grado delle velocità generalizzate e l'energia potenziale V una funzione non dipendente da esse, allora $h = T + V$.*

Dimostrazione: in base alle ipotesi e al teorema di Eulero, dall'equazione (2.20) si ottiene

$$\begin{aligned} h &= \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L = \sum_j \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - (T - V) \\ &= 2T - T + V = T + V, \end{aligned} \quad (2.23)$$

che è l'energia totale del sistema.

Definizione 2.5 Si definisce *momento coniugato* alla coordinata generalizzata q_j la quantità

$$p_j \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}. \quad (2.24)$$

Teorema 2.13 Se L non dipende esplicitamente dalla coordinata generalizzata q_j il corrispondente momento coniugato p_j si conserva (e q_j è detta ciclica).

Dimostrazione: Dall'equazione di Eulero-Lagrange per il j -esimo grado di libertà

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial L}{\partial q_j},$$

è evidente che se $\partial L / \partial q_j = 0$, allora $\frac{d}{dt} (\partial L / \partial \dot{q}_j) = 0$, cioè, $\dot{p}_j = 0$, il che prova che p_j è una costante del moto.

Teorema 2.14 Se $L = T - V$ e V non dipende dalle velocità, allora in coordinate Cartesiane, p_j è la quantità di moto (o momento lineare).

Dimostrazione:

$$p_j \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_j} = \frac{\partial}{\partial \dot{x}_j} \sum_k \frac{1}{2} m_k \dot{x}_k^2 = m_j \dot{x}_j.$$

Commento 2.7 In coordinate non Cartesiane, se V non dipende dalle velocità e se l'espressione per l'energia cinetica (2.18) è valida, si ha

$$p_j = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} = \sum_k M_{kj} \dot{q}_k, \quad (2.25)$$

che non ha, in generale, le dimensioni di quantità di moto. Per esempio, se q è una coordinata polare e V non dipende da \dot{q} , allora il momento ad essa coniugato è

$$p_\varphi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = m r^2 \dot{\varphi} = \ell$$

che è il momento angolare, come visto nell'esempio 2.2.

Capitolo 3

Meccanica Hamiltoniana

3.1 Equazioni di Hamilton

Abbiamo visto come, per un sistema fisico con f gradi di libertà, le equazioni del moto sono f equazioni differenziali del secondo ordine, le equazioni di Eulero-Lagrange. Lo stesso sistema è anche descrivibile, invece che mediante la Lagrangiana L , funzione delle coordinate e delle velocità generalizzate, mediante una funzione $H(q, p, t)$, detta funzione Hamiltoniana o, semplicemente, Hamiltoniano, che dipende dalle coordinate generalizzate e dai momenti coniugati (def. 2.5). Il passaggio da L ad H si effettua tramite una trasformata di Legendre rispetto alle velocità generalizzate. Dall'espressione del differenziale totale di L

$$dL = \sum_j \left[\frac{\partial L}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} d\dot{q}_j \right] + \partial_t L dt = \sum_j (\dot{p}_j dq_j + p_j d\dot{q}_j) + \partial_t L dt,$$

dove sono state usate le equazioni di Eulero-Lagrange e la def. 2.5, si ha

$$dL = \sum_j \dot{p}_j dq_j + d \left(\sum_j p_j \dot{q}_j \right) - \sum_j \dot{q}_j dp_j + \partial_t L dt,$$

cioè

$$d \left(\sum_j p_j \dot{q}_j - L \right) \equiv dH = \sum_j (-\dot{p}_j dq_j + \dot{q}_j dp_j) - \partial_t L dt, \quad (3.1)$$

dove si è definita la funzione Hamiltoniana

$$H(p, q, t) \equiv \sum_j p_j \dot{q}_j - L. \quad (3.2)$$

Commento 3.1 Dal confronto delle equazioni (3.2) e (2.20) si nota che

$$H(p, q, t) = h(q, \dot{q}, t), \quad (3.3)$$

cioè l' Hamiltoniano e la funzione energia assumono gli stessi valori anche se, in generale, hanno forme funzionali distinte.

Teorema 3.1 *Le equazioni del moto di $q(t)$ e $p(t)$ sono le equazioni di Hamilton,*

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (3.4)$$

e, inoltre, in accordo con le equazioni (2.21) e (3.3),

$$\partial_t H = -\partial_t L. \quad (3.5)$$

Dimostrazione: il differenziale totale di $H = H(p, q, t)$ è

$$dH \equiv \sum_j \left[\frac{\partial H}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial H}{\partial p_j} dp_j \right] + \partial_t H dt$$

che, confrontato con l'equazione (3.1), dimostra le equazioni (3.4) e (3.5).

Teorema 3.2 *Le equazioni di Hamilton si possono dedurre da un principio variazionale.*

Dimostrazione: da

$$H \equiv p\dot{q} - L$$

si ricava

$$Ldt = p\dot{q}dt - Hdt = pdq - Hdt,$$

per cui il principio di Hamilton (equazioni 2.2) può essere scritto

$$\delta \int_1^2 [pdq - Hdt] = 0. \quad (3.6)$$

Considerando le variazioni indipendenti delle coordinate q e momenti p (con gli estremi fissati così come prescrive la seconda delle equazioni (2.2)), si ottiene

$$\begin{aligned} & \int_1^2 \left[\delta pdq + p\delta(dq) - \frac{\partial H}{\partial q} \delta q dt - \frac{\partial H}{\partial p} \delta p dt \right] \\ &= \int_1^2 \left[\delta pdq + d(p\delta q) - (dp)\delta q - \frac{\partial H}{\partial q} \delta q dt - \frac{\partial H}{\partial p} \delta p dt \right] \\ &= [p\delta q]_1^2 + \int_1^2 \delta p \left[dq - \frac{\partial H}{\partial p} dt \right] - \int_1^2 \delta q \left[dp + \frac{\partial H}{\partial q} \right]. \end{aligned}$$

Il primo termine è nullo perché corrisponde alla variazione agli estremi. Affinché anche gli altri due termini si annullino per qualsiasi scelta di δq e δp , è necessario che

$$dq = \frac{\partial H}{\partial p} dt \quad \text{e} \quad dp = -\frac{\partial H}{\partial q} dt$$

cioè

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \text{e} \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

che sono le equazioni di Hamilton.

Commento 3.2 In pratica le equazioni di Hamilton si scrivono partendo da una data Lagrangiana $L(q, \dot{q}, t)$ in accordo al seguente schema:

1. fatta la scelta delle coordinate generalizzate q , una accettabile Lagrangiana si ottiene come già descritto nel commento 2.4;
2. i momenti coniugati p si calcolano usando le equazioni (2.24);
3. si invertono le equazioni (2.24) così da eliminare le velocità generalizzate;
4. l'Hamiltoniano è definito dall'equazione (3.2) nella quale si avrà avuto cura di inserire le definizioni delle velocità $\dot{q}(q, p, t)$ (ottenute nel punto 3 del presente schema) così da ottenere $H(q, p, t)$;
5. le equazioni di Hamilton possono essere infine scritte usando le definizioni (3.4).

Esempio 3.1 (Potenziale centrale) Ripercorriamo a questo punto l'esempio 2.2 nel formalismo Hamiltoniano. Avevamo trovato che

1.

$$L = L(r, \dot{r}, \dot{\varphi}) = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - V(r).$$

Perciò

2.

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \quad \text{e} \quad p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2 \dot{\varphi},$$

3.

$$\dot{r} = \frac{p_r}{m} \quad \text{e} \quad \dot{\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2},$$

4.

$$\begin{aligned} H(q, p, t) &= p_r \dot{r} + p_\varphi \dot{\varphi} - L \\ &= \frac{p_r^2}{m} + \frac{p_\varphi^2}{mr^2} - \frac{m}{2} \left[\left(\frac{p_r}{m} \right)^2 + r^2 \left(\frac{p_\varphi}{mr^2} \right)^2 \right] + V(r) \\ &= \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} + V(r), \end{aligned}$$

5.

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m} \quad \text{e} \quad \dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2}$$

$$\dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\varphi^2}{mr^3} - \partial_r V \quad \text{e} \quad \dot{p}_\varphi = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0.$$

Da notare che l'ultima equazione mostra che $p_\varphi = \text{costante} = \ell$, e dalla seconda equazione si ha $\ell = mr^2\dot{\varphi}$, che è la definizione del momento angolare della particella come abbiamo già visto nel commento 1.1. Inserendo la terza equazione nella prima si ottiene

$$m\ddot{r} = -\partial_r V + \frac{\ell^2}{mr^3},$$

che coincide con l'equazione (1.20).

3.2 Teoremi di conservazione

Teorema 3.3 *Se la Lagrangiana L non dipende esplicitamente dal tempo anche l'Hamiltoniano H non dipende esplicitamente dal tempo.*

Dimostrazione: se $\partial_t L = 0$, dall'equazione (3.5) si ha anche che $\partial_t H = 0$.

Teorema 3.4 *Se la Lagrangiana L non dipende esplicitamente da una coordinata generalizzata anche l'Hamiltoniano H non dipende esplicitamente da tale coordinata.*

Dimostrazione: dal teorema 2.13 si ha $\dot{p} = 0$, e dalla seconda delle equazioni (3.4) si ottiene $\partial H / \partial q = 0$.

Teorema 3.5 *L'Hamiltoniano H è una costante del moto se non dipende esplicitamente dal tempo.*

Dimostrazione: dalle equazioni (3.5) e (2.21) abbiamo

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} \tag{3.7}$$

e perciò, se $\partial_t H = 0$, H si conserva.

Teorema 3.6 *Se l'Hamiltoniano H non dipende esplicitamente da una coordinata canonica q , il momento p , ad essa coniugato, è una costante del moto.*

Dimostrazione: si verifica immediatamente che se il membro destro della seconda delle eq. (3.4) è nullo p_j è una costante del moto.

Commento 3.3 I teoremi 3.5 e 3.6 nel formalismo Hamiltoniano corrispondono ai teoremi 2.10 e 2.13 nel formalismo Lagrangiano.

Commento 3.4 Nel formalismo Hamiltoniano lo stato di un sistema ad un dato istante è specificato dall'insieme delle coordinate generalizzate q e dei momenti coniugati p a quell'istante. Ne consegue che nel formalismo Hamiltoniano lo stato del sistema ad un dato istante è descritto da un punto di uno spazio Cartesiano $2f$ -dimensionale (*spazio delle fasi*). Tale punto si muove nel tempo lungo una traiettoria che soddisfa le equazioni di Hamilton.

Commento 3.5 Qualsiasi variabile dinamica di un sistema fisico è funzione dello stato del sistema stesso, cioè è una funzione delle coordinate generalizzate q , dei momenti coniugati p ed, eventualmente, anche del tempo t . Sono particolarmente importanti quelle variabili dinamiche che sono costanti del moto poiché il loro valore non varia nel tempo. Di seguito stabiliremo le condizioni generali che devono essere soddisfatte affinché una variabile dinamica sia costante del moto.

Definizione 3.1 Siano $A(q, p, t)$ e $B(q, p, t)$ due variabili dinamiche. La *parentesi di Poisson* (A, B) fra A e B è, per definizione,

$$(A, B) \equiv \sum_j \left[\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial B}{\partial q_j} \frac{\partial A}{\partial p_j} \right]. \quad (3.8)$$

(In seguito si incontreranno espressioni del tipo $(A, B)_{qp}$ per indicare esplicitamente le variabili indipendenti.)

Teorema 3.7 *La parentesi di Poisson fra le coordinate generalizzate q e i momenti coniugati p sono*

$$(q_j, q_k) = (p_j, p_k) = 0 \quad (3.9a)$$

$$(q_j, p_k) = \delta_{jk}. \quad (3.9b)$$

Dimostrazione: segue direttamente dall'applicazione della definizione 3.1.

Teorema 3.8 *Le equazioni di Hamilton possono essere riscritte nella forma*

$$\dot{q}_j = (q_j, H) \quad (3.10a)$$

$$\dot{p}_j = (p_j, H). \quad (3.10b)$$

Dimostrazione: segue direttamente dall'applicazione della definizione 3.1 e dalle equazioni di Hamilton (3.4).

Teorema 3.9 *Per qualsiasi variabile dinamica $A(q, p, t)$ si ha*

$$\frac{dA}{dt} = (A, H) + \partial_t A. \quad (3.11)$$

Dimostrazione: Si ha

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= \sum_j \left[\frac{\partial A}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial A}{\partial p_j} \dot{p}_j \right] + \partial_t A \\ &= \sum_j \left[\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right] + \partial_t A, \end{aligned}$$

dove sono state usate le equazioni di Hamilton (3.4). L'eq. (3.11) segue direttamente dalla definizione 3.1.

Commento 3.6 L'equazione (3.11) è la forma più generale di diverse equazioni incontrate precedentemente: i) l'eq. (3.7), e perciò il teorema 3.5, se $A = H$; ii) la prima delle equazioni di Hamilton se $A = q$, e iii) le seconda delle equazioni di Hamilton se $A = p$ (equazioni (3.4)).

Commento 3.7 Abbiamo già visto (commento 2.2) che le equazioni di Eulero-Lagrange sono invarianti per trasformazioni puntuali. Il seguente teorema mostra il fatto che anche le equazioni di Hamilton sono invarianti per trasformazioni puntuali.

Teorema 3.10 *Le equazioni di Hamilton sono invarianti per trasformazioni puntuali*

$$Q = Q(q). \quad (3.12)$$

Dimostrazione: sia P il momento coniugato a Q , e siano $\Lambda(Q, \dot{Q})$ e $\Omega(Q, P) = P\dot{Q} - \Lambda$, rispettivamente, la Lagrangiana e l'Hamiltoniano dopo aver effettuato la trasformazione puntuale. Dato che

$$d\Lambda = \frac{\partial \Lambda}{\partial Q} dQ + \frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{Q}} d\dot{Q} \quad (3.13)$$

e che Λ soddisfa le equazioni di Eulero-Lagrange, si ha

$$d\Lambda = \dot{P}dQ + Pd\dot{Q}$$

e perciò

$$d(P\dot{Q} - \Lambda) \equiv d\Omega = \dot{Q}dP - \dot{P}dQ$$

Confrontando quest'ultima equazione con la definizione del differenziale totale di Ω ,

$$d\Omega = \frac{\partial \Omega}{\partial Q} dQ + \frac{\partial \Omega}{\partial P} dP,$$

si ha, infine,

$$\dot{Q} = \frac{\partial \Omega}{\partial P} \quad \text{e} \quad \dot{P} = -\frac{\partial \Omega}{\partial Q}, \quad (3.14)$$

e il teorema è così dimostrato.

Definizione 3.2 Una trasformazione nello spazio delle fasi del tipo

$$Q = Q(q, p) \quad P = P(q, p) \quad (3.15)$$

per la quale le equazioni di Hamilton rimangono invarianti, cioè tale che se q e p soddisfano le eq. (3.4) allora Q e P soddisfano le eq. (3.14), è chiamata *trasformazione canonica*.

Teorema 3.11 Una trasformazione nello spazio delle fasi del tipo (3.15) tale che

$$(Q_j, Q_k)_{qp} = (P_j, P_k)_{qp} = 0 \quad (3.16a)$$

e

$$(Q_j, P_k) = \delta_{jk} \quad (3.16b)$$

è *canonica*.

Dimostrazione: si noti innanzitutto che, se le equazioni (3.15) definiscono una trasformazione canonica, il principio variazionale (3.6) è valido sia per la coppia (q, p) che per la coppia (Q, P) , cioè,

$$\delta \int_1^2 [p dq - H dt] = \delta \int_1^2 [P dQ - \Omega dt] = 0. \quad (3.17)$$

L'equazione (3.17) implica (teorema 2.2) che le funzioni integrande differiscono per il differenziale totale di una funzione $F = F(q, Q, t)$:

$$p dq - H dt - P dQ + \Omega dt = dF(q, Q, t). \quad (3.18)$$

D'altra parte, per definizione,

$$dF = \frac{\partial F}{\partial q} dq + \frac{\partial F}{\partial Q} dQ + \partial_t F dt, \quad (3.19)$$

dalla quale, una volta confrontata con l'eq. (3.18), si ottiene

$$\Omega(Q, P) = H(q, p) + \partial_t F, \quad (3.20)$$

per cui

$$\frac{\partial H}{\partial \Omega} = 1. \quad (3.21)$$

Applichiamo ora la formula (3.11) per calcolare le derivate temporali totali delle variabili dinamiche $Q(q, p)$ e $P(q, p)$ definite nell'eq. (3.15):

$$\dot{Q}_j = (Q_j, H)_{qp} = \sum_k \left[\frac{\partial Q_j}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial Q_j}{\partial p_k} \right] \quad (3.22)$$

$$\dot{P}_j = (P_j, H)_{qp} = \sum_k \left[\frac{\partial P_j}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial P_j}{\partial p_k} \right]. \quad (3.23)$$

Facendo uso dell'eq. (3.21) otteniamo

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = \frac{\partial H}{\partial \Omega} \frac{\partial \Omega}{\partial q_k} = \frac{\partial \Omega}{\partial q_k} = \sum_l \left[\frac{\partial \Omega}{\partial Q_l} \frac{\partial Q_l}{\partial q_k} + \frac{\partial \Omega}{\partial P_l} \frac{\partial P_l}{\partial q_k} \right] \quad (3.24a)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = \frac{\partial H}{\partial \Omega} \frac{\partial \Omega}{\partial p_k} = \frac{\partial \Omega}{\partial p_k} = \sum_l \left[\frac{\partial \Omega}{\partial Q_l} \frac{\partial Q_l}{\partial p_k} + \frac{\partial \Omega}{\partial P_l} \frac{\partial P_l}{\partial p_k} \right], \quad (3.24b)$$

cosicché le eq. (3.22) e (3.23), dopo avere inserito le uguaglianze (3.24), diventano

$$\dot{Q}_j = \sum_l \left[\frac{\partial \Omega}{\partial Q_l} (Q_j, Q_l)_{qp} + \frac{\partial \Omega}{\partial P_l} (Q_j, P_l)_{qp} \right] \quad (3.25)$$

e

$$\dot{P}_j = \sum_l \left[\frac{\partial \Omega}{\partial Q_l} (P_j, Q_l)_{qp} + \frac{\partial \Omega}{\partial P_l} (P_j, P_l)_{qp} \right]. \quad (3.26)$$

Le eq. (3.25) e (3.26) sono le equazioni di Hamilton

$$\dot{Q}_j = \frac{\partial \Omega}{\partial P_j} \quad \dot{P}_j = -\frac{\partial \Omega}{\partial Q_j} \quad (3.27)$$

se e solo se le eq. (3.16) sono soddisfatte.

Teorema 3.12 *Le trasformazioni puntuali sono canoniche.*

Dimostrazione: in una trasformazione puntuale le coordinate generalizzate si trasformano secondo le eq. (2.4). Vediamo ora come si trasformano i momenti coniugati. Invertendo l'eq. (2.4) si ottiene

$$q = q(Q) \quad (3.28)$$

dalla quale si ricava

$$\dot{q}_k = \sum_l \frac{\partial q_k}{\partial Q_l} \dot{Q}_l,$$

per cui

$$\left(\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{Q}_j} \right)_Q = \frac{\partial q_k}{\partial Q_j} \quad (3.29)$$

e

$$P_j \equiv \frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{Q}_j} = \frac{\partial \Lambda}{\partial L} \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_j} = \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{Q}_j} = \sum_k p_k \frac{\partial q_k}{\partial Q_j}$$

dove si è usata l'eq. (3.29) e il fatto che $\partial \Lambda / \partial L = 1$. In definitiva, perciò, una trasformazione puntuale può essere definita da

$$Q_j = Q_j(q) \quad (3.30)$$

e

$$P_j = \sum_k p_k \frac{\partial q_k}{\partial Q_j}. \quad (3.31)$$

Quindi

$$(Q_j, Q_k)_{qp} = \sum_l \left[\frac{\partial Q_j}{\partial q_l} \frac{\partial Q_k}{\partial p_l} - \frac{\partial Q_k}{\partial q_l} \frac{\partial Q_j}{\partial p_l} \right] = 0,$$

dato che le coordinate Q non dipendono dai momenti p . Si ha, inoltre,

$$\begin{aligned} (P_j, P_k)_{qp} &= \sum_l \left[\frac{\partial P_j}{\partial q_l} \frac{\partial P_k}{\partial p_l} - \frac{\partial P_k}{\partial q_l} \frac{\partial P_j}{\partial p_l} \right] \\ &= \sum_l \left[\sum_n p_n \frac{\partial^2 q_n}{\partial q_l \partial Q_j} \frac{\partial q_l}{\partial Q_k} - \sum_n p_n \frac{\partial^2 q_n}{\partial q_l \partial Q_k} \frac{\partial q_l}{\partial Q_j} \right], \end{aligned}$$

dove si è usata l'eq. (3.31). Invertendo l'ordine delle derivate parziali seconde, si ottiene

$$(P_j, P_k)_{qp} = \sum_{ln} \left[p_n \frac{\partial \delta_{ln}}{\partial Q_j} \frac{\partial q_l}{\partial Q_k} - p_n \frac{\partial \delta_{ln}}{\partial Q_k} \frac{\partial q_l}{\partial Q_j} \right] = 0,$$

dato che le derivate del simbolo δ di Kronecher sono nulle. Infine,

$$\begin{aligned} (Q_j, P_k)_{qp} &= \sum_l \left[\frac{\partial Q_j}{\partial q_l} \frac{\partial P_k}{\partial p_l} - \frac{\partial P_k}{\partial q_l} \frac{\partial Q_j}{\partial p_l} \right] \\ &= \sum_l \frac{\partial Q_j}{\partial q_l} \frac{\partial q_l}{\partial Q_k} = \frac{\partial Q_j}{\partial Q_k} = \delta_{jk}. \end{aligned}$$

Dato che la trasformazione puntuale (3.30)–(3.31) soddisfa le equazioni (3.16) si conclude che essa è canonica.

Commento 3.8 Avevamo già dimostrato il teorema 3.12 provando il teorema 3.10. La dimostrazione è stata ripetuta qui come esempio dell'uso del teorema 3.11. Adesso, invece, vediamo come una variabile dinamica può essere interpretata come generatrice di una trasformazione canonica infinitesima.

Teorema 3.13 *La più generale trasformazione canonica infinitesima può essere scritta nella forma (ϵ è un parametro infinitesimo)*

$$Q_j = q_j + \epsilon \frac{\partial g}{\partial p_j} \quad (3.32a)$$

$$P_j = p_j - \epsilon \frac{\partial g}{\partial q_j}, \quad (3.32b)$$

dove la funzione $g = g(q, p)$ prende il nome di generatore della trasformazione.

Dimostrazione: secondo le condizioni (3.16) del teorema 3.11, la trasformazione infinitesima nello spazio delle fasi

$$Q_j = q_j + \epsilon \alpha_j(q, p)$$

$$P_j = p_j + \epsilon \beta_j(q, p)$$

è canonica se, al primo ordine in ϵ ,

$$(Q_j, Q_k)_{qp} \equiv \epsilon [(q_j, \alpha_k)_{qp} - (q_k, \alpha_j)_{qp}] = 0,$$

$$(P_j, P_k)_{qp} \equiv \epsilon [(p_j, \beta_k)_{qp} - (p_k, \beta_j)_{qp}] = 0,$$

$$(Q_j, P_k)_{qp} \equiv \delta_{jk} + \epsilon [(q_j, \beta_k)_{qp} - (p_k, \alpha_j)_{qp}] = \delta_{jk},$$

cioè se

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial p_j} = \frac{\partial \alpha_j}{\partial p_k}, \quad \frac{\partial \beta_k}{\partial q_j} = \frac{\partial \beta_j}{\partial q_k}, \quad \frac{\partial \beta_k}{\partial p_j} = -\frac{\partial \alpha_j}{\partial q_k}.$$

Queste ultime sono le condizioni di integrabilità della forma differenziale

$$\sum_j [\alpha_j(q, p) dp_j - \beta_j(q, p) dq_j],$$

cioè per l'esistenza di una funzione $g(q, p)$ tale che

$$\alpha_j(q, p) = \frac{\partial g}{\partial p_j} \quad \text{e} \quad \beta_j(q, p) = -\frac{\partial g}{\partial q_j}. \quad (3.33)$$

Teorema 3.14 *Una variabile dinamica $A(q, p, t)$ è invariante per la trasformazione canonica infinitesima generata da $g(q, p)$ se*

$$(A, g) = 0. \quad (3.34)$$

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} A(Q, P, t) &= A\left(q + \epsilon \frac{\partial g}{\partial p}, p - \epsilon \frac{\partial g}{\partial q}, t\right) \\ &= A(q, p, t) + \epsilon \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} - \epsilon \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} \\ &= A(q, p, t) + \epsilon (A, g), \end{aligned}$$

dalla quale si ha che $A(Q, P, t) = A(q, p, t)$ se e solo se $(A, g) = 0$.

Teorema 3.15 *La funzione Hamiltoniana $H(q, p, t)$ genera traslazioni nel tempo.*

Dimostrazione: inserendo $g = H$ nell'eq. (3.32) e facendo uso delle equazioni di Hamilton (3.4), si ottiene

$$Q = q + \epsilon \frac{\partial H}{\partial p} = q + \epsilon \dot{q} \quad (3.35a)$$

$$P = p - \epsilon \frac{\partial H}{\partial q} = p + \epsilon \dot{p}. \quad (3.35b)$$

Teorema 3.16 *Una variabile dinamica $A(q, p)$ che non dipende esplicitamente dal tempo è una costante del moto se $(A, H) = 0$.*

Dimostrazione: se $\partial_t A = 0$, il teorema è dimostrato immediatamente sia dall'eq. (3.11) o dai teoremi 3.14 e 3.15.

Teorema 3.17 *Se $H(q, p, t)$ è invariante per la trasformazione canonica infinitesima generata da $g(q, p)$, allora $g(q, p)$ è una costante del moto.*

Dimostrazione: dal teorema 3.14 si ha che $(H, g) = 0$, e dal teorema 3.16 (dato che g non è esplicitamente dipendente dal tempo) segue che $dg/dt = 0$.

Commento 3.9 Il teorema 3.17 può anche essere dimostrato calcolando direttamente la variazione di H in seguito alla trasformazione canonica infinitesima nell'ipotesi che tale variazione sia nulla:

$$\begin{aligned} 0 &= \delta H = \sum_j \left[\frac{\partial H}{\partial q_j} \delta q_j + \frac{\partial H}{\partial p_j} \delta p_j \right] \\ &= \epsilon \sum_j \left[\frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j} \right] = (H, g)\epsilon. \end{aligned}$$

Teorema 3.18 *Il momento lineare $p = m\mathbf{v}$ genera traslazioni nello spazio ordinario.*

Dimostrazione: Inserendo $g = p$ nell'eq. (3.32), si ottiene

$$Q = q + \epsilon \quad \text{e} \quad P = p. \quad (3.36)$$

Teorema 3.19 *La componente lungo l'asse z del momento angolare genera rotazioni intorno all'asse z .*

Dimostrazione: le equazioni che definiscono una rotazione infinitesima intorno all'asse z sono

$$X = x \cos \epsilon - y \sin \epsilon = x - \epsilon y \quad (3.37a)$$

$$Y = x \sin \epsilon + y \cos \epsilon = \epsilon x + y, \quad (3.37b)$$

dalla quali si ricava

$$\dot{X} = \dot{x} - \epsilon \dot{y} \quad (3.38a)$$

$$\dot{Y} = \epsilon \dot{x} + \dot{y}. \quad (3.38b)$$

D'altra parte, inserendo $g = \ell_z = xp_y - yp_x$ nelle equazioni (3.32), si ottengono le uguaglianze

$$X = x + \epsilon \frac{\partial g}{\partial p_x} = x - \epsilon y$$

$$Y = y + \epsilon \frac{\partial g}{\partial p_y} = y + \epsilon x,$$

che coincidono con le equazioni (3.37). Inoltre,

$$P_X = p_x - \epsilon \frac{\partial g}{\partial x} = p_x - \epsilon p_y$$

$$P_Y = p_y - \epsilon \frac{\partial g}{\partial y} = p_y + \epsilon p_x,$$

che, a parte un fattore di massa comune ai due membri, coincidono con le equazioni (3.38). Si conclude perciò che ℓ_z genera rotazioni infinitesime attorno all'asse z .

Teorema 3.20 *Se la funzione Hamiltoniana H è invariante per traslazioni infinitesime nello spazio ordinario, la componente del momento lineare lungo l'asse di traslazione è una costante del moto. Se essa è invariante per rotazioni, la componente del momento angolare lungo l'asse di rotazione è una costante del moto.*

Dimostrazione: segue direttamente dall'applicazione dei teoremi 3.17, 3.18 e 3.19.

Teorema 3.21 (Identità di Jacobi) *Si ha la seguente identità:*

$$((A, B), C) + ((B, C), A) + ((C, A), B) = 0. \quad (3.39)$$

Teorema 3.22 (Poisson) *Se $A(q, p)$ e $B(q, p)$ sono costanti del moto, anche la loro parentesi di Poisson è una costante del moto.*

Dimostrazione: se A e B si conservano, allora, per il teorema 3.16,

$$(A, H) = (B, H) = 0. \quad (3.40)$$

L'identità di Jacobi per A , B e H è

$$((A, B), H) + ((B, H), A) + ((H, A), B) = 0, \quad (3.41)$$

che, usando le equazioni (3.40), diventa

$$((A, B), H) = 0, \quad (3.42)$$

e, per il teorema 3.16, (A, B) è una costante del moto.

Teorema 3.23 *Se due componenti del momento angolare si conservano, allora anche la terza è una costante del moto.*

Dimostrazione: si assuma che $\ell_x = yp_z - zp_y$ e $\ell_y = zp_x - xp_z$ siano costanti del moto. La loro parentesi di Poisson è

$$\begin{aligned} (\ell_x, \ell_y) &= \frac{\partial \ell_x}{\partial z} \frac{\partial \ell_y}{\partial p_z} - \frac{\partial \ell_y}{\partial z} \frac{\partial \ell_x}{\partial p_z} = (-p_y)(-x) - (p_x)(y) \\ &= xp_y - yp_x = \ell_z \end{aligned}$$

che, per il teorema di Poisson, è una costante del moto.

3.3 Applicazioni

Definizione 3.3 Per un sistema composto da due particelle di massa m_1 e m_2 e coordinate di posizione \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 , la *trasformazione nel sistema del centro di massa* è definita da

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (3.43a)$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_1}{M}\mathbf{r}_1 + \frac{m_2}{M}\mathbf{r}_2, \quad (3.43b)$$

dove

$$M = m_1 + m_2 \quad (3.44)$$

è la massa totale, \mathbf{r} è la posizione relativa di una particella rispetto all'altra e \mathbf{R} è la posizione del centro di massa.

Teorema 3.24 *La trasformazione nel sistema del centro di massa è canonica.*

Dimostrazione: le equazioni (3.43) definiscono una trasformazione puntuale (definizione 2.2) che, come tale, è canonica in virtù del teorema 3.12.

Commento 3.10 Il teorema 3.24 può essere provato anche verificando che le ipotesi del teorema 3.11 sono soddisfatte. Invertendo le equazioni (3.43) si ha

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{M}\mathbf{r} \quad (3.45a)$$

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{M}\mathbf{r} \quad (3.45b)$$

e, dall'eq. (3.31),

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 \frac{\partial \mathbf{r}_1}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{p}_2 \frac{\partial \mathbf{r}_2}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{p}_1 \frac{m_2}{M} - \mathbf{p}_2 \frac{m_1}{M} = \frac{\mu}{m_1}\mathbf{p}_1 - \frac{\mu}{m_2}\mathbf{p}_2 \quad (3.46a)$$

e

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 \frac{\partial \mathbf{r}_1}{\partial \mathbf{R}} + \mathbf{p}_2 \frac{\partial \mathbf{r}_2}{\partial \mathbf{R}} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad (3.46b)$$

dove

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1 m_2}{M} \quad (3.47)$$

è la *massa ridotta* del sistema. Usando le equazioni (3.43) e (3.46), si vede che le equazioni (3.16) sono verificate e, per il teorema 3.11, la trasformazione (3.43) è canonica.

Teorema 3.25 (Problema dei due corpi) *Il problema del moto di due particelle di massa m_1 e m_2 interagenti mediante un potenziale conservativo $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = V(r)$ che dipende solo dalla distanza relativa delle due particelle, è equivalente al problema del moto di una particella di massa μ (come definita nell'eq. (3.47)) che si muove nel potenziale $V(r)$.*

Dimostrazione: per il teorema 2.8 la funzione Lagrangiana è

$$L = T - V = \frac{1}{2}m_1\dot{\mathbf{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\mathbf{r}}_2^2 - V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (3.48)$$

Effettuando ora la trasformazione nel sistema del centro di massa (3.43), differenziando le equazioni (3.45) rispetto al tempo ed inserendo il risultato nell'eq. (3.48), si ottiene

$$L = \frac{1}{2}M\dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{r}}^2 - V(r). \quad (3.49)$$

Quest'ultima può essere interpretata come la Lagrangiana di due particelle fittizie non interagenti, una libera, di massa M e posizione \mathbf{R} , e l'altra di massa μ , posizione \mathbf{r} ed interagente con un potenziale centrale $V(r)$. Se il sistema di riferimento è scelto in modo tale che la particella libera sia solidale con l'origine del sistema di riferimento, la Lagrangiana diventa

$$L = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 - V(r), \quad (3.50)$$

provando così il teorema.

Commento 3.11 I momenti coniugati a \mathbf{r} ed \mathbf{R} sono

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = \mu\dot{\mathbf{r}} \quad (3.51a)$$

e

$$\mathbf{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{R}}} = M\dot{\mathbf{R}} \quad (3.51b)$$

che, come può essere facilmente verificato, coincidono con le equazioni (3.46). Siccome la trasformazione nel sistema del centro di massa è canonica (teorema 3.24), sia (\mathbf{r}, \mathbf{p}) che (\mathbf{R}, \mathbf{P}) sono coppie coniugate canoniche e pertanto soddisfano le equazioni di Hamilton (definizione 2.2). La funzione Hamiltoniana è (commento 3.1 e teorema 2.12)

$$H = \frac{1}{2}M\dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{r}}^2 + V(r) = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r) \quad (3.52)$$

oppure, nel sistema di riferimento nel quale il centro di massa è solidale con l'origine,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r). \quad (3.53)$$

Esempio 3.2 (Potenziale centrale) Per una particella di massa m che si muove in un potenziale centrale $V(r)$, la funzione Lagrangiana è (esempio 2.1 e teorema 2.8) $L = T - V$, cioè, in coordinate Cartesiane e ponendo l'origine del sistema di riferimento al centro del potenziale,

$$L = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(|x^2 + y^2 + z^2|^{-1/2}), \quad (3.54)$$

dalla quale si ricavano tre equazioni del moto di Lagrange, oppure sei equazioni del moto di Hamilton.

Mostriamo ora come le proprietà di simmetria (che implicano l'esistenza di quantità costanti del moto) semplificano il problema. In coordinate polari sferiche si ha

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad (3.55a)$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi \quad (3.55b)$$

$$z = r \cos \theta, \quad (3.55c)$$

e, inserendo i quadrati di x , y e z nell'eq. (3.54), si ottiene

$$L = \frac{m}{2} \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2 \sin^2 \theta \right) - V(r). \quad (3.56)$$

Per poter scrivere l'appropriata funzione di Hamilton, seguiamo le indicazioni date nel commento 3.3. I momenti coniugati alle coordinate polari sferiche sono

$$p_r \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \quad (3.57a)$$

$$p_\theta \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta} \quad (3.57b)$$

$$p_\varphi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2 \dot{\varphi} \sin^2 \theta, \quad (3.57c)$$

dai quali si ottiene

$$\dot{r} = \frac{p_r}{m} \quad (3.58a)$$

$$\dot{\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2} \quad (3.58b)$$

$$\dot{\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2 \sin^2 \theta}. \quad (3.58c)$$

L'Hamiltoniano è perciò (eq. (3.2))

$$H = p_r \dot{r} + p_\theta \dot{\theta} + p_\varphi \dot{\varphi} - L = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2 \sin^2 \theta} + V(r). \quad (3.59)$$

Qui p_φ è la componente lungo l'asse z del momento angolare ℓ , come può essere dimostrato da un calcolo diretto di ℓ_z (commenti 1.1 e 2.7) oppure usando il teorema 3.19. Esso si conserva perché (equazioni (3.56) e (3.59)) φ è una coordinata ciclica (teoremi 2.13, 3.6 o 3.20). Inoltre, data la simmetria sferica del problema, l'asse polare può essere scelto in modo arbitrario, e perciò non solo ℓ_z , ma anche le componenti ℓ_x e ℓ_y si conservano, e quindi anche qualsiasi funzione di esse è una costante del moto, come per esempio ℓ^2 , che appare esplicitamente nell'espressione dell'Hamiltoniano. Per dimostrarlo, scriviamo il momento angolare nella forma

$$\ell = m\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}} \quad (3.60)$$

le cui componenti Cartesiane sono

$$\ell_x \equiv m(y\dot{z} - z\dot{y}) = -mr^2 \left(\dot{\theta} \sin \varphi + \dot{\varphi} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \right) \quad (3.61a)$$

$$\ell_y = mr^2 \left(\dot{\theta} \cos \varphi - \dot{\varphi} \sin \theta \cos \theta \sin \varphi \right) \quad (3.61b)$$

$$\ell_z = mr^2 \dot{\varphi} \sin^2 \theta. \quad (3.61c)$$

Il modulo quadro del momento angolare è pertanto

$$\ell^2 \equiv \ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2 = m^2 r^4 \left(\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2 \theta \right) \quad (3.62)$$

che, confrontato con

$$p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \theta} = m^2 r^4 \left(\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2 \theta \right), \quad (3.63)$$

permette di scrivere

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\ell^2}{2mr^2} + V(r). \quad (3.64)$$

Siccome ℓ è costante, il suo valore può essere determinato una volta per tutte dalle condizioni iniziali, cosicché H dipende solamente da r e p_r . Esaminando l'eq. (3.64) è naturale definire un potenziale effettivo

$$V_\ell(r) = V(r) + \frac{\ell^2}{2mr^2}, \quad (3.65)$$

ed osservare che il problema del moto di una particella, di massa m , nello spazio ordinario tridimensionale, è equivalente al moto unidimensionale lungo la coordinata radiale r di una particella di ugual massa nel potenziale efficace (3.65). Il secondo termine nell'eq. (3.65) è repulsivo ed è chiamato *potenziale centrifugo* (commento 1.2).

Commento 3.12 Dato che $\ell = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ è una costante del moto, \mathbf{r} deve necessariamente essere sempre perpendicolare a ℓ , cioè la particella si muove su di un piano (il piano xy se ℓ è scelto in modo da essere parallelo all'asse z); questa è la ragione per la quale negli esempi 3.1, 1.2 e 2.2, abbiamo considerato direttamente il caso in cui il moto si svolge solamente sul piano xy . In tal caso la funzione Lagrangiana (3.56) è

$$L = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - V(r) \quad (3.66)$$

come abbiamo già visto nell'esempio 2.2. Nel piano xy l'eq. (3.62) diventa

$$\ell^2 = p_\varphi^2 = m^2 r^4 \dot{\varphi}^2, \quad (3.67)$$

e la funzione Hamiltoniana (3.59) diventa

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} + V(r), \quad (3.68)$$

come si è già visto nell'esempio 3.1.

Esempio 3.3 (Rotatore rigido) Il rotatore rigido è una particella libera di muoversi sulla superficie di una sfera. Chiaramente il problema del moto per questo sistema può essere ricondotto al moto nel potenziale centrale $V(r) = 0$ con $r = \text{costante} = R_0$. Dal commento 3.12 sappiamo che la particella si muove su di un piano, che possiamo scegliere essere quello xy . Se R_0 è il raggio della sfera, la funzione Lagrangiana si ottiene dall'eq. (3.66) ponendo $r = R_0$ e le sue derivate temporali uguali a zero:

$$L = \frac{m}{2} R_0^2 \dot{\varphi}^2. \quad (3.69)$$

Le equazioni di Eulero-Lagrange si riducono a

$$mR_0^2 \ddot{\varphi} = 0,$$

cioè,

$$mR_0^2 \dot{\varphi} \equiv \ell = \text{costante} \quad (3.70)$$

o anche

$$\dot{\varphi} \equiv \omega = \text{costante}. \quad (3.71)$$

Definendo il momento d'inerzia del rotatore

$$I \equiv mR_0^2 \quad (3.72)$$

si ottiene la familiare relazione tra momento angolare e velocità angolare

$$\ell = I\omega. \quad (3.73)$$

Inoltre si ha

$$p_\varphi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mR_0^2 \dot{\varphi} = \ell, \quad (3.74)$$

dalla quale si ottiene

$$\dot{\varphi} = \frac{\ell}{mR_0^2}$$

e perciò

$$H = p_\varphi \dot{\varphi} - L = \frac{\ell^2}{2I}, \quad (3.75)$$

che è una costante indipendente da qualsiasi coordinata generalizzata o momento coniugato. Il moto è pertanto completamente determinato dalle condizioni iniziali e non vi sono equazioni da integrare.

Esempio 3.4 (Oscillatore armonico) La funzione Lagrangiana di un oscillatore armonico è (commento 2.5 e teorema 2.8)

$$L = T - V = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{k}{2} x^2, \quad (3.76)$$

ed il momento coniugato alla coordinata x è

$$p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}, \quad (3.77)$$

dal quale si ottiene

$$\dot{x} = \frac{p}{m},$$

perciò la funzione Hamiltoniana è

$$H = p\dot{x} - L = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 \quad (3.78)$$

che è esattamente $T + V$ così come ci si aspettava dal teorema 2.12. L e H non dipendono esplicitamente dal tempo e pertanto H è una costante del moto (teoremi 2.10 e 3.5): $H = E = \text{costante}$. L'eq. (3.78) può essere perciò scritta

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/k} = 1, \quad (3.79)$$

che è l'equazione delle traiettorie nello spazio delle fasi di un oscillatore armonico. Tali traiettorie sono ellissi i cui semiassi sono

$$a = \sqrt{\frac{2E}{k}} \quad \text{e} \quad b = \sqrt{2mE}. \quad (3.80)$$

Esempio 3.5 (Moto nucleare di una molecola biatomica) Consideriamo la molecola come un sistema composto da due particelle di massa m_1 e m_2 interagenti tramite un potenziale $V(r)$ che dipende solamente dalla loro distanza. Questo è nient'altro che il problema dei due corpi che, in virtù del teorema 3.25, può essere decomposto nel problema del moto di due particelle non interagenti, una libera di massa $M = m_1 + m_2$ e l'altra di massa uguale alla massa ridotta μ definita nell'eq. (3.47) ed interagente con il potenziale centrale $V(r)$. La funzione Lagrangiana è, come risulta dall'eq. (3.49),

$$L = L_R + L_r, \quad (3.81)$$

dove

$$L_r = \frac{\mu}{2}\dot{\mathbf{r}}^2 - V(r), \quad (3.82)$$

che è l'eq. (3.50), e L_R è la Lagrangiana della particella libera di massa M . Alla Lagrangiana (3.82) possono essere applicate tutte le considerazioni sviluppate nell'esempio 3.2. In particolare, possiamo scegliere il sistema di riferimento in modo da porre il vettore momento angolare ℓ lungo l'asse z cosicché il moto si svolge esclusivamente sul piano xy . La Lagrangiana (3.82) e il corrispondente Hamiltoniano diventano (si confronti con le equazioni (3.66)-(3.68))

$$L_r = \frac{\mu}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) - V(r) \quad (3.83)$$

$$H_r = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\ell^2}{2\mu r^2} + V(r) = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{p_\varphi^2}{2\mu r^2} + V(r). \quad (3.84)$$

I moti vibrazionale e rotazionale, descritti, rispettivamente, da $r(t)$ e $\varphi(t)$, sono, come si può vedere dalle equazioni del moto, accoppiati. Per esempio, dalla Lagrangiana (3.83), le equazioni di Eulero-Lagrange (2.3) sono

$$\mu\ddot{r} = \mu r\dot{\varphi}^2 - \partial_r V = \frac{\ell^2}{\mu r^3} - \partial_r V \quad (3.85a)$$

e

$$\mu r^2 \ddot{\varphi} + 2\mu r \dot{r} \dot{\varphi} = 0 = \frac{d}{dt} (\mu r^2 \dot{\varphi}) = \frac{d}{dt} \ell, \quad (3.85b)$$

dove è stata usata l'eq. (3.67). L'equazione (3.85a) determina $r(t)$ e l'eq. (3.85b), che dipende da $r(t)$, determina $\varphi(t)$.

Per una molecola biatomica stabile, è fisicamente ragionevole richiedere che il potenziale $V(r)$ abbia un punto di minimo per $r = R_0$. Se si considerano soltanto piccole oscillazioni intorno a R_0 , ponendo

$$r \equiv R_0 + x \quad (3.86)$$

e sviluppando $V(r)$ in serie di Taylor, si ottiene

$$V(r) = V(R_0) + \frac{V''(R_0)}{2!} x^2 + \dots \quad (3.87)$$

$$= V(R_0) + \frac{k}{2} x^2 + \dots \quad (3.88)$$

dove

$$k \equiv V''(R_0). \quad (3.89)$$

Scegliendo l'origine delle energie in modo tale che $V(R_0) = 0$ e assumendo che per piccole oscillazioni $(R_0 + x)^2 \simeq R_0^2$, La Lagrangiana (3.83) diventa

$$L_r = \frac{1}{2} \mu R_0^2 \dot{\varphi}^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{x}^2 - \frac{1}{2} k x^2 - \dots \quad (3.90)$$

che si decompone ulteriormente nella somma

$$L_r = L_{R_0} + L_x, \quad (3.91)$$

dove il primo termine (eq. (3.69)) descrive la rotazione della molecola alla distanza di equilibrio $r = R_0$. L_x descrive la vibrazione della molecola e, se la serie di Taylor (3.88) è troncata al secondo ordine in x , essa coincide con la Lagrangiana di un oscillatore armonico (eq. (3.76)), la cui costante di forza è pari alla derivata seconda del potenziale calcolata alla distanza di equilibrio R_0 (eq. (3.89)).

Capitolo 4

Trattazione Canonica dei Campi

Fino a questo punto abbiamo considerato il formalismo canonico applicato alla descrizione di un sistema con un numero finito (o, al più, infinito numerabile) di gradi di libertà. La fisica teorica classica, però, è interessata anche a campi, che sono sistemi con un numero infinito continuo di gradi di libertà. Più precisamente, un *campo* è una funzione continua ϕ (avente, eventualmente, più componenti) delle coordinate spaziali \mathbf{x} e del tempo t (collettivamente denotati, in questo e nei capitoli 5 e 11, con x , cioè $x = (\mathbf{x}, t)$):

$$\phi = \phi(\mathbf{x}, t) \equiv \phi(x). \quad (4.1)$$

La trattazione canonica di un campo classico ϕ procede come segue. Ad ogni istante t , l'insieme dei valori di ϕ corrispondenti a tutti i punti \mathbf{x} dello spazio può essere considerato come un insieme continuo di coordinate generalizzate. Lo spazio tridimensionale ordinario è allora suddiviso in una infinità numerabile di elementi di volume δV_j , in ognuno dei quali il valor medio di ϕ è definito

$$\phi_j(t) \equiv \frac{1}{\delta V_j} \int_{\delta V_j} d^3x \phi(x). \quad (4.2)$$

Si ottiene così un insieme infinito numerabile di coordinate generalizzate ϕ_j che possiamo trattare come già visto nei capitoli 2 e 3. In particolare, si ammette l'esistenza di una funzione Lagrangiana

$$L = L(\phi_j(t), \dot{\phi}_j(t), t), \quad j = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.3)$$

che, al limite del continuo, definito in modo tale che

1. il j -esimo elemento di volume si riduca fino ad identificarsi con il punto \mathbf{x} dello spazio, e
2. $\phi_j(t)$ si riduca al valore $\phi(\mathbf{x}, t)$,

diventa un funzionale

$$L = L [\phi(x), \dot{\phi}(x), t] \quad (4.4)$$

che soddisfa il principio di Hamilton e, di conseguenza, le equazioni di Eulero-Lagrange.

È possibile evitare di ricorrere all'uso dell'analisi funzionale introducendo la *densità di Lagrangiana*, definita come la funzione

$$\lambda = \lambda(\phi(x), \dot{\phi}(x), \nabla\phi(x), x) \quad (4.5)$$

tale che

$$L = \int d^3x \lambda \quad (4.6)$$

sia la funzione Lagrangiana del sistema e

$$S = \int dt L = \int d^4x \lambda \quad (4.7)$$

sia l'integrale di azione al quale il principio di Hamilton si riferisce.

Teorema 4.1 *La densità di Lagrangiana che obbedisce al principio di Hamilton soddisfa le seguenti equazioni di Eulero-Lagrange:*

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\phi}} + \nabla \cdot \frac{\partial \lambda}{\partial (\nabla \phi)} = \frac{\partial \lambda}{\partial \phi}. \quad (4.8)$$

Dimostrazione: la dimostrazione di questo teorema è analoga a quella del teorema 2.1 e sarà qui omessa.

Commento 4.1 Per formulare la trattazione Hamiltoniana dobbiamo definire il momento coniugato alla coordinata generalizzata (cioè il momento coniugato al campo ϕ) e la funzione Hamiltoniana.

Teorema 4.2 *Il momento coniugato alla variabile di campo ϕ è*

$$\pi(x) = \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\phi}} \quad (4.9)$$

e la funzione Hamiltoniana è

$$H = \int d^3x (\pi \dot{\phi} - \lambda) = \int d^3x \omega(x), \quad (4.10)$$

dove

$$\omega(x) = \pi(x) \dot{\phi}(x) - \lambda(x) \quad (4.11)$$

è la *funzione densità di Hamiltoniano*.

Dimostrazione: notiamo innanzitutto che l'eq. (4.6) è il limite continuo di

$$L = \sum_j \lambda_j \delta V_j. \quad (4.12)$$

Quindi,

$$p_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}_k} = \sum_j \frac{\partial \lambda_j}{\partial \dot{\phi}_k} \delta V_j = \frac{\partial \lambda_k}{\partial \dot{\phi}_k} \delta V_k = \pi_k \delta V_k \quad (4.13)$$

e

$$H = \sum_k p_k \dot{\phi}_k - L = \sum_k \left(\pi_k \dot{\phi}_k - \lambda_k \right) \delta V_k \quad (4.14)$$

che, al limite del continuo, diventa l'eq. (4.10), se $\pi(x)$, il momento coniugato a ϕ , è definito come nell'eq. (4.9).

Esempio 4.1 (Campo di Schrödinger) Il campo di Schrödinger è un campo complesso $\Psi(x)$ che soddisfa l'equazione di Schrödinger,

$$i\partial_t \Psi(x) = \left[-\frac{1}{2\mu} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \Psi(x), \quad (4.15)$$

e che tende a zero all'infinito (μ è una costante data e $V(\mathbf{x})$ una funzione reale delle coordinate spaziali \mathbf{x}). Il campo ha pertanto due componenti che possono essere la parte reale e immaginaria di Ψ , $\text{Re}\Psi$ e $\text{Im}\Psi$, oppure, in modo del tutto equivalente, Ψ stesso ed il suo complesso coniugato Ψ^* , la cui equazione costitutiva è facilmente ricavabile prendendo il complesso coniugato dell'eq. (4.15),

$$-i\partial_t \Psi^*(x) = \left[-\frac{1}{2\mu} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \Psi^*(x). \quad (4.16)$$

In accordo con il commento 2.4, dobbiamo ora trovare una densità di Lagrangiana λ (che è, in generale, una funzione delle coordinate generalizzate di campo, Ψ e Ψ^* , delle loro derivate spaziali e temporali ed, eventualmente, delle coordinate spaziali e del tempo, che, inserita nelle equazioni di Eulero-Lagrange (4.8), riproduca le equazioni di campo (4.15) e (4.16). Si può facilmente verificare che una densità di Lagrangiana accettabile è

$$\lambda = i\Psi^* \dot{\Psi} - \frac{1}{2\mu} \nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi - V(\mathbf{x}) \Psi^* \Psi. \quad (4.17)$$

Infatti, si ha

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\Psi}} = i\Psi^*, \quad \frac{\partial \lambda}{\partial \nabla \Psi} = -\frac{1}{2\mu} \nabla \Psi^*,$$

e perciò

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\Psi}} + \nabla \cdot \frac{\partial \lambda}{\partial \nabla \Psi} = i\dot{\Psi}^* - \frac{1}{2\mu} \Delta \Psi^*.$$

Il secondo membro di quest'ultima equazione è uguale al secondo membro dell'equazione

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \Psi} = -V\Psi^*,$$

cosicché l'eq. (4.16) è riprodotta (e quindi anche la sua complessa coniugata (4.15)). Perciò la funzione λ definita nell'eq. (4.17) è un'accettabile densità di Lagrangiana per il campo di Schrödinger.

Per sviluppare la trattazione Hamiltoniana del campo di Schrödinger dobbiamo definire i momenti coniugati alle coordinate generalizzate Ψ e Ψ^* e scrivere la densità di Hamiltoniano. Dalle equazioni (4.9) e (4.17) si ha

$$\pi_{\Psi} \equiv \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\Psi}} = i\Psi^* \quad (4.18)$$

e

$$\pi_{\Psi^*} \equiv \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{\Psi}^*} = 0, \quad (4.19)$$

dalle quali si può notare che Ψ^* non è propriamente una coordinata generalizzata indipendente, ma piuttosto il momento coniugato a Ψ . Dalle equazioni (4.11) e (4.17), la densità di Hamiltoniano è

$$\omega(x) = \frac{1}{2\mu} \nabla \Psi^* \nabla \Psi + V(\mathbf{x}) \Psi^* \Psi, \quad (4.20)$$

e, dall'eq. (4.10), la funzione Hamiltoniana è

$$\begin{aligned} H &= \int d^3x \left[\frac{1}{2\mu} \nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi + V \Psi^* \Psi \right] \\ &= \frac{1}{2\mu} \Psi^* \nabla \Psi \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int d^3x \Psi^* \left[-\frac{1}{2\mu} \Delta + V \right] \Psi \\ &= \int d^3x \Psi^*(x) \left[-\frac{1}{2\mu} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \Psi(x) \end{aligned} \quad (4.21)$$

dove si è integrato per parti e si è sfruttato il fatto che Ψ è zero all'infinito.

Capitolo 5

Il Campo Elettromagnetico

Un campo elettromagnetico è definito dai suoi componenti, campo elettrico e magnetico, $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{E}(x)$ e $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{B}(x)$, che soddisfano le *equazioni di Maxwell*,

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho \quad (5.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c}\dot{\mathbf{B}} = 0 \quad (5.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (5.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{E}} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}, \quad (5.4)$$

dove $\rho(x)$ e $\mathbf{j}(x)$ sono, rispettivamente, la densità di carica e la densità di corrente, e c è la velocità della luce nel vuoto.

Teorema 5.1 *La divergenza di un rotore è nulla.*

Dimostrazione: per qualsiasi vettore \mathbf{A} si ha

$$\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{A} = \nabla \cdot \hat{x}_j \epsilon_{jkl} \partial_k A_l = \epsilon_{jkl} \partial_j \partial_k A_l \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} &= \epsilon_{jkl} \partial_k \partial_j A_l = -\epsilon_{kjl} \partial_k \partial_j A_l \\ &= -\epsilon_{jkl} \partial_j \partial_k A_l. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Confrontando le equazioni (5.5) e (5.6) si vede che

$$\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{A} = 0. \quad (5.7)$$

Teorema 5.2 *Le densità di carica e di corrente obbediscono ad un'equazione di continuità.*

Dimostrazione: Calcolando la divergenza dell'eq. (5.4) e usando l'eq. (5.1) ed il teorema 5.1, si ottiene

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(x) + \dot{\rho}(x) = 0. \quad (5.8)$$

5.1 Gauges

Teorema 5.3 *Si ha la seguente identità:*

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \Delta \mathbf{A}. \quad (5.9)$$

Dimostrazione: sfruttando l'identità (2.6) si ha

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) &= \hat{x}_j \epsilon_{jkl} \partial_k (\nabla \times \mathbf{A})_l = \hat{x}_j \epsilon_{jkl} \epsilon_{lpq} \partial_k \partial_p A_q \\ &= \hat{x}_j (\delta_{jp} \delta_{kq} - \delta_{jq} \delta_{kp}) \partial_k \partial_p A_q \\ &= \hat{x}_j (\partial_k \partial_j A_k - \partial_k \partial_k A_j) \\ &= \hat{x}_j \partial_j \partial_k A_k - \hat{x}_j \partial_k^2 A_j = \hat{x}_j \partial_j (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \hat{x}_j \Delta A_j \\ &= \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \Delta \mathbf{A}. \end{aligned}$$

Teorema 5.4 *Il campo elettromagnetico può essere descritto da un potenziale vettore $\mathbf{A}(x)$ ed un potenziale scalare $\phi(x)$ che soddisfano le seguenti equazioni:*

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}} - \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \dot{\phi} \right) = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (5.10)$$

e

$$\Delta \phi + \frac{1}{c} \nabla \cdot \dot{\mathbf{A}} = -4\pi \rho. \quad (5.11)$$

Dimostrazione: per l'eq. (5.3) e il teorema 5.1, è possibile definire un vettore \mathbf{A} tale che

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (5.12)$$

Usando l'eq. (5.12), l'eq. (5.2) diventa

$$\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} \right) = 0, \quad (5.13)$$

da cui, usando il teorema 2.5, è possibile definire uno scalare ϕ tale che

$$\mathbf{E} + \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} = -\nabla \phi. \quad (5.14)$$

Le equazioni (5.12) e (5.14) definiscono un potenziale vettore ed un potenziale scalare che descrivono un campo elettromagnetico solo se le equazioni (5.10) e (5.11) sono soddisfatte. Ciò può essere verificato inserendo l'eq. (5.12) nell'eq. (5.4), l'eq. (5.14) nell'eq. (5.1) e facendo uso dell'identità vettoriale (5.9).

Definizione 5.1 La trasformazione dei potenziali scalare e vettore definita da

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f \quad (5.15)$$

e

$$\phi' = \phi - \frac{1}{c} \dot{f} \quad (5.16)$$

(dove $f = f(x)$ è qualsiasi funzione scalare della posizione e del tempo), è detta *trasformazione di gauge*.

Teorema 5.5 *I campi elettrico e magnetico, \mathbf{E} e \mathbf{B} , sono invarianti per trasformazioni di gauge.*

Dimostrazione: se l'eq. (5.12) è soddisfatta, il rotore di \mathbf{A}' è

$$\nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times (\mathbf{A} + \nabla f) = \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B},$$

dato che, per il teorema 2.5, il rotore di un gradiente è nullo. Inoltre, se l'eq. (5.14) è soddisfatta, si ha

$$-\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}' - \nabla\phi' = -\frac{1}{c}(\dot{\mathbf{A}} + \nabla f) - \nabla\left(\phi - \frac{1}{c}\dot{f}\right) = -\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} - \nabla\phi = \mathbf{E}.$$

Commento 5.1 La coppia di potenziali (\mathbf{A}, ϕ) non è unica: la coppia (\mathbf{A}', ϕ') , definita nelle equazioni (5.15)-(5.16) descrive lo stesso campo elettromagnetico descritto dalla coppia (\mathbf{A}, ϕ) . L'arbitrarietà nella scelta della gauge ci permette di scegliere i potenziali a meno di una condizione supplementare (solo una, in quanto è possibile scegliere in modo arbitrario soltanto una funzione scalare $f(x)$ nelle equazioni (5.15) e (5.16)). Per esempio, si potrebbe scegliere $f(x)$ in modo tale che $\phi(x) = 0$. In pratica, dato che (come vedremo nel teorema 5.6 di seguito) un vettore è determinato in modo univoco specificando il suo rotore e la sua divergenza, e dato che il rotore di \mathbf{A} è già fissato dall'eq. (5.12), la condizione supplementare arbitraria è scelta in modo tale da fissare in modo opportuno la divergenza di \mathbf{A} .

Teorema 5.6 (Helmoltz) *Un vettore \mathbf{V} è univocamente determinato specificandone, entro un volume chiuso Ω , la divergenza ρ e il rotore, \mathbf{j} e la componente V_{\perp} normale alla superficie S che racchiude tale volume.*

Dimostrazione: si assuma che le quantità V_{\perp} , ρ e \mathbf{j} siano date:

$$\nabla \times \mathbf{V} = \mathbf{j} \quad \text{e} \quad \nabla \cdot \mathbf{V} = \rho. \quad (5.17)$$

Si assuma, inoltre, che esista un vettore \mathbf{U} tale che $U_{\perp} = V_{\perp}$ e

$$\nabla \times \mathbf{U} = \mathbf{j} \quad \text{e} \quad \nabla \cdot \mathbf{U} = \rho. \quad (5.18)$$

Dimostreremo che $\mathbf{W} = \mathbf{V} - \mathbf{U}$ è identicamente nullo, cioè che $\mathbf{U} = \mathbf{V}$. Infatti, dalle equazioni (5.17) e (5.18), il rotore e la divergenza di \mathbf{W} sono nulli, per cui esiste uno scalare χ il cui gradiente è uguale a \mathbf{W} (teorema 2.5) e il cui Laplaciano è nullo, cioè

$$\mathbf{W} = \nabla\chi \quad \text{e} \quad \nabla \cdot \mathbf{W} = \Delta\chi = 0.$$

Se si integrano, sul volume chiuso Ω , entrambi i membri dell'identità vettoriale

$$\nabla \cdot (\chi \nabla \chi) \equiv \chi \Delta \chi + \nabla \chi \cdot \nabla \chi,$$

si ottiene

$$\int_S \chi \nabla \chi \cdot d\mathbf{s} = \int_{\Omega} d^3x \chi \Delta \chi + \int_{\Omega} d^3x \nabla \chi \cdot \nabla \chi,$$

che, nel nostro caso, diventa

$$\int_S \chi \mathbf{W} \cdot d\mathbf{s} = \int_{\Omega} d^3x W^2.$$

Siccome si ha anche $\mathbf{W} \cdot d\mathbf{s} = W_{\perp} = V_{\perp} - U_{\perp} = 0$, allora

$$\int_{\Omega} d^3x W^2 = 0.$$

Ma W^2 è una quantità non negativa, e l'integrale di volume è zero solo se $\mathbf{W} = 0$, cioè solo se $\mathbf{U} = \mathbf{V}$. Pertanto \mathbf{V} è unico.

Commento 5.2 Se il potenziale vettore \mathbf{A} è scelto nullo all'infinito, per il teorema 5.6, esso è univocamente determinato dal suo rotore e dalla sua divergenza. Il rotore è già fissato dall'eq. (5.12), e perciò l'unica arbitrarietà riguarda la divergenza. Fra le infinite possibili scelte, quelle che ora definiremo sono di particolare importanza.

Definizione 5.2 La *gauge di Lorentz* è la gauge in cui

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = -\frac{1}{c} \dot{\phi}. \quad (5.19)$$

Definizione 5.3 La *gauge di Coulomb* è la gauge in cui

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (5.20)$$

Teorema 5.7 Nella *gauge di Lorentz* le equazioni di campo sono

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (5.21)$$

e

$$\Delta \phi - \frac{1}{c^2} \ddot{\phi} = -4\pi\rho, \quad (5.22)$$

e nella *gauge di Coulomb* le equazioni di campo sono

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}} - \frac{1}{c} \nabla \dot{\phi} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (5.23)$$

e

$$\Delta \phi = -4\pi\rho. \quad (5.24)$$

Dimostrazione: le equazioni (5.10) e (5.11) si riducono alle equazioni (5.21) e (5.22) se si adotta la gauge di Lorentz, eq. (5.19), e si riducono alle equazioni (5.23) e (5.24) se si adotta la gauge di Coulomb, eq. (5.20).

Commento 5.3 Le denominazioni delle gauge definite precedentemente derivano dalle seguenti considerazioni. L'eq. (5.19) è manifestamente invariante per trasformazioni di Lorentz. L'eq. (5.20) implica l'eq. (5.24) che, a tempo fissato, è l'equazione di Poisson dell'elettrostatica; quindi, nella gauge di Coulomb, ϕ è il potenziale di Coulomb istantaneo generato dalla densità di carica istantanea $\rho(x)$.

5.2 Il campo nel vuoto

Commento 5.4 Un'onda elettromagnetica è, per definizione, un campo elettromagnetico nel vuoto, cioè in assenza di cariche o correnti,

$$\mathbf{j}(x) = \rho(x) \equiv 0. \quad (5.25)$$

Siccome, nella gauge di Coulomb, $\phi(x)$ è il potenziale Coulombiano istantaneo (commento 5.3), nel vuoto si ha $\Delta\phi = 0$ e, scegliendo $\phi = 0$ all'infinito, si ha

$$\phi(x) \equiv 0. \quad (5.26)$$

Perciò, nella gauge di Coulomb, un'onda elettromagnetica è descritta esclusivamente dal potenziale vettore \mathbf{A} la cui equazione di campo è l'equazione delle onde

$$\Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\ddot{\mathbf{A}} = 0, \quad (5.27)$$

ottenuta sostituendo le equazioni (5.25) e (5.26) nell'eq. (5.23). Se si richiede, inoltre, che \mathbf{A} sia zero all'infinito, allora \mathbf{A} è unico.

Commento 5.5 Per fornire una descrizione canonica del campo elettromagnetico nel vuoto occorre trovare una densità di Lagrangiana λ che, inserita nelle equazioni di Eulero-Lagrange (equazioni (4.8)), riproduca l'equazione di campo (5.27).

Teorema 5.8 *Si ha la seguente identità vettoriale:*

$$(\nabla \times \mathbf{A})^2 = (\partial_k A_l)(\partial_k A_l) - (\partial_k A_l)(\partial_l A_k). \quad (5.28)$$

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} (\nabla \times \mathbf{A})^2 &= \epsilon_{jkl}(\partial_k A_l)\epsilon_{j pq}(\partial_p A_q) = \epsilon_{jkl}\epsilon_{j pq}(\partial_k A_l)(\partial_p A_q) \\ &= \epsilon_{klj}\epsilon_{j pq}(\partial_k A_l)(\partial_p A_q) \\ &= (\delta_{kp}\delta_{lq} - \delta_{kq}\delta_{lp})(\partial_k A_l)(\partial_p A_q) \\ &= (\partial_k A_l)(\partial_k A_l) - (\partial_k A_l)(\partial_l A_k). \end{aligned}$$

Teorema 5.9 *Una densità di Lagrangiana \mathbf{A} che soddisfa l'equazione di campo (5.27) è*

$$\lambda = \frac{1}{8\pi}(\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2), \quad (5.29)$$

dove, per le equazioni (5.12), (5.14) e (5.26),

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} \quad (5.30)$$

e

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (5.31)$$

Dimostrazione: riscrivendo l'eq. (5.29),

$$\lambda = \frac{1}{8\pi c^2} \left[\dot{\mathbf{A}}^2 - c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] \quad (5.32)$$

$$= \frac{1}{8\pi c^2} \left[\dot{A}_k \dot{A}_k - c^2 (\partial_k A_l)^2 + c^2 (\partial_k A_l) (\partial_l A_k) \right] \quad (5.33)$$

e sostituendola nelle equazioni di Eulero-Lagrange (4.8) che, per il campo \mathbf{A} sono

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{A}_j} + \partial_k \frac{\partial \lambda}{\partial (\partial_k A_j)} = \frac{\partial \lambda}{\partial A_j}, \quad (5.34)$$

si ha, dopo aver semplificato il fattore comune $1/4\pi$,

$$\frac{1}{c^2} \ddot{A}_j - \partial_k^2 A_j + \partial_k \partial_j A_k = 0, \quad (5.35)$$

cioè

$$\frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}} - \Delta \mathbf{A} + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) = 0.$$

Quest'ultima equazione diventa, nella gauge di Coulumb,

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}} = 0,$$

che è proprio l'eq. (5.27).

Teorema 5.10 *La funzione Hamiltoniana del campo elettromagnetico nel vuoto è*

$$H = \frac{1}{8\pi} \int d^3x (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) \quad (5.36)$$

$$= \frac{1}{8\pi c^2} \int d^3x \left[\dot{A}_j \dot{A}_j + c^2 (\partial_j A_k) (\partial_j A_k) \right]. \quad (5.37)$$

Dimostrazione: dalle equazioni (4.9) e (5.33), il momento coniugato alla j -esima componente del campo \mathbf{A} è

$$\pi_j \equiv \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{A}_j} = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{A}_j \quad (5.38)$$

e, per le equazioni (4.11) e (5.32), la densità di Hamiltoniano è

$$\begin{aligned} \omega &= \boldsymbol{\pi} \cdot \dot{\mathbf{A}} - \lambda = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{A}_j \dot{A}_j - \frac{1}{8\pi c^2} \dot{A}_j \dot{A}_j + \frac{1}{8\pi} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \\ &= \frac{1}{8\pi c^2} \left[\dot{A}_j \dot{A}_j + c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2). \end{aligned} \quad (5.39)$$

Per l'eq. (4.10),

$$H = \int d^3x \omega = \frac{1}{8\pi} \int d^3x (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2)$$

che è l'eq. (5.36) e che, usando le equazioni (5.30) e (5.31), può essere riscritta

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{8\pi} \int d^3x (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) \\ &= \frac{1}{8\pi c^2} \int d^3x \left[\dot{A}_j \dot{A}_j + c^2 (\partial_j A_k) (\partial_j A_k) - c^2 (\partial_j A_k) (\partial_k A_j) \right], \end{aligned}$$

in cui l'ultimo termine è nullo in quanto, integrato per parti, diventa

$$\begin{aligned} \int d^3x (\partial_j A_k) (\partial_k A_j) &= \int d^3x \partial_k [(\partial_j A_k) A_j] \\ &\quad - \int d^3x [\partial_k (\partial_j A_k)] A_j \\ &= (\partial_j A_k) A_j|_{surface} \\ &\quad - \int d^3x [\partial_j (\partial_k A_k)] A_j; \end{aligned} \quad (5.40)$$

il termine di superficie è nullo dato che \mathbf{A} è zero all'infinito, e l'ultimo termine è anche nullo perché abbiamo scelto la gauge di Coulomb (eq. (5.20)). In conclusione si ha

$$H = \frac{1}{8\pi c^2} \int d^3x \left[\dot{A}_j \dot{A}_j + c^2 (\partial_j A_k) (\partial_j A_k) \right],$$

che è l'eq. (5.37).

Commento 5.6 Nelle equazioni (5.29) e (5.36)–(5.39) è presente un fattore $1/4\pi$ che abbiamo eliminato nell'eq. (5.35). Il fattore $1/4\pi$ è necessario se vogliamo che l'Hamiltoniano rappresenti l'energia, espressa in erg, del campo elettromagnetico, consistentemente con la scelta delle unità Gaussiane nelle equazioni di Maxwell (5.1)–(5.4).

5.3 Cariche nel campo

Commento 5.7 Finora abbiamo considerato il campo elettromagnetico nel vuoto, cioè in assenza di cariche o correnti. Vogliamo ora formulare una descrizione canonica di una carica e in un campo elettromagnetico definito dai vettori \mathbf{E} e \mathbf{B} . Si ricordi che la forza \mathbf{F} esercitata dal campo elettromagnetico sulla carica è la *forza di Lorentz*

$$\mathbf{F} = e \left[\mathbf{E} + \frac{1}{c} \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} \right]. \quad (5.41)$$

Teorema 5.11 *Si ha la seguente identità:*

$$\nabla \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \equiv (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{A} + (\nabla \cdot \mathbf{B}) \mathbf{A} - (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B} - (\nabla \cdot \mathbf{A}) \mathbf{B}. \quad (5.42)$$

Dimostrazione:

$$\begin{aligned}
 \nabla \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) &= \hat{x}_j \epsilon_{jkl} \partial_k (\mathbf{A} \times \mathbf{B})_l = \hat{x}_j \epsilon_{jkl} \partial_k \epsilon_{lpq} A_p B_q \\
 &= \hat{x}_j (\delta_{jp} \delta_{kq} - \delta_{jq} \delta_{kp}) (B_q \partial_k A_p + A_p \partial_k B_q) \\
 &= \hat{x}_j (B_k \partial_k A_j + A_j \partial_k B_k - B_j \partial_k A_k - A_k \partial_k B_j) \\
 &= (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{A} + \mathbf{A} (\nabla \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B} (\nabla \cdot \mathbf{A}) - (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B},
 \end{aligned}$$

dove si è fatto uso dell'eq. (2.6).

Commento 5.8 Non è possibile scrivere la forza di Lorentz in termini del gradiente di una funzione scalare che dipende solo dalla posizione della carica, perché la forza di Lorentz dipende anche dalla velocità della carica. Tuttavia, come vedremo nei prossimi due teoremi, la Lagrangiana di una carica in un campo elettromagnetico può essere ancora scritta come la differenza

$$L = T - U, \quad (5.43)$$

dove U è un'appropriata funzione della posizione e della velocità della carica.

Teorema 5.12 *Se esiste una funzione U delle coordinate e delle velocità generalizzate tale che la j -esima componente della forza può essere scritta come*

$$F_j = -\frac{\partial U}{\partial q_j} + \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j}, \quad (5.44)$$

allora la Lagrangiana di una particella soggetta alla forza \mathbf{F} è

$$L = T - U, \quad (5.45)$$

dove T è l'energia cinetica della particella. (Vedremo che l'Hamiltoniano non è $T + U$.)

Dimostrazione: in coordinate Cartesiane si ha

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} = m \ddot{q}_j \quad (5.46)$$

e, inserendo l'eq. (5.45) nelle equazioni di Eulero-Lagrange, si ha

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} - \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial L}{\partial q_j} = -\frac{\partial U}{\partial q_j}.$$

Da quest'ultima equazione, dall'eq. (5.46), e assumendo che l'eq. (5.44) sia soddisfatta, si ha

$$m \ddot{q}_j = -\frac{\partial U}{\partial q_j} + \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j} = F_j,$$

che è l'equazione di Newton, cioè l'equazione del moto della particella in coordinate Cartesiane. Naturalmente, la forma (5.45) della Lagrangiana rimane valida anche in coordinate generalizzate (commento 2.2).

Teorema 5.13 *Le componenti della forza di Lorentz possono essere scritte nella forma (5.44).*

Dimostrazione: usando le equazioni (5.12) e (5.13), riscriviamo l'eq. (5.41),

$$\mathbf{F} = e \left\{ -\nabla\phi - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} + \frac{1}{c}[\dot{\mathbf{r}} \times (\nabla \times \mathbf{A})] \right\} \quad (5.47)$$

o, per una componente,

$$F_j = -e\partial_j\phi - \frac{e}{c}\dot{A}_j + \frac{e}{c}[\dot{\mathbf{r}} \times (\nabla \times \mathbf{A})]_j. \quad (5.48)$$

L'ultimo termine dell'eq. (5.48) può essere scritto nella forma

$$\begin{aligned} [\dot{\mathbf{r}} \times (\nabla \times \mathbf{A})]_j &= \epsilon_{jkl}\dot{x}_k(\nabla \times \mathbf{A})_l \\ &= \epsilon_{jkl}\dot{x}_k\epsilon_{lpq}\partial_p A_q = \epsilon_{jkl}\epsilon_{lpq}\dot{x}_k\partial_p A_q \\ &= (\delta_{jp}\delta_{kq} - \delta_{jq}\delta_{kp})\dot{x}_k\partial_p A_q = \dot{x}_k\partial_j A_k - \dot{x}_k\partial_k A_j \\ &= \partial_j(\dot{x}_k A_k) - (\partial_j\dot{x}_k)A_k - \dot{x}_k\partial_k A_j \\ &= \partial_j(\dot{x}_k A_k) - (\partial_k A_j)\dot{x}_k \end{aligned} \quad (5.49)$$

dove si è fatto uso del fatto che

$$\partial_j\dot{x}_k = \partial_j\partial_t x_k = \partial_t\partial_j x_k = \partial_t\delta_{jk} = 0.$$

L'eq. (5.48) diventa quindi

$$\begin{aligned} F_j &= e \left[-\partial_j\phi - \frac{1}{c}\dot{A}_j + \frac{1}{c}\partial_j(A_k\dot{x}_k) - \frac{1}{c}(\partial_k A_j)\dot{x}_k \right] \\ &= e \left[-\partial_j \left(\phi - \frac{1}{c}\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) - \frac{1}{c} \left(\dot{A}_j + (\partial_k A_j)\dot{x}_k \right) \right] \end{aligned} \quad (5.50)$$

il cui ultimo termine può essere riscritto come

$$\begin{aligned} \dot{A}_j + (\partial_k A_j)\dot{x}_k &= \frac{d}{dt}A_j = \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{x}_j}(A_k\dot{x}_k) \right] \\ &= \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{x}_j}(\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}}) \right] = \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{x}_j}(\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} - c\phi) \right]. \end{aligned}$$

Pertanto, l'eq. (5.50) diventa

$$\begin{aligned} F_j &= -e\partial_j \left(\phi - \frac{1}{c}\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) + \frac{e}{c} \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{x}_j}(c\phi - \mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}}) \right] \\ &= -\partial_j \left[e \left(\phi - \frac{1}{c}\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) \right] \\ &\quad + \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{x}_j} e \left(\phi - \frac{1}{c}\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.51)$$

che è nella forma (5.44) se si pone

$$U \equiv e \left(\phi - \frac{1}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{v} \right), \quad (5.52)$$

dove \mathbf{v} è la velocità della carica.

Teorema 5.14 *L'unica classe di forze dipendenti dalla velocità per le quali esiste una funzione U delle coordinate e delle velocità generalizzate tale che la Lagrangiana della particella sulla quale la forza agisce sia della forma $L = T - U$, è quella delle forze di tipo Lorentz.*

Teorema 5.15 *La Lagrangiana di una particella di massa m e carica e in un campo elettromagnetico è*

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - e\phi + \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}}. \quad (5.53)$$

Dimostrazione: l'eq. (5.53) segue direttamente dai teoremi 5.12 e 5.13.

Teorema 5.16 *L'Hamiltoniano di una particella di massa m e carica e in un campo elettromagnetico è*

$$H = \frac{1}{2m} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 + e\phi, \quad (5.54)$$

dove \mathbf{p} è il momento coniugato alla coordinata di posizione \mathbf{r} della particella.

Dimostrazione: dalla Lagrangiana (5.53) si ha

$$p_j \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} = m\dot{x}_j + \frac{e}{c} A_j, \quad (5.55)$$

per cui

$$\dot{x}_j = \left(p_j - \frac{e}{c} A_j \right) / m, \quad (5.56)$$

quindi

$$\begin{aligned} H &\equiv \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - L \\ &= \mathbf{p} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) / m - \frac{m}{2} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 / m^2 \\ &\quad + e\phi - \frac{e}{mc} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \mathbf{A} \\ &= \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) / m - \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 / 2m + e\phi \\ &= \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 / 2m + e\phi = T + e\phi, \end{aligned}$$

che è l'eq. (5.54).

Commento 5.9 Si noti che \mathbf{p} non è il momento lineare (che invece è dato dall'eq. (5.56)). Ciò non è sorprendente se si ricorda che, per il teorema 2.14, il momento coniugato ad una coordinata Cartesiana è il momento lineare solo se $L = T - V$, dove T è l'energia cinetica e V è una funzione indipendente dalle velocità. Nel nostro caso L è della forma $T - U$, ma U dipende sia dalla posizione \mathbf{r} che dalla velocità \mathbf{v} della carica (vedi eq. (5.53)).

Commento 5.10 Si noti, inoltre, che l'Hamiltoniano non è $T + U$. Ciò non è sorprendente se si ricorda che, per il teorema 2.12, $H = T + U$ solo se $L = T - U$ dove T è una funzione omogenea di secondo grado delle velocità e U , l'energia potenziale, è indipendente dalle velocità. Perciò

$$H \neq T + U = T + e\phi - \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{v}, \quad (5.57)$$

ma, semplicemente,

$$H = T + e\phi. \quad (5.58)$$

Vedremo che ciò è consistente con il fatto che il campo magnetico \mathbf{B} non compie lavoro sulla carica.

Teorema 5.17 *La derivata temporale dell'energia cinetica T di una carica e soggetta alla forza di Lorentz (5.41) è*

$$\frac{dT}{dt} = e\mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{r}}. \quad (5.59)$$

Dimostrazione: se m è la massa della carica, la sua energia cinetica è

$$T = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2,$$

da cui

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\partial T}{\partial \dot{r}_j} \ddot{r}_j = m \dot{\mathbf{r}} \cdot \ddot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{F} = e \dot{\mathbf{r}} \cdot \left[\mathbf{E} + \frac{1}{c} \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} \right] = e \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{r}},$$

dove si è usato il fatto che

$$\dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} = 0.$$

Teorema 5.18 *Il campo magnetico non compie lavoro.*

Dimostrazione: il lavoro W_{12} compiuto dal campo per spostare la carica da un punto 1 ad un punto 2 è pari alla differenza delle energie cinetiche della carica ai due punti dati (teorema 2.3) e, per il teorema 5.17, tale lavoro è

$$W_{12} = e \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{r}} dt = e \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r},$$

da cui si può notare che l'unico contributo al lavoro compiuto dalla forza di Lorentz proviene dalla componente elettrica del campo elettromagnetico. Il campo magnetico \mathbf{B} , esercitando una forza perpendicolare alla velocità della carica (e perciò perpendicolare allo spostamento), non compie lavoro.

Commento 5.11 Il risultato (5.58) è anche consistente con il fatto che l'energia potenziale di una carica in un campo elettromagnetico è determinata, nella gauge di Coulomb, non dal potenziale vettore \mathbf{A} , ma esclusivamente dal potenziale scalare ϕ , cioè soltanto dal potenziale Coulombiano istantaneo. Quest'ultimo è determinato solo dal campo elettrico \mathbf{E} e non dal campo magnetico $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ che non compie lavoro sulla carica.

Teorema 5.19 *Si ha la seguente identità:*

$$\nabla \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot \mathbf{B} - \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) \quad (5.60)$$

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) &= \partial_j (\mathbf{A} \times \mathbf{B})_j = \partial_j \epsilon_{jkl} A_k B_l = \epsilon_{jkl} \partial_j A_k B_l \\ &= \epsilon_{jkl} (\partial_j A_k) B_l + \epsilon_{jkl} A_k \partial_j B_l \\ &= (\epsilon_{ljk} \partial_j A_k) B_l - A_k (\epsilon_{kjl} \partial_j B_l) \\ &= (\nabla \times \mathbf{A})_l B_l - A_k (\nabla \times \mathbf{B})_k \\ &= (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot \mathbf{B} - \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \mathbf{B}). \end{aligned}$$

Teorema 5.20 *Se T è l'energia cinetica totale di un sistema di cariche in un campo elettromagnetico, l'energia totale del sistema globale, composto dalle cariche e dal campo, è*

$$H = T + \frac{1}{8\pi} \int d^3x (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2). \quad (5.61)$$

Dimostrazione: moltiplichiamo scalarmente l'eq. (5.2) per \mathbf{B} e l'eq. (5.4) per \mathbf{E} . Se si sottraggono membro a membro le equazioni ottenute, si ha

$$\mathbf{B} \cdot \nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{B} \cdot \dot{\mathbf{B}} - \mathbf{E} \cdot \nabla \times \mathbf{B} + \frac{1}{c} \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{E}} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}.$$

Facendo uso dell'identità (5.60), quest'ultima equazione diventa

$$\frac{1}{c} (\mathbf{B} \cdot \dot{\mathbf{B}} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{E}}) = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} - \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B}),$$

cioè

$$\frac{1}{8\pi} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) = -\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} - \frac{c}{4\pi} \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B}),$$

da cui, integrando ambo i membri sul volume e applicando il teorema di Gauss all'ultimo integrale, si ottiene

$$\frac{1}{8\pi} \frac{\partial}{\partial t} \int d^3x (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) = - \int d^3x \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} - \frac{c}{4\pi} \int_S (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \cdot d\mathbf{s}.$$

L'integrale di superficie è nullo perché i campi \mathbf{E} e \mathbf{B} sono nulli all'infinito. Si ha, quindi,

$$\frac{1}{8\pi} \frac{\partial}{\partial t} \int d^3x (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) + \int d^3x \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = 0. \quad (5.62)$$

Si ricordi che per un sistema di cariche si ha

$$\int d^3x \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = \sum_k e_k \dot{\mathbf{r}}_k \cdot \mathbf{E}, \quad (5.63)$$

dove la somma è estesa a tutte le cariche. Allora, per le equazioni (5.59) e (5.63), l'eq. (5.62) diventa

$$\frac{d}{dt} \left[\int d^3x \left(\frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2}{8\pi} \right) + T \right] = 0. \quad (5.64)$$

Risulta, quindi, che la quantità in parentesi quadre è una costante del moto. Dato che non abbiamo assunto nessuna simmetria a parte l'uniformità del tempo, tale quantità deve essere identificata con l'energia totale del sistema. Il termine sotto il segno di integrale rappresenta la densità di energia del campo elettromagnetico ed è in accordo con l'eq. (5.36) (il fattore $1/8\pi$ di cui si è fatto menzione nel commento 5.6 è anche qui giustificato), e T è l'energia cinetica delle cariche.

Commento 5.12 Se \mathbf{Q} e \mathbf{L} sono, rispettivamente, la quantità di moto e il momento angolare di un sistema di cariche in un campo elettromagnetico, la quantità di moto totale \mathbf{P} e il momento angolare totale \mathbf{J} del sistema globale, composto dalle cariche e dal campo, sono

$$\mathbf{P} = \mathbf{Q} + \frac{1}{4\pi c} \int d^3x (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \quad (5.65)$$

e

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{1}{4\pi c} \int d^3x \mathbf{x} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}). \quad (5.66)$$

Commento 5.13 Nelle equazioni (5.61), (5.65) e (5.66), \mathbf{E} e \mathbf{B} contengono i contributi sia del campo esterno che del campo generato dalle cariche e dalle correnti del sistema. Per quest'ultimo contributo, l'integrale nell'eq. (5.61) coincide esattamente con l'energia che occorre per formare tali cariche e correnti: ciò spiega perché nell'eq. (5.61) non compare alcun termine di energia potenziale.

Esempio 5.1 (Carica in un campo magnetico uniforme) Un appropriato potenziale vettore che descrive, nella gauge di Coulomb, un campo magnetico uniforme \mathbf{B} è

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}. \quad (5.67)$$

Infatti, dalle equazioni (5.3), (5.42) e (5.67), si ha

$$2\nabla \times \mathbf{A} = \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = (\nabla \cdot \mathbf{r})\mathbf{B} - (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{r} = 3\mathbf{B} - \mathbf{B} = 2\mathbf{B},$$

e, pertanto, l'eq. (5.12) è verificata. Anche l'eq. (5.12) si verifica facilmente. Nella gauge di Coulomb ϕ è il potenziale elettrostatico istantaneo (commento

5.3) che, nel caso del presente esempio, è nullo. Inserendo l'eq. (5.67) nell'eq. (5.54) (con $\phi = 0$), si ottiene

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e}{\mu c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e}{2\mu c} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 \\
 &= \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{p} + \frac{e^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e}{2\mu c} \boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 \\
 &= \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \mathbf{M} \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2,
 \end{aligned} \tag{5.68}$$

che è l'Hamiltoniano di una particella di carica e e massa μ , in cui

$$\mathbf{M} = \frac{e}{2\mu c} \boldsymbol{\ell} \tag{5.69}$$

è il *momento magnetico* e $\boldsymbol{\ell}$ il momento angolare della carica.

Parte II

FISICA QUANTISTICA

La descrizione classica di un sistema fisico può riassumersi come segue:

1. Lo stato del sistema ad ogni istante è specificato dai valori delle coordinate generalizzate q e dei corrispondenti momenti coniugati p per tutti i gradi di libertà del sistema.
2. Ogni variabile dinamica è una funzione delle q , delle p e, eventualmente, del tempo.
3. Lo stato del sistema evolve nel tempo obbedendo alle equazioni di Hamilton

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \text{e} \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q},$$

dove $H = H(q, p, t)$ è la variabile dinamica corrispondente all'energia totale del sistema.

In meccanica quantistica, ad ogni sistema fisico è associato uno spazio di Hilbert separabile, \mathcal{H} , e la descrizione quantistica del sistema può riassumersi come segue:

1. Lo stato del sistema ad ogni istante t è specificato da un vettore $|\Psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$.
2. Ogni variabile dinamica è matematicamente rappresentata da un osservabile su \mathcal{H} .
3. Lo stato del sistema evolve nel tempo obbedendo all'equazione di Schrödinger

$$i\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle,$$

dove $H = H(t)$ è la variabile dinamica corrispondente all'energia totale del sistema.

Per comprendere la descrizione matematica della fisica, includiamo un capitolo sul formalismo matematico.

Capitolo 6

Formalismo Matematico

6.1 Spazi di Hilbert

Il concetto di *insieme* è un concetto primitivo, cioè non definito. Un insieme è specificato o elencando tutti i suoi elementi o enunciando una proprietà tale che, dato un oggetto, è possibile determinare in modo univoco se l'oggetto appartiene o no all'insieme.

Definizione 6.1 Un'applicazione f da un insieme A in un insieme B è una legge che associa ogni $a \in A$ ad uno ed un solo $b \in B$, e si scrive

$$f : A \rightarrow B \quad \text{oppure} \quad f(a) = b.$$

Teorema 6.1 Il prodotto tra applicazioni,

$$[f g](a) \equiv f(g(a)), \tag{6.1}$$

è associativo.

Dimostrazione: siano f , g e h tre applicazioni:

$$h : A \rightarrow B, \quad g : B \rightarrow C, \quad f : C \rightarrow D.$$

Per ogni $a \in A$, si ha

$$\begin{aligned} [[f g] h](a) &= [f g](h(a)) = f(g(h(a))) \\ &= f([g h](a)) = [f [g h]](a), \end{aligned}$$

per cui $[f g]h = f[gh]$.

Definizione 6.2 Il prodotto Cartesiano di due insiemi A e B è l'insieme $A \otimes B$ delle coppie ordinate (a, b) con $a \in A$ e $b \in B$.

Una operazione algebrica binaria sull'insieme A è una applicazione $f : A \otimes A \rightarrow A$.

Un *gruppoide* è un insieme sul quale è definita un'operazione algebrica binaria.

Un *semigrupp*o è un gruppoide associativo.

Un *gruppo* è un semigrupp

o per il quale ciascuna delle equazioni $ax = b$ e $ya = b$ ammettono una ed una sola soluzione.

Teorema 6.2 *In un gruppo G esiste uno ed un solo elemento, e , tale che $ae = ea = a$ per ogni $a \in G$.*

Dimostrazione: siccome G è un gruppo, l'equazione $ax = a$ ha un'unica soluzione, diciamo $x = e'_a$. Per qualsiasi altro $b \in G$ si può scrivere

$$b = ya = y(ae'_a) = (ya)e'_a = be'_a,$$

da cui si vede che e'_a non dipende da a ; possiamo quindi scrivere $e'_a = e'$. Consideriamo ora l'equazione $ya = a$ e sia e''_a la sua unica soluzione. Per qualsiasi altro $b \in G$ si può scrivere

$$b = ax = (e''_a a)x = e''_a(ax) = e''_a b,$$

da cui si vede che anche e''_a non dipende da a ; possiamo quindi scrivere $e''_a = e''$. In particolare, per $a = e''$ si ha $e''e' = e''$, e per $a = e'$ si ha $e''e' = e'$. Ne consegue che $e' = e''$ e possiamo liberarci dagli apici e scrivere $e' = e'' = e$.

Teorema 6.3 *In un gruppo G esiste, per ogni $a \in G$, uno ed un solo elemento \underline{a} tale che $a\underline{a} = \underline{a}a = e$.*

Dimostrazione: è simile a quella data per dimostrare il teorema 6.2.

Teorema 6.4 *Un semigrupp*o G è un gruppo se e solo se:

1. esiste almeno un elemento e tale che, per ogni $a \in G$, $ae = a$;
2. per ogni elemento $a \in G$, esiste almeno un elemento \underline{a} tale che $a\underline{a} = e$.

Commento 6.1 Nel seguito, se l'operazione algebrica binaria è indicata con il simbolo $+$, l'elemento neutro sarà indicato con 0 e l'elemento \underline{a} con $-a$. Se, invece, l'operazione algebrica binaria è indicata col simbolo \cdot (spesso omesso), l'elemento neutro sarà indicato con 1 e l'elemento \underline{a} con a^{-1} .

Definizione 6.3 Un *anello* è un insieme R nel quale sono definite due operazioni algebriche binarie, nel seguito indicate con $+$ (addizione) e \cdot (moltiplicazione) tali che, rispetto all'addizione,

1. R è un gruppo Abelian
o (cioè commutativo);
2. la moltiplicazione è distributiva sia a destra che a sinistra: $a(b + c) = ab + ac$ e $(a + b)c = ac + bc$.

Teorema 6.5 *In un anello l'equazione $0 \cdot x = b$ non ha soluzioni.*

Teorema 6.6 *Un anello non può essere un gruppo moltiplicativo.*

Dimostrazione: il teorema 6.5 contraddice la definizione di gruppo data sopra.

Commento 6.2 È possibile che in un anello l'insieme degli elementi diversi dallo 0 costituisca un gruppo moltiplicativo. Allora, definiamo *corpo* un anello nel quale l'insieme degli elementi diversi dallo 0 forma un gruppo moltiplicativo.

Commento 6.3 È facile verificare che l'insieme dei numeri reali e l'insieme dei numeri complessi hanno la struttura di un corpo rispetto alle ordinarie operazioni di addizione e moltiplicazione.

Definizione 6.4 Sia S un gruppo additivo Abeliano e sia K un corpo. Si dice che S è uno *spazio vettoriale* (o anche *spazio lineare*) su K se è definita un'applicazione $f : K \otimes S \rightarrow S$ tale che, per ogni $\alpha, \beta \in K$ e per ogni $|a\rangle, |b\rangle \in S$, si abbia

1. $\alpha (|a\rangle + |b\rangle) = \alpha|a\rangle + \alpha|b\rangle$
2. $(\alpha + \beta) |a\rangle = \alpha|a\rangle + \beta|a\rangle$
3. $(\alpha\beta) |a\rangle = \alpha(\beta|a\rangle)$
4. $1 \cdot |a\rangle = |a\rangle$.

Definizione 6.5 Si definisce *sottospazio* di uno spazio vettoriale S un qualunque sottoinsieme di S che sia anch'esso spazio vettoriale rispetto alle stesse leggi di composizione per le quali S è spazio vettoriale.

Teorema 6.7 *Un sottoinsieme di uno spazio vettoriale è esso stesso spazio vettoriale se e solo se ogni combinazione lineare di elementi del sottoinsieme appartiene al sottoinsieme stesso.*

Definizione 6.6 Siano \mathcal{C} il corpo dei numeri complessi e S uno spazio vettoriale su \mathcal{C} . Un'applicazione $f : S \otimes S \rightarrow \mathcal{C}$, anche indicata con

$$f(|x\rangle, |y\rangle) \equiv \langle x|y\rangle,$$

è un *prodotto scalare* (o *prodotto interno*) se soddisfa le seguenti proprietà:

1. $\langle x|y\rangle = \langle y|x\rangle^*$
2. $\langle x|\alpha_1 y_1 + \alpha_2 y_2\rangle = \alpha_1 \langle x|y_1\rangle + \alpha_2 \langle x|y_2\rangle$
3. $\langle x|x\rangle \geq 0$ ($= 0$ se e soltanto se $|x\rangle = |0\rangle$).

Teorema 6.8 *Il prodotto scalare è antilineare rispetto al primo argomento, cioè $\langle \alpha x|y\rangle = \alpha^* \langle x|y\rangle$.*

Dimostrazione: il teorema deriva dall'applicazione delle prime due proprietà del prodotto scalare.

Definizione 6.7 Uno spazio vettoriale S su \mathcal{C} nel quale sia definito un prodotto scalare è detto *spazio prehilbertiano*.

Definizione 6.8 La *norma* (o *lunghezza*) di un vettore $|\Psi\rangle$ appartenente ad uno spazio prehilbertiano è il numero reale non negativo

$$\|\Psi\| \equiv +\sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}. \quad (6.2)$$

Teorema 6.9 (Diseguaglianza di Cauchy-Schwarz). *In uno spazio prehilbertiano*

$$|\langle\Psi|\Phi\rangle| \leq \|\Psi\| \cdot \|\Phi\|, \quad (6.3)$$

in cui il segno di uguaglianza vale se e solo se $|\Psi\rangle = \alpha|\Phi\rangle$.

Commento 6.4 La diseguaglianza di Cauchy-Schwarz ci consente di definire l'angolo θ fra due vettori $|\Psi\rangle$ e $|\Phi\rangle$ come

$$\cos\theta \equiv \frac{|\langle\Psi|\Phi\rangle|}{\|\Psi\| \cdot \|\Phi\|} \leq 1. \quad (6.4)$$

Due vettori non nulli si dicono tra loro *ortogonali* se $\cos\theta = 0$, cioè se $\langle\Psi|\Phi\rangle = 0$.

Definizione 6.9 La *distanza* fra due vettori $|\Psi\rangle$ e $|\Phi\rangle$ è

$$d(|\Psi\rangle, |\Phi\rangle) \equiv \|\Psi - \Phi\| \equiv +\sqrt{\langle\Psi - \Phi|\Psi - \Phi\rangle}. \quad (6.5)$$

Teorema 6.10 *La distanza ha le seguenti proprietà:*

1. $\|\Psi - \Phi\| = \|\Phi - \Psi\|$
2. $\|\Psi - \Phi\| \geq 0$ ($= 0$ se e soltanto se $|\Psi\rangle = |\Phi\rangle$)
3. $\|\alpha(\Psi - \Phi)\| = |\alpha| \cdot \|\Psi - \Phi\|$
4. $\|\Psi - \Phi\| \leq \|\Psi - \Xi\| + \|\Xi - \Phi\|$

Definizione 6.10 Si consideri una successione di vettori

$$|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, \dots, |\Psi_n\rangle, \dots \quad (6.6)$$

in uno spazio prehilbertiano S . Si dice che la successione è *convergente* rispetto alla distanza se esiste un vettore $|\Psi\rangle \in S$ tale che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\Psi_n - \Psi\| = 0, \quad (6.7)$$

cioè tale che per ogni $\epsilon > 0$ esista un intero $\underline{n}(\epsilon)$ tale che $\|\Psi_n - \Psi\| < \epsilon$ per ogni $n > \underline{n}(\epsilon)$.

Si dice che la successione (6.6) è una *successione di Cauchy* (o anche una *successione convergente secondo Cauchy*) se, per ogni $\epsilon > 0$, esiste un intero $\underline{n}(\epsilon)$ tale che $\|\Psi_n - \Psi_m\| < \epsilon$ per ogni $n, m > \underline{n}(\epsilon)$.

Commento 6.5 Ogni successione convergente è una successione di Cauchy. Tuttavia, in generale, l'inverso non si verifica. Se anche l'inverso è vero, allora lo spazio si dice completo.

Definizione 6.11 Uno spazio vettoriale nel quale ogni successione di Cauchy è convergente è detto *completo*. Un spazio prehilbertiano completo rispetto alla distanza (6.5) definita dal prodotto scalare è detto *spazio di Hilbert*.

Definizione 6.12 Un insieme di vettori,

$$\{|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, \dots, |\Psi_n\rangle, \dots\}, \quad (6.8)$$

appartenenti ad uno spazio vettoriale S sul corpo dei numeri complessi \mathcal{C} , è detto *linearmente dipendente* se esiste in \mathcal{C} un insieme di scalari

$$\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \dots\}, \quad (6.9)$$

non tutti nulli, tali che

$$\sum_j \alpha_j |\Psi_j\rangle = |0\rangle. \quad (6.10)$$

L'insieme (6.8) è detto *linearmente indipendente* se l'unica soluzione dell'eq. (6.10) è la soluzione banale

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = \dots = 0. \quad (6.11)$$

Teorema 6.11 Un insieme di vettori $\{|\Psi_j\rangle\}$ di uno spazio prehilbertiano, tutti non nulli e a due a due ortogonali, è un insieme linearmente indipendente.

Dimostrazione: per tale insieme l'eq. (6.10) implica che

$$\sum_j \alpha_j \langle \Psi_k | \Psi_j \rangle \equiv \alpha_k \|\Psi_k\| = \langle \Psi_k | 0 \rangle = 0,$$

cioè, siccome $\|\Psi_k\| > 0$ (vedi definizioni 6.6 e 6.8), si ha $\alpha_k = 0$ per ogni k , che è l'eq. (6.11).

Definizione 6.13 Si dice che uno spazio vettoriale è *n-dimensionale* se esistono in esso n vettori linearmente indipendenti ma non $n + 1$.

Definizione 6.14 Una *base* di uno spazio vettoriale è un insieme $\{|\Psi_j\rangle\}$ di vettori linearmente indipendenti tali che per ogni $|\Psi\rangle$ in S esiste un insieme di scalari $\{\alpha_j\}$ per cui

$$\sum_j \alpha_j |\Psi_j\rangle = |\Psi\rangle.$$

Teorema 6.12 Uno spazio vettoriale è *n-dimensionale* se e solo se ammette una base di n vettori.

Commento 6.6 In uno spazio vettoriale di dimensione finita n , ogni insieme di n vettori linearmente indipendenti è una base. In uno spazio di dimensione infinita non è vero, in generale, che ogni insieme infinito di vettori linearmente indipendenti è una base. La ragione risiede nel fatto che se si sottrae un numero finito di vettori ad una base infinita, si ottiene ancora un insieme infinito di vettori linearmente indipendenti, che però non costituisce più un insieme di base.

Definizione 6.15 Si dice che una base $\{|k\rangle\}$ in un spazio prehilbertiano è *ortonormale* se

$$\langle j|k\rangle = \delta_{jk}. \quad (6.12)$$

Teorema 6.13 (Ortonormalizzazione di Gram-Schmidt) *Da una qualunque base in uno spazio prehilbertiano S è sempre possibile costruire una base ortonormale.*

Dimostrazione: sia $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle, \dots\}$ una base in S . Si costruisca in modo sequenziale il seguente insieme di vettori

$$\begin{aligned} |1\rangle &= c_1 |u_1\rangle \\ |2\rangle &= c_2 (|u_2\rangle - |1\rangle\langle 1|u_2\rangle) \\ |3\rangle &= c_3 (|u_3\rangle - |1\rangle\langle 1|u_3\rangle - |2\rangle\langle 2|u_3\rangle) \\ \dots &= \dots \end{aligned}$$

dove i coefficienti c_j sono fattori di normalizzazione. È facile verificare che i vettori dell'insieme $\{|k\rangle, k = 1, 2, \dots\}$ sono a due a due ortogonali. L'insieme $\{|k\rangle\}$ costituisce, perciò, una base ortonormale.

Definizione 6.16 Si dice che uno spazio di Hilbert è *separabile* se esiste in esso una base ortonormale, finita o infinita numerabile.

Teorema 6.14 *Ogni spazio prehilbertiano di dimensione finita è uno spazio di Hilbert separabile.*

Dimostrazione: il teorema 6.12 garantisce l'esistenza di una base e, per il teorema 6.13, questa può essere ortonormalizzata.

Commento 6.7 Il teorema 6.14 non è valido, in generale, per spazi di Hilbert di dimensione infinita.

Teorema 6.15 *Ogni vettore $|\Psi\rangle$ appartenente ad uno spazio di Hilbert separabile \mathcal{H} può sempre essere scritto come combinazione lineare*

$$|\Psi\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|\Psi\rangle, \quad (6.13)$$

dove $\{|k\rangle\}$ è una base ortonormale di \mathcal{H} .

Dimostrazione: dato che $\{|k\rangle\}$ è una base, ogni vettore $|\Psi\rangle$ può essere scritto nella forma

$$|\Psi\rangle = \sum_k \alpha_k |k\rangle \quad (6.14)$$

da cui

$$\langle j|\Psi\rangle = \sum_k \alpha_k \langle j|k\rangle = \sum_k \alpha_k \delta_{jk} = \alpha_j, \quad (6.15)$$

dove si è usata la proprietà di ortonormalità della base. Inserendo l'eq. (6.15), nell'eq. (6.14), si ottiene l'eq. (6.13).

Esempio 6.1 (Spazio l^2) Siano \mathcal{C} il corpo dei numeri complessi e l^2 l'insieme delle successioni infinite $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \dots)$ di numeri complessi tali che

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_k|^2 < \infty. \quad (6.16)$$

Le operazioni di addizione in l^2 e di moltiplicazione di un numero complesso α per un elemento $|a\rangle = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \dots)$ di l^2 , sono definite come segue:

$$|a\rangle + |b\rangle \equiv (\alpha_1 + \beta_1, \alpha_2 + \beta_2, \dots) \quad (6.17a)$$

$$\alpha|a\rangle \equiv (\alpha\alpha_1, \alpha\alpha_2, \dots). \quad (6.17b)$$

Rispetto all'addizione l^2 è un gruppoide dato che

$$|\alpha_k + \beta_k|^2 \leq |\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2.$$

l^2 è, ovviamente, un semigruppo. Esso è anche un gruppo con $|0\rangle = (0, 0, \dots)$ come elemento neutro e con $-|a\rangle = (-\alpha_1, -\alpha_2, \dots, -\alpha_n, \dots)$ come elemento inverso di $|a\rangle = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \dots)$. Perciò l^2 è un gruppo additivo Abelianiano. Si può facilmente verificare che l'operazione definita nell'eq. (6.17b) soddisfa le condizioni 1–4 della definizione 6.4 e, pertanto, l^2 è uno spazio vettoriale sul corpo dei numeri complessi. Con la definizione di prodotto scalare

$$\langle a|b\rangle \equiv \sum_k \alpha_k^* \beta_k, \quad (6.18)$$

che soddisfa le condizioni 1–3 della definizione 6.6, l^2 costituisce uno spazio prehilbertiano. È possibile dimostrare che l^2 è anche completo e separabile. Una base ortonormale di l^2 è

$$\left\{ \begin{array}{l} |\phi_1\rangle \equiv (1, 0, 0, 0, \dots, 0, \dots) \\ |\phi_2\rangle \equiv (0, 1, 0, 0, \dots, 0, \dots) \\ |\phi_3\rangle \equiv (0, 0, 1, 0, \dots, 0, \dots) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \right.$$

Esempio 6.2 (Spazio L^2) Siano \mathcal{C} il corpo dei numeri complessi e $L^2(a, b)$ l'insieme delle funzioni complesse $f(x)$ della variabile reale x definite sull'intervallo (a, b) tali che

$$\int_a^b dx |f(x)|^2 < \infty. \quad (6.19)$$

Si definiscano le regole di composizione come segue:

$$(f + g)(x) \equiv f(x) + g(x) \quad (6.20a)$$

$$(\alpha f)(x) \equiv \alpha f(x) \quad (6.20b)$$

$$\langle f|g \rangle \equiv \int_a^b dx f^*(x)g(x). \quad (6.20c)$$

È facile verificare che $L^2(a, b)$ costituisce uno spazio prehilbertiano. Si può anche dimostrare che esso è completo e separabile. I seguenti insiemi di funzioni rappresentano alcune possibili basi:

1.

$$\left\{ e^{imx}/\sqrt{2\pi}; m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \right\} \quad \text{in } L^2(0, 2\pi);$$

2.

$$\left\{ \sqrt{(2l+1)/2} P_l(x); l = 0, 1, 2, 3, \dots \right\} \quad \text{in } L^2(-1, 1),$$

dove $P_l(x)$ è l' l -esimo *polinomio di Legendre*;

3.

$$\left\{ e^{-x/2} L_n(x); n = 0, 1, 2, \dots \right\} \quad \text{in } L^2(0, \infty),$$

dove $L_n(x)$ è l' n -esimo *polinomio di Laguerre*;

4.

$$\left\{ \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x); n = 0, 1, 2, \dots \right\} \quad \text{in } L^2(-\infty, \infty),$$

dove $H_n(x)$ è l' n -esimo *polinomio di Hermite*.

Commento 6.8 La rappresentazione di una funzione $f(x)$ di $L^2(a, b)$ in serie di funzioni del tipo 1 dell'esempio precedente, costituisce la *serie di Fourier* di $f(x)$; le funzioni di base date ai punti 2-4 sono presenti nella soluzione di svariati problemi di meccanica quantistica.

6.2 Operatori lineari

Definizione 6.17 Sia S uno spazio vettoriale sul corpo dei numeri complessi \mathcal{C} . Un *operatore lineare* A definito su S è un'applicazione

$$A : S \rightarrow S \quad (6.21)$$

tale che, per ogni $\alpha, \beta \in \mathcal{C}$ e per ogni $|a\rangle, |b\rangle \in S$,

$$A(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha A|a\rangle + \beta A|b\rangle. \quad (6.22)$$

Teorema 6.16 *L'insieme degli operatori lineari definiti su uno spazio vettoriale sul corpo dei complessi \mathcal{C} , con le regole di composizione*

$$(A + B)|\Psi\rangle = A|\Psi\rangle + B|\Psi\rangle \quad (6.23a)$$

$$(\alpha A)|\Psi\rangle = \alpha(A|\Psi\rangle), \quad (6.23b)$$

è uno spazio vettoriale su \mathcal{C} .

Teorema 6.17 *L'insieme degli operatori lineari definiti su uno spazio vettoriale, con la somma definita nell'eq. (6.23a) ed il prodotto di due operatori definito come prodotto di due applicazioni (eq. (6.1)), è un anello associativo.*

Dimostrazione: l'insieme costituisce un gruppo additivo, ed il prodotto è associativo e distributivo rispetto alla somma.

Teorema 6.18 *Nell'insieme degli operatori lineari definiti su uno spazio vettoriale S esiste l'elemento neutro rispetto al prodotto.*

Dimostrazione: L'*operatore identità* definito da

$$I|\Psi\rangle \equiv |\Psi\rangle \quad \forall |\Psi\rangle \in S \quad (6.24)$$

ha la proprietà

$$(AI)|\Psi\rangle = A(I|\Psi\rangle) = A|\Psi\rangle,$$

cioè,

$$AI = A,$$

e, per il punto 1 del teorema 6.4,

$$AI = IA = A. \quad (6.25)$$

Commento 6.9 Si noti che, per l'eq. (6.13), l'operatore identità definito su uno spazio di Hilbert separabile \mathcal{H} può essere scritto come

$$I = \sum_k |k\rangle\langle k|,$$

dove $\{|k\rangle\}$ è una base ortonormale di \mathcal{H} .

Commento 6.10 L'insieme degli operatori lineari definiti su uno spazio vettoriale costituirebbe un gruppo se il punto 2 del teorema 6.4 fosse soddisfatto. Al contrario, non tutti gli operatori lineari ammettono inverso. Quelli che ammettono inverso sono detti *regolari* mentre quelli senza inverso sono detti *singolari*.

Teorema 6.19 *Un operatore lineare A , definito su uno spazio vettoriale S , è regolare se e solo se, per ogni $|\Psi\rangle \in S$, esiste uno ed un solo vettore $|\Phi\rangle$ tale che $A|\Phi\rangle = |\Psi\rangle$.*

Teorema 6.20 *L'equazione $A|\Psi\rangle = |0\rangle$ ammette soluzioni $|\Psi\rangle \neq |0\rangle$ se e solo se A è singolare.*

Dimostrazione: si noti innanzitutto che, per ogni operatore lineare A ,

$$A|0\rangle = A(|\Psi\rangle - |\Psi\rangle) = A|\Psi\rangle - A|\Psi\rangle = |0\rangle. \quad (6.26)$$

Si supponga ora che A^{-1} esista e si consideri l'equazione $A|\Psi\rangle = |0\rangle$. Si ha

$$\begin{aligned} A^{-1}(A|\Psi\rangle) &= (A^{-1}A)|\Psi\rangle = I|\Psi\rangle = |\Psi\rangle \\ &= A^{-1}|0\rangle = |0\rangle, \end{aligned}$$

cioè $|\Psi\rangle \equiv |0\rangle$. Viceversa, se esistesse un vettore $|\Psi\rangle \neq |0\rangle$ tale che $A|\Psi\rangle = |0\rangle$, questa equazione, oltre quella banale $|\Psi\rangle = |0\rangle$ (eq. (6.26)), avrebbe anche un'altra soluzione e, per il teorema 6.19, A sarebbe necessariamente singolare.

Teorema 6.21 *Se A e B sono due operatori lineari regolari, AB è un operatore lineare regolare e il suo inverso è $B^{-1}A^{-1}$.*

Dimostrazione: dal teorema 6.17 si ha

$$(AB)(B^{-1}A^{-1}) = A(BB^{-1})A^{-1} = AIA^{-1} = AA^{-1} = I,$$

cioè

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}. \quad (6.27)$$

Definizione 6.18 Un operatore lineare A definito su uno spazio vettoriale S è *limitato* se esiste un numero positivo b tale che, per ogni $|\Psi\rangle \in S$,

$$\|A|\Psi\rangle\| \leq b \cdot \|\Psi\|. \quad (6.28)$$

Il minimo valore di b per il quale l'eq. (6.28) è soddisfatta è la *norma* di A .

Teorema 6.22 *Il prodotto di un numero per un operatore limitato, come pure somme e prodotti di operatori limitati, sono operatori limitati.*

Teorema 6.23 *Qualsiasi operatore definito su uno spazio vettoriale di dimensione finita è limitato.*

Esempio 6.3 (Operatori non limitati) I seguenti sono esempi di operatori non limitati.

1. L'operatore A su l^2 definito da

$$A(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n, \dots) \equiv (\alpha_1, 2\alpha_2, 3\alpha_3, \dots, n\alpha_n, \dots)$$

è non limitato perché esistono in l^2 vettori $|a\rangle$ per i quali $\|A|a\rangle\|$ non è definito. Per esempio,

$$A\left(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \dots, \frac{1}{n}, \dots\right) = (1, 1, 1, \dots, 1, \dots)$$

non appartiene a l^2 perché la condizione (6.16) non è soddisfatta.

2. L'operatore Q su $L^2(-\infty, \infty)$ definito da

$$Q\Psi(x) \equiv x\Psi(x)$$

non è limitato perché, anche se, ad esempio,

$$\Psi(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} \in L^2(-\infty, \infty),$$

si ha, tuttavia,

$$\|x\Psi(x)\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2}{1+x^2} = \infty.$$

3. L'operatore P su $L^2(-\infty, \infty)$ definito da

$$P\Psi(x) \equiv -i \frac{d}{dx} \Psi(x),$$

non è limitato. Per dimostrarlo, si scelga

$$\Psi(x) = \exp(-\alpha^2 x^2),$$

nel qual caso

$$P\Psi(x) = 2i\alpha^2 x\Psi(x).$$

È facile verificare che

$$\|P\Psi(x)\| = \alpha \|\Psi\|,$$

per cui la condizione (6.28) non può essere soddisfatta perché α può essere scelto grande a piacere.

Teorema 6.24 *Sia S uno spazio prehilbertiano di dimensione finita n . L'insieme degli operatori lineari su S è isomorfo all'insieme delle matrici quadrate di ordine n .*

Dimostrazione: per il teorema 6.12, S deve avere una base ortonormale $\{|k\rangle\}$ e, per il teorema 6.15, si ha

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle &= A|\Psi\rangle = \sum_j |j\rangle \langle j|A\Psi\rangle = \sum_{jk} |j\rangle \langle j|Ak\rangle \langle k|\Psi\rangle \\ &= \sum_j |j\rangle \sum_k A_{jk} \Psi_k. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Perciò risulta che, ordinando gli n^2 numeri complessi A_{jk} in una matrice quadrata $n \times n$ e gli n numeri complessi Ψ_k in una matrice $n \times 1$ (vettore colonna), le componenti nella base $\{|k\rangle\}$ del vettore $A|\Psi\rangle$ si ottengono effettuando l'ordinario prodotto riga per colonna tra matrici.

Commento 6.11 Per preservare la regola del prodotto riga per colonna, è necessario sistemare in un vettore riga le componenti del vettore che appare come primo argomento nella definizione di prodotto scalare, e scrivere

$$\langle \Psi| = \sum_k \langle \Psi|k\rangle \langle k| = \sum_k \Psi_k^* \langle k|. \quad (6.30)$$

Si dice allora che il vettore colonna con elementi

$$\Psi_k \equiv \langle k|\Psi\rangle, \quad (6.31a)$$

il vettore riga con elementi

$$\Psi_k^* \equiv \langle \Psi|k\rangle, \quad (6.31b)$$

e la matrice quadrata con elementi

$$A_{jk} \equiv \langle j|Ak\rangle \quad (6.31c)$$

rappresentano, rispettivamente, $|\Psi\rangle$, $\langle \Psi|$, e A nella base $\{|k\rangle\}$.

Commento 6.12 Il fatto che S sia uno spazio di dimensione finita garantisce che ogni operatore lineare A su S sia limitato (vedi teorema 6.23), cioè che $\|A|k\rangle\|$ sia un numero finito. Se S fosse uno spazio di dimensione infinita, A potrebbe essere un operatore non limitato e $\|A|k\rangle\|$ potrebbe essere una quantità infinita, cioè si avrebbe $A|k\rangle \notin S$. Continueremo nel seguito a pensare alla rappresentazione numerica di A in uno spazio di dimensione infinita in termini di matrici quadrate, tenendo sempre in considerazione, comunque, il presente commento.

Teorema 6.25 *Sia A un operatore lineare (o, equivalentemente (teorema 6.24) una matrice $n \times n$) definito su uno spazio vettoriale n -dimensionale S sul corpo \mathcal{C} dei numeri complessi. A è regolare se e soltanto se una delle seguenti condizioni è soddisfatta:*

1. $A|\Psi\rangle = 0$ implica $|\Psi\rangle = |0\rangle$;

2. se $\{|k\rangle\}$ è una base in S , allora $\{A|k\rangle\}$ è un insieme linearmente indipendente;
3. esiste un operatore lineare B tale che $BA = I$;
4. $\det A \neq 0$.

Commento 6.13 In uno spazio di dimensione infinita le condizioni 1–3 del teorema 6.25 sono necessarie ma non sufficienti. Per esempio, siano A e B due operatori lineari su l^2 definiti come segue:

$$\begin{aligned} A(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots) &= (0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots) \\ B(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots) &= (\alpha_2, \alpha_3, \dots). \end{aligned}$$

Nonostante le condizioni 1–3 del teorema 6.25 siano chiaramente soddisfatte (per verificare la proprietà 2 si può usare la base ortonormale dell'esempio 6.1), A non ha inverso. Infatti, se si sceglie $|\Psi\rangle = (\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots)$ con $\Psi_1 \neq 0$, l'equazione $A|\Phi\rangle = |\Psi\rangle$ non ha soluzioni perché la prima componente di $A|\Phi\rangle$ è zero. Quindi, per il teorema 6.19, A è singolare.

Definizione 6.19 L'operatore *aggiunto* di un operatore lineare A è l'operatore A^\dagger tale che, per ogni $|\Psi\rangle$ e $|\Phi\rangle$,

$$\langle \Phi | A^\dagger \Psi \rangle = \langle A\Phi | \Psi \rangle.$$

Teorema 6.26 Si può dimostrare che A^\dagger è unico, lineare e, se A è limitato, anche A^\dagger lo è. Inoltre,

1. $(A^\dagger)^\dagger = A$
2. $(aA)^\dagger = a^* A^\dagger$
3. $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$
4. $(A^{-1})^\dagger = (A^\dagger)^{-1}$.

Dimostrazione:

$$1. \langle \Phi | (A^\dagger)^\dagger \Psi \rangle = \langle A^\dagger \Phi | \Psi \rangle = \langle \Psi | A^\dagger \Phi \rangle^* = \langle A\Psi | \Phi \rangle^* = \langle \Phi | A\Psi \rangle$$

2.

$$\begin{aligned} \langle \Phi | (aA)^\dagger \Psi \rangle &= \langle (aA)\Phi | \Psi \rangle = a^* \langle A\Phi | \Psi \rangle = a^* \langle \Phi | A^\dagger \Psi \rangle \\ &= \langle \Phi | a^* A^\dagger \Psi \rangle \end{aligned}$$

3.

$$\begin{aligned} \langle \Phi | (AB)^\dagger \Psi \rangle &= \langle (AB)\Phi | \Psi \rangle = \langle A(B\Phi) | \Psi \rangle = \langle B\Phi | A^\dagger \Psi \rangle \\ &= \langle \Phi | B^\dagger A^\dagger \Psi \rangle \end{aligned}$$

$$4. \langle \Phi | \Psi \rangle = \langle AA^{-1} \Phi | \Psi \rangle = \langle A^{-1} \Phi | A^\dagger \Psi \rangle = \langle \Phi | (A^{-1})^\dagger A^\dagger \Psi \rangle, \text{ cioè} \\ (A^{-1})^\dagger A^\dagger = I \text{ e } (A^{-1})^\dagger = (A^\dagger)^{-1}.$$

Teorema 6.27 *La matrice che rappresenta A^\dagger è la complessa coniugata della trasposta della matrice che rappresenta A .*

Dimostrazione:

$$A_{jk}^\dagger \equiv \langle j | A^\dagger k \rangle = \langle Aj | k \rangle = \langle k | Aj \rangle^* = A_{kj}^*.$$

Definizione 6.20 Un operatore lineare è detto *isometrico* se lascia invariata la norma di qualsiasi vettore, cioè se

$$\|U |\Psi\rangle\| = \|\Psi\|. \quad (6.32)$$

Un operatore lineare U è detto *unitario* se è isometrico e regolare.

Teorema 6.28 *Ogni operatore isometrico è limitato e la sua norma vale 1.*

Dimostrazione:

$$\|U |\Psi\rangle\| = \|\Psi\| = 1 \|\Psi\| < \infty.$$

Teorema 6.29 *Ogni operatore isometrico definito su uno spazio vettoriale di dimensione finita è unitario.*

Dimostrazione: dall'eq. (6.32) si nota che, per il teorema 6.10, se $U |\Psi\rangle = |0\rangle$, allora $|\Psi\rangle = |0\rangle$ e, per il teorema 6.25, U è un operatore lineare regolare.

Commento 6.14 Il teorema 6.29 non è valido, in generale, se U è definito su uno spazio vettoriale di dimensione infinita. Per esempio, l'operatore introdotto nel commento 6.13 è isometrico dato che

$$\|A(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots)\| = \|(0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots)\| \\ = \|(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots)\|,$$

ma, come abbiamo visto, esso non è regolare.

Teorema 6.30 *Il prodotto AB di due operatori unitari, A e B , è un operatore unitario.*

Dimostrazione: AB è isometrico in quanto

$$\|(AB) |\Psi\rangle\| = \|A(B |\Psi\rangle)\| = \|B |\Psi\rangle\| = \|\Psi\|$$

e, per il teorema 6.21, è anche regolare.

Teorema 6.31 *Un operatore U è unitario se e solo se*

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I. \quad (6.33)$$

Dimostrazione: se U è isometrico, allora

$$\begin{aligned} \|U|\Psi\rangle\|^2 &= \langle U\Psi|U\Psi\rangle = \langle \Psi|U^\dagger U\Psi\rangle \\ &= \|\Psi\|^2 = \langle \Psi|\Psi\rangle, \end{aligned}$$

e quindi

$$U^\dagger U = I. \quad (6.34)$$

Se U è anche regolare, moltiplicando a destra per U^{-1} ambo i membri dell'eq. (6.34), si ha

$$U^\dagger = U^{-1},$$

cioè

$$UU^\dagger = UU^{-1} = I.$$

Viceversa, se vale la proprietà (6.33), si ha

$$\|U|\Psi\rangle\|^2 = \langle U\Psi|U\Psi\rangle = \langle \Psi|U^\dagger U\Psi\rangle = \langle \Psi|\Psi\rangle = \|\Psi\|^2,$$

cioè U è isometrico e ammette inverso (che è U^\dagger).

Teorema 6.32 *Se U è un operatore lineare unitario, allora per ogni $|\Psi\rangle$ e $|\Phi\rangle$,*

$$\langle U\Phi|U\Psi\rangle = \langle \Phi|\Psi\rangle. \quad (6.35)$$

Dimostrazione:

$$\langle U\Phi|U\Psi\rangle = \langle \Phi|U^\dagger U\Psi\rangle = \langle \Phi|I\Psi\rangle = \langle \Phi|\Psi\rangle.$$

Teorema 6.33 *Se U è un operatore lineare unitario e $\{|j\rangle\}$ è una base ortonormale, allora anche $\{U|j\rangle\}$ è un base ortonormale.*

Dimostrazione: per il teorema 6.32 si ha

$$\langle Uj|Uk\rangle = \langle j|k\rangle = \delta_{jk},$$

cioè i vettori dell'insieme $\{U|j\rangle\}$ sono ortonormalizzati. Inoltre, per ogni $|\Psi\rangle$ si ha

$$U^{-1}|\Psi\rangle = \sum_j c_j |j\rangle,$$

e pertanto

$$UU^{-1}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle = \sum_j c_j U|j\rangle.$$

I vettori dell'insieme $\{U|j\rangle\}$ costituiscono, quindi, una base ortonormale.

Teorema 6.34 *Se $\{|j\rangle\}$ e $\{U|j\rangle\}$ sono due basi ortonormali e U è un operatore limitato, allora U è unitario.*

Commento 6.15 Il teorema 6.34 è l'inverso del teorema 6.33. Questi due teoremi stabiliscono che ogni operatore unitario determina una trasformazione da una base ortonormale ad un'altra e, viceversa, è sempre possibile trovare un operatore unitario che effettua la trasformazione tra due basi ortonormali.

Teorema 6.35 *Siano*

$$\{|\phi_j\rangle\} \quad \text{e} \quad \{|\bar{\phi}_j\rangle\} \quad (6.36)$$

due basi ortonormali, e sia

$$U_{jk} \equiv \langle \phi_j | \bar{\phi}_k \rangle \quad (6.37)$$

la j -esima componente del vettore $|\bar{\phi}_k\rangle$ rispetto alla base $\{|\phi_j\rangle\}$. Se $|\Psi\rangle$ è un vettore e A un operatore lineare specificati nella rappresentazione della base $\{|\phi_j\rangle\}$, allora i corrispondenti vettore ed operatore nella rappresentazione della base $\{|\bar{\phi}_j\rangle\}$ sono, rispettivamente,

$$|\bar{\Psi}\rangle = U^\dagger |\Psi\rangle \quad (6.38)$$

e

$$\bar{A} = U^\dagger A U. \quad (6.39)$$

Dimostrazione: si ricordi, innanzitutto, che gli insiemi 6.36 rappresentano due basi ortonormali se (vedi equazioni (6.12) e (6.13))

$$\langle \phi_j | \phi_k \rangle = \langle \bar{\phi}_j | \bar{\phi}_k \rangle = \delta_{jk} \quad (6.40)$$

e

$$\sum_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| = \sum_j |\bar{\phi}_j\rangle \langle \bar{\phi}_j| = I. \quad (6.41)$$

Allora si ha

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_j |\bar{\phi}_j\rangle \langle \bar{\phi}_j | \Psi \rangle \equiv \sum_j |\bar{\phi}_j\rangle \bar{\Psi}_j \\ &= \sum_{jk} |\bar{\phi}_j\rangle \langle \bar{\phi}_j | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \Psi \rangle = \sum_{jk} |\bar{\phi}_j\rangle U_{kj}^* \Psi_k \\ &= \sum_j |\bar{\phi}_j\rangle \sum_k U_{jk}^\dagger \Psi_k = \sum_j |\bar{\phi}_j\rangle (U^\dagger |\Psi\rangle)_j, \end{aligned}$$

cioè

$$\bar{\Psi}_j = (U^\dagger |\Psi\rangle)_j,$$

che è l'eq. (6.38); inoltre,

$$\begin{aligned} A &= \sum_{jk} |\bar{\phi}_j\rangle \langle \bar{\phi}_j | A \bar{\phi}_k \rangle \langle \bar{\phi}_k | \equiv \sum_{jk} |\bar{\phi}_j\rangle \bar{A}_{jk} \langle \bar{\phi}_k | \\ &= \sum_{jkqp} |\bar{\phi}_j\rangle \langle \bar{\phi}_j | \phi_q \rangle \langle \phi_q | A \phi_p \rangle \langle \phi_p | \bar{\phi}_k \rangle \langle \bar{\phi}_k | \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{jkqp} |\bar{\phi}_j\rangle U_{qj}^* A_{qp} U_{pk} \langle \bar{\phi}_k| = \sum_{jk} |\bar{\phi}_j\rangle \left(\sum_{qp} U_{jq}^\dagger A_{qp} U_{pk} \right) \langle \bar{\phi}_k| \\
&= \sum_{jk} |\bar{\phi}_j\rangle (U^\dagger AU)_{jk} \langle \bar{\phi}_k|,
\end{aligned}$$

cioè

$$\bar{A}_{jk} = (U^\dagger AU)_{jk},$$

che è l'eq. (6.39).

Teorema 6.36 *L'operatore U i cui elementi sono definiti nell'eq. (6.37) del teorema 6.35 è unitario.*

Dimostrazione: si può facilmente verificare che l'eq. (6.33) del teorema 6.31 è soddisfatta:

$$\begin{aligned}
(UU^\dagger)_{jk} &= \sum_q U_{jq} U_{qk}^\dagger = \sum_q U_{jq} U_{kq}^* \\
&= \sum_q \langle \phi_j | \bar{\phi}_q \rangle \langle \phi_k | \bar{\phi}_q \rangle^* \\
&= \sum_q \langle \phi_j | \bar{\phi}_q \rangle \langle \bar{\phi}_q | \phi_k \rangle = \langle \phi_j | \phi_k \rangle = \delta_{jk}. \quad (6.42)
\end{aligned}$$

Analogamente, si può dimostrare che

$$(U^\dagger U)_{jk} = \delta_{jk}. \quad (6.43)$$

Commento 6.16 Non sarebbe stato necessario dimostrare il teorema 6.36 per uno spazio di dimensione finita: in questo caso, l'operatore U sarebbe limitato e (teorema 6.23) sarebbe stato possibile applicare il teorema 6.34.

Teorema 6.37 *Un operatore unitario U definito su uno spazio di dimensione finita è rappresentato da una matrice in cui coppie di righe (o colonne) contengono le componenti di coppie di vettori normalizzati e tra loro ortogonali.*

Dimostrazione: per il teorema 6.31, l'operatore U è unitario se e solo se $U^\dagger U = UU^\dagger = I$. Tale proprietà, espressa in termini degli elementi di matrice di U , si scrive

$$(UU^\dagger)_{jl} = \sum_k U_{jk} U_{kl}^\dagger = \sum_k U_{jk} U_{lk}^* = (I)_{jl} = \delta_{jl},$$

cioè

$$\sum_k U_{jk} U_{lk}^* = \delta_{jl}. \quad (6.44)$$

Ciò dimostra che coppie di righe di U contengono le componenti di coppie di vettori ortonormali. In modo analogo,

$$(U^\dagger U)_{jl} = \sum_k U_{jk}^\dagger U_{kl} = \sum_k U_{kj}^* U_{kl} = \delta_{jl}, \quad (6.45)$$

che dimostra che anche coppie di colonne di U contengono le componenti di coppie di vettori ortonormali.

Definizione 6.21 Un operatore lineare A è *Hermitiano* se

$$A^\dagger = A. \quad (6.46)$$

Commento 6.17 L'equazione (6.46) implica non soltanto che per ogni $|\Psi\rangle$ e $|\Phi\rangle$ si abbia (definizione 6.19)

$$\langle \Phi | A \Psi \rangle = \langle A \Phi | \Psi \rangle, \quad (6.47)$$

ma anche che A e A^\dagger abbiano lo stesso dominio. Infatti, se A è limitato, anche A^\dagger è limitato (teorema 6.26), e quindi A e A^\dagger hanno lo stesso dominio, che è l'intero spazio (definizione 6.18). Perciò, per dimostrare che un operatore lineare limitato sia Hermitiano, è sufficiente verificare che l'equazione (6.47) sia soddisfatta (o, alternativamente, verificare che le ipotesi del successivo teorema 6.38 siano soddisfatte). Se, invece, A è un operatore non limitato, affinché l'eq. (6.46) sia soddisfatta, è necessario verificare anche che i domini di A e A^\dagger coincidano.

Commento 6.18 Si noti che se A è un operatore Hermitiano, per l'eq. (6.47), è possibile scrivere

$$\langle \Phi | A \Psi \rangle = \langle A \Phi | \Psi \rangle \equiv \langle \Phi | A | \Psi \rangle$$

in cui è implicito il fatto che, nell'ultima espressione, l'operatore A agisce indifferentemente sul vettore di destra o di sinistra. Tale notazione è spesso usata e verrà adoperata secondo convenienza.

Esempio 6.4 (Hermiticità di operatori non limitati) Gli operatori Q e P definiti nell'esempio 6.3 sono Hermitiani su $L^2(-\infty, \infty)$:

1.

$$\langle \Phi | Q \Psi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi^* x \Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x \Phi)^* \Psi \equiv \langle Q \Psi | \Psi \rangle.$$

Inoltre, se $|\Psi\rangle$ appartiene al dominio di Q^\dagger , si ha

$$\begin{aligned} \langle \Psi | Q^\dagger \Psi \rangle &= \langle Q \Phi | \Psi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx (x \Phi)^* \Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi^* x \Psi \\ &\equiv \langle \Phi | Q \Psi \rangle, \end{aligned}$$

cioè, $|\Psi\rangle$ appartiene anche al dominio di Q , e perciò $Q = Q^\dagger$.

2.

$$\begin{aligned} \langle \Phi | P \Psi \rangle &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi^* (-i \Psi') = -i \Phi^* \Psi \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dx (-i \Phi')^* \Psi \\ &\equiv \langle P \Phi | \Psi \rangle, \end{aligned}$$

dove l'apice indica l'operazione di derivata rispetto a x , ed è stata effettuata un'integrazione per parti in cui la parte integrata è nulla poiché le funzioni in $L^2(-\infty, \infty)$ sono nulle all'infinito. Inoltre, se $|\Psi\rangle$ appartiene al dominio di P^\dagger , si ha (integrando ancora per parti)

$$\begin{aligned}\langle \Phi | P^\dagger \Psi \rangle &= \langle P \Phi | \Psi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx (-i\Phi')^* \Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi^* (-i\Psi') \\ &\equiv \langle \Phi | P \Psi \rangle,\end{aligned}$$

cioè, $|\Psi\rangle$ appartiene anche al dominio di P , e perciò $P = P^\dagger$.

Commento 6.19 In realtà, non è necessario che $\Psi(\pm\infty) = 0$ per avere $\Psi(x) \in L^2(-\infty, \infty)$. Esistono, infatti, funzioni a quadrato sommabile che, per x tendente all'infinito, oscillano con ampiezza decrescente ma mai nulla. Per i nostri scopi, non considereremo questi casi patologici che non hanno alcun possibile riscontro fisico.

Commento 6.20 Si noti l'importanza di specificare sempre lo spazio sul quale un operatore è definito. Per esempio, l'operatore $P = -id/dx$ è Hermitiano su $L^2(-\infty, \infty)$, ma non è Hermitiano se definito su $L^2(0, \infty)$, a meno che non ci si limiti al sottospazio di $L^2(0, \infty)$ delle funzioni nulle in $x = 0$.

Teorema 6.38 *Un operatore lineare A il cui dominio coincide con quello di A^\dagger , è Hermitiano se e solo se $\langle \Psi | A \Psi \rangle$ è reale per ogni $|\Psi\rangle$.*

Dimostrazione: Se $A = A^\dagger$, allora

$$\langle \Psi | A \Psi \rangle = \langle A^\dagger \Psi | \Psi \rangle = \langle A \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | A \Psi \rangle^*.$$

Viceversa, se $\langle \Psi | A \Psi \rangle$ è reale, allora

$$\langle \Psi | A \Psi \rangle = \langle \Psi | A \Psi \rangle^* = \langle A \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | A^\dagger \Psi \rangle,$$

cioè $A = A^\dagger$.

Teorema 6.39 *Il prodotto AB di due operatori Hermitiani A e B è Hermitiano se e solo se A e B commutano.*

Dimostrazione: se $A = A^\dagger$ e $B = B^\dagger$, si ha, per il teorema 6.26

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA,$$

che è uguale a AB se e solo se $AB - BA \equiv [A, B] = 0$.

Teorema 6.40 *Un operatore Hermitiano A definito su uno spazio di dimensione finita è rappresentato da una matrice i cui elementi diagonali sono reali, e quelli in posizione simmetrica rispetto alla diagonale principale sono tra loro complessi coniugati.*

Dimostrazione: dall'eq. (6.46) e dal teorema 6.27,

$$A_{jk}^\dagger = A_{jk} = A_{kj}^*$$

e, per $j = k$,

$$A_{jj} = A_{jj}^*.$$

Definizione 6.22 Un operatore lineare è detto *anti-Hermitiano* se

$$A^\dagger = -A. \quad (6.48)$$

Teorema 6.41 Un operatore lineare A è anti-Hermitiano se e solo se (iA) è Hermitiano.

Dimostrazione: se (iA) è Hermitiano, allora $(iA) = (iA)^\dagger = -iA^\dagger$, cioè $A^\dagger = -A$. Viceversa, se A è anti-Hermitiano, $(iA)^\dagger = -iA^\dagger = iA$, cioè (iA) è Hermitiano.

Teorema 6.42 Un operatore lineare anti-Hermitiano definito su uno spazio di dimensione finita è rappresentato da una matrice i cui elementi diagonali sono numeri immaginari puri e gli elementi in posizione simmetrica rispetto alla diagonale principale sono l'uno l'opposto del complesso coniugato dell'altro.

Dimostrazione: segue direttamente dai teoremi 6.40 e 6.41.

Teorema 6.43 Ogni operatore lineare può essere scritto come somma di un operatore Hermitiano e di un operatore anti-Hermitiano.

Dimostrazione:

$$A \equiv \frac{A + A^\dagger}{2} + \frac{A - A^\dagger}{2} \equiv A_1 + A_2$$

dove si può notare che A_1 è Hermitiano e che A_2 è anti-Hermitiano:

$$A_1^\dagger \equiv \frac{A^\dagger + A}{2} = A_1 \quad \text{e} \quad A_2^\dagger = \frac{A^\dagger - A}{2} = -A_2.$$

Definizione 6.23 Un operatore lineare è detto *normale* se commuta con il suo aggiunto, cioè se $AA^\dagger = A^\dagger A$.

Teorema 6.44 Gli operatori unitari, quelli Hermitiani e quelli anti-Hermitiani sono operatori normali.

Dimostrazione: segue direttamente dalle equazioni (6.33), (6.46) e (6.48).

6.3 Equazione agli autovalori

Definizione 6.24 Sia A un operatore lineare definito su uno spazio vettoriale sul corpo dei numeri complessi \mathcal{C} . L'equazione

$$A|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle \quad \text{con} \quad |\Psi\rangle \neq |0\rangle \quad (6.49)$$

è detta *equazione agli autovalori* per A . $a \in \mathcal{C}$ è detto *autovalore* di A , e $|\Psi\rangle$ è un *autovettore* appartenente all'autovalore a .

Teorema 6.45 *Autovettori appartenenti ad autovalori distinti sono linearmente indipendenti tra loro.*

Dimostrazione: si supponga che

$$A|\Psi_1\rangle = a_1|\Psi_1\rangle \quad \text{e} \quad A|\Psi_2\rangle = a_2|\Psi_2\rangle$$

dove $a_1 \neq a_2$. Se fosse $|\Psi_1\rangle = \lambda|\Psi_2\rangle$ allora

$$A|\Psi_2\rangle = A\lambda|\Psi_1\rangle = a_2|\Psi_2\rangle = a_2\lambda|\Psi_1\rangle,$$

cioè

$$A|\Psi_1\rangle = a_2|\Psi_1\rangle,$$

ma ciò implica che $a_1 = a_2$, contraddicendo così l'ipotesi.

Definizione 6.25 Siano A un operatore lineare e T un operatore lineare regolare. La trasformazione

$$A \rightarrow A' = T^{-1}AT \quad (6.50a)$$

è detta *trasformazione di similitudine*. Se T è unitario, la trasformazione

$$A \rightarrow A' = T^\dagger AT \quad (6.50b)$$

è detta *trasformazione unitaria*.

Teorema 6.46 *Gli operatori A e $T^{-1}AT$, con T regolare, hanno gli stessi autovalori.*

Dimostrazione: se

$$A|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle,$$

allora

$$T^{-1}A|\Psi\rangle = aT^{-1}|\Psi\rangle,$$

da cui

$$(T^{-1}AT)(T^{-1}|\Psi\rangle) = a(T^{-1}|\Psi\rangle).$$

Siccome $T^{-1}|\Psi\rangle \neq |0\rangle$ (teorema 6.20), a è un autovalore di $T^{-1}AT$. Viceversa, se

$$(T^{-1}AT)|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle, \quad (6.51)$$

allora

$$TT^{-1}AT|\Psi\rangle = aT|\Psi\rangle,$$

cioè

$$A(T|\Psi\rangle) = a(T|\Psi\rangle), \quad (6.52)$$

da cui si vede che a è un autovalore di A .

Commento 6.21 Val la pena sottolineare che se $|\Psi\rangle$ è un autovettore di $T^{-1}AT$, allora il corrispondente autovettore di A appartenente allo stesso autovalore cui appartiene $|\Psi\rangle$ è $T|\Psi\rangle$, come si può vedere dall'eq. (6.52).

Teorema 6.47 *Una qualunque delle seguenti è condizione necessaria e sufficiente affinché a sia autovalore di un operatore lineare A definito su uno spazio di dimensione finita:*

1. $(A - aI)$ è singolare;

2.

$$\det(A - aI) = 0. \quad (6.53)$$

Dimostrazione: a è autovalore di A se (definizione 6.24)

$$(A - aI)|\Psi\rangle = |0\rangle \quad \text{con} \quad |\Psi\rangle \neq |0\rangle, \quad (6.54)$$

per cui il teorema è una diretta conseguenza del teorema 6.25.

Commento 6.22 La condizione 2 del teorema 6.47 fornisce una procedura, in verità non molto pratica (ma vedi commento 6.25 di seguito), per calcolare gli autovalori e gli autovettori di una matrice A : bisogna dapprima risolvere l'equazione algebrica $\det(A - aI) = 0$ nell'incognita a , poi, sostituendo uno alla volta gli autovalori così trovati, si risolve l'eq. (6.54), ottenendo i corrispondenti autovettori.

Definizione 6.26 Si dice che un autovalore a di un operatore lineare A ha ordine di *degenerazione* m (o è m volte *degenere*) se esistono m autovettori di A linearmente indipendenti appartenenti all'autovalore a . Se $m = 1$ l'autovalore è detto *semplice* (o *non degenere*).

Commento 6.23 Affinché un autovalore sia degenere è necessario che gli autovettori ad esso appartenenti siano linearmente indipendenti. Infatti, si noti che da ogni autovettore $|\Psi\rangle$ è possibile costruire un numero infinito di autovettori semplicemente moltiplicando $|\Psi\rangle$ per un qualsiasi numero complesso; tali autovettori sono tuttavia considerati indistinguibili. In genere, si fa la scelta di normalizzarli secondo le successive eq. (6.60) e (6.67).

Teorema 6.48 *L'insieme $S_a \equiv \{|a_j\rangle, j = 1, 2, \dots, m\}$, formato dagli m autovettori linearmente indipendenti appartenenti al medesimo autovalore a , è un sottospazio vettoriale (ed è detto sottospazio vettoriale appartenente all'autovalore a).*

Dimostrazione:

$$A \sum_j c_j |aj\rangle = \sum_j c_j A|aj\rangle = \sum_j c_j a|aj\rangle = a \sum_j c_j |aj\rangle,$$

cioè qualsiasi combinazione lineare dei vettori $|aj\rangle$ è autovettore di A e appartiene, pertanto, a S_a . Per il teorema 6.7, S_a è un sottospazio, il sottospazio vettoriale appartenente ad a .

Teorema 6.49 *Una radice di molteplicità m dell'equazione algebrica 6.53 è un autovalore della matrice A che possiede m autovettori ortogonali se e solo se A è normale (definizione 6.23).*

Teorema 6.50 *L'insieme degli autovettori di un operatore normale A definito su uno spazio vettoriale n -dimensionale è una base (vedi definizione 6.14).*

Dimostrazione: l'equazione algebrica (6.53), le cui soluzioni sono gli autovalori di A , ha, nel corpo dei numeri complessi, esattamente n radici. Gli autovettori corrispondenti a radici differenti sono linearmente indipendenti (teorema 6.45), e ogni radice di molteplicità m ammette m autovettori ortogonali (teorema 6.49). Perciò A è un insieme di n vettori linearmente indipendenti e, per il teorema 6.12, questo insieme è una base per lo spazio vettoriale su cui l'operatore A è definito.

Teorema 6.51 *Se A è una matrice normale e $T^{-1}AT$ è diagonale, allora gli elementi diagonali di $T^{-1}AT$ e le colonne della matrice T sono, rispettivamente, gli autovalori e gli autovettori della matrice A . Se, inoltre, T è una matrice unitaria, gli autovettori sono ortonormali.*

Dimostrazione: il teorema 6.46 garantisce che $T^{-1}AT$ e A abbiano gli stessi autovalori. Dato che $T^{-1}AT$ è diagonale, essa è normale e l'eq. (6.53) (scritta per $T^{-1}AT$) ha come soluzioni gli elementi diagonali di $T^{-1}AT$. Gli autovettori normalizzati a 1 di qualsiasi matrice normale diagonale di ordine n sono i seguenti n vettori $|\Psi\rangle$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.55)$$

Dalle equazioni (6.51) e (6.52) ne consegue che gli autovettori di A sono gli n vettori $T|\Psi\rangle$ (ottenuti applicando la matrice T a ogni vettore dell'insieme (6.55)), i quali coincidono, come si può facilmente verificare, con le colonne di T . Le n colonne di T rappresentano effettivamente n autovettori linearmente indipendenti in quanto, in caso contrario, una delle

colonne potrebbe essere scritta come una combinazione lineare delle altre, implicando, perciò, che $\det T = 0$, in contraddizione con l'ipotesi che T sia regolare (vedi teorema 6.25). Inoltre, se T è unitario, l'eq. (6.45) è soddisfatta, cioè

$$\sum_k T_{kj}^* T_{kl} = \delta_{jl},$$

per cui le colonne di T (cioè gli autovettori di A) sono un insieme di n vettori ortonormali.

Commento 6.24 Affinché le ipotesi del teorema 6.51 siano soddisfatte, è necessario che la matrice A sia normale, altrimenti la matrice T non esisterebbe. Infatti, se T esistesse, le sue n colonne sarebbero n autovettori ortogonali di A , in contraddizione col teorema 6.49.

Commento 6.25 Il teorema 6.51 fornisce un metodo per calcolare gli autovettori e gli autovalori di una matrice normale A : è necessario trovare una matrice unitaria T tale che $T^\dagger A T$ sia diagonale. Un algoritmo che sfrutta questa proprietà, usato comunemente nel calcolo numerico, è il metodo di Jacobi.

Teorema 6.52 *Gli autovalori di un operatore Hermitiano sono reali.*

Dimostrazione: dall'equazione $A|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$, con $A^\dagger = A$ e $|\Psi\rangle \neq 0$, si ha

$$\begin{aligned} \langle \Psi | A \Psi \rangle &= \langle \Psi | a \Psi \rangle = a \langle \Psi | \Psi \rangle \\ &= \langle A^\dagger \Psi | \Psi \rangle = \langle A \Psi | \Psi \rangle = \langle a \Psi | \Psi \rangle = a^* \langle \Psi | \Psi \rangle, \end{aligned}$$

e, siccome $|\Psi\rangle \neq 0$, cioè $\langle \Psi | \Psi \rangle \neq 0$, ne segue che $a = a^*$.

Teorema 6.53 *Gli autovettori di un operatore isometrico sono numeri complessi di modulo unitario, cioè numeri della forma $e^{i\alpha}$ (α reale).*

Dimostrazione: da $U|\Psi\rangle = u|\Psi\rangle$, con $U^\dagger U = I$ e $|\Psi\rangle \neq 0$, si ha

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | U^\dagger U \Psi \rangle = \langle U \Psi | U \Psi \rangle = u^* u \langle \Psi | \Psi \rangle,$$

cioè

$$u^* u = 1. \tag{6.56}$$

Teorema 6.54 *Autovettori di operatori Hermitiani o isometrici appartenenti ad autovalori distinti sono tra loro ortogonali.*

Dimostrazione: si considerino le equazioni

$$A|\Psi_1\rangle = a_1|\Psi_1\rangle \quad \text{e} \quad A|\Psi_2\rangle = a_2|\Psi_2\rangle$$

con $a_1 \neq a_2$.

1. Se $A^\dagger = A$ si ha

$$\langle \Psi_2 | A \Psi_1 \rangle = \langle A \Psi_2 | \Psi_1 \rangle$$

da cui

$$a_1 \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = a_2 \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle$$

e, siccome $a_1 \neq a_2$, ne segue che $\langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = 0$.

2. se $A^\dagger A = I$ si ha

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_1 | A^\dagger A \Psi_2 \rangle = \langle A \Psi_1 | A \Psi_2 \rangle = a_1^* a_2 \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle,$$

da cui

$$(a_1^* a_2 - 1) \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = 0 \quad (6.57)$$

dove

$$a_1^* a_2 \equiv e^{-i\alpha_1} e^{i\alpha_2} \equiv e^{i(\alpha_2 - \alpha_1)} \neq 1 \quad (6.58)$$

se $a_1 \neq a_2$. Quindi, dalle equazioni (6.57) e (6.58), si ha $\langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = 0$.

6.4 Osservabili

Definizione 6.27 Si dice che un operatore Hermitiano A , definito su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , è un *osservabile* se gli autovettori di A formano una base per i vettori di \mathcal{H} .

Teorema 6.55 *Ogni operatore Hermitiano definito su uno spazio vettoriale di dimensione finita è un osservabile.*

Dimostrazione: ogni operatore Hermitiano è un operatore normale (teorema 6.44) e l'insieme degli autovettori di un operatore normale definito su uno spazio vettoriale di dimensione finita è una base (teorema 6.50).

Commento 6.26 Operatori Hermitiani definiti su spazi di Hilbert di dimensione infinita non sono necessariamente osservabili. Vedremo che, per una interpretazione fisica coerente della teoria quantistica, è necessario che operatori che rappresentano quantità fisiche siano osservabili.

Teorema 6.56 *Ogni osservabile A può essere scritto come*

$$A = \sum_{n\tau} |n\tau\rangle a_n \langle n\tau| \quad (6.59)$$

dove $\{a_n\}$ è l'insieme degli autovalori di A e $\{|n\tau\rangle\}$ è l'insieme dei corrispondenti autovettori (τ è un indice di degenerazione).

Dimostrazione: dato che A è un osservabile, l'insieme $\{|n\tau\rangle\}$ è una base ortonormale (teorema 6.54), e pertanto (commento 6.9),

$$I = \sum_{n\tau} |n\tau\rangle \langle n\tau|$$

e

$$A = AI = A \sum_{n\tau} |n\tau\rangle \langle n\tau| = \sum_{n\tau} a_n |n\tau\rangle \langle n\tau|.$$

Commento 6.27 La condizione affinché un operatore sia un osservabile è quindi che se $\{|n\tau\rangle\}$ è l'insieme dei suoi autovettori e se

$$\langle n\tau|n'\tau'\rangle = \delta_{nn'}\delta_{\tau\tau'}, \quad (6.60)$$

allora,

$$\sum_{n\tau} |n\tau\rangle\langle n\tau| = I. \quad (6.61)$$

Le equazioni (6.60) e (6.61) sono dette condizioni di *ortonormalità* e di *completezza*.

Teorema 6.57 *Gli autovettori appartenenti ad autovalori dello spettro continuo di un osservabile definito su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , non appartengono ad \mathcal{H} .*

Dimostrazione: sia

$$Q|q\rangle = q|q\rangle \quad (6.62)$$

l'equazione agli autovalori per l'osservabile Q e si assuma che tutti gli autovalori q (che, senza perdere in generalità, supponiamo semplici) appartengano allo spettro continuo, cioè che q assuma tutti i valori compresi in un qualche intervallo. Dato che Q è un osservabile, ogni $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ può scriversi

$$|\Psi\rangle = \int dq |q\rangle\langle q|\Psi\rangle, \quad (6.63)$$

da cui la condizione di completezza

$$\int dq |q\rangle\langle q| = I.$$

La norma di un vettore non nullo $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ può pertanto scriversi

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \int dq \langle\Psi|q\rangle\langle q|\Psi\rangle = \int dq |\langle q|\Psi\rangle|^2, \quad (6.64)$$

dove, siccome $|\Psi\rangle \neq |0\rangle$ (cioè $\langle\Psi|\Psi\rangle \neq 0$), la funzione integranda $|\langle q|\Psi\rangle|^2$ è una funzione non identicamente nulla. Di conseguenza, anche $\langle q|\Psi\rangle \equiv \Psi(q)$ è una funzione non identicamente nulla e può scriversi

$$\langle q|\Psi\rangle = \int dq' \langle q|q'\rangle\langle q'|\Psi\rangle$$

o anche

$$\Psi(q) = \int dq' \langle q|q'\rangle\Psi(q'). \quad (6.65)$$

Nell'eq. (6.65) si ha $\langle q|q'\rangle = 0$ per $q \neq q'$ (teorema 6.54) e, dato che la funzione $\Psi(q)$ è non identicamente nulla, la norma $\|q\| \equiv +\sqrt{\langle q|q\rangle}$ del vettore $|q\rangle$ non può essere finita. Ciò prova che $|q\rangle$ non appartiene ad \mathcal{H} .

Commento 6.28 La quantità $\langle q|q'\rangle = \delta(q - q')$, sebbene nulla per ogni $q \neq q'$, è tale che l'integrale (6.65) è non nullo. In matematica tale quantità è detta *funzione delta* e non è una funzione ordinaria, ma piuttosto quella che in matematica si chiama *distribuzione*. Per i nostri scopi, tuttavia, possiamo considerare la funzione delta come una ordinaria funzione definita dalle seguenti proprietà:

$$\delta(q - q') = 0 \quad \text{per } q \neq q' \quad (6.66a)$$

e

$$\int dq' \Psi(q') \delta(q - q') = \Psi(q). \quad (6.66b)$$

Nel seguito chiameremo tale funzione *delta di Dirac*.

Commento 6.29 Se lo spettro di un osservabile Q è continuo e semplice, le condizioni di ortonormalità e completezza sono (confronta col commento 6.27)

$$\langle q|q'\rangle \equiv \delta(q - q') \quad (6.67)$$

e

$$\int dq |q\rangle\langle q| = I. \quad (6.68)$$

L'osservabile Q può allora essere scritto (teorema 6.56)

$$Q = \int dq |q\rangle q \langle q|. \quad (6.69)$$

Le condizioni di ortonormalità e completezza per operatori che hanno uno spettro di autovalori che sia in parte discreto possono essere facilmente scritte combinando le equazioni (6.60), (6.61), (6.67) e (6.68). Le equazioni (6.59) e (6.69) possono essere altrettanto facilmente generalizzate.

Teorema 6.58 *Due osservabili, A e B , che hanno gli stessi autovettori, commutano.*

Dimostrazione: se

$$A|n\tau\rangle = a_n|n\tau\rangle \quad (6.70)$$

e

$$B|n\tau\rangle = b_n|n\tau\rangle \quad (6.71)$$

allora, per ogni $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, dato che A e B sono osservabili, si ha (teorema 6.56)

$$AB|\Psi\rangle = A \sum_{n\tau} b_n |n\tau\rangle \langle n\tau|\Psi\rangle = \sum_{n\tau} a_n b_n |n\tau\rangle \langle n\tau|\Psi\rangle, \quad (6.72)$$

e

$$BA|\Psi\rangle = B \sum_{n\tau} a_n |n\tau\rangle \langle n\tau|\Psi\rangle = \sum_{n\tau} a_n b_n |n\tau\rangle \langle n\tau|\Psi\rangle. \quad (6.73)$$

Confrontando le equazioni (6.72) e (6.73), si ha

$$AB|\Psi\rangle = BA|\Psi\rangle \quad \forall \quad |\Psi\rangle,$$

e pertanto, $AB = BA$.

Teorema 6.59 *Se due osservabili A e B commutano, è possibile costruire una base ortonormale di autovettori comuni ad A e B .*

Dimostrazione: siano $\{a_n\}$ l'insieme degli autovalori di A e $\{|nj\rangle\}$ l'insieme dei corrispondenti autovettori (j è un indice di degenerazione). Se a_n è un autovalore semplice, allora, da

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle,$$

ne consegue che

$$a_n B|n\rangle = BA|n\rangle = AB|n\rangle,$$

perciò anche $B|n\rangle$ è autovettore di A appartenente all'autovalore a_n . $B|n\rangle$ deve essere perciò proporzionale ad $|n\rangle$, cioè

$$B|n\rangle = b_n|n\rangle.$$

Risulta, perciò, che $|n\rangle$ è anche un autovettore di B e, se tutti gli autovalori di A sono semplici, anche quelli di B lo sono in quanto A e B , per ipotesi, sono osservabili. Nella rappresentazione della base $\{|n\rangle\}$ sia A che B sono diagonali.

Se qualche autovalore di A è degenere, B non è, in generale, diagonale nella rappresentazione in cui A è diagonale. In particolare si ha che gli elementi di matrice di B che connettono sottospazi relativi ad autovalori distinti di A sono nulli, perché da

$$\langle nj|AB|mk\rangle = \langle nj|BA|mk\rangle,$$

segue che

$$a_n \langle nj|B|mk\rangle = a_m \langle nj|B|mk\rangle$$

e, se $a_n \neq a_m$, allora $\langle nj|B|mk\rangle = 0$. Invece, gli elementi di matrice $\langle nj|B|nk\rangle$ sono, in generale, diversi da zero per $j \neq k$. Tuttavia, essendo un operatore Hermitiano, B può essere diagonalizzato da un'appropriata matrice unitaria T (teorema 6.51) che trasforma la base $\{|nj\rangle\}$ del sottospazio definito dall'autovalore a_n di A , nella base $\{|Tnj\rangle\}$ rispetto alla quale B è diagonale. Naturalmente, A conserva la sua forma diagonale anche nella nuova base $\{|Tnj\rangle\}$, poiché, per il teorema 6.48, i vettori dell'insieme $\{|Tnj\rangle\}$ sono anch'essi autovettori di A appartenenti all'autovalore a_n .

Esempio 6.5 (Operatore parità) L'operatore parità Π sullo spazio $L^2(-\infty, \infty)$ è definito da

$$\Pi f(x) = f(-x). \quad (6.74)$$

Π è ovviamente limitato, è Hermitiano dato che (vedi commento 6.17)

$$\langle f|\Pi f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)f(-x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(-x)f(x) = \langle \Pi f|f\rangle \quad (6.75)$$

ed è unitario perché è Hermitiano e in quanto

$$\Pi^2 = I. \quad (6.76)$$

L'equazione agli autovalori per Π è

$$\Pi\pi(x) = p\pi(x) \quad (6.77)$$

che può essere risolta applicando Π ad ambo i membri dell'eq. (6.77) e usando l'eq. (6.76),

$$\Pi^2\pi(x) = p^2\pi(x) = \pi(x). \quad (6.78)$$

Perciò gli autovalori sono dati da

$$p = \pm 1. \quad (6.79)$$

Sostituendo nell'equazione (6.77) gli autovalori (6.79) trovati, si nota che le autofunzioni appartenenti all'autovalore $+1$ sono le funzioni pari e quelle appartenenti all'autovalore -1 sono le funzioni dispari.

6.5 Funzioni di operatori

Definizione 6.28 Sia A un operatore lineare e $F(z)$ una funzione il cui sviluppo in serie di potenze è

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n. \quad (6.80)$$

La funzione $F(A)$ dell'operatore A è, per definizione,

$$F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n \quad (6.81)$$

dove i coefficienti f_n sono gli stessi di quelli che appaiono nello sviluppo (6.80).

Teorema 6.60 Se $|\Psi\rangle$ è autovettore di A appartenente all'autovalore a , $|\Psi\rangle$ è anche autovettore di $F(A)$ appartenente all'autovalore $F(a)$.

Dimostrazione: dalle equazioni (6.80) e (6.81) si ha

$$F(A)|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n |\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n a^n |\Psi\rangle = F(a)|\Psi\rangle. \quad (6.82)$$

Commento 6.30 Il teorema 6.60 ci permette di definire la funzione di una matrice A di ordine n come segue: nella rappresentazione in cui A è diagonale (con elementi diagonali a_1, \dots, a_n), $F(A)$ è la matrice diagonale $n \times n$ i cui elementi diagonali sono $F(a_1), \dots, F(a_n)$.

Commento 6.31 Quando si considerano funzioni di operatori occorre fare attenzione all'ordine delle operazioni perché, in generale, gli operatori non commutano fra di loro. Per esempio,

$$e^A e^B = \sum_{pq} \frac{A^p B^q}{p!q!} \quad (6.83)$$

$$e^B e^A = \sum_{pq} \frac{B^p A^q}{p!q!} \quad (6.84)$$

e

$$e^{(A+B)^p} = \sum_p \frac{(A+B)^p}{p!} = \sum_p \frac{1}{p!} \sum_{k=0}^p \binom{p}{k} A^{p-k} B^k \quad (6.85)$$

rappresentano tre distinti operatori. Si può facilmente verificare che essi rappresentano lo stesso operatore se e solo se $[A, B] = 0$.

Teorema 6.61 Sia $A(t)$ un operatore che dipende da un parametro t e sia $\dot{A}(t)$ la derivata di A rispetto a t . Se $A(t)$ e $\dot{A}(t)$ commutano, allora

$$\frac{d}{dt} e^A(t) = \dot{A}(t) e^A(t). \quad (6.86)$$

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} e^A(t) &= \frac{d}{dt} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n(t)}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d}{dt} A^n(t) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\dot{A} A^{n-1} + A \dot{A} A^{n-2} + \dots + A^{n-2} \dot{A} A + A^{n-1} \dot{A} \right) \end{aligned}$$

e, se $[A(t), \dot{A}(t)] = 0$, allora

$$\begin{aligned} &\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\dot{A} A^{n-1} + A \dot{A} A^{n-2} + \dots + A^{n-2} \dot{A} A + A^{n-1} \dot{A} \right) \\ &= \dot{A} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{n!} A^{n-1} = \dot{A} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{A^{n-1}}{(n-1)!} = \dot{A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!} = \dot{A} e^A. \end{aligned}$$

Teorema 6.62 Se A e B commutano con $[A, B]$, allora

$$[A, F(B)] = [A, B] F'(B) \quad (6.87)$$

dove $F'(B)$ indica la derivata di F rispetto a B .

Dimostrazione: si noti innanzitutto che con le ipotesi appena enunciate vale la seguente identità:

$$[A, B^n] = n[A, B] B^{n-1}. \quad (6.88)$$

L'eq. (6.88) può essere dimostrata per induzione. Per $n = 2$

$$[A, B^2] = [A, BB] = B[A, B] + [A, B]B = 2[A, B]B.$$

Inoltre, se l'eq. (6.88) vale per n , essa vale anche per $n + 1$:

$$\begin{aligned} [A, B^{n+1}] &= [A, BB^n] = B[A, B^n] + [A, B]B^n \\ &= nB[A, B]B^{n-1} + [A, B]B^n \\ &= n[A, B]BB^{n-1} + [A, B]B^n \\ &= n[A, B]B^n + [A, B]B^n = (n+1)[A, B]B^n. \end{aligned}$$

L'equazione (6.88) è, così, verificata. Perciò

$$\begin{aligned} [A, F(B)] &= \left[A, \sum_n f_n B^n \right] = \sum_n f_n [A, B^n] \\ &= \sum_n f_n n [A, B] B^{n-1} = [A, B] \sum_n f_n n B^{n-1} \\ &= [A, B] F'(B). \end{aligned}$$

Teorema 6.63 (Glauber) *Se A e B commutano con $[A, B]$, allora*

$$e^A e^B = e^{(A+B)} e^{[A, B]/2}. \quad (6.89)$$

Dimostrazione: Se si pone

$$F(t) \equiv e^{At} e^{Bt}, \quad (6.90)$$

si ha

$$\frac{dF}{dt} = A e^{At} e^{Bt} + e^{At} B e^{Bt} = (A + e^{At} B e^{-At}) F(t) \quad (6.91)$$

e, per il teorema 6.62,

$$[e^{At}, B] = [A, B] t e^{At},$$

cioè

$$e^{At} B = B e^{At} + t [A, B] e^{At}$$

e

$$e^{At} B e^{-At} = B + t [A, B].$$

Inserendo quest'ultima equazione nell'eq. (6.91) si ha

$$\frac{dF}{dt} = (A + B + t [A, B]) F(t).$$

L'operatore $A + B + t [A, B]$ commuta con l'operatore $(A + B)t + t^2 [A, B]/2$ dato che, per ipotesi, $[A, B]$ commuta con A , quindi A commuta con $A + B$.

Perciò si può applicare l'eq. (6.87) e ottenere

$$\begin{aligned} F(t) &= F(0) \exp \{ (A + B)t + t^2 [A, B]/2 \} \\ &= \exp \{ (A + B)t + t^2 [A, B]/2 \} \end{aligned} \quad (6.92)$$

perché, per l'eq. (6.90), $F(0) = I$. Per $t = 1$, dalle equazioni (6.90) e (6.92) si ottiene la *formula di Glauber* (6.89).

6.6 Prodotto tensoriale

Definizione 6.29 Lo spazio di Hilbert

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2)$$

è detto *prodotto tensoriale* dei due spazi di Hilbert $\mathcal{H}(1)$ e $\mathcal{H}(2)$ se, per ogni $|\Phi(1)\rangle \in \mathcal{H}(1)$ e per ogni $|\Psi(2)\rangle \in \mathcal{H}(2)$, esiste un vettore

$$|\Phi(1)\rangle \otimes |\Psi(2)\rangle \equiv |\Phi(1)\rangle|\Psi(2)\rangle \in \mathcal{H}$$

tale che

1. $\{|u_j(1)\rangle|v_k(2)\rangle\}$ è una base di \mathcal{H} se $\{|u_j(1)\rangle\}$ e $\{|v_k(2)\rangle\}$ sono basi, rispettivamente, di $\mathcal{H}(1)$ e $\mathcal{H}(2)$,

- 2.

$$[\lambda|\Phi(1)\rangle]|\Psi(2)\rangle = \lambda[|\Phi(1)\rangle|\Psi(2)\rangle], \quad (6.93)$$

- 3.

$$[|\Phi_1(1)\rangle + |\Phi_2(1)\rangle]|\Psi(2)\rangle = |\Phi_1(1)\rangle|\Psi(2)\rangle + |\Phi_2(1)\rangle|\Psi(2)\rangle. \quad (6.94)$$

Teorema 6.64 Se N_1 e N_2 sono le dimensioni di $\mathcal{H}(1)$ e $\mathcal{H}(2)$, allora la dimensione di $\mathcal{H} = \mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2)$ è $N = N_1 N_2$.

Dimostrazione: il teorema è una diretta conseguenza della proprietà 1 nella precedente definizione 6.29.

Commento 6.32 Tutti i vettori del tipo $|\Phi(1)\rangle|\Psi(2)\rangle$ appartengono ad \mathcal{H} . Tuttavia, non tutti i vettori di \mathcal{H} sono del tipo $|\Phi(1)\rangle|\Psi(2)\rangle$, dato che le combinazioni lineari di vettori di questo tipo, benché appartengano ad \mathcal{H} , non possono, in generale, essere fattorizzati nel prodotto di un vettore di $\mathcal{H}(1)$ per un vettore di $\mathcal{H}(2)$. Anzi, per la proprietà 1 della definizione 6.29, qualsiasi vettore $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ può essere espresso nella forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{jk} c_{jk} |u_j(1)\rangle |v_k(2)\rangle. \quad (6.95)$$

Tuttavia, non c'è garanzia che esista un insieme di coefficienti, $\{a_j\}$ e $\{b_k\}$, tali che $c_{jk} = a_j b_k$. Se ciò effettivamente fosse possibile si avrebbe

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{jk} c_{jk} |u_j(1)\rangle |v_k(2)\rangle = \sum_j a_j |u_j(1)\rangle \sum_k b_k |v_k(2)\rangle \\ &= |\Phi(1)\rangle|\Psi(2)\rangle. \end{aligned}$$

Definizione 6.30 L'operatore $A(1) \otimes B(2)$ è detto *prodotto tensoriale* dei due operatori $A(1)$, definito su $\mathcal{H}(1)$, e $B(2)$, definito su $\mathcal{H}(2)$, se

$$[A(1) \otimes B(2)]|\Phi(1)\rangle|\Psi(2)\rangle = [A(1)|\Phi(1)\rangle] \otimes [B(2)|\Psi(2)\rangle]. \quad (6.96)$$

Definizione 6.31 Se $A(1)$ è un operatore definito su $\mathcal{H}(1)$, l'estensione di $A(1)$ su $\mathcal{H} = \mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2)$ è il prodotto tensoriale

$$\bar{A}(1) \equiv A(1) \otimes I(2), \quad (6.97)$$

dove $I(2)$ è l'operatore identità in $\mathcal{H}(2)$. Analogamente, l'estensione di $B(2)$ su \mathcal{H} è il prodotto tensoriale

$$\bar{B}(2) \equiv I(1) \otimes B(2), \quad (6.98)$$

dove $I(1)$ è l'operatore identità in $\mathcal{H}(1)$. Reciprocamente, si dice che $A(1)$ e $B(2)$ sono le *restrizioni* degli operatori definiti nelle equazioni (6.97) e (6.98).

Commento 6.33 Ovviamente si ha

$$A(1) \otimes B(2) = \bar{A}(1)\bar{B}(2), \quad (6.99)$$

e

$$[\bar{A}(1), \bar{B}(2)] = 0. \quad (6.100)$$

L'eq. (6.100) segue dalla commutatività del prodotto tensoriale tra operatori e dal fatto che operatori definiti su spazi distinti commutano.

Teorema 6.65 *Un autovalore, a_n , d_n volte degenere, dell'osservabile $A(1)$ definito su $\mathcal{H}(1)$, è anche un autovalore dell'estensione di $A(1)$ su $\mathcal{H} = \mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2)$, ed è ivi $d_n N_2$ volte degenere, dove N_2 è la dimensione di $\mathcal{H}(2)$.*

Dimostrazione: Siano $\{|n\tau\rangle\}$ tali che

$$A(1)|n\tau\rangle = a_n|n\tau\rangle \quad (6.101)$$

e sia $\{|v_k\rangle\}$ una base di $\mathcal{H}(2)$. Si ha

$$\begin{aligned} \bar{A}(1)[|n\tau\rangle|v_k(2)\rangle] &= [A(1)|n\tau\rangle]|v_k(2)\rangle \\ &= a_n[|n\tau\rangle|v_k(2)\rangle]. \end{aligned} \quad (6.102)$$

Inoltre, l'insieme di vettori $\{|n\tau\rangle|v_k(2)\rangle\}$, con n fisso e τ e k variabili, contiene esattamente $d_n N_2$ vettori. Il grado di degenerazione di a_n in \mathcal{H} non può essere maggiore di $d_n N_2$ poiché, essendo $A(1)$ un osservabile, l'insieme di vettori $\{|n\tau\rangle\}$ con n e τ variabili è una base di $\mathcal{H}(1)$. Perciò, l'insieme $\{|n\tau\rangle|v_k(2)\rangle\}$ con n , τ e k variabili è una base di \mathcal{H} e comprende tutti gli autovettori di $\bar{A}(1)$ (che, pertanto, è un'osservabile in \mathcal{H}).

Teorema 6.66 *Sia $\{a_n\}$ l'insieme degli autovalori di un osservabile $A(1)$ definito sullo spazio $\mathcal{H}(1)$, e sia $\{b_n\}$ l'insieme degli autovalori di un osservabile $B(1)$ definito sullo spazio $\mathcal{H}(2)$. Gli autovalori dell'osservabile*

$$C \equiv \bar{A}(1) + \bar{B}(2), \quad (6.103)$$

definito su $\mathcal{H} = \mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2)$, sono tutti e soli i numeri

$$c_{nm} = a_n + b_m, \quad (6.104)$$

e i corrispondenti autovettori sono del tipo

$$|c_{nm}\rangle = |a_n\rangle |b_m\rangle. \quad (6.105)$$

Dimostrazione: da

$$A(1) |a_n\rangle = a_n |a_n\rangle \quad (6.106a)$$

e

$$B(2) |b_m\rangle = b_m |b_m\rangle, \quad (6.106b)$$

si ha

$$\bar{A}(1) |a_n\rangle |b_m\rangle = a_n |a_n\rangle |b_m\rangle \quad (6.107a)$$

e

$$\bar{B}(2) |a_n\rangle |b_m\rangle = b_m |a_n\rangle |b_m\rangle, \quad (6.107b)$$

e perciò

$$[\bar{A}(1) + \bar{B}(2)] |a_n b_m\rangle = (a_n + b_m) |a_n b_m\rangle. \quad (6.108)$$

Ciò esaurisce tutti i possibili autovettori perché, dato che $A(1)$ e $B(2)$ sono osservabili e quindi $\{|a_n\rangle\}$ e $\{|b_m\rangle\}$ sono, rispettivamente, basi di $\mathcal{H}(1)$ e $\mathcal{H}(2)$, $\{|a_n b_m\rangle\}$ è una base di \mathcal{H} .

Capitolo 7

Interpretazione Fisica

7.1 Interpretazione probabilistica

Enunciamo il seguente *postulato fondamentale*:

1. ad ogni sistema fisico S è associato uno spazio di Hilbert separabile \mathcal{H} i cui elementi $|\Psi\rangle$ rappresentano i possibili stati del sistema;
2. ad ogni variabile dinamica A di S è associato un operatore lineare A su \mathcal{H} ;
3. il valor medio di A , quando il sistema è nello stato $|\Psi\rangle$ è

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Psi | A \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (7.1)$$

Teorema 7.1 *Se la variabile dinamica A è reale, allora il corrispondente operatore A è Hermitiano.*

Dimostrazione: per il teorema 6.38, $\langle A \rangle$ nell'eq. (7.1) è reale se e solo se A è Hermitiano.

Commento 7.1 Nel seguito considereremo soltanto variabili dinamiche reali. Inoltre indicheremo la variabile dinamica A e l'operatore ad essa associato con lo stesso simbolo A dato che, sebbene i due concetti debbano essere mantenuti distinti, l'uso di un unico simbolo è raramente causa di confusione.

Definizione 7.1 Le deviazioni della variabile dinamica A dal suo valore medio sono dette *fluttuazioni*. Tali deviazioni sono espresse in modo quantitativo dalla *varianza* ΔA di A definita come segue:

$$(\Delta A)^2 \equiv \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (7.2)$$

Teorema 7.2 *Le fluttuazioni di A sono nulle se e solo se il sistema si trova in uno stato che è autovettore di A (si dice che il sistema si trova in un autostato di A).*

Dimostrazione: se $\Delta A = 0$, dall'eq. (7.2) si ha

$$\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \frac{\langle \Psi | A^2 \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - \frac{\langle \Psi | A \Psi \rangle^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} = 0,$$

cioè

$$\langle A \Psi | A \Psi \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | A \Psi \rangle^2$$

o, equivalentemente,

$$\|\Psi\|^2 \cdot \|A|\Psi\rangle\|^2 = \langle \Psi | A \Psi \rangle^2. \quad (7.3)$$

Quest'ultima è la disuguaglianza di Cauchy-Schwarz (eq. (6.3) del teorema 6.9) con il segno di uguaglianza, quindi $A|\Psi\rangle$ deve essere proporzionale a $|\Psi\rangle$,

$$A|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle, \quad (7.4)$$

cioè $|\Psi\rangle$ è un autovettore di A . Viceversa, se l'eq. (7.4) è soddisfatta, si ha

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \frac{\langle \Psi | A^2 \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - \frac{\langle \Psi | A \Psi \rangle^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} \\ &= a^2 \frac{\langle \Psi | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} - a^2 \frac{\langle \Psi | \Psi \rangle^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle^2} = 0. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Teorema 7.3 *Se il sistema è in un autostato $|\Psi\rangle$ di A appartenente all'autovalore a , il valor medio di A è a .*

Dimostrazione:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Psi | A \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = a \frac{\langle \Psi | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = a. \quad (7.6)$$

Teorema 7.4 *Gli autovalori di A sono gli unici possibili valori che possono essere ottenuti misurando la variabile dinamica A .*

Dimostrazione: a è un possibile valore di A se esiste uno stato del sistema per il quale misurando A si ottiene sempre il valore a . Per un tale stato, quindi, si avrebbe $\Delta A = 0$ e, per il teorema 7.2, tale stato è un autostato di A appartenente all'autovalore a .

Teorema 7.5 *La parte 3 del postulato fondamentale impone che A sia un osservabile.*

Dimostrazione: per uno spazio degli stati finito, A è sicuramente un osservabile (teorema 6.55). In tal caso, usando l'equazione agli autovalori per A ,

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle, \quad (7.7)$$

l'eq. (7.1) si riscrive

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n \langle \Psi | A | n \rangle \langle n | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \sum_n \frac{|\langle n | \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle} a_n \equiv \sum_n p_n a_n, \quad (7.8)$$

dove

$$p_n \equiv \frac{|\langle n | \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (7.9)$$

deve essere la probabilità che misurando A quando il sistema è nello stato $|\Psi\rangle$, si registri il valore a_n . Il fatto che A è un osservabile, cioè che

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = I \quad (7.10)$$

con

$$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}, \quad (7.11)$$

è, quindi, consistente con il fatto che

$$\sum_n p_n = 1, \quad (7.12)$$

così come deve essere se le quantità p_n sono probabilità. Affinchè tale interpretazione probabilistica sia mantenuta in generale, le equazioni (7.10) e (7.11) devono essere soddisfatte anche nel caso in cui lo spettro di A è infinito numerabile. Se, infine, lo spettro di A è continuo, usando l'equazione agli autovalori

$$A|a\rangle = a|a\rangle, \quad (7.13)$$

si ha

$$\langle A \rangle = \int da \frac{|\langle a | \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle} a \equiv \int dP_a a, \quad (7.14)$$

dove

$$dP_a \equiv \frac{|\langle a | \Psi \rangle|^2 da}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (7.15)$$

è la probabilità che misurando A quando il sistema è nello stato $|\Psi\rangle$, si registri un valore compreso fra a e $a + da$. Il fatto che A è un osservabile, cioè che

$$\int da |a\rangle \langle a| = I \quad (7.16)$$

con

$$\langle a | a' \rangle = \delta(a - a'), \quad (7.17)$$

è, quindi, consistente con il fatto che

$$\int dP_a = 1, \quad (7.18)$$

così come deve essere se dP_a è una probabilità.

Commento 7.2 L'insieme degli autovettori di un osservabile definito su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} si comporta come un sistema di coordinate rispetto al quale qualunque stato $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ può essere rappresentato. Va osservato che $|\Psi\rangle$ e $\lambda|\Psi\rangle$ rappresentano lo stesso stato fisico (vedi commento 6.23) dato che

$$\langle A \rangle_{\lambda|\Psi} = \frac{\langle \lambda\Psi | A \lambda\Psi \rangle}{\langle \lambda\Psi | \lambda\Psi \rangle} = \frac{\lambda^* \lambda \langle \Psi | A \Psi \rangle}{\lambda^* \lambda \langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\langle \Psi | A \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \langle A \rangle_{|\Psi}. \quad (7.19)$$

Siamo, quindi, liberi di scegliere a piacere la costante di normalizzazione; d'ora in poi, a meno che non sia specificato altrimenti, la costante di normalizzazione sarà scelta in modo tale che $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$. In seguito a tale scelta le equazioni (7.9) e (7.15) diventano, rispettivamente,

$$p_n = |\langle n | \Psi \rangle|^2 \quad (7.20)$$

e

$$dP_a = |\langle a | \Psi \rangle|^2 da \quad (7.21)$$

dove le quantità $\langle n | \Psi \rangle$ o $\langle a | \Psi \rangle$, dette *ampiezze di probabilità*, hanno il seguente significato: $|\langle n | \Psi \rangle|^2$ o $|\langle a | \Psi \rangle|^2 da$ sono le probabilità che, misurando la variabile dinamica A quando il sistema è nello stato $|\Psi\rangle$, si ottenga il valore a_n o un valore compreso fra a e $a + da$. Qui a_n appartiene alla parte discreta dello spettro di A mentre a a quella continua.

Commento 7.3 C'è un'ulteriore arbitrarietà nella scelta della costante moltiplicativa di un vettore di stato: esso può sempre essere moltiplicato per un fattore di fase arbitrario, cioè per un numero complesso di norma unitaria (un numero del tipo $e^{i\alpha}$ con α reale), senza che ne venga alterata la normalizzazione. Tale arbitrarietà non può essere rimossa.

Commento 7.4 È facile generalizzare le equazioni (7.20) e (7.21) al caso di autovalori degeneri. Per esempio, l'eq. (7.20) diventa

$$p_n = \sum_{\tau} |\langle n\tau | \Psi \rangle|^2, \quad (7.22)$$

dove τ è un indice di degenerazione che permette di distinguere autovettori $|n\tau\rangle$ appartenenti ad un unico autovalore a_n .

Commento 7.5 Dal teorema 6.57 segue che gli autovettori appartenenti ad autovalori della parte continua dello spettro di un osservabile non appartengono allo spazio di Hilbert. Tuttavia, pur non potendo rappresentare uno stato fisico del sistema, essi, insieme con gli autovettori appartenenti ad autovalori della parte discreta dello spettro dell'osservabile, formano una base per la rappresentazione di qualsiasi stato $|\Psi\rangle$ dello spazio di Hilbert del sistema.

Definizione 7.2 Dai teoremi 6.58 e 6.59 si nota che è possibile che un sistema fisico sia in uno stato che è autovettore comune ad un insieme di osservabili che commutano tra loro. Si dice, allora, che un insieme di osservabili $\{A, B, C, \dots\}$ è un *set completo di osservabili che commutano* (SCOC), se:

1. tutti gli osservabili dell'insieme commutano tra loro;
2. nessun osservabile dell'insieme è una funzione degli altri;
3. qualsiasi altro osservabile che commuti con un osservabile dell'insieme è una funzione degli osservabili dell'insieme.

Definizione 7.3 Si dice che lo stato di un sistema fisico è completamente noto se sono noti gli autovalori di tutti gli osservabili appartenenti ad un SCOC.

Commento 7.6 Il problema di determinare se un insieme di osservabili che soddisfa i punti 1 e 2 della definizione 7.2 è effettivamente un SCOC, è un problema non matematico, ma fisico. Per esempio, le tre coordinate di posizione costituiscono un SCOC per un elettrone fino a che non si scopre che l'elettrone possiede uno spin.

Commento 7.7 La specificazione dell'insieme degli autovalori degli osservabili componenti un SCOC, individua un unico autovettore comune a tutti gli osservabili del SCOC (se permanessero degenerazioni l'insieme degli osservabili non sarebbe completo). La totalità degli autovettori comuni a tutti gli osservabili di un SCOC costituisce un insieme di base e può, quindi, essere usata per rappresentare qualsiasi vettore di stato $|\Psi\rangle$: SCOC distinti individuano basi distinte e quindi distinte *rappresentazioni*. Di conseguenza, gli autovettori normalizzati, comuni a tutti gli osservabili di un SCOC, hanno la stessa funzione che hanno i versori in un sistema di coordinate, e distinte rappresentazioni sono equivalenti a due distinti sistemi di coordinate. Rappresentazioni distinte sono collegate tra loro tramite una trasformazione unitaria (teorema 6.51). La scelta della rappresentazione è guidata da ragioni di convenienza ma è altrimenti completamente arbitraria; ne vedremo alcuni esempi nel seguito (definizione 7.9).

Teorema 7.6 Siano A e B due osservabili. Per ogni stato normalizzato $|\Psi\rangle$ si ha

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle A\Psi|B\Psi\rangle - \langle B\Psi|A\Psi\rangle|, \quad (7.23)$$

dove la varianza degli operatori A e B è stata definita nell'eq. (7.2).

Dimostrazione: senza perdere in generalità, poniamo l'origine dei valori di A e B in modo tale che $\langle A\rangle = \langle B\rangle = 0$, cosicché

$$(\Delta A)^2 = \langle \Psi|A^2|\Psi\rangle = \langle A\Psi|A\Psi\rangle = \|A\Psi\|^2 \quad (7.24)$$

e, analogamente,

$$(\Delta B)^2 = \|B\Psi\|^2. \quad (7.25)$$

Si ha, pertanto, l'uguaglianza

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 = \|A\Psi\|^2 \cdot \|B\Psi\|^2, \quad (7.26)$$

alla quale si può applicare la disuguaglianza di Cauchy-Schwarz (teorema 6.9),

$$\|A\Psi\|^2 \cdot \|B\Psi\|^2 \geq |\langle A\Psi|B\Psi \rangle|^2. \quad (7.27)$$

Il membro destro dell'eq. (7.27) può essere riscritto come

$$\begin{aligned} |\langle A\Psi|B\Psi \rangle|^2 &= (\operatorname{Re}\langle A\Psi|B\Psi \rangle)^2 + (\operatorname{Im}\langle A\Psi|B\Psi \rangle)^2 \\ &= \frac{1}{4}|\langle A\Psi|B\Psi \rangle + \langle B\Psi|A\Psi \rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle A\Psi|B\Psi \rangle - \langle B\Psi|A\Psi \rangle|^2 \\ &\geq \frac{1}{4}|\langle A\Psi|B\Psi \rangle - \langle B\Psi|A\Psi \rangle|^2. \end{aligned} \quad (7.28)$$

Confrontando le equazioni (7.26), (7.27) e (7.28) si ha

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}|\langle A\Psi|B\Psi \rangle - \langle B\Psi|A\Psi \rangle|^2, \quad (7.29)$$

che è l'eq. (7.23).

Teorema 7.7 *Se si verifica qualsiasi delle seguenti condizioni:*

1. $[A, B] = 0$,
2. A (B) ammette un autovettore dello spettro discreto che appartiene al dominio di B (A),
3. A o B è un operatore limitato,

allora esiste uno stato $|\Psi\rangle$ per il quale il prodotto $\Delta A \Delta B$ è arbitrariamente piccolo.

Dimostrazione: se la condizione 1 è soddisfatta, il membro destro dell'eq. (7.28) è nullo per qualsiasi stato dato che, indicando con $\{|n\rangle\}$ l'insieme degli autovettori comuni a A e B (teorema 6.59), si ha, per qualsiasi stato $|\Psi\rangle$,

$$A|\Psi\rangle = \sum_n A|n\rangle\langle n|\Psi\rangle = \sum_n a_n|n\rangle\langle n|\Psi\rangle \quad (7.30)$$

e

$$B|\Psi\rangle = \sum_n B|n\rangle\langle n|\Psi\rangle = \sum_n b_n|n\rangle\langle n|\Psi\rangle, \quad (7.31)$$

da cui

$$\langle A\Psi|B\Psi \rangle = \sum_{nm} a_n b_m \langle \Psi|n\rangle\langle n|m\rangle\langle m|\Psi\rangle = \sum_n a_n b_n |\langle n|\Psi\rangle|^2 \quad (7.32)$$

e

$$\langle B\Psi|A\Psi \rangle = \sum_n a_n b_n |\langle n|\Psi\rangle|^2, \quad (7.33)$$

per cui la differenza delle equazioni (7.32) e (7.33) è zero. Se la condizione 2 è soddisfatta, scegliendo $|\Psi\rangle$ essere proprio quell'autovettore si ha $\Delta A = 0$ e ΔB è un numero finito ($\Delta B = 0$ e ΔA è un numero finito). Infine, se è soddisfatta la condizione 3, siccome la varianza di un operatore limitato è un numero finito (dalla definizione 6.18, il dominio di un operatore limitato è l'intero spazio), e dato che è sempre possibile trovare uno stato, $|\Psi\rangle$, per il quale la varianza di un operatore, limitato o no, è piccola a piacere (teorema 7.2), il prodotto delle varianze di A e B in tale stato risulterà piccolo a piacere.

Commento 7.8 Il teorema 7.7 fornisce le condizioni per l'esistenza di coppie di osservabili tali che il prodotto delle loro varianze in qualunque stato non sia minore di un determinato numero positivo. Si noti che il fatto che A e B non commutino non è una condizione sufficiente: è anche necessario che sia A che B siano non limitati e che nessun autovettore dello spettro discreto dell'uno appartenga al dominio dell'altro.

Teorema 7.8 *Se nessuna delle condizioni del teorema 7.7 è soddisfatta e se per due osservabili A e B si ha*

$$[A, B] = cI \quad (7.34)$$

dove c è uno scalare, allora

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{|c|}{2}. \quad (7.35)$$

Dimostrazione: con le ipotesi fatte si ha, per qualsiasi stato normalizzato $|\Psi\rangle$,

$$\begin{aligned} c &= \langle \Psi | c \Psi \rangle = \langle \Psi | [A, B] \Psi \rangle = \langle \Psi | AB \Psi \rangle - \langle \Psi | BA \Psi \rangle \\ &= \langle A \Psi | B \Psi \rangle - \langle B \Psi | A \Psi \rangle \end{aligned}$$

e, confrontando questa quantità con l'eq. (7.23), si ottiene l'eq. (7.35).

7.2 Trasformazioni unitarie

Teorema 7.9 (Wigner) *Se, per ogni $|\Psi\rangle$ e $|\Phi\rangle$ appartenenti ad uno spazio di Hilbert si ha*

$$|\langle \Phi | \Psi \rangle| = |\langle \Phi' | \Psi' \rangle| \quad (7.36)$$

con

$$U|\Psi\rangle = |\Psi'\rangle \quad (7.37)$$

e

$$U|\Phi\rangle = |\Phi'\rangle, \quad (7.38)$$

allora U è un operatore unitario, o lineare o antilineare.

Teorema 7.10 *Se l'operatore unitario U definito nel teorema 7.9 compie una trasformazione continua, esso è lineare.*

Dimostrazione: Sia ϵ il parametro infinitesimo della trasformazione:

$$U(\epsilon)|\Psi_0\rangle = |\Psi_\epsilon\rangle. \quad (7.39)$$

Se U fosse antilineare si avrebbe

$$\begin{aligned} U(2\epsilon)c|\Psi_0\rangle &= U(\epsilon)U(\epsilon)c|\Psi_0\rangle = U(\epsilon)c^*|\Psi_\epsilon\rangle = c|\Psi_{2\epsilon}\rangle \\ &= cU(2\epsilon)|\Psi_0\rangle, \end{aligned}$$

perciò U è necessariamente lineare.

Teorema 7.11 *Le trasformazioni unitarie preservano il valor medio di un osservabile A e le relazioni di commutazione tra due osservabili A e B .*

Dimostrazione: si ha

$$\langle A' \rangle' = \langle \Psi' | A' | \Psi' \rangle = \langle \Psi | U U^\dagger A U U^\dagger | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle A \rangle \quad (7.40)$$

e

$$\begin{aligned} [A', B'] &\equiv [U^\dagger A U, U^\dagger B U] = U^\dagger A U U^\dagger B U - U^\dagger B U U^\dagger A U \\ &= U^\dagger A B U - U^\dagger B A U = U^\dagger [A, B] U \equiv [A, B]'. \end{aligned} \quad (7.41)$$

Teorema 7.12 (Stone) *Per ogni operatore lineare U , funzione di un parametro continuo ϵ , esiste uno ed un solo operatore Hermitiano G (detto il generatore della trasformazione unitaria effettuata da U), indipendente da ϵ , tale che*

$$U(\epsilon) = e^{-i\epsilon G} \quad (7.42)$$

$$= I - i\epsilon G + \dots \quad (7.43)$$

Commento 7.9 Gli osservabili possono essere considerati generatori di trasformazioni unitarie infinitesime (vedi commento 3.8).

Teorema 7.13 *Se un osservabile A è invariante per la trasformazione unitaria infinitesima generata da G , allora*

$$[A, G] = 0. \quad (7.44)$$

Dimostrazione: l'invarianza di A implica che

$$A = A' = (I + i\epsilon G)A(I - i\epsilon G) = A - i\epsilon[A, G],$$

da cui segue l'eq. (7.44)

Definizione 7.4 Siano $U(t)$, $T_x(\epsilon)$ e $R_z(t)$ gli operatori lineari unitari che effettuano, rispettivamente, le seguenti trasformazioni unitarie: traslazioni nel

tempo, traslazioni nello spazio ordinario lungo l'asse x e rotazioni nello spazio ordinario di un angolo ϵ intorno all'asse z . Per il teorema di Stone si ha

$$U(t) = I - itH \quad (7.45)$$

$$T_x(\epsilon) = I - i\epsilon P_x \quad (7.46)$$

$$R_z(\epsilon) = I - i\epsilon J_z \quad (7.47)$$

dove, per definizione, gli operatori Hermitiani H , P_x e J_z sono, rispettivamente, l'energia totale, la componente lungo l'asse x del momento lineare (o quantità di moto) totale e la componente lungo l'asse z del momento angolare totale.

Commento 7.10 Si noti che le dimensioni degli operatori H , P_x e J_z sono consistenti con le rispettive definizioni se si include nell'ultimo termine delle equazioni (7.45)–(7.47) una costante moltiplicativa in modo tale che tale termine risulti adimensionale. Tale costante, generalmente indicata con $2\pi/h$ e che ha le dimensioni dell'inverso di un'azione, non appare esplicitamente nelle equazioni (7.45)–(7.47) perché abbiamo scelto le unità di misura in modo tale che $\hbar \equiv h/2\pi = 1$ (e si continuerà a farlo nel resto del libro a meno che non si specifichi altrimenti). Con questa particolare scelta delle unità di misura, l'energia e il momento lineare appaiono avere le dimensioni, rispettivamente, dell'inverso di tempo e dell'inverso di lunghezza, mentre il momento angolare appare essere adimensionale. Tale sistema di unità di misura è conveniente in quanto, eseguendo calcoli, non ci si deve trascinare la quantità \hbar ad ogni passaggio. Semplici considerazioni dimensionali permettono di ristabilire, alla fine del calcolo le corrette espressioni generali che contengono \hbar . Inoltre, siccome le azioni che contraddistinguono i processi atomici e molecolari hanno lo stesso ordine di grandezza di \hbar , se si indica con $-e$ la carica dell'elettrone, con m_e la massa dell'elettrone, e con a_0 il raggio di Bohr di un elettrone legato ad una massa infinitamente pesante e di carica $+e$, possiamo scegliere le unità di misura in modo tale che $e = m_e = a_0 = 1$. Definiamo perciò le *unità atomiche* come le unità per le quali

$$\hbar = e = m_e = a_0 = 1. \quad (7.48)$$

Si noti che in queste unità la velocità della luce nel vuoto è $c = 137.036$, e che, in due dei più comuni sistemi di unità di misura (cgs e SI), le suddette quantità hanno i seguenti ordini di grandezza (il loro esatto valore può essere trovato in qualsiasi manuale di fisica):

$$\begin{aligned} \hbar &\sim 10^{-27} \text{ erg}\cdot\text{s} \sim 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \\ e &\sim 10^{-10} \text{ statC} \sim 10^{-19} \text{ C} \\ m_e &\sim 10^{-27} \text{ g} \sim 10^{-30} \text{ Kg} \\ a_0 &\sim 10^{-8} \text{ cm} \sim 10^{-10} \text{ m} \\ c &\sim 10^{10} \text{ cm/s} \sim 10^8 \text{ m/s}. \end{aligned}$$

Teorema 7.14 *Se un osservabile A è una costante del moto, esso commuta con l'osservabile energia totale, H .*

Dimostrazione: se A è una costante del moto, essa è invariante per traslazioni nel tempo, le quali sono generate da H (definizione 7.4). Per il teorema 7.13, si ha

$$[A, H] = 0. \quad (7.49)$$

Teorema 7.15 *Il vettore di stato evolve nel tempo secondo l'equazione di Schrödinger*

$$i \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle, \quad (7.50)$$

e il valore medio di un osservabile A evolve nel tempo secondo l'equazione

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \frac{1}{i} \langle [A, H] \rangle + \langle \partial_t A \rangle. \quad (7.51)$$

Dimostrazione: dalle equazioni (7.39) e (7.45) si ha

$$|\Psi(t)\rangle = U(t) |\Psi(0)\rangle = e^{-itH} |\Psi(0)\rangle. \quad (7.52)$$

Calcolando la derivata totale dell' eq. (7.52) ed usando il teorema 6.61 (H , per il teorema 7.12, non dipende dal tempo) si ottiene l'eq. (7.50). Infine, dato che per un vettore di stato normalizzato l'eq. (7.1) è (vedi commenti 7.1 e 7.2)

$$\langle A \rangle(t) = \langle \Psi(t) | A(t) | \Psi(t) \rangle \quad (7.53)$$

e che l'aggiunta dell'eq. (7.50) è

$$-i \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | = \langle \Psi(t) | H, \quad (7.54)$$

si ha

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) &= \langle \dot{\Psi} | A \Psi \rangle + \langle \Psi | \dot{A} \Psi \rangle + \langle \Psi | A \dot{\Psi} \rangle \\ &= -\frac{1}{i} \langle \Psi | H A \Psi \rangle + \langle \dot{A} \rangle + \frac{1}{i} \langle \Psi | A H \Psi \rangle, \end{aligned}$$

da cui segue l'eq. (7.51).

Commento 7.11 Le equazioni (7.50) e (7.51) mostrano che un vettore di stato $|\Psi\rangle$ e il valore medio $\langle A \rangle$ di un osservabile A evolvono nel tempo in modo deterministico: la natura probabilistica che caratterizza la meccanica quantistica è limitata al risultato del singolo processo di misura (ammesso che il sistema non si trovi in un autostato dell'osservabile che si sta misurando). Dall'equazione (7.50) si può notare, inoltre, che la forma esplicita dell'operatore H è

$$H \equiv i \frac{d}{dt}, \quad (7.55)$$

e dall'eq. (7.51) si può vedere che, siccome H non dipende esplicitamente dal tempo (teorema 7.12), la variabile dinamica ad esso associata (l'energia) è una costante del moto.

7.3 Descrizioni

Commento 7.12 Dall'eq. (7.51) si può vedere che l'evoluzione temporale di $\langle A \rangle$ (eq. (7.53)) è conseguenza:

1. dell'evoluzione temporale del vettore di stato $|\Psi(t)\rangle$, il quale evolve secondo l'equazione di Schrödinger (7.50) e
2. di un'eventuale esplicita dipendenza dal tempo di A .

Benché l'evoluzione temporale del sistema sia completamente descritta dal vettore di stato $|\Psi(t)\rangle$, visto che è la quantità $\langle A \rangle$ ad avere significato fisico piuttosto che $|\Psi(t)\rangle$, è possibile formulare la teoria quantistica in modo tale che la dipendenza temporale sia tutta contenuta negli operatori. Per ottenere ciò si inserisca l'eq. (7.52) nell'eq. (7.53)

$$\langle A \rangle(t) = \langle \Psi(0) | e^{itH} A(t) e^{-itH} | \Psi(0) \rangle, \quad (7.56)$$

e si definiscano

$$|\Psi_H\rangle \equiv |\Psi(0)\rangle \quad (7.57)$$

e

$$A_H(t) \equiv e^{itH} A(t) e^{-itH}. \quad (7.58)$$

Si ha

$$\langle A_H \rangle(t) = \langle \Psi_H | A_H(t) | \Psi_H \rangle, \quad (7.59)$$

dove il vettore di stato $|\Psi_H\rangle$ non dipende dal tempo ma l'operatore A_H lo è (anche se A non vi dipendesse).

La formulazione della teoria che corrisponde alle equazioni (7.52) e (7.53) è detta *descrizione di Schrödinger*, e in essa l'equazione del moto è l'equazione di Schrödinger (7.50). La formulazione della teoria che corrisponde alle equazioni (7.57)–(7.59) è detta *descrizione di Heisenberg*, e in essa l'equazione del moto è l'equazione di Heisenberg che deriveremo nel prossimo teorema. La coerenza interna della teoria si ottiene richiedendo che

$$\langle A_H \rangle(t) = \langle A \rangle(t). \quad (7.60)$$

Teorema 7.16 *Un osservabile $A_H(t)$ nella descrizione di Heisenberg evolve nel tempo secondo l'equazione di Heisenberg*

$$\frac{dA_H(t)}{dt} = \frac{1}{i} [A_H(t), H] + (\partial_t A)_H. \quad (7.61)$$

Dimostrazione: Si noti innanzitutto che

$$H_H = H, \quad (7.62)$$

come si può verificare dall'eq. (7.58). Dall'eq. (7.58), si ha

$$\begin{aligned} \frac{dA_H(t)}{dt} &= iH e^{iHt} A(t) e^{-iHt} + e^{iHt} \dot{A}(t) e^{-iHt} - i e^{iHt} A(t) H e^{-iHt} \\ &= iH A_H(t) + (\partial_t A)_H - i A_H(t) H \\ &= \frac{1}{i} [A_H(t), H] + (\partial_t A)_H \end{aligned}$$

che è l'eq. (7.61).

Commento 7.13 L'eq. (7.51) si ottiene ora facilmente calcolando il valor medio dell'eq. (7.61) e facendo uso della condizione (7.60).

Commento 7.14 Da ciò che si è visto finora appare chiaro che è possibile definire, tramite trasformazioni unitarie (vedi definizione 6.25), un infinito numero di descrizioni (delle quali le descrizioni di Schrödinger e di Heisenberg sono due casi particolari) in ognuna delle quali la dipendenza temporale è contenuta sia nei vettori di stato che negli osservabili. La sola condizione è che tutte le distinte descrizioni forniscano lo stesso valor medio di ogni osservabile. Particolarmente importante fra queste è la *descrizione di interazione*.

Definizione 7.5 Si assuma che l'Hamiltoniano di un dato sistema possa essere decomposto in

$$H = H_0 + V \quad (7.63)$$

con $[H_0, V] \neq 0$. La *descrizione di interazione* (indicata nel seguito con una barra orizzontale) è definita, a partire da quella di Schrödinger, da

$$\bar{A}(t) \equiv e^{iH_0 t} A(t) e^{-iH_0 t} \quad (7.64a)$$

e

$$|\bar{\Psi}(t)\rangle \equiv e^{iH_0 t} |\Psi(t)\rangle. \quad (7.64b)$$

Commento 7.15 La descrizione di Heisenberg e la descrizione di interazione coincidono se $V = 0$; inoltre, tutte e tre le descrizioni (quella di Schrödinger, quella di Heisenberg e quella di interazione) coincidono al tempo $t = 0$.

Teorema 7.17 *Le equazioni di evoluzione temporale per operatori e per vettori di stato nella descrizione di interazione sono, rispettivamente,*

$$\frac{d}{dt} \bar{A}(t) = \frac{1}{i} [\bar{A}(t), H_0] + \partial_t \bar{A} \quad (7.65)$$

e

$$i \frac{d}{dt} |\bar{\Psi}(t)\rangle = \bar{V}(t) |\bar{\Psi}(t)\rangle. \quad (7.66)$$

Dimostrazione: si noti innanzitutto che dall'eq. (7.64a) si ha

$$\bar{H}_0 = H_0, \quad (7.67)$$

per cui l'eq. (7.65) segue dall'eq. (7.64a) così come l'eq. (7.61) segue dall'eq. (7.58). Inoltre, dalle equazioni (7.64b) e (7.50),

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\bar{\Psi}\rangle &= iH_0 e^{iH_0 t} |\Psi(t)\rangle + e^{iH_0 t} \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle \\ &= iH_0 e^{iH_0 t} |\Psi(t)\rangle - i e^{iH_0 t} H |\Psi(t)\rangle \\ &= iH_0 e^{iH_0 t} |\Psi(t)\rangle - i e^{iH_0 t} (H_0 + V) |\Psi(t)\rangle = -i e^{iH_0 t} V |\Psi(t)\rangle \\ &= -i e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t} e^{iH_0 t} |\Psi(t)\rangle = -i \bar{V}(t) |\bar{\Psi}(t)\rangle, \end{aligned}$$

che è l'eq. (7.66).

Commento 7.16 Nella pratica, l'equazione di Schrödinger è più facile da usare dell'equazione di Heisenberg in quanto quest'ultima è un'equazione fra operatori mentre la prima è un'equazione vettoriale. La descrizione di Heisenberg, tuttavia, è particolarmente importante perchè, come vedremo, costituisce la descrizione più naturale di un sistema quantizzato a partire dal corrispondente sistema classico.

Nella descrizione di interazione, come si può vedere dalle equazioni (7.65) e (7.66), l'evoluzione temporale degli operatori dipende soltanto da H_0 mentre quella dei vettori di stato dipende soltanto da $\bar{V}(t)$. Nel caso in cui $H = H_0 + V$ e se il problema per H_0 è stato già risolto (ma non quello per H !), la descrizione di interazione è più conveniente di quella di Schrödinger: l'unica equazione da risolvere è la (7.66). Tale equazione è formalmente simile all'equazione di Schrödinger (7.50) a parte il fatto che in quest'ultima H non dipende esplicitamente dal tempo mentre, nell'eq. (7.66), \bar{V} è una funzione del tempo (anche se V non lo fosse). Vedremo ora (teoremi 7.18–7.20) le conseguenze che questo fatto comporta quando si risolve l'equazione (7.66).

Teorema 7.18 *Se si definisce $U(t)$ come*

$$|\Psi(t)\rangle \equiv U(t)|\Psi(0)\rangle \quad (7.68)$$

e $\bar{U}(t)$ come

$$|\bar{\Psi}(t)\rangle \equiv \bar{U}(t)|\bar{\Psi}(0)\rangle, \quad (7.69)$$

le rispettive equazioni di evoluzione temporale sono

$$i \frac{d}{dt} U(t) = H U(t) \quad (7.70)$$

e

$$i \frac{d}{dt} \bar{U}(t) = \bar{V}(t) \bar{U}(t). \quad (7.71)$$

Dimostrazione: segue immediatamente calcolando la derivata totale rispetto al tempo delle equazioni (7.68) e (7.69) e facendo uso delle equazioni (7.50) e (7.66).

Teorema 7.19 *La soluzione dell'eq. (7.70), con $U(0) = I$, è*

$$U(t) = e^{-iHt}. \quad (7.72)$$

Dimostrazione: si può vedere che l'eq. (7.70) è soddisfatta calcolando la derivata totale rispetto al tempo dell'eq. (7.72) e facendo uso del teorema 6.61 (H non dipende dal tempo).

Commento 7.17 La soluzione dell'eq. (7.71) non è

$$\bar{U}(t) = \exp \left[-i \int_0^t dt' \bar{V}(t') \right] \quad (7.73)$$

in quanto l'operatore integrando e quello integrato in generale non commutano, ed il teorema 6.61 non può essere applicato. Vedremo ora come risolvere correttamente l'eq. (7.71).

Definizione 7.6 L'operatore di ordinamento temporale è definito come

$$T[A(t_1)B(t_2)] = \begin{cases} A(t_1)B(t_2) & \text{se } t_1 \geq t_2 \\ B(t_2)A(t_1) & \text{se } t_1 < t_2 \end{cases} . \quad (7.74)$$

Teorema 7.20 La soluzione dell'eq. (7.71) è

$$\bar{U}(t) = T \left\{ \exp \left[-i \int_0^t dt' \bar{V}(t') \right] \right\} . \quad (7.75)$$

Dimostrazione: l'equazione differenziale (7.71) è equivalente all'equazione integrale

$$\bar{U}(t) = I + \frac{1}{i} \int_0^t dt' \bar{V}(t') \bar{U}(t') \quad (7.76)$$

che può essere risolta iterativamente:

$$\bar{U}(t) = I + \frac{1}{i} \int_0^t dt' \bar{V}(t') + \left(\frac{1}{i} \right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \bar{V}(t') \bar{V}(t'') + \dots \quad (7.77)$$

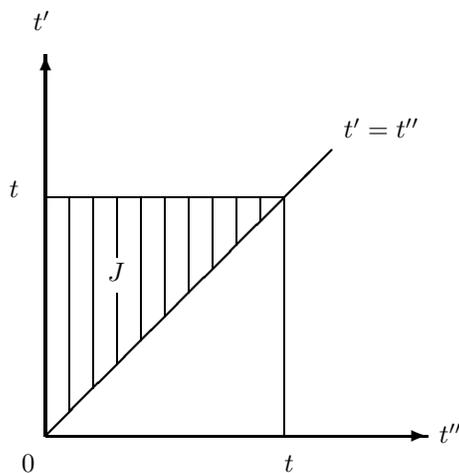
Si calcoli ora l'ultimo integrale,

$$J \equiv \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \bar{V}(t') \bar{V}(t'') , \quad (7.78)$$

che può essere separato nella somma

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \bar{V}(t') \bar{V}(t'') + \frac{1}{2} \int_0^t dt'' \int_{t''}^t dt' \bar{V}(t') \bar{V}(t'') \\ &\equiv (K + L) \end{aligned}$$

La figura seguente mostra il dominio d'integrazione relativo all'integrale J .



Inoltre, dalla definizione della *funzione scalino*,

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ 1 & \text{se } x > 0 \end{cases}, \quad (7.79)$$

gli integrali K e L diventano

$$K = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \bar{V}(t') \bar{V}(t'') = \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \bar{V}(t') \bar{V}(t'') \theta(t' - t'')$$

e

$$\begin{aligned} L &= \int_0^t dt'' \int_{t''}^t dt' \bar{V}(t') \bar{V}(t'') = \int_0^t dt' \int_{t'}^t dt'' \bar{V}(t'') \bar{V}(t') \\ &= \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \bar{V}(t'') \bar{V}(t') \theta(t'' - t'). \end{aligned}$$

Pertanto,

$$J = \frac{1}{2}(K + L) = \frac{1}{2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' T [\bar{V}(t') \bar{V}(t'')]. \quad (7.80)$$

La generalizzazione di questa procedura ai termini di ordine superiore dell'eq. (7.77), fornisce la soluzione completa dell'eq. (7.71):

$$\bar{U}(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-i)^j}{j!} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_j T [\bar{V}(t_1) \dots \bar{V}(t_j)], \quad (7.81)$$

che può essere riscritta in modo compatto nella forma (7.75).

7.4 Teoremi di conservazione

Teorema 7.21 *Se l'operatore Hamiltoniano H è invariante rispetto alla trasformazione infinitesima generata da un osservabile G che non dipende esplicitamente dal tempo, allora G è una costante del moto.*

Dimostrazione: dalle ipotesi si ha $[H, G] = 0$ (teorema 7.13) e per il teorema 7.11 ciò è valido in qualsiasi descrizione, ed in particolare nella descrizione di Heisenberg. Dato che G non dipende esplicitamente dal tempo, dall'eq. (7.61), si ha $dG_H/dt = 0$, per cui G è una costante del moto.

Teorema 7.22 *La componente P_x del momento lineare \mathbf{P} si conserva se H è invariante per traslazioni lungo l'asse x ; la componente J_z del momento angolare \mathbf{J} si conserva se H è invariante per rotazioni attorno all'asse z .*

Dimostrazione: il teorema segue direttamente dall'applicazione del teorema 7.21 e dal fatto che, per definizione (definizione 7.4), P_x e J_z sono, rispettivamente, il generatore di traslazioni lungo l'asse x e il generatore di rotazioni attorno all'asse z .

Commento 7.18 L'identificazione di H come l'osservabile associato con l'energia totale del sistema è confermata dal confronto delle equazioni (7.61) e (3.11): si può derivare la prima dalla seconda sostituendo la parentesi di Poisson con l'operazione di commutazione divisa per i . Ciò implica che le equazioni (3.9) per le variabili dinamiche classiche q e p debbano essere sostituite in meccanica quantistica con le equazioni

$$[Q_j, Q_k] = [P_j, P_k] = 0 \quad (7.82a)$$

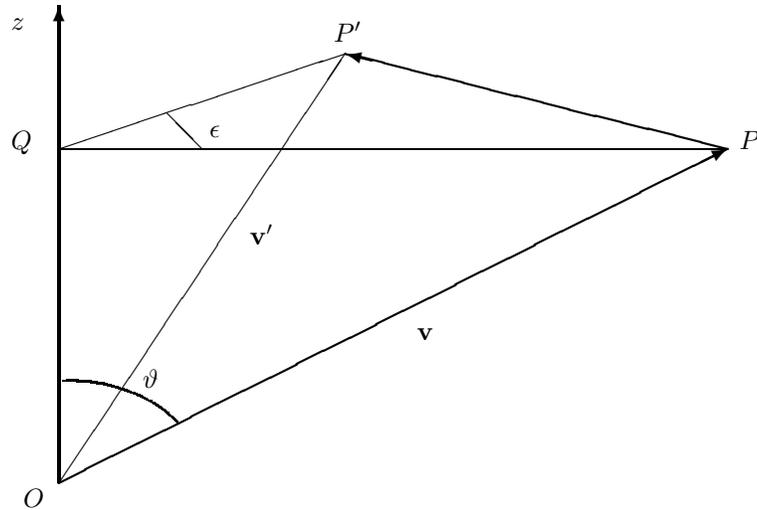
$$[Q_j, P_k] = i\delta_{jk} \quad (7.82b)$$

per i corrispondenti osservabili quantistici Q e P . Si mostrerà che (teorema 7.28) che la coerenza interna della teoria richiede che le equazioni (7.82) siano appunto soddisfatte.

Teorema 7.23 *Se, nello spazio tridimensionale ordinario, un punto P (definito dal vettore posizione \mathbf{V}) è ruotato di un angolo infinitesimo ϵ intorno ad un asse dato (diciamo, l'asse z) sino a sovrapporsi sul punto P' (definito dal vettore posizione \mathbf{V}'), allora*

$$\mathbf{V}' = \mathbf{V} + \epsilon(\hat{z} \times \mathbf{V}). \quad (7.83)$$

Dimostrazione: dalla figura seguente,



si può notare che

$$\mathbf{V}' = \mathbf{V} + \mathbf{P}'\mathbf{P}. \quad (7.84)$$

Il vettore $\mathbf{P}'\mathbf{P}$, essendo, per ϵ infinitesimo, perpendicolare al piano definito dall'asse z e dal vettore \mathbf{V} , può essere scritto come

$$\mathbf{P}'\mathbf{P} = \overline{P'P} \frac{\hat{z} \times \mathbf{V}}{V \sin \vartheta} = \overline{QP} \epsilon \frac{\hat{z} \times \mathbf{V}}{V \sin \vartheta} = \epsilon \hat{z} \times \mathbf{V} \quad (7.85)$$

dove, per ϵ infinitesimo, la lunghezza della corda $\overline{P'P}$ può essere sostituita con la lunghezza dell'arco corrispondente e $\sin \epsilon$ può essere sostituito con ϵ . Inserendo l'eq. (7.85) nell'eq. (7.84) si ottiene l'eq. (7.83).

Teorema 7.24 *Sia $\mathcal{R}_u(\epsilon)$ l'operatore che ruota i vettori dello spazio tridimensionale ordinario di un angolo infinitesimo ϵ intorno all'asse u . Vale la seguente identità:*

$$\mathcal{R}_y(-\epsilon')\mathcal{R}_x(\epsilon)\mathcal{R}_y(\epsilon')\mathcal{R}_x(-\epsilon) = \mathcal{R}_z(\epsilon\epsilon'). \quad (7.86)$$

Dimostrazione: usando l'eq. (7.83) possiamo scrivere

$$\mathcal{R}_x(-\epsilon)\mathbf{V} = \mathbf{V} - \epsilon\hat{x} \times \mathbf{V},$$

e, successivamente,

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_y(\epsilon')\mathcal{R}_x(-\epsilon)\mathbf{V} &= (\mathbf{V} - \epsilon\hat{x} \times \mathbf{V}) + \epsilon'\hat{y} \times (\mathbf{V} - \epsilon\hat{x} \times \mathbf{V}) \\ &= \mathbf{V} - \epsilon\hat{x} \times \mathbf{V} + \epsilon'\hat{y} \times \mathbf{V} - \epsilon\epsilon'\hat{y} \times (\hat{x} \times \mathbf{V}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_x(\epsilon)\mathcal{R}_y(\epsilon')\mathcal{R}_x(-\epsilon)\mathbf{V} &= \mathbf{V} - \epsilon\hat{x} \times \mathbf{V} + \epsilon'\hat{y} \times \mathbf{V} - \epsilon\epsilon'\hat{y} \times (\hat{x} \times \mathbf{V}) + \epsilon\hat{x} \times \mathbf{V} \\ &\quad + \epsilon\epsilon'\hat{x} \times (\hat{y} \times \mathbf{V}) \\ &= \mathbf{V} + \epsilon'\hat{y} \times \mathbf{V} - \epsilon\epsilon'[\hat{y} \times (\hat{x} \times \mathbf{V}) - \hat{x} \times (\hat{y} \times \mathbf{V})] \end{aligned}$$

e, infine,

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_y(-\epsilon')\mathcal{R}_x(\epsilon)\mathcal{R}_y(\epsilon')\mathcal{R}_x(-\epsilon)\mathbf{V} &= \mathbf{V} + \epsilon'\hat{y} \times \mathbf{V} - \epsilon\epsilon'[\hat{y} \times (\hat{x} \times \mathbf{V}) - \hat{x} \times (\hat{y} \times \mathbf{V})] \\ &\quad - \epsilon'\hat{y} \times (\mathbf{V} + \epsilon'\hat{y} \times \mathbf{V} + \dots) \\ &= \mathbf{V} + \epsilon\epsilon'[-\hat{y} \times (\hat{x} \times \mathbf{V}) + \hat{x} \times (\hat{y} \times \mathbf{V})]. \end{aligned}$$

Facendo uso dell'identità vettoriale

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})\mathbf{B} - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})\mathbf{C}, \quad (7.87)$$

si vede che

$$\hat{y} \times (\hat{x} \times \mathbf{V}) = V_y\hat{x} \quad \text{e} \quad \hat{x} \times (\hat{y} \times \mathbf{V}) = V_x\hat{y},$$

cioè

$$\hat{y}V_x - \hat{x}V_y = \hat{z} \times \mathbf{V}.$$

Usando nuovamente l'eq. (7.83) si ottiene, infine, l'eq. (7.86):

$$\mathcal{R}_y(-\epsilon')\mathcal{R}_x(\epsilon)\mathcal{R}_y(\epsilon')\mathcal{R}_x(-\epsilon)\mathbf{V} = \mathbf{V} + \epsilon'\epsilon\hat{z} \times \mathbf{V} = \mathcal{R}_z(\epsilon\epsilon')\mathbf{V}.$$

Commento 7.19 L'identità (7.86) è una conseguenza del fatto che le rotazioni nello spazio tridimensionale ordinario, in generale, non commutano tra loro. Vedremo ora quali conseguenze ciò comporti per i generatori delle rotazioni unitarie infinitesime definite nell'eq. (7.47).

Teorema 7.25 *Tra gli osservabili corrispondenti alle componenti del momento angolare:*

$$[J_x, J_y] = iJ_z. \quad (7.88)$$

Dimostrazione: dalle equazioni (7.47) e (7.86) si ha

$$(I + i\epsilon' J_y)(I - i\epsilon J_x)(I - i\epsilon' J_y)(I + i\epsilon J_x) = I - i\epsilon\epsilon' J_z,$$

da cui, sviluppando il membro a sinistra e includendo solo i termini di ordine non superiore a $\epsilon\epsilon'$, si ottiene

$$I + \epsilon\epsilon' (J_y J_x - J_x J_y) = I - i\epsilon\epsilon' J_z,$$

da cui segue l'eq. (7.88).

Commento 7.20 Le relazioni di commutazione fra le componenti del momento angolare sono, talvolta, scritte come

$$\mathbf{J} \times \mathbf{J} = i\mathbf{J} \quad \text{oppure} \quad \epsilon_{klm} J_l J_m = iJ_k. \quad (7.89)$$

Definizione 7.7 Si dice che un osservabile è uno *scalare* se è invariante rispetto alle rotazioni.

Teorema 7.26 *Uno scalare S commuta con tutte le componenti del momento angolare, cioè*

$$[\mathbf{J}, S] = 0. \quad (7.90)$$

Dimostrazione: questo teorema è una conseguenza diretta del teorema 7.13 e della definizione 7.4 (eq. (7.47)).

Teorema 7.27 *L'Hamiltoniano totale è uno scalare.*

Dimostrazione: assumere lo spazio isotropo significa assumere che l'evoluzione temporale dei sistemi fisici non è influenzata da una rotazione dello spazio. Formalmente ciò implica che, se R è l'operatore di rotazione nello spazio degli stati,

$$\begin{aligned} |\Psi'(0)\rangle &\equiv R|\Psi(0)\rangle \\ |\Psi'(t)\rangle &\equiv R|\Psi(t)\rangle \end{aligned}$$

e

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle - itH|\Psi(0)\rangle,$$

allora

$$|\Psi'(t)\rangle = |\Psi'(0)\rangle - itH|\Psi'(0)\rangle,$$

che può essere riscritto nella forma

$$R|\Psi(t)\rangle = R|\Psi(0)\rangle - itHR|\Psi(0)\rangle,$$

cioè

$$R|\Psi(0)\rangle - itRH|\Psi(0)\rangle = R|\Psi(0)\rangle - itHR|\Psi(0)\rangle .$$

Ciò implica che

$$HR = RH ,$$

cioè

$$R^\dagger HR = H .$$

Quindi, H è invariante per rotazioni e perciò è uno scalare. Per il teorema 7.26, H commuta con tutte le componenti del momento angolare, cioè,

$$[\mathbf{J}, H] = 0 . \quad (7.91)$$

Teorema 7.28 *Tra le componenti Cartesiane degli osservabili \mathbf{Q} e \mathbf{P} corrispondenti, rispettivamente, alla posizione e al momento lineare, si hanno le seguenti relazioni di commutazione:*

$$[Q_j, Q_k] = [P_j, P_k] = 0 \quad (7.92a)$$

$$[Q_j, P_k] = i\delta_{jk} . \quad (7.92b)$$

Dimostrazione: dall'eq. (7.88) si ha

$$[YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z] = i(XP_y - YP_x) .$$

Sviluppando il membro a sinistra dell'ultima equazione, si vede facilmente che, affinché questo sia uguale al membro a destra, è necessario che $[Z, P_z] = i$, e che tutti gli altri commutatori siano nulli. Dalle relazioni di commutazione tra le rimanenti componenti del momento angolare, è possibile ottenere, in modo analogo, le relazioni di commutazione tra le rimanenti componenti degli osservabili di posizione e di momento lineare.

Teorema 7.29 *La soluzione generale dell'eq. (7.50) è*

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n\tau} |n\tau\rangle e^{-iE_n t} \langle n\tau | \Psi(0) \rangle , \quad (7.93)$$

dove $|n\tau\rangle$ è uno degli autovettori di H appartenenti all'autovalore E_n (τ è un indice di degenerazione).

Dimostrazione: moltiplicando l'eq. (7.50), a sinistra, per $|n\tau\rangle$ si ha

$$i \frac{d}{dt} \langle n\tau | \Psi(t) \rangle = E_n \langle n\tau | \Psi(t) \rangle \quad (7.94)$$

dove si è usato il fatto che

$$H |n\tau\rangle = E_n |n\tau\rangle . \quad (7.95)$$

(E_n non dipende dal tempo perchè H non lo è.) La soluzione dell'eq. (7.94) è perciò

$$\langle n\tau|\Psi(t)\rangle \equiv \Psi_{n\tau}(t) = e^{-iE_n t}\Psi_{n\tau}(0). \quad (7.96)$$

Dato che H è un osservabile, si ha

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n\tau} |n\tau\rangle \langle n\tau|\Psi(t)\rangle,$$

e, usando l'eq. (7.96), si ottiene

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n\tau} |n\tau\rangle e^{-iE_n t}\Psi_{n\tau}(0),$$

che è l'eq. (7.93).

Teorema 7.30 *Gli autostati dell'Hamiltoniano H non evolvono nel tempo.*

Dimostrazione: se $|\Psi(0)\rangle$ è un autostato di H appartenente all'autovalore E_m , esso può essere scritto come

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_{\tau} |m\tau\rangle \langle m\tau|\Psi(0)\rangle. \quad (7.97)$$

Dall'eq. (7.93) si ha

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{n\tau} |n\tau\rangle e^{-iE_n t} \langle n\tau| \sum_{\tau'} |m\tau'\rangle \langle m\tau'|\Psi(0)\rangle \\ &= \sum_{n\tau\tau'} |n\tau\rangle e^{-iE_n t} \delta_{nm} \delta_{\tau\tau'} \langle m\tau'|\Psi(0)\rangle \\ &= \sum_{\tau} |m\tau\rangle \langle m\tau|\Psi(0)\rangle e^{-iE_m t} \\ &= |\Psi(0)\rangle e^{-iE_m t}. \end{aligned} \quad (7.98)$$

L'evoluzione temporale manifesta nell'eq. (7.98) non è fisicamente rilevante (si veda il commento 7.3) e non c'è modo di poterla misurare. Questo è il motivo per cui gli autostati di H sono anche detti *stati stazionari*.

Teorema 7.31 *Se un osservabile A è una costante del moto, allora esistono stati stazionari del sistema che sono autostati di A e che rimangono tali nel tempo, senza cambiare l'autovalore cui essi appartengono.*

Dimostrazione: Se A è una costante del moto, per il teorema 7.14, esso commuta con H e, per il teorema 6.59, i suoi autostati possono essere scelti in modo che siano autostati anche di H . Questi sono, per il teorema 7.30, stati stazionari, cioè, a meno di un irrilevante fattore di fase (eq. (7.98)), non dipendono dal tempo e, pertanto, rimangono sempre autostati di A senza cambiare l'autovalore cui essi appartengono. Questo è il motivo per cui gli autovalori di operatori costanti del moto sono detti *buoni numeri quantici*.

Teorema 7.32 *Il valor medio, in uno stato stazionario, di un osservabile che non dipende esplicitamente dal tempo, è una costante del moto.*

Dimostrazione: dall'eq. (7.51) si ha

$$i \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle \Psi | AH - HA | \Psi \rangle = E \langle \Psi | A | \Psi \rangle - E \langle \Psi | A | \Psi \rangle = 0.$$

Definizione 7.8 Il tempo τ_A necessario ad un osservabile A di modificare il suo valore medio $\langle A \rangle$ di una quantità pari a ΔA è detto il *tempo di evoluzione* di A :

$$\tau_A \equiv \frac{\Delta A}{|d\langle A \rangle/dt|}. \quad (7.99)$$

(Se il sistema è in un autostato stazionario di A si ha $d\langle A \rangle/dt = 0$ e l'eq. (7.99) non può essere applicata. Tuttavia, in tal caso si ha, per la definizione data, $\tau_A = \infty$.) Il più piccolo τ_A definibile è detto *il tempo di evoluzione del sistema*, τ . (Si noti che sia τ_A che τ dipendono dal particolare stato del sistema nel quale la media è calcolata.)

Commento 7.21 Per il modo in cui τ è stato definito, appare chiaro che i risultati di due misure di un osservabile effettuate negli istanti t_1 e t_2 con $|t_1 - t_2| < \tau$, non differiscono essenzialmente tra loro; ciò giustifica la definizione data di τ come tempo di evoluzione *del sistema*.

Teorema 7.33 *Se ΔE è la varianza dell'energia totale H di un sistema, e se τ è il tempo di evoluzione del sistema, allora, in ogni stato, si ha*

$$\tau \Delta E \geq \frac{1}{2}. \quad (7.100)$$

Dimostrazione: l'eq. (7.23) applicata agli operatori A e H diventa

$$\Delta A \Delta E \geq \frac{1}{2} |\langle [A, H] \rangle|. \quad (7.101)$$

Se A non dipende esplicitamente dal tempo, possiamo usare le equazioni (7.51) e (7.99) e ottenere

$$\Delta A \Delta E \geq \frac{1}{2} |d\langle A \rangle/dt| = \frac{\Delta A}{2\tau_A},$$

cioè

$$\tau_A \Delta E \geq \frac{1}{2}.$$

Questa disuguaglianza è valida per qualsiasi osservabile A e, pertanto, anche per quell'osservabile per cui τ_A assume il valore minimo. L'eq. (7.100) è pertanto provata.

Commento 7.22 In uno stato stazionario (cioè in un autostato di H), si ha $\Delta E = 0$ (teorema 7.2). L'eq. (7.100) implicherebbe, pertanto, che $\tau = \infty$. Per poter provare quest'asserto, si ricordi che in uno stato stazionario, $d\langle A \rangle/dt = 0$ per qualsiasi A che non dipende esplicitamente dal tempo (teorema 7.32), e, perciò, dall'eq. (7.99), si ha $\tau_A = \infty$, in accordo con il fatto che $\Delta E = 0$.

7.5 Rappresentazioni

Commento 7.23 Come è stato già osservato (commenti 7.2 e 7.7), l'insieme degli autovettori comuni ad un set completo di osservabili che commutano (SCOC) costituisce una base, cioè qualsiasi vettore di stato può essere rappresentato in termini delle sue componenti rispetto a tale base. Considereremo ora le più importanti rappresentazioni: le rappresentazioni delle coordinate, dei momenti (lineari) e dell'energia.

Definizione 7.9 La *rappresentazione delle coordinate* è quella rappresentazione in cui la base è scelta essere l'insieme degli autovettori comuni ad un SCOC che contiene l'insieme degli osservabili di posizione Q (i quali, come sappiamo dall'eq. (7.92a), commutano tra loro). La *rappresentazione dei momenti* è quella rappresentazione in cui la base è scelta essere l'insieme degli autovettori comuni ad un SCOC che contiene l'insieme degli osservabili di momento lineare (i quali, come sappiamo dall'eq. (7.92a), commutano tra loro). La *rappresentazione dell'energia* è quella rappresentazione in cui la base è scelta essere l'insieme degli autovettori comuni ad un SCOC che contiene l'Hamiltoniano H .

Teorema 7.34 *Lo spettro degli autovalori di Q è continuo.*

Dimostrazione: si noti innanzitutto che

$$QT(\epsilon) - T(\epsilon)Q \equiv [Q, T(\epsilon)] = [Q, e^{-i\epsilon P}] = i(-i\epsilon)e^{-i\epsilon P} = \epsilon T(\epsilon)$$

cioè

$$QT(\epsilon) = T(\epsilon)Q + \epsilon T(\epsilon) = T(\epsilon)(Q + \epsilon), \quad (7.102)$$

dove si sono usati la definizione 7.4 e il teorema 6.62. Quindi,

$$QT(\epsilon)|q\rangle = T(\epsilon)(Q + \epsilon)|q\rangle = (q + \epsilon)T(\epsilon)|q\rangle, \quad (7.103)$$

dove si è indicato con $|q\rangle$ un autovettore di Q appartenente all'autovalore q ,

$$Q|q\rangle = q|q\rangle. \quad (7.104)$$

Dall'eq. (7.103) si nota che $T(\epsilon)|q\rangle$ è autovettore di Q appartenente all'autovalore $q + \epsilon$. (Il fatto che $T(\epsilon)|q\rangle \neq 0$ è assicurato: per ipotesi, siccome $|q\rangle$ è un autovettore di Q , $|q\rangle \neq 0$, cioè esso è un vettore di norma non nulla; inoltre, essendo unitario, T lascia invariata la norma di qualsiasi vettore, per cui la norma di $T(\epsilon)|q\rangle$ è non nulla, e ciò garantisce che $T(\epsilon)|q\rangle \neq 0$.) Dato che ϵ può assumere qualsiasi valore reale, lo spettro di Q è continuo.

Commento 7.24 Dal teorema 7.34 appare chiaro che in un spazio a dimensione finita o infinita numerabile non possono esistere due osservabili il cui commutatore è uguale ad i .

Teorema 7.35 *Tutti gli autovalori di Q hanno la stessa degenerazione.*

Dimostrazione: Si assuma che l'autovalore q sia semplice e che, inoltre, esistano due autovettori linearmente indipendenti tra loro, $|q + \epsilon, \alpha\rangle$ e $|q + \epsilon, \beta\rangle$, appartenenti al medesimo autovalore $q + \epsilon$; essi possono essere scelti in modo da essere mutualmente ortogonali (teorema 6.13):

$$\langle q + \epsilon, \alpha | q + \epsilon, \beta \rangle = 0. \quad (7.105)$$

Si considerino ora i due vettori $T(-\epsilon)|q + \epsilon, \alpha\rangle$ e $T(-\epsilon)|q + \epsilon, \beta\rangle$, il cui prodotto scalare è

$$\langle q + \epsilon, \alpha | T^\dagger(-\epsilon)T(-\epsilon)|q + \epsilon, \beta \rangle = \langle q + \epsilon, \alpha | q + \epsilon, \beta \rangle = 0,$$

dove si è fatto uso dell'eq. (7.105) e del fatto che $T(-\epsilon)$ è unitario. $T(-\epsilon)|q + \epsilon, \alpha\rangle$ e $T(-\epsilon)|q + \epsilon, \beta\rangle$ sono, per l'eq. (7.103), autovettori di Q appartenenti al medesimo autovalore q , e siccome q , per ipotesi, è non degenere, essi devono essere necessariamente proporzionali e, pertanto, il loro prodotto scalare non può essere nullo. C'è, pertanto, una contraddizione che sorge dall'aver assunto che la degenerazione dell'autovalore $q + \epsilon$ sia differente da quella dell'autovalore q .

Commento 7.25 Nella rappresentazione delle coordinate il vettore di stato è rappresentato da una funzione,

$$\langle q | \Psi \rangle \equiv \Psi(q), \quad (7.106)$$

il cui significato fisico è stato chiarito nel commento 7.2 (vedi eq. (7.21)): in un processo di misura della coordinata Q , allorquando il sistema è nello stato rappresentato dalla funzione (normalizzata) $\Psi(q)$ (solitamente detta *la funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate*), $\Psi^*(q)\Psi(q)dq$ è la probabilità di misurare un valore compreso fra q e $q + dq$. La condizione di normalizzazione dello stato $|\Psi\rangle$ nella rappresentazione delle coordinate diventa

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle \Psi | q \rangle \langle q | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq \Psi^*(q) \Psi(q) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dq |\Psi(q)|^2 = 1, \end{aligned} \quad (7.107)$$

quindi la funzione d'onda appartiene allo spazio $L^2(-\infty, \infty)$.

Teorema 7.36 *L'osservabile Q , corrispondente alla coordinata Cartesiana di posizione, opera sulle funzioni d'onda nella rappresentazione delle coordinate, $\Psi(q)$, moltiplicandola per q .*

Dimostrazione:

$$\langle q | Q \Psi \rangle = \langle Q q | \Psi \rangle = q \langle q | \Psi \rangle = q \Psi(q), \quad (7.108)$$

dove si è usata l'Hermiticità di Q e la sua equazione agli autovalori.

Commento 7.26 Si ricordi che Q è non limitato e Hermitiano (esempi 6.3 e 6.4).

Teorema 7.37 *Nella rappresentazione delle coordinate, le autofunzioni di Q sono le funzioni δ di Dirac.*

Dimostrazione: dato che lo spettro degli autovalori di Q è continuo (teorema 7.34), il teorema 6.57 è applicabile e perciò (commento 6.28)

$$\langle q'|q \rangle = \delta(q' - q), \quad (7.109)$$

che è la rappresentazione delle coordinate di $|q\rangle$.

Teorema 7.38 *Nella rappresentazione delle coordinate, l'operatore*

$$T(\epsilon) \equiv e^{-i\epsilon P} \quad (7.110)$$

(dove P è la componente del momento lineare corrispondente alla coordinata q), trasla le funzioni d'onda lungo la direzione definita dalla coordinata q della quantità ϵ .

Dimostrazione:

$$\langle q|T(\epsilon)\Psi \rangle = \langle T^\dagger(\epsilon)q|\Psi \rangle = \langle T(-\epsilon)q|\Psi \rangle = \langle q - \epsilon|\Psi \rangle. \quad (7.111)$$

L'ultima uguaglianza richiede una precisazione. Dal fatto che $T(\epsilon)|q\rangle$ è un autovettore di Q appartenente all'autovalore $q + \epsilon$ (eq. (7.103)), e se l'autovalore q è semplice, si ha

$$T(\epsilon)|q\rangle = C|q + \epsilon\rangle.$$

Siccome $T(\epsilon)$ è un operatore unitario, se $|q\rangle$ è normalizzato C è un fattore di fase, cioè $C = e^{i\alpha}$. Se la differenza di fase fra ogni autostato di Q è scelta in modo tale che

$$|q\rangle = T(q)|0\rangle,$$

si ha

$$T(\epsilon)|q\rangle = T(\epsilon)T(q)|0\rangle = T(q + \epsilon)|0\rangle = |q + \epsilon\rangle$$

e perciò $C = 1$. L'equazione (7.111) può essere anche scritta come

$$T(\epsilon)\Psi(q) = \Psi(q - \epsilon), \quad (7.112)$$

e ciò prova il teorema.

Teorema 7.39 *L'osservabile P , componente del momento lineare corrispondente alla coordinata q , opera sulle funzioni d'onda nella rappresentazione delle coordinate, $\Psi(q)$, come segue:*

$$P\Psi(q) = -i\frac{\partial}{\partial q}\Psi(q). \quad (7.113)$$

Dimostrazione:

$$\langle q|T(-\epsilon)\Psi\rangle = \langle q|I + i\epsilon P|\Psi\rangle = \Psi(q) + i\epsilon\langle q|P\Psi\rangle \quad (7.114)$$

$$= \Psi(q + \epsilon), \quad (7.115)$$

dove l'ultima uguaglianza deriva dal teorema 7.38. Confrontando le equazioni (7.114) e (7.115) si ottiene

$$P\Psi(q) \equiv \langle q|P\Psi\rangle = -i \left[\frac{\Psi(q + \epsilon) - \Psi(q)}{\epsilon} \right]$$

che, nel limite $\epsilon \rightarrow 0$, è l'eq. (7.113).

Commento 7.27 si ricordi che P è non limitato ed Hermitiano (si vedano gli esempi 6.3 e 6.4).

Teorema 7.40 *Lo spettro degli autovalori di P è continuo; tutti i suoi autovalori hanno la stessa degenerazione; P opera sui vettori di stato nella rappresentazione dei momenti, $\Phi(p)$, moltiplicandoli per p ; gli autovettori di P , nella rappresentazione dei momenti, sono le funzioni δ di Dirac; l'osservabile di posizione Q opera sulle funzioni d'onda nella rappresentazione dei momenti, $\Phi(p)$, come segue:*

$$Q\Phi(p) = i\frac{\partial}{\partial p}\Phi(p). \quad (7.116)$$

Dimostrazione: dalla regola di commutazione

$$[Q, P] = i \quad (7.117)$$

si ha

$$[P, Q] = -i. \quad (7.118)$$

che coincide con l'eq. (7.117) se Q è sostituito con P e l'unità immaginaria i è sostituita da $-i$. Procedendo a queste sostituzioni, i teoremi 7.34, 7.35, 7.36, 7.37 e 7.39 sono validi anche nella rappresentazione dei momenti.

Teorema 7.41 *In qualsiasi stato, si ha la seguente disuguaglianza (principio di indeterminazione di Heisenberg):*

$$\Delta P \Delta Q \geq \frac{1}{2}. \quad (7.119)$$

Dimostrazione: questo teorema segue direttamente dall'eq. (7.92b), dai teoremi 7.34 e 7.40, dai commenti 7.26 e 7.27, e dal teorema 7.8. Va sottolineato (commento 7.8) il fatto che l'eq. (7.119) è valida per qualsiasi stato perchè i) Q e P non commutano, ii) i rispettivi spettri degli autovalori sono entrambi continui, ed iii) Q e P sono operatori non limitati.

Teorema 7.42 *Nella rappresentazione delle coordinate, le autofunzioni di P sono*

$$\langle q|p\rangle \equiv f_p(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipq}. \quad (7.120)$$

Dimostrazione: nella rappresentazione delle coordinate l'equazione agli autovalori per P è

$$-i \frac{\partial}{\partial q} f_p(q) = p f_p(q) \quad (7.121)$$

la cui soluzione è

$$f_p(q) = C e^{ipq}.$$

Dalla condizione di normalizzazione degli autovettori appartenenti ad autovalori della parte continua dello spettro (teoremi 6.57 e commento 6.28), si ottiene

$$\begin{aligned} \delta(p' - p'') &= \langle p' | p'' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle p' | q \rangle \langle q | p'' \rangle \\ &= |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-i(p' - p'')q} = |C|^2 2\pi \delta(p' - p''), \end{aligned}$$

da cui è possibile determinare la costante di normalizzazione C (a meno di un irrilevante fattore di fase), e ottenere così l'eq. (7.120).

Teorema 7.43 *La rappresentazione delle coordinate $\Psi(q)$ e la rappresentazione dei momenti $\Phi(p)$ del medesimo vettore di stato $|\chi\rangle$ sono in relazione l'una con l'altra tramite una trasformata di Fourier.*

Dimostrazione:

$$\Psi(q) \equiv \langle q | \chi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle q | p \rangle \langle p | \chi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipq} \Phi(p) \quad (7.122)$$

e

$$\Phi(p) \equiv \langle p | \chi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle p | q \rangle \langle q | \chi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-iqp} \Psi(q). \quad (7.123)$$

Teorema 7.44 *Le funzioni d'onda nella rappresentazione delle coordinate e nella rappresentazione dei momenti sono limitate e continue.*

Dimostrazione: si ricordi (commento 7.25) che il significato fisico associato alle funzioni $\Psi(q)$ e $\Phi(p)$ richiede che esse appartengano allo spazio $L^2(-\infty, \infty)$, cioè che siano a quadrato sommabile. Inoltre, esse sono la trasformata di Fourier l'una dell'altra. Il presente teorema segue da un altro teorema che stabilisce che la trasformata di Fourier di una funzione a quadrato sommabile $f(x)$, esiste ed è anch'essa a quadrato sommabile, se la funzione $f(x)$ è limitata e continua.

Commento 7.28 In meccanica classica, una variabile dinamica è una funzione $f(q, p, t)$ delle coordinate e dei momenti (questi ultimi, in coordinate Cartesiane, sono i momenti lineari). In meccanica quantistica, la stessa variabile dinamica è rappresentata da un osservabile $F(Q, P, t)$ che, nella rappresentazione delle coordinate (Cartesiane), si ottiene dalla corrispondente funzione classica

$f(q, p, t)$ procedendo alle sostituzioni richieste dalle equazioni (7.108) e (7.113), e che, nella rappresentazione dei momenti, si ottiene dalla corrispondente funzione classica $f(q, p, t)$ procedendo alle sostituzioni richieste dalle equazioni (7.116) e (7.121). Per cui, nella rappresentazione delle coordinate,

$$F(Q, P, t) = f\left(q, -i\frac{\partial}{\partial q}, t\right) \quad (7.124)$$

e, nella rappresentazione dei momenti,

$$F(Q, P, t) = f\left(i\frac{\partial}{\partial p}, p, t\right). \quad (7.125)$$

In particolare, l'Hamiltoniano di una particella classica di massa μ in un potenziale $V(q)$ diventa l'osservabile quantistico,

$$H = \frac{P^2}{2\mu} + V(Q), \quad (7.126)$$

nel quale la dipendenza da Q del termine di energia potenziale è, in generale, più complicata della dipendenza da P del termine di energia cinetica. Questo è il motivo per cui, nel risolvere l'equazione di Schrödinger, la rappresentazione delle coordinate è più conveniente della rappresentazione dei momenti: nella rappresentazione delle coordinate, l'equazione di Schrödinger (7.50) con l'Hamiltoniano (7.126), è l'equazione differenziale alle derivate parziali

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(q, t) = \left[-\frac{1}{2\mu^2}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q)\right]\Psi(q, t), \quad (7.127)$$

mentre, nella rappresentazione dei momenti, l'equazione di Schrödinger, come vedremo nel teorema 7.45, è un'equazione integro-differenziale.

Teorema 7.45 *Nella rappresentazione dei momenti, l'equazione di Schrödinger per una particella di massa μ in un potenziale $V(q)$, è un'equazione integro-differenziale.*

Dimostrazione: dalle equazioni (7.50) e (7.126) si ha

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \left[\frac{P^2}{2\mu} + V(Q)\right]|\Psi(t)\rangle, \quad (7.128)$$

la cui rappresentazione dei momenti è

$$i\frac{\partial}{\partial t}\langle p|\Psi(t)\rangle = \langle p|\frac{P^2}{2\mu}|\Psi(t)\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dp' \langle p|V(Q)|p'\rangle\langle p'|\Psi(t)\rangle,$$

oppure, indicando con $\Psi(p, t)$ la funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti, si ha (gli integrali che seguono si intendono estesi a tutto

l'asse reale)

$$\begin{aligned}
& i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(p, t) \\
&= \frac{p^2}{2\mu} \Psi(p, t) + \int dp' \Psi(p', t) \int dq \int dq' \langle p|q \rangle \langle q|V(Q)|q' \rangle \langle q'|p' \rangle \\
&= \frac{p^2}{2\mu} \Psi(p, t) + \frac{1}{2\pi} \int dp' \Psi(p', t) \int dq \int dq' e^{-ipq+ip'q'} V(q') \delta(q-q') \\
&= \frac{p^2}{2\mu} \Psi(p, t) + \frac{1}{2\pi} \int dp' \Psi(p', t) \int dq e^{-i(p-p')q} V(q),
\end{aligned}$$

cioè

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(p, t) = \frac{p^2}{2\mu} \Psi(p, t) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dq W(p-p') \Psi(p', t) \quad (7.129)$$

dove

$$W(p-p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-i(p-p')q} V(q) \quad (7.130)$$

è la trasformata di Fourier del potenziale $V(q)$.

Commento 7.29 Affinché l'eq. (7.129) sia valida, deve esistere la trasformata di Fourier del potenziale $V(q)$.

Commento 7.30 Se si ricorda quello che è stato stabilito nella sezione 6.6, è facile convincersi che, se a due sistemi $S(1)$ ed $S(2)$ sono associati due spazi di Hilbert $\mathcal{H}(1)$ e $\mathcal{H}(2)$, lo spazio di Hilbert associato al sistema S (che contiene $S(1)$ e $S(2)$ come sottosistemi) è il prodotto tensoriale (o, eventualmente, un suo sottospazio)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2), \quad (7.131)$$

e qualsiasi osservabile A pertinente al solo sottosistema $S(1)$, è l'estensione $\bar{A}(1)$ su \mathcal{H} (definizione 6.31) dell'osservabile $A(1)$ definito su $\mathcal{H}(1)$. Si può inoltre dimostrare che, se $\{A_1(1), A_2(1), \dots\}$ e $\{B_1(2), B_2(2), \dots\}$ sono due SCOC definiti, rispettivamente, su $\mathcal{H}(1)$ e $\mathcal{H}(2)$, un possibile SCOC definito su $\mathcal{H} = \mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2)$ è

$$\{\bar{A}_1(1), \bar{A}_2(1), \dots, \bar{B}_1(2), \bar{B}_2(2), \dots\}.$$

Per esempio, lo spazio di Hilbert associato ad un sistema di molte particelle è il prodotto tensoriale degli spazi di Hilbert associati ad ogni particella (vedremo nel capitolo 10 che, se le particelle sono identiche, lo spazio di Hilbert è, in effetti, un sottospazio del prodotto tensoriale degli spazi di Hilbert di particella singola). Analogamente, se lo spazio di Hilbert, nella rappresentazione delle coordinate, di una particella in moto lungo l'asse x è lo spazio $L^2(-\infty < x < \infty)$ delle funzioni a quadrato sommabili $f(x)$, lo spazio di Hilbert di una particella libera di muoversi nello spazio tridimensionale è $L^2(-\infty < x < \infty) \otimes L^2(-\infty <$

$x < \infty) \otimes L^2(-\infty < x < \infty) \equiv L^2(\mathbf{r})$, cioè lo spazio delle funzioni a quadrato sommabili, $f(\mathbf{r})$, e l'Hamiltoniano nella rappresentazione delle coordinate è

$$H = -\frac{1}{2\mu}\Delta + V(\mathbf{r}). \quad (7.132)$$

Teorema 7.46 *Nella rappresentazione delle coordinate, l'Hamiltoniano di una particella di massa μ e carica e , interagente con un campo elettromagnetico specificato dal potenziale vettore \mathbf{A} e dal potenziale scalare ϕ , può essere scritto come*

$$H = H_0 + \frac{ie}{\mu c}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2, \quad (7.133)$$

dove H_0 è il membro destro dell'eq. (7.132) con $V = e\phi$.

Dimostrazione: dalle equazioni (5.54) e (7.132) si ha

$$H = \frac{1}{2\mu} \left[\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right]^2 + e\phi \quad (7.134a)$$

$$= -\frac{1}{2\mu}\Delta + e\phi + \frac{ie}{2\mu c} [(\nabla \cdot \mathbf{A}) + 2(\mathbf{A} \cdot \nabla)] + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2 \quad (7.134b)$$

$$= H_0 + \frac{ie}{\mu c}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2, \quad (7.134c)$$

dove si è usato il fatto che

$$\nabla \cdot \mathbf{A}\Psi = \mathbf{A} \cdot \nabla\Psi + (\nabla \cdot \mathbf{A})\Psi$$

e si è adottata la gauge di Coulomb (definizione 5.3).

Commento 7.31 Per un elettrone (per il quale, in unità atomiche, $\mu = -e = 1$) l'eq. (7.133) diventa

$$H = H_0 - \frac{i}{c}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{1}{2c^2}\mathbf{A}^2 = H_0 + \alpha H_1 + \alpha^2 H_2, \quad (7.135)$$

dove

$$H_1 \equiv -i\mathbf{A} \cdot \nabla, \quad (7.136)$$

$$H_2 \equiv \frac{1}{2}\mathbf{A}^2 \quad (7.137)$$

e (vedere commento 7.10)

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (7.138)$$

si chiama *costante di struttura fine* ed è una quantità adimensionale. (Vedere esempio 9.5)

Teorema 7.47 *La norma di un vettore di stato si conserva.*

Dimostrazione: dall'equazione di Schrödinger (7.50) e usando la proprietà di Hermiticità dell'Hamiltoniano, si ha

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|\Psi\|^2 &= \frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle = \left\langle \frac{d}{dt} \Psi \middle| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{d}{dt} \Psi \right\rangle \\ &= i \langle \Psi | H | \Psi \rangle - i \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0. \end{aligned}$$

Commento 7.32 Il teorema 7.47 stabilisce che la *densità di probabilità*, che nella rappresentazione delle coordinate è data da

$$\rho(\mathbf{r}, t) \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (7.139)$$

si conserva globalmente. È possibile, in effetti, anche stabilire una legge di conservazione della probabilità locale, cioè è possibile trovare un *vettore corrente di probabilità* $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ tale che sia soddisfatta una *equazione di continuità*

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (7.140)$$

Teorema 7.48 *Il vettore densità di corrente di probabilità associato ad una particella in un potenziale (si veda l'eq. (7.132)) è*

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\mu i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*), \quad (7.141)$$

e quello associato ad una carica in un campo elettromagnetico (si veda l'eq. (7.133)) è

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\mu i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e}{\mu c} \Psi^* \mathbf{A} \Psi. \quad (7.142)$$

Dimostrazione: L'equazione di Schrödinger per l'Hamiltoniano definito dall'eq. (7.133) è

$$i\dot{\Psi} = \left(-\frac{1}{2\mu} \Delta + V + \frac{ie}{\mu c} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 \right) \Psi.$$

Moltiplicandola per Ψ^* e sottraendo la sua complessa coniugata moltiplicata per Ψ , si ottiene

$$\begin{aligned} \Psi \dot{\Psi}^* + \dot{\Psi} \Psi^* &+ \frac{1}{2\mu i} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) \\ &- \frac{e}{\mu c} (\Psi^* \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi + \Psi \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi^*) = 0, \end{aligned}$$

cioè

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \left[\frac{1}{2\mu i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e}{\mu c} \Psi^* \mathbf{A} \Psi \right] = 0, \quad (7.143)$$

dove è stata adottata la gauge di Coulomb ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$). L'eq. (7.143) è un'equazione di continuità per un "fluido di probabilità" se, appunto, si interpreta la quantità definita nell'eq. (7.142) come densità di corrente di probabilità. Nel caso in cui $\mathbf{A} = 0$, l'eq. (7.142) diventa l'eq. (7.141).

Teorema 7.49 *L'equazione di Schrödinger è invariante per trasformazioni di gauge.*

Dimostrazione: per effetto di una trasformazione di gauge, l'Hamiltoniano (7.134b) (che è l'Hamiltoniano (7.134a) nella rappresentazione delle coordinate) diventa

$$\begin{aligned} H' = & -\frac{1}{2\mu}\Delta + \frac{ie}{\mu c}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{ie}{\mu c}\nabla f \cdot \nabla + \frac{ie}{2\mu c}\nabla \cdot \mathbf{A} \\ & + \frac{ie}{2\mu c}\Delta f + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2 + \frac{e^2}{2\mu c^2}(\nabla f)^2 + \frac{e^2}{\mu c^2}\mathbf{A} \cdot \nabla f \\ & + e\phi - \frac{e}{c}\dot{f} + V, \end{aligned} \quad (7.144)$$

dove sono state usate la funzione $f = f(\mathbf{r}, t)$ e la definizione 5.1. Sia $|\Psi(t)\rangle$ la soluzione dell'equazione di Schrödinger relativa all'Hamiltoniano (7.134) e si applichi l'Hamiltoniano H' alla funzione d'onda $\Psi'(\mathbf{r}, t)$, rappresentazione delle coordinate del vettore

$$|\Psi'(t)\rangle \equiv e^{ief/c}|\Psi(t)\rangle. \quad (7.145)$$

Per calcolare l'azione su $\Psi'(\mathbf{r}, t)$ dei primi tre termini dell'eq. (7.144) (che sono operatori differenziali, mentre gli altri sono funzioni moltiplicative), si noti che

$$\nabla\Psi' = \frac{ie}{c}\Psi'\nabla f + e^{ief/c}\nabla\Psi \quad (7.146a)$$

e

$$\Delta\Psi' = -\frac{e^2}{c^2}\Psi'(\nabla f)^2 + \frac{2ie}{c}e^{ief/c}\nabla f \cdot \nabla\Psi + e^{ief/c}\Delta\Psi. \quad (7.146b)$$

Usando le equazioni (7.146) si ottiene, dopo semplici passaggi algebrici,

$$H'\Psi' = e^{ief/c}H\Psi - \frac{e}{c}\dot{f}\Psi' = e^{ief/c}(i\dot{\Psi}) - \frac{e}{c}\dot{f}\Psi', \quad (7.147)$$

dove, nell'ultima uguaglianza, si è usata l'ipotesi che $H\Psi = id_t\Psi$. D'altra parte si ha anche

$$i\frac{d}{dt}\Psi' = i\frac{d}{dt}\left(e^{ief/c}\Psi\right) = ie^{ief/c}\dot{\Psi} - \frac{e}{c}\dot{f}e^{-ief/c}\Psi \quad (7.148)$$

che, confrontata con l'eq. (7.147), mostra che

$$i\dot{\Psi}' = H'\Psi'. \quad (7.149)$$

Dall'eq. (7.149) si vede che, se $|\Psi(t)\rangle$ è soluzione dell'equazione di Schrödinger con l'Hamiltoniano H e se H' è lo stesso Hamiltoniano dopo la trasformazione di gauge, la soluzione dell'equazione di Schrödinger con l'Hamiltoniano H' è data da $|\Psi'(t)\rangle$ così come definito dall'eq. (7.145). Tuttavia,

il vettore di stato $|\Psi'(t)\rangle$ differisce da $|\Psi(t)\rangle$ solo per un irrilevante fattore di fase (si veda il commento 7.3). Per cui, il contenuto fisico del vettore di stato non dipende dalla scelta della gauge (in particolare, come si può facilmente verificare, la densità di probabilità (7.139) ed il vettore corrente di probabilità (7.142) sono invarianti per trasformazioni di gauge). Il teorema è, quindi, dimostrato.

7.6 Matrice densità

Commento 7.33 Lo stato di un sistema quantomeccanico è completamente determinato se sono noti tutti gli autovalori di un set completo di osservabili che commutano (definizioni 7.2 e 7.3, e commento 7.6). In tal caso, lo stato del sistema è specificato da un vettore di un appropriato spazio di Hilbert, e si dice che il sistema è in uno *stato puro*. Spesso, tuttavia, lo stato del sistema non è completamente determinato, cioè il problema agli autovalori non è stato risolto per tutti gli osservabili di un SCOC e perciò non è possibile associare al sistema un vettore di stato. Si dice, allora, che il sistema è in uno *stato misto* (o *stato di miscela*) e sorge la necessità di una trattazione statistica. Tale trattazione è meglio sviluppata tramite il formalismo della *matrice densità*.

Definizione 7.10 Sia $\{p_n\}$ un insieme di pesi statistici corrispondenti all'insieme di vettori di stato normalizzati $\{|\Psi_n\rangle\}$, sia, cioè, p_n la probabilità che un sistema fisico si trovi nello stato $|\Psi_n\rangle$. L'operatore densità ρ è, per definizione,

$$\rho \equiv \sum_n p_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|. \quad (7.150)$$

Teorema 7.50 Lo stato del sistema è rappresentato dall'operatore densità, cioè è possibile definire, tramite esso, il valore medio di qualsiasi osservabile.

Dimostrazione: se il sistema si trova in uno stato di miscela il valore medio di un osservabile A è

$$\langle A \rangle \equiv \sum_n p_n \langle A \rangle_{|\Psi_n\rangle}. \quad (7.151)$$

Nella rappresentazione $\{|k\rangle\}$ si ha

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n p_n \langle \Psi_n | A | \Psi_n \rangle = \sum_{nkk'} p_n \langle \Psi_n | k \rangle \langle k | A | k' \rangle \langle k' | \Psi_n \rangle \\ &= \sum_{nkk'} p_n \langle k' | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | k \rangle \langle k | A | k' \rangle = \sum_{kk'} \rho_{k'k} A_{kk'}, \end{aligned}$$

cioè

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A). \quad (7.152)$$

Quindi, effettivamente ρ definisce lo stato di un sistema quantomeccanico.

Commento 7.34 La combinazione lineare (7.150) non va confusa con la combinazione lineare di vettori di stato, cioè di stati puri, che è anch'essa uno stato puro ed è detta *sovrapposizione coerente* di stati, e che è concettualmente diversa dalla combinazione lineare (7.150) che è detta *sovrapposizione incoerente* di stati.

Commento 7.35 L'equazione (7.152) può essere considerata come la definizione operativa della matrice densità ρ , che risulta così definita mediante un insieme di equazioni del tipo (7.152) sufficienti a specificarne gli elementi di matrice. Infatti il membro destro dell'eq. (7.150) non è univocamente definito (esistono infiniti insiemi di coppie $\{p_n, |\Psi_n\rangle\}$ che producono la stessa ρ), e, inoltre, le informazioni accessibili su un sistema sono nella forma di valori medi di un insieme di osservabili piuttosto che di specificazione degli stati puri presenti nella miscela.

Teorema 7.51 *L'operatore densità è Hermitiano e ha traccia unitaria in qualsiasi rappresentazione.*

Dimostrazione: L'Hermiticità dell'operatore densità è direttamente verificabile dalla sua definizione (vedi eq. (7.150)). Inoltre,

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho &= \sum_{kn} p_n \langle k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | k \rangle = \sum_{kn} p_n \langle \Psi_n | k \rangle \langle k | \Psi_n \rangle \\ &= \sum_n p_n \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = \sum_n p_n = 1, \end{aligned} \quad (7.153)$$

dove sono state usate le proprietà di completezza della base $\{|k\rangle\}$ e di normalizzazione degli stati $|\Psi_n\rangle$.

Commento 7.36 Se lo stato del sistema è puro, si ha $p_{n'} = \delta_{nn'}$ e

$$\rho = |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|. \quad (7.154)$$

Vediamo, quindi, che la matrice densità può descrivere anche stati puri e fornisce, così, un formalismo unificato capace di descrivere tutti i tipi di stati quantomeccanici, sia quelli che sono completamente specificati e sia quelli che non lo sono: l'operatore densità contiene tutte le informazioni che si hanno su un sistema fisico.

Teorema 7.52 *La traccia del quadrato della matrice densità, in qualsiasi rappresentazione, è minore di uno per uno stato di miscela e uguale ad uno per uno stato puro.*

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho^2 &= \sum_{knm} p_n p_m \langle k | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | k \rangle \\ &= \sum_{knm} p_n p_m \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | k \rangle \langle k | \Psi_n \rangle = \sum_{nm} p_n p_m |\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle|^2 \\ &\leq \sum_{nm} p_n p_m \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle \langle \Psi_m | \Psi_m \rangle = \sum_n p_n \sum_m p_m = 1 \end{aligned}$$

dove è stata usata la disuguaglianza di Cauchy-Schwarz (6.3). Si ha il segno di uguaglianza se e solo se $|\Psi_n\rangle$ è proporzionale a $|\Psi_m\rangle$ (teorema 6.9), e ciò accade se e solo se il sistema è descritto da un solo stato al quale è associato un peso statistico uguale ad uno, cioè se il sistema è in uno stato puro.

Commento 7.37 Gli elementi della matrice densità in una data rappresentazione hanno un semplice significato fisico, come mostra la loro forma matematica:

$$\rho_{rs} = \sum_n p_n \langle r | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | s \rangle. \quad (7.155)$$

Per $r \neq s$, tale quantità fornisce il contributo degli stati r e s a tutti gli stati $|\Psi_n\rangle$; in tal caso i valori ρ_{rs} sono detti *coerenze* in quanto, se non nulli, esprimono il fatto che alcuni degli stati $|\Psi_n\rangle$ sono sovrapposizioni coerenti degli stati $|r\rangle$ e $|s\rangle$. Per $r = s$ si ha

$$\rho_{rr} = \sum_n p_n |\langle r | \Psi_n \rangle|^2, \quad (7.156)$$

che è la *popolazione* dello stato $|r\rangle$.

Teorema 7.53 *L'evoluzione temporale dell'operatore densità è descritta dall'equazione di Liouville–von Neumann*

$$i \frac{d}{dt} \rho(t) = [H, \rho(t)]. \quad (7.157)$$

Dimostrazione: dalle equazioni (7.52) e (7.152), si ha

$$\rho(t) = \sum_n p_n U(t) |\Psi_n(0)\rangle \langle \Psi_n(0)| U^\dagger(t) = U(t) \rho(0) U^\dagger(t). \quad (7.158)$$

La derivata rispetto al tempo dell'eq. (7.158), usando l'eq. (7.70) è

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(t) &= -i H U(t) \rho(0) U^\dagger(t) + i U(t) \rho(0) U^\dagger(t) H \\ &= -i H \rho(t) + i \rho(t) H, \end{aligned}$$

che è l'eq. (7.157)

Commento 7.38 Dalle equazioni (7.52) e (7.158) si può notare che stati puri evolvono sempre in stati puri e stati di miscela evolvono sempre in stati di miscela.

Commento 7.39 L'operatore densità è un operatore di stato, non un osservabile, perciò nella descrizione di Schrödinger esso dipende dal tempo. Per cui, l'eq. (7.157) non va confusa con l'equazione di Heisenberg (7.61), la cui forma, in ogni caso, è diversa, in quanto l'ordine degli operatori nel commutatore è invertito.

Teorema 7.54 *Per un sistema il cui Hamiltoniano è specificato dall'eq. (7.63), l'evoluzione temporale, nella descrizione di interazione, dell'operatore densità è*

$$i \frac{d}{dt} \bar{\rho}(t) = [\bar{V}(t), \bar{\rho}(t)] , \quad (7.159)$$

dove (vedi eq. (7.64a))

$$\bar{\rho}(t) \equiv e^{iH_0 t} \rho(t) e^{-iH_0 t} \quad (7.160)$$

e

$$\bar{V}(t) = e^{iH_0 t} V(t) e^{-iH_0 t} . \quad (7.161)$$

Dimostrazione: si noti che l'eq. (7.66) si ottiene dall'eq. (7.50) sostituendo H con l'operatore dato nell'eq. (7.161) e $|\Psi\rangle$ con la sua espressione nella descrizione di interazione. D'altra parte, si è anche ottenuta l'eq. (7.157) dall'eq. (7.50), e perciò l'eq. (7.159) si ottiene sostituendo H con l'operatore dato dall'eq. (7.161) e ρ con la sua espressione nella descrizione di interazione. (Se avessimo calcolato la derivata rispetto al tempo dell'operatore densità nella descrizione di interazione avremmo ottenuto lo stesso risultato.)

Commento 7.40 La descrizione di un sistema tramite l'operatore densità si applica quando lo stato del sistema non è completamente noto, e ciò accade in due casi importanti: i) in fisica statistica, dove l'enorme numero di particelle presenti fa in modo che sia impossibile (e, in realtà, anche indesiderabile) effettuare un numero di esperimenti sufficiente a determinare il vettore di stato del sistema, e ii) nella descrizione di *sistemi aperti*, per esempio un sistema $S(1)$ dopo che ha interagito con un sistema $S(2)$ il quale rimane inosservato dopo l'interazione.

Teorema 7.55 *Non è possibile, in generale, assegnare un vettore di stato ad un sistema aperto.*

Dimostrazione: in accordo al commento 7.30, lo spazio di Hilbert associato al sistema totale S che contiene i sottosistemi $S(1)$ e $S(2)$ è il prodotto tensoriale

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(1) \otimes \mathcal{H}(2) ,$$

e qualsiasi osservabile A , pertinente solo a $S(1)$, è l'estensione su \mathcal{H} (definizione 6.31) dell'osservabile $A(1)$ definito su $\mathcal{H}(1)$. Per il teorema 6.65, ogni autovalore, d_n volte degenere, di $A(1)$, è autovalore $N_2 d_n$ volte degenere dell'estensione di $A(1)$ su \mathcal{H} , dove N_2 è la dimensione di $\mathcal{H}(2)$. Quindi, se si effettua una misura su $S(1)$ dopo che ha interagito con $S(2)$ e non osservando quest'ultimo, non possiamo associare a $S(1)$ alcun vettore di stato (a meno che $S(2)$ abbia un solo stato accessibile). Piuttosto, indicando col sottoscritto 1 una base in $\mathcal{H}(1)$ e col sottoscritto 2 una base in $\mathcal{H}(2)$ ed usando l'eq. (6.97), si ha

$$\langle \bar{A}(1) \rangle = \text{Tr} [\rho \bar{A}(1)]$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j_1 j_2} \sum_{k_1 k_2} \langle j_1 j_2 | \rho | k_1 k_2 \rangle \langle k_1 k_2 | \bar{A}(1) | j_1 j_2 \rangle \\
&= \sum_{j_1 j_2} \sum_{k_1 k_2} \langle j_1 j_2 | \rho | k_1 k_2 \rangle \langle k_1 | A(1) | j_1 \rangle \delta_{k_2 j_2} \\
&= \sum_{j_1 j_2} \sum_{k_1} \langle j_1 j_2 | \rho | k_1 j_2 \rangle \langle k_1 | A(1) | j_1 \rangle \\
&= \sum_{j_1 k_1} \langle j_1 | \rho(1) | k_1 \rangle \langle k_1 | A(1) | j_1 \rangle \\
&= \text{Tr} [\rho_1 A(1)] ,
\end{aligned}$$

dove la quantità

$$\rho_1 \equiv \sum_{j_2} \langle j_2 | \rho | j_2 \rangle = \text{Tr}_{S(2)} [\rho] \quad (7.162)$$

è detta *operatore densità ridotto*, e si ottiene dall'operatore densità totale effettuando una traccia parziale sugli stati del sistema non osservato, $S(2)$.

Commento 7.41 L'evoluzione temporale dell'operatore densità ridotto si può ottenere, formalmente, effettuando una traccia parziale su entrambi i membri delle equazioni (7.157) o (7.159). Tuttavia, ciò non è di grande utilità, in quanto le equazioni che si ottengono contengono, nel loro membro destro, l'operatore densità totale $\rho(t)$. Speciali tecniche devono allora essere adottate. Per esempio, l'eq. (7.159) può essere risolta iterativamente,

$$\begin{aligned}
\bar{\rho}(t) &= \bar{\rho}(0) + \frac{1}{i} \int_0^t dt' [\bar{V}(t'), \bar{\rho}(0)] \\
&+ \left(\frac{1}{i}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [\bar{V}(t'), [\bar{V}(t''), \bar{\rho}(0)]] + \dots \quad (7.163)
\end{aligned}$$

Effettuando una traccia parziale dell'eq. (7.163) e facendo uso del fatto che al tempo $t = 0$ le descrizioni di Schrödinger e di interazione coincidono (commento 7.15), si ottiene l'operatore densità ridotto relativo al sistema $S(1)$, cioè

$$\begin{aligned}
\bar{\rho}_1(1) &= \rho_1(0) + \frac{1}{i} \int_0^t dt' \text{Tr}_{S(2)} [\bar{V}(t'), \rho(0)] \\
&+ \left(\frac{1}{i}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \text{Tr}_{S(2)} [\bar{V}(t'), [\bar{V}(t''), \rho(0)]] + \dots \quad (7.164)
\end{aligned}$$

Per poter effettuare le operazioni di traccia parziale sugli stati del sistema $S(2)$, è naturalmente necessario specificare il sistema in studio (un esempio verrà fornito alla fine del capitolo 11).

Capitolo 8

Sistemi Unidimensionali

Nella rappresentazione delle coordinate, l'equazione di Schrödinger unidimensionale per una particella di massa m in un potenziale $V(x)$ è (si veda l'eq. (7.127))

$$i\partial_t\Psi(x,t) = \left[-\frac{1}{2m}\partial_x^2 + V(x) \right] \Psi(x,t), \quad (8.1)$$

la cui soluzione generale è (teorema 7.29)

$$\Psi(x,t) = \sum_{n\tau} \Psi_{n\tau}(x) e^{-iE_n t} \langle n\tau | \Psi(0) \rangle \quad (8.2)$$

dove $\Psi_{n\tau}(x)$ e E_n sono le soluzioni, nella rappresentazione delle coordinate, dell'equazione agli autovalori per l'Hamiltoniano della particella (chiamata anche *equazione di Schrödinger indipendente dal tempo*):

$$\left[-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x). \quad (8.3)$$

Ponendo

$$E = \frac{\epsilon}{2m} \quad \text{e} \quad V(x) = \frac{U(x)}{2m}, \quad (8.4)$$

l'eq. (8.3) diventa

$$\Psi''(x) + [\epsilon - U(x)]\Psi(x) = 0, \quad (8.5)$$

che è un'equazione differenziale ordinaria, lineare, omogenea, del secondo ordine, e priva del termine al prim'ordine. In questo capitolo si investigheranno le sue proprietà generali.

Commento 8.1 Nell'eq. (8.2), la somma su n include tutti gli autovalori dell'energia, compresi quelli che appartengono alla parte continua dello spettro. Quindi, il simbolo di somma deve intendersi come simbolo di integrale sugli autovalori del continuo. τ è un indice di degenerazione che tiene conto del fatto che gli autovalori dell'energia potrebbero essere degeneri. In realtà, come vedremo

(teoremi 8.13–8.15), per l'equazione di Schrödinger unidimensionale indipendente dal tempo, gli autovalori che appartengono alla parte discreta dello spettro sono tutti semplici, e quelli che appartengono alla parte continua dello spettro sono, al più, doppiamente degeneri.

Definizione 8.1 Il *Wronskiano* di due funzioni differenziabili $y_1(x)$ e $y_2(x)$ è, per definizione,

$$W[y_1, y_2] \equiv \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ y_1' & y_2' \end{vmatrix} = y_1 y_2' - y_2 y_1'. \quad (8.6)$$

Teorema 8.1 Due funzioni $y_1(x)$ e $y_2(x)$ sono linearmente indipendenti se e solo se il loro Wronskiano è ovunque nullo.

Dimostrazione: $W[y_1, y_2] = 0$ implica $y_1 y_2' = y_2 y_1'$, cioè $y_1'/y_1 = y_2'/y_2$, che integrata, diventa $\log y_1 - \log y_2 = \text{costante}$, o $y_1 = C y_2$. Siccome y_1 e y_2 risultano tra loro proporzionali, essi sono linearmente dipendenti. Viceversa, se $y_1 = C y_2$, allora $W[y_1, y_2] = W[C y_2, y_2] = C y_2' y_2 - C y_2 y_2' = 0$.

Commento 8.2 Il teorema 8.1 vale per qualsivoglia insieme di n funzioni, y_1, \dots, y_n , n volte differenziabili, il cui Wronskiano è definito

$$W[y_1, \dots, y_n] \equiv \begin{vmatrix} y_1 & \dots & y_n \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ y_1^{(n-1)} & \dots & y_n^{(n-1)} \end{vmatrix} \quad (8.7)$$

Definizione 8.2 Un'equazione del tipo

$$y^{(n)}(x) + p_1(x)y^{(n-1)}(x) + \dots + p_n(x)y(x) = 0 \quad (8.8)$$

è la più generale equazione differenziale ordinaria, lineare, omogenea, di ordine n .

Teorema 8.2 Una equazione differenziale ordinaria, lineare, omogenea, di ordine n non può avere più di n soluzioni linearmente indipendenti.

Dimostrazione: assumiamo che l'eq. (8.8) abbia $n + 1$ soluzioni linearmente indipendenti. Il loro Wronskiano

$$W[y_1, \dots, y_{n+1}] \equiv \begin{vmatrix} y_1 & \dots & y_{n+1} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ y_1^{(n)} & \dots & y_{n+1}^{(n)} \end{vmatrix}$$

è ovunque nullo perché se le $n + 1$ funzioni y_1, \dots, y_{n+1} sono soluzioni dell'eq. (8.8), l'ultima riga del Wronskiano risulta essere combinazione lineare delle rimanenti righe. Quindi, per il teorema 8.1 e per il commento 8.2, le $n + 1$ funzioni y_1, \dots, y_{n+1} non possono essere linearmente indipendenti.

Teorema 8.3 *La soluzione generale $y(x)$ di un'equazione differenziale ordinaria, lineare, omogenea, di ordine n (eq. (8.8)) con condizioni iniziali*

$$y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y'_0, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = y_0^{(n-1)}, \quad (8.9)$$

è data da una combinazione lineare (con coefficienti univocamente specificati dalle condizioni iniziali (8.9)) di n soluzioni linearmente indipendenti, cioè

$$y(x) = c_1 y_1(x) + \dots + c_n y_n(x). \quad (8.10)$$

Dimostrazione: l'eq. (8.10) esaurisce tutte le possibili soluzioni dell'eq. (8.8) con condizioni iniziali date dalle equazioni (8.9) perché, differenziando l'eq. (8.10) $n - 1$ volte e inserendo le condizioni iniziali (8.9), si ottiene

$$\begin{array}{ccccccc} c_1 y_1(x_0) & + & \dots & + & c_n y_n(x_0) & = & y_0 \\ \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ c_1 y_1^{(n-1)}(x_0) & + & \dots & + & c_n y_n^{(n-1)}(x_0) & = & y_0^{(n-1)}. \end{array}$$

Questo è un sistema di equazioni algebriche (i coefficienti c sono le incognite), e ha un'unica soluzione perché il suo determinante è non nullo in quanto esso non è altro che il Wronskiano (8.7), ed è non nullo perché le n funzioni y_1, \dots, y_n sono, per ipotesi, linearmente indipendenti tra loro. Se le condizioni iniziali fossero omogenee (cioè se $y_0 = \dots = y_0^{(n-1)} = 0$), allora l'unica soluzione del sistema algebrico appena scritto sarebbe la soluzione banale $c_1 = \dots = c_n = 0$ e la soluzione (8.10) dell'equazione differenziale (8.8) con condizioni iniziali omogenee è la funzione identicamente nulla $y(x) \equiv 0$.

Teorema 8.4 *Il Wronskiano di due soluzioni $y_1(x)$ e $y_2(x)$ di una equazione differenziale ordinaria, lineare, omogenea, del secondo ordine,*

$$y''(x) + p_1(x)y'(x) + p_2(x)y(x) = 0, \quad (8.11)$$

è

$$W[y_1, y_2] = W_0 e^{-\int_{x_0}^x dt p_1(t)}, \quad (8.12)$$

dove W_0 è una costante, ovviamente uguale al Wronskiano in $x = x_0$.

Dimostrazione: dall'eq. (8.6) si ha

$$\frac{dW}{dx} = y_1 y_2'' - y_1'' y_2. \quad (8.13)$$

Per ipotesi, y_1 e y_2 sono soluzioni dell'eq. (8.11), cosicché

$$y_1'' + p_1 y_1' + p_2 y_1 = 0 \quad (8.14)$$

e

$$y_2'' + p_1 y_2' + p_2 y_2 = 0. \quad (8.15)$$

Moltiplicando l'eq. (8.14) per y_2 e l'eq. (8.15) per y_1 , sottraendo l'eq. (8.14) dall'eq. (8.15) e usando le equazioni (8.6) e (8.13), si ottiene

$$\frac{dW}{dx} + p_1 W = 0,$$

la cui soluzione è l'eq. (8.12).

Commento 8.3 Il teorema (8.4) vale anche per n soluzioni dell'eq. (8.8):

$$W[y_1, \dots, y_n] = W_0 e^{-\int_{x_0}^x dt p_1(t)}. \quad (8.16)$$

Teorema 8.5 *Il Wronskiano di n soluzioni di un'equazione differenziale ordinaria, lineare, omogenea, di ordine n e priva del termine di ordine $n - 1$, è costante.*

Dimostrazione: se $p_1 \equiv 0$, allora, dall'eq. (8.16) segue che

$$W[y_1, \dots, y_n] = W_0.$$

Commento 8.4 L'equazione agli autovalori (8.5) è un'equazione differenziale ordinaria, lineare, omogenea, del secondo ordine e priva del termine del primo ordine. Essa ha, pertanto, due soluzioni linearmente indipendenti, il cui Wronskiano è una costante non nulla (teoremi 8.1, 8.2 e 8.5).

Teorema 8.6 *Se $U(x)$ presente nell'eq. (8.5) è una funzione reale, allora le soluzioni dell'eq. (8.5) possono essere scelte reali.*

Dimostrazione: se $U(x)$ è reale, e $\Psi(x)$ è una soluzione dell'eq. (8.5), allora anche la sua complessa coniugata $\Psi^*(x)$ ne è soluzione ed è linearmente indipendente da $\Psi(x)$. Quindi, $\text{Re}\Psi$ e $\text{Im}\Psi$ sono due soluzioni linearmente indipendenti e reali, e sono le sole possibili perché l'eq. (8.5) non può avere più di due soluzioni linearmente indipendenti (8.2).

Teorema 8.7 *Le soluzioni dell'eq. (8.5) devono essere funzioni continue.*

Dimostrazione: Affinché una funzione abbia derivata seconda è necessario che essa e la sua derivata prima siano continue. Quindi, affinché l'eq. (8.5) abbia significato, Ψ e Ψ' devono essere continue. Se poi $U(x)$ è una funzione continua, anche Ψ'' è continua. Se $U(x)$ ha, in un punto, una discontinuità finita, ivi, anche Ψ'' ha una discontinuità finita, ma Ψ e Ψ' sono continue (Ψ' ha una cuspide). Infine, se $U(x)$ in un punto va ad infinito, Ψ'' in quel punto non è definita e, sebbene non sia più necessario che Ψ' sia continua, essa deve esistere a sinistra e a destra del punto, mentre Ψ deve essere ivi continua.

Teorema 8.8 *Le soluzioni fisicamente accettabili dell'eq. (8.5) devono essere limitate all'infinito.*

Dimostrazione: siano $|\epsilon\rangle$ un autovettore dell'Hamiltoniano dell'eq. (8.3) e $|\Psi(t)\rangle$ uno stato della particella. Ricordiamo dal commento 7.2 che, se la particella è nello stato $|\Psi(t)\rangle$, allora l'ampiezza di probabilità che misurando la sua energia totale si registri il valore ϵ , è

$$\langle\epsilon|\Psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_{\epsilon}^{*}(x)\Psi(x,t) \quad (8.17)$$

in cui il membro di destra è la rappresentazione delle coordinate del membro di sinistra. Siccome la quantità nell'eq. (8.17) è un'ampiezza di probabilità, essa deve essere finita e perciò l'integrando deve annullarsi all'infinito. Abbiamo già visto nel commento 7.25 che una funzione d'onda $\Psi(x,t)$ deve appartenere allo spazio $L^2(-\infty, \infty)$, e deve pertanto annullarsi all'infinito (a parte i casi privi di significato fisico accennati nel commento 6.19). Pertanto, affinché l'integrando nell'eq. (8.17) sia finito è necessario che $\Psi_{\epsilon}(x)$ sia, all'infinito, limitata.

Commento 8.5 In conclusione, il fatto che le soluzioni $\Psi_{\epsilon}(x)$ dell'eq. (8.5) possono essere scelte reali (teorema 8.6) e che devono essere continue (teorema 8.7) e quindi limitate per ogni valore finito di x , è un risultato matematico. È invece una conseguenza della loro interpretazione fisica il fatto che esse siano limitate anche all'infinito (teorema 8.7). Ricordiamo infine (teorema 6.57 ed equazioni (7.11) e (7.11)) che $\Psi_{\epsilon}(x)$ appartiene o no ad $L^2(-\infty, \infty)$ a seconda che appartenga ad un autovalore della parte discreta o della parte continua dello spettro.

Teorema 8.9 *Si assuma che nell'eq. (8.5)*

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} U(x) = U_{\pm} \quad (8.18)$$

dove U_{+} e U_{-} possono essere finiti o infiniti. Le autofunzioni fisicamente accettabili e appartenenti ad autovalori $\epsilon > U_{+}$ oscillano al tendere di x a $+\infty$, e quelle appartenenti ad autovalori $\epsilon > U_{-}$ oscillano al tendere di x a $-\infty$.

Dimostrazione: si ponga

$$\epsilon - U(x) \equiv k^2(x) \quad (8.19)$$

che, per x sufficientemente grande (quando $\epsilon > U_{+}$) e per x sufficientemente piccolo (quando $\epsilon > U_{-}$), è una quantità positiva. Quindi, dall'eq. (8.5),

$$\Psi''(x) = -k^2(x)\Psi(x) \quad (8.20)$$

e si vede che, per x sufficientemente grande (quando $\epsilon > U_{+}$) e per x sufficientemente piccolo (quando $\epsilon > U_{-}$), Ψ e la sua derivata seconda Ψ''

hanno segno opposto, cioè Ψ mantiene la concavità verso l'asse delle x : essa può crescere sempre, tendere ad un valore asintotico, o oscillare. Le prime due possibilità devono essere escluse: la prima, a causa del teorema 8.8, la seconda perché si avrebbe

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi''(x) = 0 \neq \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x), \quad (8.21)$$

un risultato che contraddice l'eq. (8.20).

Teorema 8.10 *Se, nell'eq. (8.18), al tendere di x a $+\infty$, $U(x)$ tende verso U_+ più rapidamente di $1/x$, allora le autofunzioni dell'eq. (8.5) appartenenti ad autovalori $\epsilon > U_+$ hanno il seguente comportamento asintotico:*

$$\Psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} A_+ \sin(k_+ x + \phi_+). \quad (8.22)$$

Analogamente, se, al tendere di x a $-\infty$, $U(x)$ tende verso U_- più rapidamente di $1/x$, allora le autofunzioni dell'eq. (8.5) appartenenti ad autovalori $\epsilon > U_-$ hanno il seguente comportamento asintotico:

$$\Psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} A_- \sin(k_- x + \phi_-). \quad (8.23)$$

Nelle equazioni (8.22) e (8.23), A_\pm e ϕ_\pm sono costanti e

$$k_\pm \equiv +\sqrt{\epsilon - U_\pm}. \quad (8.24)$$

Teorema 8.11 *Con le ipotesi espresse dall'eq. (8.18), ad ogni autovalore $\epsilon < U_+$ dell'eq. (8.5) corrisponde una sola autofunzione accettabile, ed essa tende a zero al tendere di x a $+\infty$, e ad ogni autovalore $\epsilon < U_-$ corrisponde una sola autofunzione accettabile, ed essa tende a zero al tendere di x a $-\infty$.*

Dimostrazione: si ponga

$$U(x) - \epsilon \equiv \rho^2(x) \quad (8.25)$$

che, per x sufficientemente grande (quando $\epsilon < U_+$) e per x sufficientemente piccolo (quando $\epsilon < U_-$), è una quantità positiva. Quindi, dall'eq. (8.5),

$$\Psi''(x) = \rho^2(x)\Psi(x), \quad (8.26)$$

e si vede che, per x sufficientemente grande (quando $\epsilon < U_+$) e per x sufficientemente piccolo (quando $\epsilon < U_-$), Ψ e la sua derivata seconda Ψ'' hanno lo stesso segno, cioè Ψ mantiene la convessità verso l'asse delle x : essa può crescere sempre, tendere ad un valore asintotico non nullo, o tendere a zero. Le prime due possibilità devono essere escluse: la prima a causa del teorema 8.8, e la seconda perché si avrebbe l'eq. (8.21) (che contraddice l'eq. (8.26)). C'è solo una soluzione che soddisfa la terza possibilità, perché, se esistesse un'altra soluzione linearmente indipendente da essa, il loro Wronskiano sarebbe non nullo (teorema 8.1). Tuttavia,

il Wronskiano di due soluzioni che vanno entrambe a zero all'infinito è, all'infinito, nullo. Siccome il Wronskiano di due soluzioni linearmente indipendenti dell'eq. (8.5) è una costante (teorema 8.5), esso sarebbe nullo ovunque e le due soluzioni, quindi, non potrebbero essere linearmente indipendenti.

Commento 8.6 Il fatto che, quando il sistema si trova in un autostato dell'energia, regioni che classicamente sono proibite siano quantisticamente permesse senza che si la conservazione dell'energia o senza introdurre energie cinetiche negative prive di significato fisico, è in accordo col fatto che gli osservabili di posizione e di energia non commutano: $[X, H] \neq 0$ (perché $[X, P] \neq 0$). Quindi, se il sistema fosse trovato con certezza in una ben precisa posizione dello spazio (permessa o proibita classicamente), esso non avrebbe una ben definita energia.

Teorema 8.12 *Autofunzioni dell'eq. (8.5) appartenenti ad autovalori $\epsilon < U_+$, al tendere di x a $+\infty$, o decrescono esponenzialmente a zero o crescono esponenzialmente all'infinito. Analogamente, autofunzioni dell'eq. (8.5) appartenenti ad autovalori $\epsilon < U_-$, al tendere di x a $-\infty$, o decrescono esponenzialmente a zero o crescono esponenzialmente all'infinito.*

Commento 8.7 Dal teorema 8.12, il comportamento asintotico della soluzione generale dell'eq. (8.5) con $\epsilon < U_+$ è

$$\Psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} C_+ e^{\rho_+ x} + C_- e^{-\rho_+ x}. \quad (8.27)$$

Analogamente, il comportamento asintotico della soluzione generale dell'eq. (8.5) con $\epsilon < U_-$ è

$$\Psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} D_+ e^{\rho_- x} + D_- e^{-\rho_- x}. \quad (8.28)$$

Nelle equazioni (8.27) e (8.28),

$$\rho_{\pm} \equiv +\sqrt{U_{\pm} - \epsilon} \quad (8.29)$$

e C_{\pm} e D_{\pm} sono costanti il cui valore dipende da ϵ . Le soluzioni fisicamente accettabili appartenenti ad autovalori $\epsilon < U_+$ devono essere quelle per cui $C_+ \equiv 0$, e le soluzioni fisicamente accettabili appartenenti ad autovalori $\epsilon < U_-$ devono essere quelle per cui $D_- \equiv 0$.

Teorema 8.13 *Nell'eq. (8.5), gli autovalori ϵ con $\epsilon > U_-$ e $\epsilon > U_+$, sono due volte degeneri e appartengono alla parte continua dello spettro.*

Dimostrazione: le due soluzioni linearmente indipendenti dell'eq. (8.5) sono, infatti, limitate (teorema 8.9), e pertanto non vi è alcuna limitazione ai possibili valori di ϵ .

Teorema 8.14 *Nell'eq. (8.5), gli autovalori ϵ con $\epsilon > U_+$ e $\epsilon < U_-$ (o con $\epsilon < U_+$ e $\epsilon > U_-$), sono non degeneri e appartengono alla parte continua dello spettro.*

Dimostrazione: per il teorema 8.11, nel caso in cui $\epsilon > U_+$ e $\epsilon < U_-$, solo una delle due soluzioni linearmente indipendenti ha, per x tendente a $-\infty$, un comportamento asintotico fisicamente accettabile (e, nel caso in cui $\epsilon < U_+$ e $\epsilon > U_-$, solo una delle due soluzioni linearmente indipendenti ha, per x tendente a $+\infty$, un comportamento asintotico fisicamente accettabile). Sia ora x_0 il punto dell'asse reale più lontano dall'origine tale che $U(x_0) = \epsilon$ e per cui (teorema 8.7) la funzione è continua e la sua derivata prima esiste (anch'essa è continua se $U(x_0)$ è finito). L'unica soluzione accettabile nella regione asintotica, ha, in x_0 , specificati valore e derivata prima, e pertanto si propaga in modo univoco nella regione in cui $x < x_0$, e in particolare, nella regione in cui $U(x) < \epsilon$ (teorema 8.3). Ai possibili valori di ϵ non vi è alcuna limitazione.

Teorema 8.15 *Nell'eq. (8.5), gli autovalori ϵ con $\epsilon < U_+$ e $\epsilon < U_-$ sono non degeneri e appartengono alla parte discreta dello spettro.*

Dimostrazione: siano x_- e x_+ i punti sull'asse x tali che, per ogni $x < x_-$ e per ogni $x > x_+$, si abbia $U(x) > \epsilon$, e immaginiamo di costruire le soluzioni dell'eq. (8.5) a partire da $x = -\infty$ dove (teorema 8.11) vi è una sola soluzione fisicamente accettabile, cioè quella che, al tendere di x a $-\infty$ decade esponenzialmente a zero (teorema 8.12). Questa soluzione ha, in $x = x_-$, valore e derivata specificati (teorema 8.7), e pertanto si propagerà univocamente a destra di x_- , sino al punto x_+ dove essa assumerà nuovo valore e nuova derivata, e da dove si propagerà univocamente verso $+\infty$, con un comportamento asintotico dato dall'eq. (8.27), in cui C_+ non è, in generale, nullo. Solo soluzioni per cui

$$C_+(\epsilon) = 0 \tag{8.30}$$

sono accettabili. L'equazione (8.30) è l'equazione che fornisce la parte discreta dello spettro degli autovalori ϵ cui appartengono autofunzioni fisicamente accettabili.

Definizione 8.3 Autostati appartenenti ad autovalori del tipo specificato nei teoremi 8.13 e 8.14 sono chiamati *stati non legati* o anche *stati di scattering* perché la particella può avere densità di probabilità non nulla di trovarsi all'infinito, Gli stati appartenenti ad autovalori del tipo specificato nel teorema 8.15 sono chiamati *stati legati* perché la densità di probabilità di trovare la particella all'infinito decresce a zero.

Teorema 8.16 *Se $U(x)$ ha un minimo assoluto U_0 , allora non esistono soluzioni fisicamente accettabili dell'eq. (8.5) appartenenti ad autovalori $\epsilon < U_0$.*

Dimostrazione: autofunzioni appartenenti ad autovalori minori di qualunque valore del potenziale avrebbero, ovunque, la convessità verso l'asse x (si veda l'eq. (8.26)). Tuttavia, funzioni siffatte sarebbero non limitate all'infinito e quindi non possono essere fisicamente accettabili (teorema 8.8).

Teorema 8.17 *Se il potenziale $U(x)$ è infinito in un intervallo, la funzione d'onda $\Psi(x)$ è nulla su quell'intervallo.*

Dimostrazione: Se $U(x)$ è infinito in un singolo punto x_0 , dall'eq. (8.5) si vede che, se $\Psi'(x_0) \neq 0$, allora, siccome $\Psi''(x_0)$ diverge, $\Psi'(x_0)$ deve essere discontinua in x_0 . Ma, se $U(x)$ è infinita in un intervallo, non è possibile che $\Psi'(x)$ sia discontinua su tutto l'intervallo. Quindi, deve essere, su tutto l'intervallo, $\Psi(x) \equiv 0$.

Teorema 8.18 *Se gli autovalori dell'eq. (8.5) appartenenti alla parte discreta dello spettro vengono ordinati in ordine crescente,*

$$\epsilon_0 < \epsilon_1 < \epsilon_2 < \dots < \epsilon_n < \epsilon_{n+1} < \dots,$$

allora l'autofunzione $\Psi_n(x)$ appartenente all'autovalore ϵ_n ha esattamente n zeri.

Esempio 8.1 (Oscillatore armonico) Nella parte rimanente di questo capitolo si studierà l'oscillatore armonico unidimensionale (OAU) di massa m , costante di forza k e frequenza classica ω (eq. (1.4)).

Teorema 8.19 *L'Hamiltoniano di un OAU è*

$$H = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \omega \quad (8.31)$$

con

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (8.32)$$

Dimostrazione: L'espressione classica dell'Hamiltoniano, eq. (3.78), può scriversi

$$\begin{aligned} H_{\text{cl}} &= \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \\ &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\omega}}p \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\omega}}p \right) \omega \end{aligned} \quad (8.33)$$

con

$$a \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\omega}}p \quad (8.34a)$$

e

$$a^* \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\omega}}p. \quad (8.34b)$$

L'Hamiltoniano quantistico si ottiene da quello classico promuovendo le variabili dinamiche ad operatori con una specificata algebra, cioè,

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{k}{2}X^2 = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}X^2 \quad (8.35)$$

con

$$[X, P] = i. \quad (8.36)$$

Allo scopo di riscrivere l'Hamiltoniano in termini degli operatori a e a^\dagger , corrispondenti alle quantità classiche a e a^* , si deve prima riscrivere l'eq. (8.33) in modo da determinare univocamente l'Hamiltoniano quantistico. A questo scopo basta scrivere

$$H_{cl} = \frac{1}{2} (a^* a + a a^*) \omega, \quad (8.37)$$

da cui l'Hamiltoniano quantistico risulta essere l'operatore Hermitiano

$$H = \frac{1}{2} (a^\dagger a + a a^\dagger) \omega, \quad (8.38)$$

in cui gli operatori di *creazione* e *annichilazione* sono definiti da

$$a \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}} X + \frac{i}{\sqrt{2m\omega}} P \quad (8.39a)$$

e

$$a^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}} X - \frac{i}{\sqrt{2m\omega}} P \quad (8.39b)$$

La relazione di commutazione tra a e a^\dagger si ricava immediatamente,

$$[a, a^\dagger] = -\frac{i}{2}[X, P] + \frac{i}{2}[P, X] = -\frac{i}{2}(i) + \frac{i}{2}(-i) = 1, \quad (8.40)$$

che è l'eq. (8.32). L'Hamiltoniano (8.38) può allora scriversi

$$H = \frac{1}{2} (a^\dagger a + a a^\dagger + a^\dagger a - a^\dagger a) \omega = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \omega, \quad (8.41)$$

che è l'eq. (8.31).

Teorema 8.20 *Gli autovettori dell'Hamiltoniano di un OAU coincidono con gli autovettori dell'operatore numero*

$$N \equiv a^\dagger a. \quad (8.42)$$

Dimostrazione: Per un OAU, $U_\pm = +\infty$ nell'eq. (8.18). Dal teorema 8.15, lo spettro degli autovalori dell'energia di un OAU è discreto e ogni autovalore è non degenere, e dalle equazioni (8.31) e (8.42) si vede che N commuta con H . Quindi, per il teorema 6.59, gli autovettori di N coincidono con quelli di H .

Teorema 8.21 *Se $|n\rangle$ è un autovettore normalizzato di N appartenente all'autovalore n , allora*

$$|n-1\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n}} a |n\rangle \quad (8.43)$$

e

$$|n+1\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger |n\rangle \quad (8.44)$$

sono autovettori normalizzati di N appartenenti, rispettivamente, agli autovalori $n-1$ e $n+1$.

Dimostrazione: Dalle equazioni (8.32) e (8.42) si ha

$$\begin{aligned} Na|n\rangle &= a^\dagger aa|n\rangle = (aa^\dagger - 1)a|n\rangle = aa^\dagger a|n\rangle - a|n\rangle \\ &= a(N-1)|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} Na^\dagger|n\rangle &= a^\dagger aa^\dagger|n\rangle = a^\dagger(1 + a^\dagger a)|n\rangle \\ &= a^\dagger(1 + N)|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle \end{aligned}$$

Inoltre, se $\langle n|n\rangle = 1$, allora

$$\left\| \frac{1}{\sqrt{n}}a|n\rangle \right\| = \sqrt{\frac{1}{n}\langle n|a^\dagger a|n\rangle} = \sqrt{\langle n|n\rangle} = 1$$

ed

$$\begin{aligned} \left\| \frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger|n\rangle \right\| &= \frac{1}{\sqrt{n+1}}\sqrt{\langle n|aa^\dagger|n\rangle} = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\sqrt{\langle n|a^\dagger a + 1|n\rangle} \\ &= \frac{1}{\sqrt{n+1}}\sqrt{\langle n|N+1|n\rangle} = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\sqrt{(n+1)\langle n|n\rangle} = 1. \end{aligned}$$

Teorema 8.22 *Gli autovalori di N sono tutti i numeri interi non negativi.*

Dimostrazione: Gli autovalori di N sono certamente numeri non negativi perché

$$0 \leq \|a|n\rangle\|^2 = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = n\langle n|n\rangle$$

e, siccome $\langle n|n\rangle \geq 0$ (definizione 6.6), ne consegue che

$$n \geq 0. \quad (8.45)$$

Per il precedente teorema 8.21, basta applicare l'operatore di annichilazione a all'autovettore $|n\rangle$ di N appartenente all'autovalore n , e ottenere l'autovettore appartenente all'autovalore $n-1$. Comunque, siccome vale l'eq. (8.45), deve esistere un autovalore n_0 il cui autovettore gode della proprietà

$$a|n_0\rangle = \mathbf{0}. \quad (8.46)$$

Si vede facilmente che $n_0 = 0$:

$$n_0|n_0\rangle = N|n_0\rangle = (a^\dagger a)|n_0\rangle = a^\dagger(a|n_0\rangle) = a^\dagger\mathbf{0} = \mathbf{0},$$

dove si è fatto uso dell'eq. (8.46). Quindi,

$$n_0 = 0, \quad (8.47)$$

e il corrispondente autovettore può essere indicato con

$$|n_0\rangle \equiv |0\rangle. \quad (8.48)$$

Per il teorema 8.21, gli autovettori $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots$, si possono ottenere applicando successivamente l'operatore a^\dagger al vettore $|0\rangle$. Pertanto, tutti gli autovettori normalizzati appartenenti agli autovalori che sono interi positivi vengono direttamente ottenuti dall'eq. (8.44), cioè

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (8.49)$$

Infine, non esistono autovettori appartenenti ad autovalori non interi perché se ne esistesse uno, vi si potrebbe applicare l'operatore di annichilazione a tante volte sino ad ottenere un autovettore $|x\rangle \neq \mathbf{0}$ appartenente ad un autovalore positivo $x < 1$ per cui

$$a|x\rangle = \mathbf{0}. \quad (8.50)$$

La norma del membro destro dell'eq. (8.50) è zero, mentre la norma del membro sinistro è

$$\|a|x\rangle\|^2 = \langle x|a^\dagger a|x\rangle = \langle x|N|x\rangle = x\langle x|x\rangle,$$

che è differente da zero in quanto $\langle x|x\rangle > 0$ (visto che $|x\rangle \neq \mathbf{0}$) e $x > 0$ per ipotesi. Quindi, non esistono autovettori appartenenti ad autovalori non interi.

Commento 8.8 I teoremi 8.21 e 8.22 giustificano i nomi “annichilazione”, “creazione” e “numero” dati agli operatori a , a^\dagger e N .

Commento 8.9 Nel teorema 8.22 abbiamo modificato la notazione sinora adottata nel libro. In particolare, abbiamo indicato con $|0\rangle$ l'autovettore di N appartenente all'autovalore $n = 0$, coerentemente con la scelta di indicare con $|n\rangle$ l'autovettore di N appartenente all'autovalore n . Nel capitolo 6, invece, avendo indicato i vettori con $|\rangle$, il vettore zero, cioè il vettore neutro rispetto all'addizione tra vettori, veniva indicato con $|0\rangle$. Raramente si fa confusione quando il simbolo $|0\rangle$ è usato con un solo significato, ma quando sono usati entrambi i significati sarebbe bene adottare notazioni differenti. Nel teorema 8.22 abbiamo pertanto indicato il vettore nullo con $\mathbf{0}$ e l'autovettore appartenente all'autovalore $n = 0$ di N con $|0\rangle$ (faremo questa scelta nel resto del libro ovunque sia necessario). Naturalmente, il numero zero continua ad essere indicato con 0.

Commento 8.10 Avendo risolto il problema agli autovalori per N , si è risolto anche quello per H (teorema 8.20): gli autovettori di H sono i vettori $|n\rangle$ e, dalle equazioni (8.31) e (8.42), gli autovalori di H sono

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.51)$$

Commento 8.11 L'insieme $\{|n\rangle\}$ (come ogni altro insieme di autovettori di un osservabile) può essere usato per rappresentare i vettori di stato dello spazio

di Hilbert associato all'OAU, e gli operatori che agiscono su esso. Questa è la rappresentazione dell'energia (definizione 7.9) ed è anche chiamata *rappresentazione numero*. Nel successivo teorema vedremo la forma esplicita degli autovettori dell'energia di un OAU nella rappresentazione delle coordinate.

Teorema 8.23 *Nella rappresentazione delle coordinate, le autofunzioni normalizzate dell'Hamiltoniano di un OAU sono*

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{\beta}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \exp(-\beta^2 x^2/2) H_n(\beta x), \quad (8.52)$$

dove

$$\beta \equiv \sqrt{m\omega} \quad (8.53)$$

e H_n è l' n -esimo polinomio di Hermite, definito dalla relazione di ricorrenza

$$H_n(z) = (-)^n \exp(z^2) \frac{d^n}{dz^n} \exp(-z^2). \quad (8.54)$$

Dimostrazione: Troviamo innanzitutto lo stato fondamentale Ψ_0 . Per il teorema 7.39 e dalle equazioni (8.39a) e (8.53), l'eq. (8.46) diventa

$$\Psi_0'(x) + \beta^2 x \Psi_0(x) = 0,$$

la cui soluzione normalizzata è

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}} \exp(-\beta^2 x^2/2). \quad (8.55)$$

Una volta trovato Ψ_0 , le equazioni (8.39b) e (8.49) permettono di trovare tutti gli stati eccitati. Il risultato (8.52) si ottiene facilmente.

Commento 8.12 I polinomi di Hermite si trovano in opportune tabelle e possono anche essere facilmente generati al computer. I primi di essi sono

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 & H_1 &= 2z & H_2 &= 4z^2 - 2 \\ H_3 &= 8z^3 - 12z & H_4 &= 16z^4 - 48z^2 + 12. \end{aligned}$$

Commento 8.13 Lo stato fondamentale dell'Hamiltoniano di un OAU corrisponde ad un valore non nullo dell'energia, cioè

$$E_0 = \omega/2. \quad (8.56)$$

Questo risultato può comprendersi in termini del principio di indeterminazione di Heisenberg: per l'OAU, l'autovalore dell'energia $E = 0$ implicherebbe, nel corrispondente stato, che $\langle H \rangle = 0$ (teorema 7.3), e quindi (si veda eq. (8.35)) $\langle p^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = 0$, cioè, $\Delta x \Delta p = 0$, in contraddizione con la disuguaglianza di Heisenberg (7.119). Ricavando P e X dalle equazioni (8.39), si ha

$$P = i\sqrt{\frac{m\omega}{2}} (a^\dagger - a) \quad (8.57a)$$

e

$$X = \sqrt{\frac{1}{2m\omega}} (a^\dagger + a) . \quad (8.57b)$$

Dalle equazioni (8.57) e usando le equazioni (8.43) e (8.44), si calcola facilmente che in ogni autostato $|n\rangle$ dell'OAU,

$$\langle P \rangle = \langle X \rangle = 0 , \quad (8.58)$$

$$\langle P^2 \rangle = mE_n \quad (8.59a)$$

e

$$\langle X^2 \rangle = \frac{E_n}{m\omega^2} . \quad (8.59b)$$

Quindi, nell'autostato $|n\rangle$ dell'energia,

$$\Delta X \Delta P = \frac{E_n}{\omega} = n + \frac{1}{2} , \quad (8.60)$$

che soddisfa la disuguaglianza di Heisenberg. Si noti che per $n = 0$, $\Delta X \Delta P = 1/2$, che è il minimo valore permesso dalla disuguaglianza di Heisenberg. Si noti, inoltre, che dalle equazioni (8.59) i valori medi dell'energia cinetica T e dell'energia potenziale V sono

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle = \frac{E_n}{2} . \quad (8.61)$$

Teorema 8.24 *Nella rappresentazione delle coordinate, le autofunzioni dell'OAU hanno parità definita.*

Dimostrazione: Come si vede immediatamente dalla sua rappresentazione delle coordinate, l'Hamiltoniano di un OAU,

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 ,$$

è invariante per trasformazione di parità (esempio 6.5), cioè,

$$H' = \Pi^\dagger H \Pi = \Pi H \Pi = H , \quad (8.62)$$

in cui si è fatto uso dell'Hermiticità dell'operatore parità. Usando la sua unitarietà, dall'eq. 8.62), si ottiene,

$$[H, \Pi] = 0 , \quad (8.63)$$

da cui si vede che, siccome lo spettro di H è non degenere, le autofunzioni di H coincidono con quelle dell'operatore parità, che sono le funzioni pari e dispari (esempio 6.5).

Commento 8.14 È istruttivo considerare l'OAU nella descrizione di Heisenberg. L'equazione di Heisenberg (7.61) per le osservabili $P_H(t)$ e $X_H(t)$ diventa

$$i\dot{P}_H(t) = [P_H(t), H] = -im\omega^2 X_H(t) \quad (8.64a)$$

e

$$i\dot{X}_H(t) = [X_H(t), H] = \frac{i}{m}P_H(t), \quad (8.64b)$$

dove i commutatori sono stati calcolati facendo uso del teorema 6.62 e del fatto che, dalle equazioni (7.58), (7.92a) e (7.92b),

$$[X_H(t), P_H(t)] = i. \quad (8.65)$$

Prendendo una opportuna combinazione lineare delle equazioni (8.64), queste si trasformano in una singola equazione, nella rappresentazione di Heisenberg, per l'operatore di annichilazione definito nell'eq. (8.39a), cioè,

$$\dot{a}_H(t) + i\omega a_H(t) = 0, \quad (8.66)$$

la cui soluzione è

$$a_H(t) = a_H(0)e^{-i\omega t} = ae^{-i\omega t}, \quad (8.67)$$

dove si è fatto uso del fatto che, a $t = 0$, le descrizioni di Heisenberg e di Schrödinger coincidono (commento 7.15). Sostituendo l'eq. (8.67) nelle equazioni (8.57), si ha

$$P_H(t) = P \cos \omega t - m\omega X \sin \omega t \quad (8.68a)$$

e

$$X_H(t) = X \cos \omega t - \frac{1}{m\omega}P \sin \omega t. \quad (8.68b)$$

Dalle equazioni (8.68) si vede che un operatore, considerato a tempi distinti, non commuta neanche con se stesso:

$$[X_H(t), X_H(t')] = \frac{i}{m\omega} \sin \omega(t - t') \quad (8.69a)$$

e

$$[P_H(t), P_H(t')] = -im \sin \omega(t - t'). \quad (8.69b)$$

Concludiamo notando che

$$[X_H(t), P_H(t')] = i \cos \omega(t - t'), \quad (8.70)$$

che, per $t = t'$, si riduce all'eq. (8.65).

Capitolo 9

Momento Angolare

Abbiamo definito il momento angolare come il generatore di rotazioni infinitesime (eq. (7.47)), ed abbiamo visto (teorema 7.25) che, a conseguenza del fatto che le rotazioni intorno ad assi distinti non commutano, anche le componenti del momento angolare lungo due assi distinti non commutano. In particolare (si veda il commento 7.20) si ha

$$\epsilon_{jkl} J_k J_l = i J_j. \quad (9.1)$$

Nel presente capitolo studieremo il problema agli autovalori per gli osservabili del momento angolare.

9.1 Equazione agli autovalori

Teorema 9.1 J^2 commuta con tutte le componenti di \mathbf{J} .

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} [J^2, J_z] &= [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_z] = [J_x^2, J_z] + [J_y^2, J_z] \\ &= J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_y, J_z] + [J_y, J_z] J_y \\ &= i (-J_x J_y - J_y J_x + J_y J_x + J_x J_y) = 0. \end{aligned}$$

In modo analogo si dimostra che $[J^2, J_x] = [J^2, J_y] = 0$ e si scrive

$$[J^2, \mathbf{J}] = 0. \quad (9.2)$$

Teorema 9.2 Se si definiscono gli operatori

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm i J_y \quad (9.3)$$

detti, rispettivamente, operatori di ascesa e di discesa, allora:

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}, \quad (9.4)$$

$$[J_+, J_-] = 2J_z, \quad (9.5)$$

$$[J^2, J_\pm] = 0, \quad (9.6)$$

$$J_+ J_- = J^2 - J_z(J_z - 1), \quad (9.7)$$

$$J_- J_+ = J^2 - J_z(J_z + 1). \quad (9.8)$$

Dimostrazione: Usando l'eq. (9.3), le equazioni (9.4) e (9.5) seguono dall'eq. (9.1) e l'eq. (9.6) segue dall'eq. (9.2). Si ha inoltre

$$\begin{aligned} J_+ J_- &= (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 - i(J_x J_y - J_y J_x) \\ &= J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 - J_z^2 - i(iJ_z) = J^2 - J_z^2 + J_z \\ &= J^2 - J_z(J_z - 1), \end{aligned}$$

che è l'eq. (9.7). L'eq. (9.8) si deriva in modo analogo sviluppando il prodotto $J_- J_+$.

Commento 9.1 Dalle equazioni (9.1) e (9.2) e dai teoremi 6.58 e 6.59, si vede che è possibile trovare un sistema di autovettori comuni a J^2 e ad una sola delle componenti di \mathbf{J} , diciamo J_z . Scegliamo di scrivere le equazioni agli autovalori come

$$J^2 |jm\rangle = j(j+1) |jm\rangle \quad (9.9)$$

e

$$J_z |jm\rangle = m |jm\rangle. \quad (9.10)$$

Nell'eq. (9.9) si deve ovviamente avere la disuguaglianza

$$j(j+1) \geq 0, \quad (9.11)$$

in cui, per convenzione, *scegliamo*

$$j \geq 0. \quad (9.12)$$

Teorema 9.3 La norma dei vettori $J_+ |jm\rangle$ e $J_- |jm\rangle$ è

$$\|J_\pm |jm\rangle\|^2 = -(-j \pm m)(j \pm m + 1). \quad (9.13)$$

Dimostrazione: dalle equazioni (9.8)–(9.10) si ha

$$\begin{aligned} \|J_+ |jm\rangle\|^2 &= \langle jm | J_- J_+ |jm\rangle = \langle jm | J^2 - J_z(J_z + 1) |jm\rangle \\ &= j(j+1) - m(m+1) \end{aligned} \quad (9.14)$$

$$= (j-m)(j+m+1). \quad (9.15)$$

Analogamente, dalle equazioni (9.7), (9.9) e (9.10), si ha

$$\|J_- |jm\rangle\|^2 = j(j+1) - m(m-1) \quad (9.16)$$

$$= (j+m)(j-m+1). \quad (9.17)$$

Teorema 9.4 *Nell' eq. (9.10), il valore assoluto di m non può essere maggiore di j , cioè*

$$-j \leq m \leq j. \quad (9.18)$$

Dimostrazione: dall' eq. (9.15) si ha

$$(j - m)(j + m + 1) \geq 0, \quad (9.19)$$

che si verifica se $\begin{cases} j \geq m \\ j \geq -(m + 1) \end{cases}$ oppure se $\begin{cases} j \leq m \\ j \leq -(m + 1) \end{cases}$. Il secondo sistema di disequazioni è in contraddizione con la scelta, riguardo il segno di j , espressa dall' eq. (9.12): $0 \leq j \leq m$ implica $(m + 1) > 0$, cioè $j \leq -(m + 1) < 0$. Per cui l'eq. (9.19) implica

$$-(j + 1) \leq m \leq j. \quad (9.20a)$$

L'eq. (9.17) può essere ottenuta dall'eq. (9.15) sostituendo m con $-m$, e, così facendo nell'eq. (9.20a) (che è una conseguenza dell' eq. (9.15)), si ha

$$-(j + 1) \leq -m \leq j.$$

cioè

$$-j \leq m \leq j + 1. \quad (9.20b)$$

Richiedendo che le equazioni (9.20) siano entrambe soddisfatte, si ottiene l'eq. (9.18).

Teorema 9.5 *I vettori $J_{\pm}|jm\rangle$ sono autovettori di J^2 e J_z corrispondenti ai numeri quantici j e $m \pm 1$.*

Dimostrazione: per le equazioni (9.6) e (9.9) si ha

$$J^2 J_{\pm}|jm\rangle = J_{\pm} J^2|jm\rangle = j(j + 1)J_{\pm}|jm\rangle, \quad (9.21a)$$

e per le equazioni (9.4) e (9.10) si ha

$$\begin{aligned} J_z J_{\pm}|jm\rangle &= (\pm J_{\pm} + J_{\pm} J_z)|jm\rangle = J_{\pm}(\pm I + J_z)|jm\rangle \\ &= (m \pm 1)J_{\pm}|jm\rangle. \end{aligned} \quad (9.21b)$$

Teorema 9.6 *I valori $m = \pm j$ sono numeri quantici permessi.*

Dimostrazione: per il teorema 9.5 e per la condizione (9.18), devono esistere due valori di m , m_+ e m_- , tali che

$$J_{\pm}|jm_{\pm}\rangle = \mathbf{0}. \quad (9.22)$$

La norma di tali vettori, che deve essere nulla, può essere ottenuta dall'eq. (9.13):

$$\|J_{\pm}|jm_{\pm}\rangle\|^2 = -(\pm m_{\pm} - j)(j \pm m_{\pm} + 1) = 0. \quad (9.23)$$

Dato che la condizione (9.18) deve essere soddisfatta, l'eq. (9.23) implica che

$$m_{\pm} = \pm j. \quad (9.24)$$

Commento 9.2 Si veda il commento 8.9.

Teorema 9.7 *I numeri quantici j e $|m|$ possono assumere solo valori interi ($0, 1, 2, \text{etc.}$) o seminteri ($1/2, 3/2, 5/2, \text{etc.}$).*

Dimostrazione: si è visto nel teorema 9.6 che $m = j$ e $m = -j$ sono, rispettivamente, i valori massimo e minimo che m può assumere. Indichiamo i corrispondenti autovettori con $|jj\rangle$ e $|j-j\rangle$. Per il teorema 9.5, possiamo ottenere gli altri autovettori di J_z appartenenti allo stesso autovalore, j , di J^2 , applicando successivamente l'operatore J_+ al vettore $|j-j\rangle$ (o l'operatore J_- al vettore $|jj\rangle$). Ciò può essere eseguito un numero finito p (e, ovviamente, intero) di volte, sino ad ottenere i vettori $|j-j+p\rangle$ e $|jj-p\rangle$ tali che

$$J_+|j(-j+p)\rangle = J_-|j(j-p)\rangle = \mathbf{0} \quad (9.25)$$

con

$$-j+p = j \quad \text{e} \quad j-p = -j,$$

cioè

$$p = 2j. \quad (9.26)$$

Per cui, il numero quantico j può assumere soltanto valori interi o seminteri. Infine, se esistesse un valore x di m tale che $j-1 \leq x \leq j$ si avrebbe $J_+|jx\rangle = \mathbf{0}$. Tuttavia, come si è visto nel teorema 9.6, ciò implicherebbe $x = j$; quindi, anche il numero quantico $|m|$ può assumere solo valori interi o seminteri.

Commento 9.3 In conclusione, gli autovalori di J^2 sono tutti i numeri della forma $j(j+1)$ con

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots \quad (9.27)$$

Per ciascun valore di j , la proiezione di \mathbf{J} lungo l'asse z può assumere solo i $(2j+1)$ valori

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j. \quad (9.28)$$

Da un generico autovettore $|jm\rangle$, applicandovi successivamente gli operatori J_+ e J_- , è possibile ricavare i rimanenti $2j$ autovettori (con j fissato e m variabile). Dalle equazioni (9.14)–(9.17) si ha che, se $|jm\rangle$ è normalizzato, i vettori normalizzati $|j m \pm 1\rangle$ sono

$$\begin{aligned} |j m \pm 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{-(-j \pm m)(j \pm m + 1)}} J_{\pm} |jm\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}} J_{\pm} |jm\rangle. \end{aligned} \quad (9.29)$$

In generale, J^2 e J_z non formano un set completo di osservabili che commutano (SCOC, definizione 7.2). Quindi, gli autostati di un sistema che sono anche autovettori di J^2 e J_z sono indicati con $|\tau jm\rangle$, dove τ è un indice di degenerazione

e rappresenta il numero quantico (o l'insieme dei numeri quantici) corrispondente agli autostati degli altri osservabili che commutano con J^2 e J_z e con i quali formano un SCOC. Ovviamente, le condizioni di ortonormalità e completezza mantengono la loro validità (commento 6.27):

$$\langle \tau' j' m' | \tau j m \rangle = \delta_{\tau' \tau} \delta_{j' j} \delta_{m' m} \quad (9.30)$$

e

$$\sum_{\tau} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j |\tau j m\rangle \langle \tau j m| = I. \quad (9.31)$$

Siccome $\{|\tau j m\rangle\}$ è un insieme di autovettori comuni ad un SCOC, esso può essere utilizzato per rappresentare qualsiasi vettore di stato dello spazio di Hilbert associato al sistema fisico (commento 7.23). Tale rappresentazione è detta *rappresentazione standard* ed è la rappresentazione nella quale J^2 e J_z sono diagonali con le fasi definite dall'eq. (9.29).

Teorema 9.8 *Nella rappresentazione standard, le matrici che rappresentano \mathbf{J} non dipendono da τ .*

Dimostrazione: dalle equazioni (9.10) e (9.30)

$$\langle \tau' j' m' | J_z | \tau j m \rangle = m \delta_{\tau' \tau} \delta_{j' j} \delta_{m' m}. \quad (9.32)$$

Inoltre, dalle equazioni (9.29) e (9.30), si ha

$$\langle \tau' j' m' | J_{\pm} | \tau j m \rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \delta_{\tau' \tau} \delta_{j' j} \delta_{m' m \pm 1} \quad (9.33)$$

e quindi, dall'eq. (9.3), si vede che anche J_x e J_y (e, ovviamente J^2) non dipendono da τ .

Commento 9.4 Il teorema 9.8 semplifica enormemente la costruzione delle matrici che rappresentano, nella rappresentazione standard, le componenti del momento angolare (o qualsiasi funzione di esse) di un dato sistema fisico: tali matrici non dipendono dal particolare sistema in studio ma solo dai numeri quantici j e m (e, ovviamente, dall'operatore che esse rappresentano).

9.2 Momenti angolari orbitale e di spin

Commento 9.5 Per definizione, il *momento angolare orbitale*, è

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}, \quad (9.34)$$

ed ha componenti

$$L_j = \epsilon_{jkl} X_k P_l, \quad (9.35)$$

i cui commutatori sono

$$\epsilon_{jkl} L_k L_l = i L_j, \quad (9.36)$$

come può essere facilmente verificato usando le regole di commutazione (7.92). Pertanto, \mathbf{L} gode di tutte le proprietà, elencate nel commento 9.3, di un momento angolare. Tuttavia, l'eq. (9.35), nel fornire una forma esplicita per \mathbf{L} , contiene altre informazioni, formalizzate nel teorema 9.9 di seguito, oltre alle regole di commutazione (9.36).

Commento 9.6 Nella rappresentazione delle coordinate (Cartesiane), le espressioni per gli operatori L^2 e L_z sono facilmente derivabili. Per esempio, usando i teoremi 7.36 e 7.39, si ha

$$L_z = (XP_y - YP_x) = -i(x\partial_y - y\partial_x). \quad (9.37)$$

Usando la appropriata trasformazione di coordinate (equazioni (3.55)), L_z può essere scritto in coordinate polari sferiche:

$$L_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi}. \quad (9.38)$$

In modo analogo si ottiene

$$L_{\pm} = e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (9.39)$$

e

$$L^2 = - \left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]. \quad (9.40)$$

Teorema 9.9 *Gli autovalori di L^2 sono tutti i numeri della forma $l(l+1)$ con l intero non negativo:*

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9.41)$$

Per ciascun valore di l , gli autovalori m di L_z assumono i seguenti $(2l+1)$ valori:

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (9.42)$$

Dimostrazione: dato che L_z , nell' eq. (9.38), opera solo su ϕ , la dipendenza da ϕ delle autofunzioni comuni a L^2 e L_z è tutta contenuta nelle autofunzioni dell'operatore L_z appartenenti allo spazio (si veda l'esempio 6.2) $L^2(0, 2\pi)$ delle funzioni a quadrato sommabile definite sull'intervallo $(0, 2\pi)$. Le soluzioni normalizzate dell'equazione

$$\left(\frac{d}{d\phi} - im \right) \Phi(\phi) = 0$$

sono

$$\Phi(\phi) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (9.43)$$

e, affinché siano differenziabili, devono essere continue. Tale condizione implica che

$$e^{im2\pi} = 1,$$

cioè m deve essere un numero intero. Gli operatori L_{\pm} possono essere definiti e hanno le stesse proprietà degli operatori J_{\pm} . In particolare, valgono i teoremi 9.5 e 9.6, cosicché anche l può assumere solo valori interi. Esso può effettivamente assumere qualsiasi valore intero in quanto la rappresentazione delle coordinate dell'equazione seguente (vedi eq. (9.22))

$$L_+|ll\rangle = \mathbf{0},$$

cioè

$$\left(\frac{d}{d\theta} - l \cot \theta\right) \Theta_l^l(\theta) = 0, \quad (9.44)$$

ha, per qualsiasi l , una e (a meno di una costante di normalizzazione) una sola soluzione:

$$\Theta_l^l(\theta) = C_l \sin^l(\theta).$$

I rimanenti vettori $|lm\rangle$ si ottengono applicando in successione l'operatore L_- così come prescritto dall'eq. (9.29).

Commento 9.7 Le autofunzioni normalizzate comuni agli operatori L^2 e L_z , nella rappresentazione delle coordinate polari sferiche, sono dette *armoniche sferiche* e sono le funzioni

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (9.45)$$

dove

$$P_l^{|m|}(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x) \quad (9.46)$$

è un *polinomio associato di Legendre* e $P_l(x)$ è l' l -esimo polinomio di Legendre. I polinomi di Legendre sono tabulati e, sfruttando le loro proprietà di ricorrenza, possono essere efficientemente generati al calcolatore. I primi della serie sono:

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 & P_1(x) &= x & P_2(x) &= (3x^2 - 1)/2 \\ P_3(x) &= (5x^3 - 3x)/2 & P_4(x) &= (35x^4 - 30x^2 + 3)/8. \end{aligned}$$

Esempio 9.1 (Potenziale centrale) Per una particella di massa μ in moto in un potenziale centrale $V(r)$, l'Hamiltoniano quantomeccanico nella rappresentazione delle coordinate è (eq. (7.132))

$$H = -\frac{1}{2\mu} \Delta + V(r). \quad (9.47)$$

Ora, possiamo o scrivere esplicitamente il Laplaciano in coordinate polari sferiche, oppure scrivere l'Hamiltoniano classico in coordinate polari sferiche (eq. (3.64)) e sostituire alle variabili canoniche i corrispondenti osservabili quantomeccanici, e ottenere

$$H = \frac{1}{2\mu} P_R^2 + \frac{L^2}{2\mu R^2} + V(R). \quad (9.48)$$

La quantità di moto classica è

$$P_r = \mu \dot{r} = \frac{\mu}{r} (x_j \dot{x}_j) = \frac{1}{r} (x_j p_j) = \frac{1}{2} \left(\frac{x_j}{r} p_j + p_j \frac{x_j}{r} \right),$$

che, nell'ultima uguaglianza è stata simmetrizzata per poter determinare univocamente il corrispondente operatore quantomeccanico,

$$P_R = \frac{1}{2} \left(\frac{X_j}{R} P_j + P_j \frac{X_j}{R} \right),$$

la cui rappresentazione delle coordinate è

$$P_r = -\frac{i}{2} \left(\frac{x_j}{r} \partial_j + \partial_j \frac{x_j}{r} \right) = -\frac{i}{r} (2x_j \partial_j + 1) = -i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$$

e il cui quadrato è

$$\begin{aligned} P_r^2 &= -(\partial_r + r^{-1})^2 = -(\partial_r^2 - r^{-2} + 2r^{-1}\partial_r + r^{-2}) \\ &= -(\partial_r^2 + 2r^{-1}\partial_r) = -r^{-1} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r. \end{aligned} \quad (9.49)$$

Quindi, l'Hamiltoniano (9.48) diventa, nella rappresentazione delle coordinate,

$$H = -\frac{1}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r). \quad (9.50)$$

Esso commuta con L^2 e L_z : siccome è invariante per rotazioni nello spazio tridimensionale, esso commuta (teorema 7.22) con tutte le componenti del momento angolare \mathbf{L} (in particolare con L_z), e quindi anche con L^2 che, a sua volta, commuta solo con L_z . È così possibile cercare un insieme di autofunzioni comuni a H , L^2 e L_z . Dall'eq. (9.40) si vede chiaramente che L^2 non opera sulla coordinata radiale r e quindi le autofunzioni di H saranno della forma

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (9.51)$$

dove le armoniche sferiche sono le autofunzioni comuni a L^2 e L_z e le funzioni radiali sono le soluzioni dell'*equazione radiale*

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r), \quad (9.52)$$

che, ponendo

$$u_{nl}(r) = r R_{nl}(r), \quad (9.53)$$

si riduce nella forma

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r). \quad (9.54)$$

Dato che $0 < r < \infty$, l'eq. (9.54) è formalmente l'equazione di Schrödinger unidimensionale per una particella in moto in un *potenziale effettivo* che, per $r \leq 0$ ha un valore infinito e, per $r > 0$, è

$$V_l(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2}, \quad (9.55)$$

il cui secondo termine è detto *potenziale centrifugo*. Le soluzioni dell'eq. (9.54) devono soddisfare la condizione (teorema 8.17)

$$u_{nl}(0) = 0. \quad (9.56)$$

Per una particella in un campo centrale, quindi, l'unica equazione da risolvere è l'eq. (9.54). A parte alcuni casi in cui il potenziale $V(r)$ ha una forma particolare, non esistono soluzioni analitiche dell'eq. (9.54) che quindi, in generale, deve essere risolta numericamente.

Esempio 9.2 (Particella libera) L'Hamiltoniano, che nella rappresentazione delle coordinate è dato dall'eq. (7.132) con $V(\mathbf{r}) \equiv 0$, in coordinate Cartesiane diventa

$$H = H_1 + H_2 + H_3, \quad (9.57)$$

dove

$$H_j = -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \quad (9.58)$$

è l'Hamiltoniano di una particella libera in una dimensione. Siccome H_1 , H_2 e H_3 operano su spazi distinti, un'autofunzione di H è il prodotto di un'autofunzione di H_1 per una di H_2 e una di H_3 . Dato che, inoltre, $[H_j, P_j] = 0$, H_j e P_j ammettono un insieme comune di autofunzioni. Gli autovalori di H_j sono

$$E_j = \frac{p_j^2}{2\mu}, \quad (9.59)$$

e (teorema 8.13) ognuno di essi è doppiamente degenere (in corrispondenza con i due possibili versi della quantità di moto \mathbf{P} lungo la direzione individuata dalla j -esima coordinata), e le corrispondenti autofunzioni sono date dall'eq. (7.120). Gli autovalori di H sono

$$E = \sum_j E_j = \frac{p^2}{2\mu}, \quad (9.60)$$

e le corrispondenti autofunzioni normalizzate sono

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (9.61)$$

Ogni autovalore è infinitamente degenere in corrispondenza con l'infinito numero di possibili direzioni del vettore \mathbf{p} , il cui modulo è

$$p = \sqrt{2\mu E}. \quad (9.62)$$

Il grado di degenerazione in uno spettro continuo di autovalori può essere rappresentato quantitativamente in termini della funzione *densità degli stati* $\rho(E)$, definita in modo tale che $\rho(E)dE$ rappresenti il numero di stati nell'intervallo di energie comprese fra E e $E + dE$. La densità degli stati di una particella libera può essere calcolata utilizzando la condizione di completezza

$$\int d^3p |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| = 4\pi \int_0^\infty dp |p\rangle p^2 \langle p| = I = \int_0^\infty dE \rho(E) |E\rangle\langle E|,$$

e dalla *relazione di dispersione* per una particella libera

$$E(p) = \frac{p^2}{2\mu}, \quad (9.63)$$

ottenendo

$$\rho(E) = 4\pi p^2 \left(\frac{dE}{dp} \right)^{-1} = 4\pi\mu\sqrt{2\mu E}. \quad (9.64)$$

Gli stati stazionari di una particella libera con quantità di moto \mathbf{p} ed energia E sono, pertanto, le onde piane

$$\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (9.65)$$

di lunghezza d'onda

$$\lambda = 2\pi/p, \quad (9.66)$$

frequenza lineare

$$\nu = E/2\pi, \quad (9.67)$$

e velocità di fase

$$v_\phi = E/p = p/2\mu. \quad (9.68)$$

Gli stati stazionari (9.65) non appartengono allo spazio di Hilbert delle funzioni di norma finita e perciò non rappresentano uno stato fisico della particella. Tale stato si realizza considerando la soluzione generale dell'equazione di Schrödinger, che si ottiene dalle equazioni (7.93) e (9.61)

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3p' c(\mathbf{p}') e^{i(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r} - E't)}, \quad (9.69)$$

e costruendo un *pacchetto d'onde*, cioè scegliendo, nell'eq. (9.69), i coefficienti (complessi) $c(\mathbf{p}') = |c(\mathbf{p}')| e^{i\alpha(\mathbf{p}')}$ in modo che siano non nulli soltanto in una piccola regione intorno al valore della quantità di moto \mathbf{P} della particella. In questo modo, l'integrale (9.69) è significativamente diverso da zero solo in quella regione nella quale la fase φ dell'esponenziale è approssimativamente costante, cioè quando

$$\nabla_{\mathbf{p}'} \varphi = \nabla[\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r} - E't + \alpha(\mathbf{p}')] = 0,$$

o, equivalentemente, quando

$$\mathbf{r} = t\nabla_{\mathbf{p}} E - \nabla_{\mathbf{p}} \alpha(\mathbf{p}),$$

che rappresenta una particella localizzata nel punto \mathbf{r} e in moto con velocità

$$|\mathbf{v}_g| = |\nabla_{\mathbf{p}} E| = p/\mu. \quad (9.70)$$

Si osservi che è la velocità \mathbf{v}_g , detta la *velocità di gruppo*, e non la velocità di fase \mathbf{v}_ϕ , che deve essere identificata con la velocità della particella.

L'Hamiltoniano della particella libera commuta non solo con le tre componenti della quantità di moto ma anche con gli operatori del momento angolare L^2 e L_z (che non commutano con \mathbf{P}). Quindi, $\{P_x, P_y, P_z\}$ e $\{H, L^2, L_z\}$ costituiscono due distinti SCOC. Le autofunzioni normalizzate della particella libera corrispondenti al primo insieme sono date dall'eq. (9.61), mentre quelle corrispondenti al secondo insieme sono date dall'eq. (9.51), nella quale le armoniche sferiche sono date dall'eq. (9.45) e la funzione radiale si ottiene, dall'eq. (9.53), risolvendo l'eq. (9.54) con la condizione (9.56) e ponendo $V(r) = 0$. L'equazione risultante è una ben nota equazione differenziale, e le sue soluzioni forniscono le funzioni radiali normalizzate di una particella libera

$$R_l(pr) = \sqrt{\frac{2p^2}{\pi}} j_l(pr), \quad (9.71)$$

dove $j_l(pr)$ è l' l -esima *funzione di Bessel*. (Il numero quantico n che appare nell'eq. (9.51) è stato qui sostituito dal parametro continuo p che corrisponde all'energia E tramite l'eq. (9.63).)

Le due basi di autofunzioni dell'Hamiltoniano della particella libera sono legate dalla solita relazione

$$|\mathbf{p}\rangle = \sum_{Elm} |Elm\rangle \langle Elm|\mathbf{p}\rangle,$$

che, nella rappresentazione delle coordinate, diventa

$$e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (i)^l Y_l^m(\theta_{\mathbf{p}}, \phi_{\mathbf{p}})^* j_l(pr) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (9.72)$$

dove gli angoli polari del vettore \mathbf{p} sono stati indicati con $\theta_{\mathbf{p}}$ e $\phi_{\mathbf{p}}$. L'eq. (9.72) mostra che uno stato che abbia un definito valore della quantità di moto è una sovrapposizione di stati con definito valore del momento angolare.

Esempio 9.3 (Problema dei due corpi) L'Hamiltoniano quantomeccanico di questo sistema può essere scritto partendo da quello classico, dato nell'eq. (3.52), sostituendo le variabili canoniche classiche con gli appropriati operatori. Il teorema 3.25 è valido anche in meccanica quantistica e, pertanto, la funzione d'onda di due particelle che interagiscono tramite un potenziale che dipende solo dalla loro distanza, è il prodotto della funzione d'onda di una particella libera (che descrive lo stato del centro di massa) e di una funzione d'onda di una particella in un potenziale centrale. I più noti, forse, fra questi tipi di sistemi sono i sistemi idrogenoidi la cui equazione radiale può essere risolta analiticamente.

Commento 9.8 Il teorema 9.9 stabilisce che il momento angolare associato con le rotazioni nello spazio ordinario tridimensionale ammette solo numeri quantici interi. Tuttavia, la possibilità di avere numeri quantici seminteri del momento angolare, ammessi dal teorema 9.7, non può essere ignorata in quanto essi sono stati effettivamente osservati in sistemi quantomeccanici. Per questo motivo la descrizione di una particella quantomeccanica prevede la possibilità di presenza di momento angolare anche nel sistema di riferimento nel quale la particella è in quiete: tale momento angolare è detto *spin* della particella. Il numero quantico s associato all'operatore di spin \mathbf{S} può essere intero o semiintero ed è una proprietà intrinseca della particella, come la massa o la carica (per elettroni, protoni e neutroni $s = 1/2$). Esistono $2s + 1$ autostati indipendenti di S_z che, pertanto, deve essere aggiunto ad ogni SCOC definito senza aver tenuto conto dello spin (si ricordi il commento 7.6). Per esempio, un possibile SCOC per una particella può essere uno qualsiasi dei seguenti insiemi: $\{X, Y, Z, S_z\}$, $\{P_x, P_y, P_z, S_z\}$ o $\{H, L^2, L_z, S_z\}$.

Lo spazio di Hilbert, nella rappresentazione delle coordinate, degli stati di una particella singola è il prodotto tensoriale $L^2(\mathbf{r}) \otimes \mathcal{C}^{2s+1}$ dove \mathcal{C}^{2s+1} è lo spazio complesso di dimensione $2s + 1$, e una base è data dai vettori $|\mathbf{r}m_s\rangle$ con $m_s = -s, -s + 1, \dots, s - 1, s$. Uno stato $|\Psi\rangle$ della particella, perciò, è dato, nella rappresentazione delle coordinate, da $\langle \mathbf{r}m_s | \Psi \rangle$, che può essere visto come una funzione d'onda a $2s + 1$ componenti $[\Psi](\mathbf{r})$ detta *spinore di rango $2s + 1$* . Un osservabile A , che, in generale, è rappresentato da

$$A = \sum_{jk} \int d^3x d^3x' |\mathbf{r}'m_j\rangle \langle \mathbf{r}'m_j| A |\mathbf{r}m_k\rangle \langle \mathbf{r}m_k|,$$

quando opera soltanto sulle coordinate di spin, è rappresentato da

$$A = \sum_{jk} |m_j\rangle \langle m_j| A |m_k\rangle \langle m_k| \otimes I_{\mathbf{r}}, \quad (9.73)$$

dove $I_{\mathbf{r}}$ è l'operatore identità nello spazio delle coordinate di posizione. Se, invece, A opera solo sulle coordinate di posizione, esso può essere rappresentato da

$$A = \int d^3x d^3x' |\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}'| A |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| \otimes I_s, \quad (9.74)$$

dove I_s è l'operatore identità nello spazio delle coordinate di spin, cioè la matrice identità $2s + 1$ -dimensionale (si noti che ciò è consistente con la definizione 6.31).

Per esempio, per una particella di spin $1/2$, come l'elettrone, lo spinore può scriversi

$$[\Psi](\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} \Psi_+(\mathbf{r}) \\ \Psi_-(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (9.75)$$

e la condizione di normalizzazione è

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3x [\Psi]^\dagger [\Psi] = \int d^3x (|\Psi_+|^2 + |\Psi_-|^2) = 1. \quad (9.76)$$

Nella rappresentazione $\{X, Y, Z, S_z\}$, la componente x del momento angolare di spin e della quantità di moto operano sullo stato dell'elettrone come prescritto, rispettivamente, delle equazioni (9.73) e (9.74), cioè

$$S_x[\Psi] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{bmatrix} \quad (9.77)$$

e

$$P_x[\Psi] = -i \begin{bmatrix} \partial_x & 0 \\ 0 & \partial_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{bmatrix}. \quad (9.78)$$

Esempio 9.4 (Matrici di Pauli) Nella rappresentazione standard (commento 9.3), le tre componenti del momento angolare di spin \mathbf{S} di una particella di spin $1/2$ sono, in accordo alle equazioni (9.3), (9.32) e (9.33),

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}, \quad (9.79)$$

dove $\boldsymbol{\sigma}$ rappresenta le tre *matrici di Pauli*:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (9.80)$$

Alcune importanti proprietà delle matrici di Pauli sono date di seguito nelle equazioni (9.81), (9.82) e (9.83). Dall'eq. (9.79) e dalle relazioni di commutazione fra le componenti di \mathbf{S} , si vede facilmente che

$$\sigma_j \sigma_k - \sigma_k \sigma_j = 2i \epsilon_{j k q} \sigma_q. \quad (9.81)$$

Inoltre, dall'eq. (9.80), si ha

$$\sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = 2\delta_{jk}. \quad (9.82)$$

Infine, dalle equazioni (9.81) e (9.82), si ha

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} + i \epsilon_{j k q} \sigma_q$$

che, sostituita nell'identità

$$(\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = A_j \sigma_j B_k \sigma_k = A_j B_k \sigma_j \sigma_k$$

(che vale per ogni operatore vettoriale \mathbf{A} e \mathbf{B} le cui componenti commutano con le matrici di Pauli), produce

$$(\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = A_j B_k (\delta_{jk} + i \epsilon_{j k q} \sigma_q) = A_j B_j + i \epsilon_{j k q} A_j B_k \sigma_q,$$

cioè

$$(\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}). \quad (9.83)$$

Esempio 9.5 (Carica con spin 1/2 in un campo elettromagnetico) Dall'eq. (9.83), si vede che

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}) = \mathbf{P}^2, \quad (9.84)$$

che ci permette di scrivere l'Hamiltoniano di una particella libera di spin 1/2 come

$$H = \frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})^2. \quad (9.85)$$

In un campo elettromagnetico specificato dai potenziali (\mathbf{A}, ϕ) , si adotta la sostituzione (eq. (5.54))

$$\mathbf{P} \rightarrow \boldsymbol{\pi} = \mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \quad (9.86)$$

e, dall'eq. (9.83), si ha

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 = \boldsymbol{\pi}^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi}). \quad (9.87)$$

Dato che

$$\begin{aligned} \mathbf{P} \times \mathbf{A} &= \epsilon_{jkq} \hat{x}_j P_k A_q = -i\epsilon_{jkq} \hat{x}_j [(\partial_k A_q) + A_q \partial_k] \\ &= -i\nabla \times \mathbf{A} + i(\mathbf{A} \times \nabla) = -i\mathbf{B} - \mathbf{A} \times \mathbf{P}, \end{aligned} \quad (9.88)$$

si vede che

$$(\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi}) = -\frac{e}{c}(\mathbf{P} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{P}) = \frac{i e \mathbf{B}}{c} \quad (9.89)$$

per cui l'eq. (9.87) diventa

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 = \boldsymbol{\pi}^2 - \frac{e}{c}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \boldsymbol{\pi}^2 - \frac{e}{c}2\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}, \quad (9.90)$$

dove si è usata l'eq. (9.79). Dalle equazioni (9.85), (9.86) e (9.90) l'Hamiltoniano di una particella carica di spin 1/2 in un campo elettromagnetico è perciò (si confronti con l'eq. (7.134a))

$$H = \frac{1}{2\mu} \left(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 - \frac{e}{2\mu c} 2\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} + e\phi. \quad (9.91)$$

Commento 9.9 Nella teoria elettromagnetica classica, una particella con carica e , massa μ e momento angolare orbitale $\boldsymbol{\ell}$, ha un momento magnetico \mathbf{M} proporzionale a $\boldsymbol{\ell}$, cioè (eq. (5.69))

$$\mathbf{M} = \frac{e}{2\mu c}\boldsymbol{\ell}, \quad (9.92)$$

al quale, in un campo magnetico \mathbf{B} , è associata un'energia

$$H_M = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}. \quad (9.93)$$

In meccanica quantistica, le equazioni fra operatori che corrispondono alle equazioni classiche (9.92) e (9.93) sono valide se la particella carica non possiede spin. Ciò si può facilmente verificare nel caso in cui il campo magnetico che agisce

sulla carica è uniforme. In questo caso, un appropriato potenziale vettore è dato dall'eq. (5.67) e, sostituendo l'identità

$$\mathbf{A} \cdot \nabla = i\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = \frac{i}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{R} \cdot \mathbf{P} = \frac{i}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{R} \times \mathbf{P} = \frac{i}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}$$

nell'eq. 7.136, si ottengono le equazioni (9.92) e (9.93). Sperimentalmente, tuttavia, si osserva che per una particella che possiede un momento angolare di spin \mathbf{S} , la relazione fra \mathbf{S} e il corrispondente momento magnetico \mathbf{M}_s differisce dalla relazione classica (9.92) per una costante g che dipende dalla natura della particella:

$$\mathbf{M}_s = g \frac{e}{2\mu c} \mathbf{S}. \quad (9.94)$$

Per cui, la relazione fra il momento angolare totale e il momento magnetico di una particella carica dotata di spin è

$$\mathbf{M} = \frac{e}{2\mu c} (\mathbf{L} + g\mathbf{S}). \quad (9.95)$$

La costante g è chiamata il *fattore g* della particella. I suoi valori per l'elettrone e per il protone sono

$$g_e = 2.002 \quad g_p = 5.586. \quad (9.96)$$

Dall'eq. (9.91) si osserva, tuttavia, che la meccanica quantistica non relativistica predice, per qualsiasi particella carica di spin $1/2$, un fattore g esattamente pari a 2. L'elettrodinamica quantistica relativistica, che tratta il campo elettromagnetico in modo più esatto, predice per il fattore g dell'elettrone un valore in accordo con quello sperimentale fino alla ottava cifra decimale.

9.3 Composizione di momenti angolari

Commento 9.10 In molti casi, un possibile SCOC per un dato sistema è l'insieme $\{A, L^2, L_z, S^2, S_z\}$ dove A è un osservabile (o un insieme di osservabili) che commuta con tutte le componenti del momento angolare orbitale \mathbf{L} e del momento angolare di spin \mathbf{S} . Oppure, un sistema S è composto da due sottosistemi $S(1)$ e $S(2)$ per ciascuno dei quali i due SCOC possono essere gli insiemi $\{A_1, J_1^2, J_{1z}\}$ e $\{A_2, J_2^2, J_{2z}\}$ (dove A_1 e A_2 commutano con tutte le componenti di \mathbf{J}_1 e \mathbf{J}_2), per cui un possibile SCOC di S è dato da $\{A_1, A_2, J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}\}$ (commento 7.30). In questi casi, talvolta si richiede un SCOC che contenga il momento angolare totale ($\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ oppure $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$). Vedremo che tale SCOC è $\{A_1, A_2, J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\}$ e costruiremo gli autovalori, $j(j+1)$ e m , e gli autovettori $|\tau_1 \tau_2 j_1 j_2 j m\rangle$ degli operatori del momento angolare totale J^2 e J_z a partire dagli autovalori $j_1(j_1+1)$, $j_2(j_2+1)$, m_1 e m_2 e dagli autovettori $|\tau_1 j_1 m_1\rangle$ e $|\tau_2 j_2 m_2\rangle$ dei momenti angolari componenti.

Teorema 9.10 *Gli operatori nell'insieme $\{A_1, A_2, J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\}$ commutano tutti tra loro.*

Dimostrazione: gli operatori con l'indice 1 commutano con gli operatori con l'indice 2 perché operano su spazi differenti (più precisamente, essi sono le estensioni su di uno spazio che è il prodotto tensoriale di due spazi su ognuno dei quali operano le restrizioni (vedi definizione 6.31) di operatori con indici distinti (commento 6.34)). Siccome A_1 commuta con tutte le componenti di \mathbf{J}_1 , esso commuta anche con J_1^2 , $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ e $J^2 = (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2)^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 = J_1^2 + J_2^2 + 2(J_{1x}J_{2x} + J_{1y}J_{2y} + J_{1z}J_{2z})$. Analogamente, A_2 commuta con J_2^2 , J_z e J^2 , e inoltre J_1^2 e J_2^2 commutano con J^2 e J_z . Infine, J^2 e J_z commutano tra loro (teorema 9.1).

Commento 9.11 Si noti che $[J^2, J_{1z}] \neq 0$ e $[J^2, J_{2z}] \neq 0$: per esempio,

$$\begin{aligned} [J^2, J_{1z}] &= 2[J_{1x}J_{2x} + J_{1y}J_{2y}, J_{1z}] = 2i(-J_{1y}J_{2x} + J_{1x}J_{2y}) \\ &= 2i(\mathbf{J}_1 \times \mathbf{J}_2) \cdot \hat{z}. \end{aligned}$$

Commento 9.12 Dal teorema 9.8, sappiamo che gli elementi di matrice di qualsiasi funzione di \mathbf{J} non dipendono da τ_1 e τ_2 . Per cui, il problema della diagonalizzazione di J_z e J^2 nella rappresentazione in cui J_1^2 , J_2^2 , J_{1z} e J_{2z} sono diagonali, si riduce al problema della diagonalizzazione di matrici $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ -dimensionali, dove j_1 e j_2 sono numeri quantici fissati. Indicheremo, quindi, il vettore $|\tau_1 \tau_2 j_1 j_2 j m\rangle$ semplicemente con $|j m\rangle$ e il cambiamento di rappresentazione con

$$|j m\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle. \quad (9.97)$$

Pertanto, il problema è: date due coppie di numeri quantici del momento angolare, (j_1, m_1) e (j_2, m_2) , determinare

1. I possibili valori di j e m ;
2. i coefficienti di Clebsch-Gordan (CG) $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle$.

Teorema 9.11 Siano (j_1, m_1) , (j_2, m_2) e (j, m) i numeri quantici associati, rispettivamente, con i momenti angolari \mathbf{J}_1 , \mathbf{J}_2 e $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$. Si ha

$$m = m_1 + m_2. \quad (9.98)$$

Dimostrazione: siccome $J_z = J_{1z} + J_{2z}$, J_z commuta con J_{1z} e J_{2z} , e si ha

$$J_z |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = (J_{1z} + J_{2z}) |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = (m_1 + m_2) |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle,$$

da cui segue l'eq. (9.98).

Commento 9.13 Per il teorema 9.11, la doppia sommatoria nell'eq. (9.97) è ridondante e, utilizzando la condizione (9.98), l'eq. (9.97) diventa

$$|j m\rangle = \sum_{m_1} |j_1 m_1 j_2 m - m_1\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m - m_1 | j m\rangle. \quad (9.99)$$

Teorema 9.12 Siano (j_1, m_1) , (j_2, m_2) e (j, m) i numeri quantici associati, rispettivamente, con i momenti angolari \mathbf{J}_1 , \mathbf{J}_2 e $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$. Allora j può assumere tutti (e solo) i seguenti valori:

$$|j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, |j_1 - j_2| + 2, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2, \quad (9.100)$$

cioè quei valori che soddisfano la disuguaglianza triangolare

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2. \quad (9.101)$$

Dimostrazione: si noti innanzitutto che, a causa dell'eq. (9.98) e del teorema 9.4, il massimo valore che m può assumere è $j_1 + j_2$, che è non degenero e corrisponde a $m_1 = j_1$ e $m_2 = j_2$. Per questo motivo, il massimo valore che j può assumere è anche $j_1 + j_2$ ed il suo grado di degenerazione è $2(j_1 + j_2) + 1$. Il valore $j_1 + j_2 - 1$ è anche un valore ammesso per m , ed è doppiamente degenero: corrisponde alla combinazione $m_1 = j_1 - 1$ e $m_2 = j_2$ oppure $m_1 = j_1$ e $m_2 = j_2 - 1$ e la doppia degenerazione è dovuta al fatto che, oltre a $j = j_1 + j_2$, tale valore di m corrisponde anche a $j = j_1 + j_2 - 1$. Quindi, riducendo successivamente di 1 il valore di j partendo da $j_1 + j_2$, si ottengono tutti i possibili valori di j fino a pervenire ad un valore minimo j_0 . Per determinare tale valore minimo si ricordi che ogni valore di j è $(2j + 1)$ volte degenero e che la dimensione dello spazio definito dai due momenti angolari con numeri quantici j_1 e j_2 è $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. Quindi, necessariamente, si ha

$$\sum_{j=j_0}^{j_1+j_2} (2j + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1). \quad (9.102)$$

Il membro sinistro dell'eq. (9.102) è una progressione aritmetica con $j_1 + j_2 - j_0 + 1$ termini, la cui somma è

$$\begin{aligned} \sum_{j=j_0}^{j_1+j_2} (2j + 1) &= \frac{2j_0 + 1 + 2(j_1 + j_2) + 1}{2} (j_1 + j_2 - j_0 + 1) \\ &= (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_0^2. \end{aligned}$$

Dal confronto di tale risultato col secondo membro dell'eq. (9.102) si ottiene

$$j_0^2 = (j_1 - j_2)^2.$$

Siccome abbiamo adottato la scelta $j \geq 0$ (commento 9.1), otteniamo

$$j_0 = |j_1 - j_2|, \quad (9.103)$$

che è il minimo valore permesso di j . La relazione (9.101) è pertanto provata.

Commento 9.14 Il secondo problema posto nel commento 9.12 non può essere risolto in modo da ottenere un'espressione generale per i coefficienti di CG. Essi possono essere calcolati iterativamente sfruttando le loro proprietà e adottando appropriate convenzioni di fase. Si vuole anche segnalare il fatto che nella letteratura i coefficienti di CG sono spesso sostituiti dai cosiddetti *simboli-3j* (le cui proprietà di simmetria sono più esplicitamente manifeste) definiti da

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \equiv \frac{(-)^{j_1-j_2+m}}{\sqrt{2j+1}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle.$$

Ci limiteremo a fornire solo alcune proprietà generali dei coefficienti di CG.

Teorema 9.13 *Il coefficiente di CG $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle$ è diverso da zero se e solo se le equazioni (9.98) e (9.101) sono soddisfatte.*

Dimostrazione: il coefficiente di CG $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle$ dà l'ampiezza di probabilità (commento 9.2) che due momenti angolari con numeri quantici (j_1, m_1) e (j_2, m_2) sono in un autostato del momento angolare totale corrispondente ai numeri quantici (j, m) . Abbiamo già mostrato nei teoremi 9.11 e 9.12 che tale ampiezza di probabilità è nulla a meno che le equazioni (9.98) e (9.101) siano soddisfatte; il teorema è così dimostrato.

Commento 9.15 Il vettore di stato (9.99) è definito a meno di un fattore di fase arbitrario. È d'uso comune scegliere il fattore di fase in modo tale che il coefficiente di CG $\langle j_1 j_1 j_2 j - j_1 | j j \rangle$ sia reale e positivo.

Teorema 9.14 *La scelta del fattore di fase che rende $\langle j_1 j_1 j_2 j - j_1 | j j \rangle$ reale e positivo implica che tutti i coefficienti di CG sono reali.*

Dimostrazione: tutti i coefficienti di CG del tipo $\langle j_1 m_1 j_2 j - m_1 | j j \rangle$ si ottengono dal coefficiente $\langle j_1 j_1 j_2 j - j_1 | j j \rangle$ applicando un numero sufficiente di volte l'operatore $(J_{1-} + J_{2+})$ al vettore $|j_1 j_1 j_2 j - j_1\rangle$, e i coefficienti del tipo $\langle j_1 m_1 j_2 m - m_1 | j m \rangle$ si ottengono applicando un numero sufficiente di volte l'operatore J_- al vettore $|j j\rangle$. Tuttavia, l'applicazione degli operatori di ascesa e di discesa, definiti nell'eq. (9.29), fa uso solo di coefficienti reali e perciò tutti i coefficienti di CG debbono essere reali.

9.4 Operatori tensoriali

Teorema 9.15 *Ad ogni rotazione finita \mathcal{R} nello spazio tridimensionale ordinario corrispondono, nello spazio di Hilbert dei momenti angolari con numero quantico semiintero, due distinti operatori di rotazione.*

Dimostrazione: possiamo certamente scrivere

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_z(2\pi)\mathcal{R}, \quad (9.104)$$

in cui è stata inserita una rotazione di 2π intorno all'asse z . A tale uguaglianza, tuttavia, non ne corrisponde una analoga per gli operatori dello spazio di Hilbert in quanto

$$D \equiv R_z(2\pi) = e^{-2\pi i J_z} \quad (9.105)$$

è l'operatore identità solo se opera sullo spazio di Hilbert dei momenti angolari con numero quantico intero:

$$D|jm\rangle = |jm\rangle \quad \text{per } j \text{ intero} \quad (9.106)$$

$$D|jm\rangle = -|jm\rangle \quad \text{per } j \text{ semiintero.} \quad (9.107)$$

Quindi, ad ogni rotazione finita \mathcal{R} nello spazio tridimensionale ordinario, corrispondono, nello spazio dei momenti angolari con numero quantico semiintero, due operatori di rotazione, R e DR .

Commento 9.16 Il fatto che gli autovettori degli operatori di momento angolare con numero quantico semiintero cambino di segno in seguito ad una rotazione di 2π (eq. (9.107)) non pone alcuna difficoltà, in quanto i vettori di stato sono definiti a meno di un arbitrario fattore di fase (commento 7.3). Per converso, un osservabile G non può variare in seguito ad una rotazione di 2π (tale rotazione deve lasciare il suo spettro invariato), cioè

$$D^\dagger G D = G, \quad (9.108a)$$

o

$$[G, D] = 0. \quad (9.108b)$$

Le equazioni (9.108) stabiliscono che solo quegli osservabili che commutano con D rappresentano una quantità fisica. Si dice che le equazioni (9.108) forniscono una *regola di superselezione*.

Commento 9.17 La regola di superselezione (9.108) deve essere soddisfatta per qualsiasi osservabile e, in particolare, per l'Hamiltoniano:

$$[H, D] = 0. \quad (9.109)$$

Da questa equazioni e dal teorema 9.21, si nota che l'operatore D è una costante del moto, per cui i momenti angolari con numeri quantici interi e seminteri evolvono, rispettivamente, in momenti angolari con numeri quantici interi e seminteri.

Definizione 9.1 Sia $\{T_q^{(k)}; q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm k\}$ un insieme di $2k + 1$ osservabili, e $R^{(k)}$ la rappresentazione standard $(2k + 1)$ -dimensionale dell'operatore di rotazione R . Si dice che i $2k + 1$ osservabili $\{T_q^{(k)}\}$ sono le $2k + 1$ componenti di un *operatore tensoriale irriducibile di rango k* (indicato con $\mathbf{T}^{(k)}$) se, in seguito ad una rotazione, essi si trasformano secondo l'equazione

$$R^\dagger T_q^{(k)} R = \sum_{q'} R_{qq'}^{(k)*} T_{q'}^{(k)}. \quad (9.110)$$

Teorema 9.16 *Il rango di di un operatore tensoriale irriducibile deve essere un numero intero.*

Dimostrazione: se, nell'eq. (9.110), si pone $R = D$ (come definito nell'eq. (9.105)), si ha

$$D^\dagger T_q^{(k)} D = \sum_{q'} D_{qq'}^{(k)*} T_{q'}^{(k)} = \pm T_q^{(k)}, \quad (9.111)$$

dove l'ultima uguaglianza deriva dal fatto che $D = \pm I$ (equazioni (9.106) e (9.107)), ed il segno è positivo se k è un intero e negativo se k è semi-intero. Ma la regola di superselezione data in precedenza (equazioni (9.108)) richiede che nell'eq. (9.111) solo il segno positivo è ammissibile. Per cui solo gli operatori tensoriali di rango intero possono rappresentare una quantità fisica.

Teorema 9.17 *Fra le componenti standard $T_q^{(k)}$ di un operatore tensoriale irriducibile di rango k e gli operatori del momento angolare totale J_z , J_+ e J_- , valgono le seguenti regole di commutazione:*

$$[J_z, T_q^{(k)}] = q T_q^{(k)} \quad (9.112)$$

e

$$[J_\pm, T_q^{(k)}] = \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} T_{q \pm 1}^{(k)}. \quad (9.113)$$

Dimostrazione: per una rotazione infinitesima intorno all'asse z , si ha

$$\begin{aligned} R_z^\dagger(\epsilon) T_q^{(k)} R_z(\epsilon) &\equiv (I + i\epsilon J_z) T_q^{(k)} (I - i\epsilon J_z) \\ &= T_q^{(k)} + i\epsilon [J_z, T_q^{(k)}], \end{aligned} \quad (9.114)$$

il cui primo membro può essere riscritto, usando l'eq. (9.110), come

$$\begin{aligned} R_z^\dagger(\epsilon) T_q^{(k)} R_z(\epsilon) &= \sum_{q'} \langle kq' | I + i\epsilon J_z | kq \rangle T_{q'}^{(k)} = \sum_{q'} (1 + i\epsilon q) \delta_{qq'} T_{q'}^{(k)} \\ &= T_q^{(k)} + i\epsilon q T_q^{(k)}. \end{aligned} \quad (9.115)$$

Il confronto delle equazioni (9.114) e (9.115) dà l'eq. (9.112). Analogamente, per una rotazione infinitesima intorno all'asse x , si ha

$$T_q^{(k)} + i\epsilon [J_x, T_q^{(k)}] = T_q^{(k)} + \frac{i\epsilon}{2} \sum_{q'} \langle kq' | J_+ + J_- | kq \rangle T_{q'}^{(k)}, \quad (9.116)$$

dove è stata usata l'eq. (9.3). Infine, per una rotazione infinitesima intorno all'asse y , si ha

$$T_q^{(k)} + i\epsilon [J_y, T_q^{(k)}] = T_q^{(k)} + \frac{\epsilon}{2} \sum_{q'} \langle kq' | J_+ - J_- | kq \rangle T_{q'}^{(k)}. \quad (9.117)$$

Dalle equazioni (9.116) e (9.117), facendo uso delle equazioni (9.3) e (9.29), e dopo alcuni passaggi algebrici, si ottiene l'eq. (9.113).

Teorema 9.18 *Gli osservabili scalari sono tensori irriducibili di rango zero.*

Dimostrazione: secondo la definizione 7.7, un osservabile S è uno scalare se è invariante per rotazioni, cioè se

$$R^\dagger S R = S. \quad (9.118a)$$

L'equazione (9.110) per un operatore tensoriale di rango zero è

$$R^\dagger T_0^{(0)} R = R_{00}^{(0)} T_0^{(0)} = T_0^{(0)}, \quad (9.118b)$$

poiché l'eq. (9.108a) richiede che $R_{00}^{(0)} = 1$. Quindi, confrontando le equazioni (9.118a) e (9.118b), si vede che gli osservabili scalari sono, appunto, operatori tensoriali irriducibili di rango zero.

Definizione 9.2 Si dice che tre osservabili A_x , A_y e A_z sono le componenti Cartesiane di un *osservabile vettoriale* \mathbf{A} se, in seguito a rotazioni, essi si trasformano come le tre componenti del vettore di posizione, \mathbf{r} . (Si ricordi che le componenti Cartesiane del vettore posizione, \mathbf{r} , si trasformano, per rotazione degli assi, secondo la relazione

$$x_j \rightarrow x'_j = \cos(\hat{x}'_j \hat{x}_k) x_k, \quad (9.119)$$

dove l'argomento del coseno rappresenta l'angolo fra il k -esimo asse prima della rotazione e il j -esimo asse dopo la rotazione e dove è sottintesa la somma sull'indice ripetuto, k .)

Teorema 9.19 *Tra le componenti Cartesiane di un operatore vettoriale \mathbf{A} e le componenti Cartesiane dell'operatore momento angolare \mathbf{J} valgono le seguenti regole di commutazione:*

$$\mathbf{J} \times \mathbf{A} = i\mathbf{A}. \quad (9.120)$$

Dimostrazione: siccome \mathbf{A} è un operatore vettoriale, le sue componenti in un sistema di riferimento ruotato rispetto ad un sistema di riferimento fisso sono legate dalla relazione (9.119), cioè

$$A_j \rightarrow A'_j = \cos(\hat{x}'_j \hat{x}_k) A_k. \quad (9.121)$$

Se ora consideriamo una rotazione infinitesima attorno all'asse z , l'eq. (9.121) dà

$$A'_x = A_x \cos \epsilon + A_y \sin \epsilon = A_x + \epsilon A_y \quad (9.122a)$$

$$A'_y = -A_x \sin \epsilon + A_y \cos \epsilon = -\epsilon A_x + A_y \quad (9.122b)$$

$$A'_z = A_z \quad (9.122c)$$

Inoltre, ogni componente ruotata può anche essere scritta (vedi eq. (9.123))

$$A'_j = A_j + i\epsilon [J_z, A_j]. \quad (9.123)$$

Dal confronto di ciascuna delle equazioni (9.122) con l'eq. (9.123) si ha

$$[J_z, A_x] = iA_y \quad (9.124a)$$

$$[J_z, A_y] = -iA_x \quad (9.124b)$$

$$[J_z, A_z] = 0. \quad (9.124c)$$

Considerando anche le rotazioni infinitesime attorno agli assi x e y , si ottengono i commutatori fra J_x e J_y con gli operatori A_j , fornendo, così, l'eq. (9.120).

Definizione 9.3 Se A_x , A_y e A_z sono le componenti Cartesiane di un operatore vettoriale \mathbf{A} , le sue *componenti sferiche* sono, per definizione,

$$A_0 \equiv A_z \quad (9.125a)$$

$$A_{-1} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(A_x - iA_y) \quad (9.125b)$$

$$A_{+1} \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}}(A_x + iA_y). \quad (9.125c)$$

Teorema 9.20 *Gli operatori vettoriali sono operatori tensoriali irriducibili di rango uno le cui componenti standard coincidono con le componenti sferiche.*

Dimostrazione: il teorema si dimostra provando che fra le componenti sferiche (9.125) e gli operatori di momento angolare J_z , J_+ e J_- , valgono le regole di commutazione (9.112) e (9.113). Usando le equazioni (9.124), si ha

$$[J_z, A_0] = [J_z, A_z] = 0, \quad (9.126a)$$

$$\begin{aligned} [J_z, A_{-1}] &= \frac{1}{\sqrt{2}}([J_z, A_x] - i[J_z, A_y]) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(iA_y - A_x) = -A_{-1} \end{aligned} \quad (9.126b)$$

$$[J_z, A_{+1}] = A_{+1}. \quad (9.126c)$$

Le equazioni (9.126) verificano l'eq. (9.112). Dopo qualche semplice passaggio algebrico, usando le equazioni (9.3), (9.120) e (9.125), si verifica anche l'eq. (9.113).

Teorema 9.21 (Wigner-Eckart) *Gli elementi di matrice nella rappresentazione standard delle componenti standard di un operatore tensoriale irriducibile di rango k possono essere fattorizzati come*

$$\langle \tau j m | T_q^{(k)} | \tau' j' m' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \tau j | \mathbf{T}^{(k)} | \tau' j' \rangle \langle j' m' k q | j m \rangle. \quad (9.127)$$

La quantità $\langle \tau j | \mathbf{T}^{(k)} | \tau' j' \rangle$ è detta elemento di matrice ridotta e non dipende da m , m' o q .

Commento 9.18 Il teorema di Wigner-Eckart è utile soprattutto per le seguenti ragioni: (i) per j e j' dati, ci sono $(2j+1)(2j'+1)$ elementi matriciali per ognuna delle $(2k+1)$ componenti di un operatore tensoriale irriducibile $\mathbf{T}^{(k)}$ e, per calcolarli è sufficiente calcolare solo uno di questi $(2j+1)(2j'+1)(2k+1)$ numeri, in quanto tutti gli altri possono essere derivati tramite l'eq. (9.127); (ii) il teorema fornisce alcune *regole di selezione* per la rappresentazione standard degli elementi di matrice delle componenti standard di un operatore tensoriale irriducibile, in quanto, per i teoremi 9.11 e 9.12, il membro destro dell'eq. (9.127) è nullo a meno che le seguenti regole di selezione siano soddisfatte:

$$m - m' = q \quad (9.128a)$$

e

$$|j' - j| \leq k \leq j' + j. \quad (9.128b)$$

Esempio 9.6 (Matrici di rotazione) Nell'eq. (9.110) della definizione 9.1, compaiono gli elementi di matrice degli operatori di rotazione nella rappresentazione standard $(2k+1)$ -dimensionale. In questo esempio li definiremo con maggiore precisione e forniremo alcuni suggerimenti su come possono essere calcolati.

Si ricordi, anzitutto, la definizione di rotazione nello spazio tridimensionale ordinario: è una trasformazione lineare che lascia invariata la lunghezza di un vettore \mathbf{x} . Quindi, se \mathbf{x}' è il vettore ruotato, si ha

$$x_j \rightarrow x'_j = \mathcal{R}_{jk} x_k, \quad (9.129)$$

con

$$x'_j x'_j = x_j x_j. \quad (9.130)$$

La condizione (9.130) implica che i coefficienti, reali, \mathcal{R}_{jk} sono gli elementi di una matrice unitaria 3×3 , cioè

$$x_j x_j = x'_j x'_j = \mathcal{R}_{jk} x_k \mathcal{R}_{jq} x_q,$$

e, siccome

$$x_j x_j = x_j x_q \delta_{jq},$$

ne consegue che

$$\mathcal{R}_{jk} \mathcal{R}_{jq} = \delta_{kq}, \quad (9.131)$$

che è la condizione di unitarietà per una matrice reale (eq. (6.45)). L'equazione (9.131) fornisce sei condizioni, cosicché dei nove coefficienti \mathcal{R}_{jk} solo tre sono indipendenti: una rotazione nello spazio tridimensionale ordinario è specificata da tre parametri. Tre possibili parametri sono gli *angoli di Eulero* definiti come gli angoli α , β e γ tali che qualsiasi rotazione \mathcal{R} possa essere decomposta nel prodotto

$$\mathcal{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathcal{R}_z(\alpha) \mathcal{R}_y(\beta) \mathcal{R}_z(\gamma), \quad (9.132)$$

e che appartengano agli intervalli

$$0 \leq \alpha < 2\pi, 0 \leq \beta \leq \pi, 0 \leq \gamma < 2\pi. \quad (9.133)$$

L'insieme delle rotazioni nello spazio ordinario tridimensionale è un gruppo: è ovviamente un semigrupp, e l'elemento neutro è quella rotazione corrispondente a $\alpha = \beta = \gamma = 0$ (cioè nessuna rotazione è effettuata) e l'elemento inverso esiste (teorema 6.25) dato che, dall'eq. (9.131), si ha

$$1 = \det(\mathcal{R}^\dagger \mathcal{R}) = \det \mathcal{R}^\dagger \det \mathcal{R} = (\det \mathcal{R})^2,$$

cioè

$$\det \mathcal{R} = \pm 1 \neq 0. \quad (9.134)$$

Un gruppo i cui elementi dipendono da un insieme di r parametri continui è detto *gruppo di Lie a r -parametri*. Il gruppo delle rotazioni appena discusso è anche detto gruppo di Lie $O(3)$ (la O sta per *ortogonale*). L'insieme delle rotazioni con $\det \mathcal{R} = +1$ è un sottogruppo di $O(3)$ ed è detto gruppo di Lie $SO(3)$ delle rotazioni proprie (S sta per *speciale*). L'insieme delle rotazioni con $\det \mathcal{R} = -1$ non è un gruppo. Tuttavia, qualsiasi matrice di rotazione in tale gruppo può essere generata moltiplicando una matrice di rotazione propria appartenente a $SO(3)$ per la matrice di inversione $-I$ (dove I è la matrice identità). Per cui è sufficiente studiare il gruppo delle rotazioni proprie $SO(3)$. Gli elementi di $SO(3)$ possono essere connessi in modo continuo alla rotazione nulla, una proprietà che ci permette di scrivere una matrice infinitesima come

$$\mathcal{R}(\epsilon) = I + i\epsilon_j \left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \epsilon_j} \right)_{\epsilon=0} = I - i\epsilon_j J_j,$$

dove i J_j sono i generatori della rotazione. Una rotazione finita viene allora ottenuta per esponenziazione: siccome

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\epsilon)\mathcal{R}(\epsilon') &= (I - i\epsilon_j J_j)(I - i\epsilon'_j J_j) = I - i(\epsilon_j + \epsilon'_j)J_j \\ &= \mathcal{R}(\epsilon + \epsilon'), \end{aligned}$$

qualsiasi rotazione finita può essere riscritta

$$\mathcal{R}(\Omega) = \mathcal{R}^k(\Omega/k)$$

e, nel limite di k infinito, si ha

$$\mathcal{R}(\Omega) = \lim_{k \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i\Omega_j J_j}{k} \right)^k = e^{-i\Omega_j J_j} = e^{-i\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{J}}. \quad (9.135)$$

Per rappresentazione n -dimensionale di un gruppo si intende un gruppo di matrici regolari $n \times n$ omomorfo al gruppo dato. (Il gruppo $SO(3)$ è già formato da matrici.) Fino ad ora abbiamo indicato con \mathcal{R} una rotazione nello spazio ordinario tridimensionale e con R il corrispondente operatore nello spazio di Hilbert. Per ottenere gli elementi di matrice di un operatore di rotazione nella rappresentazione standard si adoperano le equazioni (9.132) e (9.135) scrivendo

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}. \quad (9.136)$$

Nella rappresentazione standard, gli elementi di matrice dell'operatore definito dall'eq. (9.136) sono $\langle \tau' j' m' | R(\alpha, \beta, \gamma) | \tau j m \rangle$. Essi non dipendono da τ (teorema 9.8 e commento 9.4) e sono diagonali in j perché l'operatore (9.136) commuta con J^2 . Quindi, prendendo in considerazione l'eq. (9.10),

$$\langle \tau' j' m' | R(\alpha, \beta, \gamma) | \tau j m \rangle = \delta_{\tau' \tau} \delta_{j' j} R_{m' m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma), \quad (9.137)$$

dove

$$R_{m' m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\alpha m'} e^{-i\gamma m} r_{m' m}^{(j)}(\beta), \quad (9.138)$$

e

$$r_{m' m}^{(j)}(\beta) \equiv \langle j m' | e^{-i\beta J_y} | j m \rangle. \quad (9.139)$$

Notiamo, quindi, che la costruzione delle matrici di rotazione richiede il calcolo degli elementi di matrice dati nell'eq. (9.139). Per esempio, facendo uso delle equazioni (9.3) (scrivendo, perciò, J_y in termini degli operatori di ascesa e di discesa) e (9.22), si vede chiaramente che (in accordo con l'eq. (9.108a))

$$R_{00}^{(0)}(\alpha, \beta, \gamma) = 1, \quad (9.140)$$

come è stato già verificato nel teorema 9.18.

Capitolo 10

Sistemi a Molti Corpi

In meccanica classica, particelle identiche mantengono la loro individualità perché ciascuna può essere seguita, nel tempo, lungo la traiettoria ottenuta, da date condizioni iniziali, risolvendo le equazioni di Hamilton. In meccanica quantistica particelle identiche sono, invece, indistinguibili, una circostanza che, come vedremo, introduce la cosiddetta degenerazione di scambio, la quale dà luogo a difficoltà nella specificazione del vettore di stato di un sistema di particelle identiche. Il problema è meglio formulato introducendo gli operatori di permutazione. (In questo capitolo ogniqualvolta ci si riferisce ad un sistema di n particelle, è sottinteso, a meno che non sia specificato diversamente, che esse siano identiche.)

10.1 Degenerazione di scambio

Definizione 10.1 L'operatore di permutazione P_α è l'operatore che, nello spazio di Hilbert di un sistema di n particelle, effettua l' α -esima permutazione (fra le $n!$ possibili) delle n particelle.

Commento 10.1 Ogni operatore di permutazione può essere scritto come prodotto di operatori di scambio P_{jk} , che sono operatori di permutazione che scambiano la j -esima con la k -esima particella. Quindi, nel seguito, a meno che non sia specificato diversamente, considereremo solo operatori di scambio.

Commento 10.2 Lo spazio di Hilbert $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}(n)$ di un sistema di n particelle identiche è il prodotto tensoriale n -uplo per sé stesso (vedi definizione 6.29) dello spazio di Hilbert $\mathcal{H}(1)$ associato alla singola particella:

$$\mathcal{H}(n) = \mathcal{H}(1) \otimes \dots \otimes \mathcal{H}(1).$$

In \mathcal{H} , il vettore che rappresenta lo stato nel quale n_1 particelle sono nello stato $|\Psi_1\rangle$, n_2 sono nello stato $|\Psi_2\rangle$, ..., n_m sono nello stato $|\Psi_m\rangle$ (con $n_1 + n_2 +$

$\dots + n_m = n$, e $m \leq n$), può essere uno qualunque dei $n!/(n_1!n_2!\dots n_m!)$ vettori linearmente indipendenti

$$P_\alpha[|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle] \quad (10.1)$$

che si ottengono effettuando, nel prodotto $[|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle]$, tutte le possibili permutazioni delle coordinate delle particelle (che sono indicate in parentesi per ogni stato $|\Psi_j\rangle$). Tale circostanza è detta *degenerazione di scambio* e dà luogo alla seguente difficoltà: un vettore di stato $|\Psi\rangle$ del sistema è una combinazione lineare dei vettori (10.1), cioè

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} P_{\alpha}[|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle], \quad (10.2)$$

per cui le ampiezze di probabilità del tipo $\langle \tau | \Psi \rangle$ (dove τ è una collezione di numeri quantici che specificano i valori degli osservabili di un SCOC) dipenderebbero, in generale, dai coefficienti c_{α} scelti, e questa è una situazione certamente indesiderabile.

Teorema 10.1 *Gli operatori di scambio sono unitari, Hermitiani (con autovalori ± 1) e, in generale, non commutano tra loro.*

Dimostrazione: P_{jk} è isomentrico:

$$\| |P_{jk} | \dots j \dots k \dots \rangle \| = \| | \dots k \dots j \dots \rangle \| = \| | \dots j \dots k \dots \rangle \|.$$

Dato che

$$P_{jk}^2 = I, \quad (10.3)$$

P_{jk} è inverso di sé stesso,

$$P_{jk}^{-1} = P_{jk}, \quad (10.4)$$

e, quindi, è unitario, cioè

$$P_{jk}^{\dagger} = P_{jk}^{-1}. \quad (10.5)$$

Le equazioni (10.4) e (10.5) implicano che P_{jk} è Hermitiano:

$$P_{jk}^{\dagger} = P_{jk} \quad (10.6)$$

e, dall' eq. (10.3), i suoi autovalori sono $\epsilon_{jk} = \pm 1$. Infine,

$$P_{jk} P_{kr} | \dots j \dots k \dots r \dots \rangle = | \dots k \dots r \dots j \dots \rangle,$$

ma

$$P_{kr} P_{jk} | \dots j \dots k \dots r \dots \rangle = | \dots r \dots j \dots k \dots \rangle,$$

che mostra che, in generale,

$$[P_{jk}, P_{rs}] \neq 0. \quad (10.7)$$

Commento 10.3 L'indistinguibilità tra particelle identiche impone che qualsiasi osservabile G definito sullo spazio di Hilbert di un sistema di n particelle identiche sia invariante per permutazione di qualsiasi coppia di particelle, cioè (definizione 6.25)

$$P_{jk}^\dagger G P_{jk} = G,$$

o

$$[G, P_{jk}] = 0. \quad (10.8)$$

Questa è una *regola di superselezione* (commento 9.16) che deve essere valida per qualsiasi osservabile e , in particolare, per l'Hamiltoniano:

$$[H, P_{jk}] = 0. \quad (10.9)$$

Commento 10.4 Dato che gli operatori di scambio, in generale, non commutano tra loro, non esiste un insieme completo di autovettori comuni a qualunque coppia di essi (teorema 6.58). È possibile, tuttavia, che esistano alcuni autovettori che siano comuni a due operatori di scambio e, anzi, mostreremo che esistono vettori di stato che sono autovettori comuni a tutti gli operatori di scambio e, per l'eq. (10.8), a tutti gli osservabili di un SCOC.

Teorema 10.2 *Se un vettore di stato di un sistema di n particelle identiche è autovettore comune a tutti gli operatori di scambio, allora esso appartiene al medesimo autovalore per ciascun operatore di scambio.*

Dimostrazione: si assuma che

$$P_{jk}|\Psi\rangle = \epsilon_{jk}|\Psi\rangle,$$

e che

$$P_{rs}|\Psi\rangle = \epsilon_{rs}|\Psi\rangle.$$

È facile verificare l'identità

$$P_{jk} = P_{sk}P_{rj}P_{rs}P_{sk}P_{rj},$$

per cui

$$\epsilon_{jk} = \epsilon_{rs}\epsilon_{sk}^2\epsilon_{rj}^2 = \epsilon_{rs}.$$

Perciò, se un vettore di stato di un sistema di n particelle identiche è autovettore comune a tutti gli operatori di scambio, allora esso deve essere simmetrico o antisimmetrico rispetto allo scambio di qualsiasi coppia di particelle. Si dice, che esso deve essere o *total-simmetrico* o *total-antisimmetrico* per permutazione delle particelle.

Teorema 10.3 *Fra le $n!(n_1!n_2!\dots n_m!)^{-1}$ combinazioni lineari linearmente indipendenti (10.2), ne esiste una (e una sola) che è total-simmetrica e (al più) una che è total-antisimmetrica per permutazione delle particelle.*

Dimostrazione: si definiscano innanzitutto gli operatori

$$S \equiv \frac{1}{n!} \sum_{\alpha} P_{\alpha} \quad (10.10)$$

e

$$A \equiv \frac{1}{n!} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} P_{\alpha} \quad (10.11)$$

dove $\epsilon_{\alpha} = +1$ o $\epsilon_{\alpha} = -1$ a seconda che, rispetto alla permutazione fondamentale, $(1, 2, 3, \dots, n)$, l' α -esima permutazione è pari o dispari. Dato che

$$P_{jk} P_{\alpha} = P_{\beta}$$

e

$$\epsilon_{\beta} = -\epsilon_{\alpha},$$

si ha

$$P_{jk} S = S = S P_{jk} \quad (10.12)$$

e

$$P_{jk} A = -A = A P_{jk}. \quad (10.13)$$

Per il commento 10.1, ciò implica che

$$P_{\alpha} S = S = S P_{\alpha} \quad (10.14)$$

e

$$P_{\alpha} A = \epsilon_{\alpha} A = A P_{\alpha}. \quad (10.15)$$

Il vettore

$$|\Psi_S\rangle = S[|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle] \quad (10.16)$$

è chiaramente total-simmetrico perché esso è autovettore di ogni P_{jk} con autovalore $+1$:

$$P_{jk} S[|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle] = S[|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle],$$

in cui si è usata la prima delle uguaglianze (10.12). Analogamente, il vettore

$$|\Psi_A\rangle = A[|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle] \quad (10.17)$$

è, per $m = n$, total-antisimmetrico poiché esso è autovettore di ogni P_{jk} con autovalore -1 :

$$P_{jk} A[|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle] = -A[|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle], \quad (10.18)$$

in cui è stata usata la prima delle uguaglianze (10.13). (Il vettore (10.17) è il vettore nullo se $m < n$: è questo il caso, come si può facilmente verificare dall'eq. (10.18), in cui le particelle j e k sono in uno stato descritto dallo stesso vettore di singola particella.) Infine, i vettori (10.16) e (10.17) sono unici perché, se fosse possibile costruire, dagli $n!(n_1!n_2! \dots n_m!)^{-1}$ vettori

(10.1) o da una qualsiasi combinazione lineare (10.2), due altri vettori, uno total-simmetrico e l'altro total-antisimmetrico, si avrebbe, usando la seconda delle uguaglianze (10.14) e (10.15),

$$\begin{aligned}
|\Phi_S\rangle &= S \sum_{\alpha} c_{\alpha} P_{\alpha} [|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle] \\
&= \sum_{\alpha} c_{\alpha} S P_{\alpha} [|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle] \\
&= \sum_{\alpha} c_{\alpha} S [|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle] \\
&= |\Psi_S\rangle \sum_{\alpha} c_{\alpha} = C' |\Psi_S\rangle,
\end{aligned}$$

che è proporzionale a $|\Psi_S\rangle$, e (qui poniamo $m = n$)

$$\begin{aligned}
|\Phi_A\rangle &= A \sum_{\alpha} c_{\alpha} P_{\alpha} [|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_n(n)\rangle] \\
&= \sum_{\alpha} c_{\alpha} A P_{\alpha} [|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_n(n)\rangle] \\
&= \sum_{\alpha} c_{\alpha} \epsilon_{\alpha} A [|\Psi_1(1)\rangle \dots |\Psi_n(n)\rangle] \\
&= |\Psi_A\rangle \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha} = C'' |\Psi_A\rangle,
\end{aligned}$$

che è proporzionale a $|\Psi_A\rangle$.

Commento 10.5 È facile verificare che, se $\{|\Psi_j\rangle\}$ è un insieme di stati normalizzati di singola particella, gli stati total-simmetrico e total-antisimmetrico normalizzati del sistema composto, sono

$$|\Psi_S\rangle = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_m!}{n!}} \sum_{\alpha} P_{\alpha} [|\Psi_1(1)\rangle |\Psi_2(2)\rangle \dots |\Psi_m(n)\rangle] \quad (10.19)$$

e

$$|\Psi_A\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} P_{\alpha} [|\Psi_1(1)\rangle |\Psi_2(2)\rangle \dots |\Psi_n(n)\rangle]. \quad (10.20)$$

Nell'eq. (10.20), avendo posto $m = n$, si ha $n_1 = n_2 = \dots = n_n = 1$.

Teorema 10.4 Lo spazio di Hilbert \mathcal{H} di un sistema di n particelle identiche è uno qualsiasi degli spazi \mathcal{H}_S , \mathcal{H}_A o \mathcal{H}_R , dove \mathcal{H}_S contiene i vettori total-simmetrici, \mathcal{H}_A contiene i vettori total-antisimmetrici, e \mathcal{H}_R contiene tutti i vettori di \mathcal{H} che sono ortogonali ai vettori di \mathcal{H}_S e \mathcal{H}_A .

Dimostrazione: innanzitutto si noti che

$$S^2 = \frac{1}{n!} \sum_{\alpha} P_{\alpha} S = \frac{S}{n!} \sum_{\alpha} 1 = S, \quad (10.21a)$$

e, analogamente,

$$A^2 = A, \quad (10.21b)$$

dove abbiamo usato le equazioni (10.14)–(10.15) ed il fatto che il numero di possibili permutazioni è $n!$. Se ora definiamo (I è l'operatore identità nello spazio di Hilbert \mathcal{H} del sistema di n particelle)

$$R \equiv I - S - A, \quad (10.22)$$

cosicché ogni vettore in \mathcal{H} possa scriversi

$$|\Psi\rangle = I|\Psi\rangle = S|\Psi\rangle + A|\Psi\rangle + R|\Psi\rangle = |\Psi_S\rangle + |\Psi_A\rangle + |\Psi_R\rangle,$$

si ha

$$AS \propto \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} P_{\alpha} S = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} S = S \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} = 0, \quad (10.23a)$$

e, analogamente,

$$SA = 0, \quad (10.23b)$$

dove si è usato il fatto che metà degli ϵ_{α} è pari ad 1 e metà è pari a -1 . Dalle equazioni (10.21)–(10.23) si dimostra anche che

$$RS = SR = RA = AR = 0, \quad (10.24)$$

(e $R^2 = R$).

Vediamo quindi che gli elementi di matrice di qualsiasi osservabile G fra due vettori appartenenti ciascuno a distinti spazi di Hilbert, \mathcal{H}_j e \mathcal{H}_k , con $j \neq k$ ($j, k = S, A, R$), sono nulli:

$$\langle \Psi_S | G | \Phi_A \rangle = \langle \Psi | SGA | \Phi \rangle = \langle \Psi | GSA | \Phi \rangle = 0, \quad (10.25a)$$

$$\langle \Psi_S | G | \Phi_R \rangle = \langle \Psi | SGR | \Phi \rangle = \langle \Psi | GSR | \Phi \rangle = 0, \quad (10.25b)$$

$$\langle \Psi_R | G | \Phi_A \rangle = \langle \Psi | RGA | \Phi \rangle = \langle \Psi | GRA | \Phi \rangle = 0, \quad (10.25c)$$

dove si sono usate le equazioni (10.8), (10.23) e (10.24). In particolare,

$$\langle \Psi_S | \Phi_A \rangle = \langle \Psi_S | \Phi_R \rangle = \langle \Psi_A | \Phi_R \rangle = 0, \quad (10.26)$$

per cui gli spazi \mathcal{H}_S , \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_R sono mutuamente ortogonali. Inoltre, dall'eq. (10.9) e per il teorema 7.21, tutti gli operatori di scambio sono costanti del moto e, quindi, se il vettore di stato di un sistema di n particelle appartiene a \mathcal{H}_S o \mathcal{H}_A (o \mathcal{H}_R), esso rimane, nel tempo, in \mathcal{H}_S o \mathcal{H}_A (o \mathcal{H}_R). In conclusione, lo spazio di Hilbert di un sistema di n particelle identiche non è l'intero spazio di Hilbert \mathcal{H} definito nel commento 10.1 ma solo uno dei settori \mathcal{H}_S , \mathcal{H}_A , o \mathcal{H}_R in cui \mathcal{H} è stato ripartito.

Commento 10.6 La regola di superselezione (10.8) restringe lo spazio di Hilbert di un sistema fisico: per avere significato fisico, il vettore di stato del sistema deve appartenere ad uno solo dei settori \mathcal{H}_S , \mathcal{H}_A , o \mathcal{H}_R . Quale di questi settori

è effettivamente associato ad un dato sistema fisico di molte particelle identiche, dipende dalla natura delle particelle stesse e non dal loro numero. È un fatto finora mai contraddetto dall'esperienza che solo i settori \mathcal{H}_S e \mathcal{H}_A si realizzano in Natura e, in particolare, sistemi di molte particelle a spin intero (*bosoni*) sono descritti da vettori appartenenti a \mathcal{H}_S , e sistemi di molte particelle a spin semintero (*fermioni*) sono descritti da vettori appartenenti a \mathcal{H}_A . Nel teorema 10.3 abbiamo visto che, una volta che gli stati $|\Psi_j\rangle$ di singola particella sono stati specificati, i vettori $|\Psi_S\rangle$ o $|\Psi_A\rangle$ sono unici (se tutti gli stati $|\Psi_j\rangle$ sono normalizzati, i vettori normalizzati $|\Psi_S\rangle$ e $|\Psi_A\rangle$ sono dati dalle equazioni (10.19) e (10.20)): la degenerazione di scambio (commento 10.2) è così rimossa.

Teorema 10.5 (Principio di esclusione di Pauli) *Due fermioni non possono essere nello stesso stato di singola particella.*

Dimostrazione: se due stati di singola particella coincidono, scambiando le corrispondenti particelle, lo stato del sistema di n particelle, $|\Psi_S\rangle$ o $|\Psi_A\rangle$, rimane, ovviamente, invariato. Per un sistema composto da fermioni, tuttavia, otteniamo anche $-|\Psi_A\rangle$ (eq. (10.20)). Quindi, se in un sistema composto da fermioni due stati di singola particella coincidono, allora $|\Psi_A\rangle = -|\Psi_A\rangle$, cioè $|\Psi_A\rangle = \mathbf{0}$.

Commento 10.7 Per l'eq. (10.20), e dalla definizione di determinante di una matrice quadrata, si vede che un vettore di stato di molti fermioni non interagenti può essere scritto nella forma (chiamata *determinante di Slater*),

$$|\Psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} |\Psi_1(1)\rangle & |\Psi_2(1)\rangle & \dots & |\Psi_n(1)\rangle \\ |\Psi_1(2)\rangle & |\Psi_2(2)\rangle & \dots & |\Psi_n(2)\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\Psi_1(n)\rangle & |\Psi_2(n)\rangle & \dots & |\Psi_n(n)\rangle \end{vmatrix}, \quad (10.27)$$

dove il fattore di normalizzazione è stato riscritto in accordo con il fatto che, per il teorema 10.5, i numeri n_j che appaiono nell'eq. (10.20) possono assumere solo i valori 0 o 1.

10.2 Seconda quantizzazione

Commento 10.8 Nella rappresentazione delle coordinate, la funzione d'onda di un sistema di n particelle (non necessariamente identiche),

$$\Psi = \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; t), \quad (10.28)$$

è una funzione che soddisfa l'equazione di Schrödinger per n particelle

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; t) \\ = H(1, 2, \dots, n) \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; t). \end{aligned} \quad (10.29)$$

La quantità $\Psi^* \Psi d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_n$ rappresenta la probabilità di trovare la particella 1 nell'elemento di volume d^3x_1 , la particella 2 nell'elemento di volume d^3x_2 , ..., e la particella n nell'elemento di volume d^3x_n (commento 7.25). Il numero totale di particelle rimane costante nel tempo: il formalismo che abbiamo fin qui sviluppato, quindi, è limitato alla descrizione di sistemi fisici in cui il numero totale di particelle rimane costante. Se, inoltre, le n particelle sono identiche, rimane la complicazione di dover simmetrizzare o antisimmetrizzare la funzione d'onda, a seconda che le particelle siano bosoni o fermioni.

Nel resto di questo capitolo svilupperemo una rappresentazione che i) è adatta a descrivere sistemi in cui il numero di particelle è variabile, e ii) è strutturata in modo tale che le proprietà di simmetria dei vettori di stato di un sistema di molte particelle identiche siano automaticamente soddisfatte. Tale rappresentazione è detta *rappresentazione numero*, e può essere usata al posto della rappresentazione delle coordinate se il numero delle particelle del sistema si conserva, con il vantaggio, come vedremo, di non richiedere una esplicita simmetrizzazione o antisimmetrizzazione del vettore di stato del sistema. Invece, nel caso in cui non vi è conservazione del numero di particelle, la rappresentazione numero è una scelta obbligata.

Il formalismo che stiamo per presentare è noto con il nome (in verità non molto appropriato) di *seconda quantizzazione*, per la seguente ragione. Fino ad ora abbiamo presentato la formulazione quantomeccanica per descrivere la materia, cioè le particelle. Perciò, dobbiamo ancora presentare la formulazione quantomeccanica per descrivere l'altro componente, oltre la materia, di cui, secondo la meccanica classica, l'Universo è composto, e cioè la radiazione, descritta da un campo. Per sviluppare una descrizione quantomeccanica di un campo classico, procediamo per analogia con la procedura seguita per la descrizione quantomeccanica di una particella classica. La procedura di quantizzazione di una singola particella classica, ricordiamo, può essere così riassunta: si promuovono le coordinate canoniche classiche e i corrispondenti momenti coniugati (che soddisfano le equazioni del moto di Hamilton) ad operatori definiti su un appropriato spazio di Hilbert; quindi, si sostituiscono le parentesi di Poisson classiche con i commutatori quantomeccanici divisi per $i\hbar$, ottenendo così l'equazione del moto quantomeccanica di Heisenberg (si confrontino le equazioni (3.11) e (7.61)) per gli operatori; questi obbediscono all'algebra imposta loro dalle relazioni di commutazione canoniche (RCC) specificate dalle equazioni (7.92). La procedura di quantizzazione di un campo classico segue, per analogia, il percorso appena descritto per la quantizzazione di una particella classica: le coordinate canoniche del campo classico ed i corrispondenti momenti coniugati sono promossi a operatori definiti su un appropriato spazio di Hilbert, e si impone ad essi un'algebra definita da opportune (e ancora da specificare) relazioni di commutazione (si veda il teorema 10.7). Una caratteristica della procedura di quantizzazione è la seguente: nel quantizzare una particella classica in un potenziale $V(\mathbf{x})$, le equazioni del moto di Heisenberg ottenute sono, come abbiamo visto (commento

7.12), equivalenti all'equazione di Schrödinger

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x) = \left[-\frac{1}{2\mu}\Delta + V(\mathbf{x}) \right] \Psi(x), \quad (10.30)$$

che è essa stessa un'equazione di campo, cioè l'equazione per il campo di materia $\Psi(\mathbf{x}, t) \equiv \Psi(x)$ (per la notazione si consulti il capitolo 4). In conclusione, la procedura di quantizzazione di una particella classica ne fornisce una descrizione in termini di campo. D'altra parte, quando si procede alla quantizzazione di un campo classico, l'Hamiltoniano che si ottiene è, come vedremo, formalmente equivalente all'Hamiltoniano di un sistema di molte particelle, identiche e non interagenti: in conclusione, la procedura di quantizzazione di un campo classico ne fornisce una descrizione in termini di molte particelle. Allora, dato un sistema di particelle identiche, eventualmente variabili in numero, sorge spontanea la domanda se sia possibile fornirne una descrizione in termini di un'equazione di campo. La risposta è, come avremo modo di vedere, affermativa: partendo dall'equazione quantomeccanica di una particella classica, cioè dall'equazione di Schrödinger (10.30), e considerandola formalmente come l'equazione di un campo classico (a dispetto del fatto che essa sia già stata ottenuta applicando una volta la procedura di quantizzazione), vi si applica la procedura di quantizzazione (apparentemente per la seconda volta!), ottenendo così quella descrizione in termini di molte particelle che si ottiene abitualmente quando si quantizza qualsiasi campo.

Commento 10.9 Da quanto detto nel commento 10.8, è chiaro che quella di Heisenberg è la descrizione naturale da usare nella procedura di quantizzazione di un campo classico (commento 7.16). Dato che nel resto del capitolo si adotterà quasi esclusivamente la descrizione di Heisenberg, si ometterà il sottoscritto H che si è adoperato in precedenza (commento 7.12 e teorema 7.16) e si userà, invece, il soprascritto S per indicare la descrizione di Schrödinger.

Teorema 10.6 *Le RCC (equazioni (7.92)) sono valide anche nella descrizione di Heisenberg purché gli operatori nei commutatori si riferiscano a tempi uguali.*

Dimostrazione: le equazioni (7.92) si riferiscono alle componenti Cartesiane degli operatori di posizione e quantità di moto:

$$[Q_j^S, Q_k^S] = [P_j^S, P_k^S] = 0 \quad (10.31a)$$

e

$$[Q_j^S, P_k^S] = i\delta_{jk}. \quad (10.31b)$$

Nella descrizione di Heisenberg si ha

$$\begin{aligned} [Q_j(t), P_k(t')] &= e^{-iHt} Q_j^S e^{iHt} e^{-iHt'} P_k^S e^{iHt'} - e^{-iHt'} P_k^S e^{iHt'} e^{-iHt} Q_j^S e^{iHt} \\ &= e^{-iHt} [Q_j^S, P_k^S] e^{iHt} = e^{-iHt} i\delta_{jk} e^{iHt} = i\delta_{jk}, \end{aligned}$$

dove la seconda uguaglianza è valida solo se $t' = t$. (Come esempio per il caso $t' \neq t$ si vedano le equazioni (8.69) e (8.70)). Possiamo calcolare in modo analogo i due commutatori rimanenti e ottenere così le RCC nella rappresentazione di Heisenberg:

$$[Q_j(t), Q_k(t)] = [P_j(t), P_k(t)] \quad (10.32a)$$

e

$$[Q_j(t), P_k(t)] = i\delta_{jk}. \quad (10.32b)$$

Commento 10.10 Abbiamo già discusso la trattazione canonica di un campo classico $\phi(\mathbf{x}, t) \equiv \phi(x)$ e abbiamo definito il suo momento coniugato $\pi(\mathbf{x}, t) \equiv \pi(x)$ e l'Hamiltoniano classico (teorema 4.2). Per fornire una descrizione quantomeccanica del campo dobbiamo promuovere le variabili canoniche $\phi(x)$ e $\pi(x)$ ad operatori definiti su un appropriato spazio di Hilbert. Indicheremo i risultanti operatori di campo ed i corrispondenti momenti coniugati con le stesse lettere, $\phi(x)$ e $\pi(x)$, usate per indicare il campo classico e il suo momento coniugato (invece di usare le corrispondenti lettere maiuscole): non può sorgere alcuna confusione in quanto non necessiteremo di fare nuovamente riferimento alle quantità classiche che assumeremo, in seguito, essere state sostituite dai corrispondenti operatori quantomeccanici, le cui RCC devono essere ancora specificate.

Teorema 10.7 *Le RCC (a tempi uguali) fra le coordinate generalizzate e i corrispondenti momenti coniugati, $\phi(x)$ e $\pi(x)$, sono*

$$[\phi(\mathbf{x}, t), \phi(\mathbf{x}', t)] = [\pi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{x}', t)] = 0, \quad (10.33a)$$

$$[\phi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{x}', t)] = i\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (10.33b)$$

Dimostrazione: procedendo come nel capitolo 4, se dividiamo lo spazio tridimensionale ordinario in un numero infinito, ma discreto, di elementi di volume δV_j , in ognuno dei quali definiamo il campo medio come nell'eq. (4.2), otteniamo un numero discreto di gradi di libertà. La quantizzazione procede promuovendo le coordinate generalizzate mediate e i loro momenti coniugati, definiti dalle equazioni (4.2) e (4.13), ad operatori, e imponendo a essi l'algebra specificata dalle RCC (a tempi uguali),

$$[\phi_j(t), \phi_k(t)] = [p_j(t), p_k(t)] = [\pi_j(t), \pi_k(t)] = 0, \quad (10.34a)$$

$$[\phi_j(t), p_k(t)] = [\phi_j(t), \pi_k(t)\delta V_k] = i\delta_{jk}, \quad (10.34b)$$

dove abbiamo usato l'eq. (4.13). Nel limite continuo, definito in modo tale che i) il j -esimo elemento di volume si riduce al punto \mathbf{x} e, ii) $\phi_j(t)$ e $\pi_j(t)$ assumono i valori $\phi(\mathbf{x}, t)$ e $\pi(\mathbf{x}, t)$, l'eq. (10.34a) diventa l'eq. (10.33a). Per poter determinare il limite continuo dell'eq. (10.34b), si noti che l'identità

$$\sum_k \delta V_k \frac{\delta_{jk}}{\delta V_k} f_k \equiv f_j$$

nel limite continuo diventa

$$\int d^3x' g(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\mathbf{x}') \equiv f(\mathbf{x}),$$

che è la definizione della funzione delta di Dirac. Ciò giustifica l'identificazione

$$\lim_{\delta V_k \rightarrow 0} \delta_{jk} / \delta V_k = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (10.35)$$

Pertanto l'eq. (10.33b) è il limite continuo dell'eq. (10.34b).

Commento 10.11 Siamo ora pronti a quantizzare il campo di Schrödinger che è stato trattato classicamente nell'esempio 4.1. Si ricordi che, benché il campo di Schrödinger sia complesso, una delle due componenti è in effetti il momento coniugato dell'altra (equazioni (10.18) e (10.19)). La quantizzazione del campo si ottiene promuovendo le variabili classiche di campo ad operatori (non Hermitiani) e imponendo ad essi (nella descrizione di Heisenberg) le RCC (a tempi uguali), così come prescritto dalle equazioni (10.33),

$$[\Psi(\mathbf{x}, t), \Psi(\mathbf{x}', t)] = [\Psi^\dagger(\mathbf{x}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t)] = 0, \quad (10.36a)$$

$$[\Psi(\mathbf{x}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t)] = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (10.36b)$$

dove si è usata l'eq. (4.18) e dove il campo classico $\Psi^*(\mathbf{x}, t)$ è stato sostituito dall'operatore di campo $\Psi^\dagger(\mathbf{x}, t)$. L'Hamiltoniano quantomeccanico è (si confronti con l'eq. (4.21)),

$$H = \int d^3x \Psi^\dagger(x) h(\mathbf{x}) \Psi(x), \quad (10.37)$$

dove $h(\mathbf{x})$ è l'Hamiltoniano di singola particella che appare nell'equazione di Schrödinger (eq. (10.30)). L'equazione del moto per gli operatori di campo sono ottenute dall'equazione di Heisenberg:

$$i\dot{\Psi}(\mathbf{x}, t) = [\Psi(\mathbf{x}, t), H] \quad (10.38a)$$

e

$$i\dot{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) = [\Psi^\dagger(\mathbf{x}, t), H]. \quad (10.38b)$$

Commento 10.12 Sia chiaro che stiamo costruendo una teoria di quantizzazione dei campi in analogia con quella di quantizzazione dei sistemi di particelle che è stata già sviluppata nei precedenti capitoli. È perciò importante verificare la coerenza interna della nuova teoria. Una prima verifica è fornita dal successivo teorema, da cui si vede che le equazioni (10.36)–(10.38) sono coerenti con un'equazione per l'operatore di campo che è formalmente equivalente all'eq. (10.30), cioè all'equazione per il corrispondente campo “classico”.

Teorema 10.8 *Le equazioni (10.36)–(10.38) per gli operatori di campo sono coerenti con un'equazione formalmente equivalente all'eq. (10.30).*

Dimostrazione: dalle equazioni (10.38a) e (10.37) si ha

$$\begin{aligned} i\dot{\Psi}(x) &= [\Psi(\mathbf{x}, t), H] \\ &= \left[\Psi(\mathbf{x}, t), \int d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) h(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}', t) \right]. \end{aligned} \quad (10.39)$$

Dato che l'Hamiltoniano H è una costante del moto, possiamo considerarlo a qualunque istante e, in tal caso, scegliamo lo stesso istante t che appare nel primo argomento del commutatore. Sviluppando il commutatore e facendo uso dell'identità

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C], \quad (10.40)$$

l'eq. (10.39) diventa

$$\begin{aligned} i\dot{\Psi}(x) &= \int d^3x' [\Psi(\mathbf{x}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) h(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}', t)] \\ &= \int d^3x' [\Psi(\mathbf{x}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t)] h(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}', t) \\ &\quad + \int d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) [\Psi(\mathbf{x}, t), h(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}', t)]. \end{aligned} \quad (10.41)$$

Moltiplicando a sinistra per $h(\mathbf{x}')$ l'eq. (10.36a), otteniamo il commutatore che appare nel secondo integrale del secondo membro dell'eq. (10.41), e che è, pertanto, nullo. Sostituendo l'eq. (10.36b) nel primo integrale del secondo membro dell'eq. (10.41), si ha

$$i\dot{\Psi}(x) = \int d^3x' \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') h(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}', t),$$

cioè

$$i\dot{\Psi}(x) = h(\mathbf{x}) \Psi(x), \quad (10.42)$$

che è formalmente simile all'eq. (10.30).

Teorema 10.9 *L'Hamiltoniano H definito nell'eq. (10.37), con gli operatori di campo che seguono l'algebra specificata dalle equazioni (10.36), è formalmente equivalente all'Hamiltoniano di un sistema di molti bosoni identici ed indipendenti, le cui energie permesse sono date dagli autovalori dell'Hamiltoniano di singola particella $h(\mathbf{x})$.*

Dimostrazione: la soluzione più generale dell'eq. (10.42) è

$$\Psi(x) = \sum_j a_j u_j(\mathbf{x}) e^{-iE_j t}, \quad (10.43)$$

dove gli a_j sono operatori costanti (che, cioè, non dipendono né dalle coordinate di posizione né dal tempo), gli E_j sono gli autovalori dell'operatore

Hamiltoniano di singola particella $h(\mathbf{x})$, e gli $u_j(\mathbf{x})$ sono le corrispondenti autofunzioni normalizzate:

$$h(\mathbf{x})u_j(\mathbf{x}) = E_j u_j(\mathbf{x}) \quad (10.44)$$

e

$$\langle u_k | u_j \rangle \equiv \int d^3x u_k^*(\mathbf{x})u_j(\mathbf{x}) = \delta_{kj}. \quad (10.45)$$

Sostituendo l'eq. (10.43) e la sua aggiunta nell'Hamiltoniano (10.37), si ha

$$H = \int d^3x \Psi^\dagger(x)h(\mathbf{x})\Psi(x) = \sum_{jk} a_k^\dagger a_j e^{iE_k t} e^{-iE_j t} E_j \langle u_k | u_j \rangle,$$

dove si è usata l'eq. (10.44). Adoperando l'eq. (10.45) si ha infine

$$H = \sum_j E_j a_j^\dagger a_j \equiv \sum_j E_j N_j \equiv \sum_j h_j. \quad (10.46)$$

Per determinare l'algebra degli operatori a_j , invertiamo dapprima l'eq. (10.43), moltiplicando ambo i membri per $u_k^*(\mathbf{x})$, integrando su tutto il volume e facendo uso dell'eq. (10.45), ottenendo

$$a_k = e^{iE_k t} \int d^3x u_k^*(\mathbf{x})\Psi(x), \quad (10.47)$$

e quindi calcoliamo i commutatori voluti. Per esempio,

$$\begin{aligned} [a_k, a_j^\dagger] &= \left[e^{iE_k t} \int d^3x u_k^*(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x}, t), e^{-iE_j t} \int d^3x' u_j(\mathbf{x}')\Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) \right], \end{aligned}$$

dove, dato che gli a_j sono operatori costanti, entrambi gli argomenti del commutatore possono essere scelti allo stesso istante t . Si ha, quindi,

$$\begin{aligned} [a_k, a_j^\dagger] &= e^{iE_k t} e^{-iE_j t} \int d^3x \int d^3x' u_k^*(\mathbf{x})u_j(\mathbf{x}')[\Psi(\mathbf{x}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t)] \\ &= e^{iE_k t} e^{-iE_j t} \int d^3x u_k^*(\mathbf{x})u_j(\mathbf{x}) = \delta_{kj}, \end{aligned}$$

dove si sono adoperate le equazioni (10.36b) e (10.45). I rimanenti commutatori possono essere calcolati in modo analogo e perciò l'algebra degli operatori a_j è specificata dai seguenti commutatori:

$$[a_j, a_k] = [a_j^\dagger, a_k^\dagger] = 0, \quad (10.48a)$$

$$[a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}. \quad (10.48b)$$

Per risolvere l'equazione agli autovalori per H , definito nell'eq. (10.46), si noti innanzitutto che

$$\begin{aligned} [N_j, N_k] &= [a_j^\dagger a_j, a_k^\dagger a_k] = a_j^\dagger [a_j, a_k^\dagger] a_k + a_k^\dagger [a_j^\dagger, a_k] a_j \\ &= \delta_{jk} (a_j^\dagger a_k - a_k^\dagger a_j) = 0, \end{aligned}$$

dove abbiamo usato le equazioni (10.40) e (10.48). Quindi,

$$[h_j, h_k] = E_j E_k [N_j, N_k] = 0, \quad (10.49a)$$

e

$$[H, h_k] = \sum_j [h_j, h_k] = 0. \quad (10.49b)$$

Le equazioni (10.49) e il teorema 6.59 stabiliscono che per risolvere il problema agli autovalori per H , è sufficiente risolvere il problema agli autovalori per uno qualsiasi degli h_j , cioè il problema agli autovalori per

$$N_j = a_j^\dagger a_j, \quad (10.50)$$

con

$$[a_j, a_j^\dagger] = 1. \quad (10.51)$$

Confrontando le equazioni (10.50) e (10.51), rispettivamente, con le equazioni (8.42) e (8.32), ci accorgiamo immediatamente che il problema agli autovalori per N_j è stato già risolto nel teorema 8.22. Gli autovalori di N_j sono tutti i numeri interi non negativi,

$$n_j = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (10.52)$$

per cui gli autovalori di h_j sono

$$\epsilon_j = n_j E_j, \quad (10.53)$$

e i corrispondenti autovettori normalizzati sono

$$|n_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_j!}} (a_j^\dagger)^{n_j} |0\rangle_j. \quad (10.54)$$

Dato che E_j è l'autovalore dell'energia corrispondente all'autofunzione $u_j(\mathbf{x})$ dell'Hamiltoniano di singola particella $h(\mathbf{x})$, vediamo che $|n_j\rangle$ rappresenta lo stato di n_j particelle indipendenti, tutte nello stato $u_j(\mathbf{x})$ e tutte aventi energia E_j . In particolare, $|0\rangle_j$ rappresenta lo stato in cui non ci sono particelle nello stato di singola particella $u_j(\mathbf{x})$. Dato che non c'è nessun limite al numero n_j , tali particelle devono essere necessariamente bosoni. Analogamente, H , definito dall'eq. (10.46), rappresenta l'Hamiltoniano di un sistema composto da n bosoni, n_1 dei quali sono nello stato $u_1(\mathbf{x})$ con energia E_1 , n_2 sono nello stato $u_2(\mathbf{x})$ con energia E_2 , n_3 sono

nello stato $u_3(\mathbf{x})$ con energia E_3 , e così via. Il corrispondente autovettore normalizzato è il prodotto tensoriale degli stati (10.54), cioè

$$|n_1 n_2 n_3 \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! n_3! \dots}} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} (a_3^\dagger)^{n_3} \dots |0\rangle, \quad (10.55)$$

dove

$$|0\rangle \equiv |0\rangle_1 |0\rangle_2 |0\rangle_3 \dots \quad (10.56)$$

rappresenta lo stato in cui non ci sono particelle ed è detto lo stato di *vuoto*. Il teorema è così dimostrato.

Commento 10.13 Gli operatori a_j e a_j^\dagger sono detti, rispettivamente, operatori di *annichilazione* e di *creazione*, perché la loro azione sullo stato $|\dots n_j \dots\rangle$ consiste nel sottrarre o aggiungere una particella nello stato di singola particella $u_j(\mathbf{x})$ (equazioni (8.43) e (8.44)):

$$a_j |\dots n_j \dots\rangle = \sqrt{n_j} |\dots n_j - 1 \dots\rangle \quad (10.57)$$

e

$$a_j^\dagger |\dots n_j \dots\rangle = \sqrt{n_j + 1} |\dots n_j + 1 \dots\rangle. \quad (10.58)$$

Vediamo quindi, come promesso nel commento 10.8, che la rappresentazione appena costruita (detta *rappresentazione numero*) è adatta alla descrizione di sistemi in cui il numero di particelle è variabile.

Commento 10.14 Dato che lo scambio di qualsiasi coppia di particelle nello stato al primo membro dell'eq. (10.55) corrisponde allo scambio dei corrispondenti operatori di creazione al secondo membro, e dato che, per la seconda delle uguaglianze (10.48a), gli operatori di creazione commutano fra di loro, ne segue che lo stato (10.55) è total-simmetrico per permutazione delle particelle, così come deve essere per un sistema di molti bosoni identici. Vediamo perciò che, come promesso nel commento 10.8, la rappresentazione numero tiene automaticamente conto delle proprietà di simmetria che deve possedere lo stato di un sistema di bosoni identici, per cui non è necessario effettuare alcuna operazione di simmetrizzazione.

Commento 10.15 Nel commento 10.8 abbiamo detto che la rappresentazione numero può essere usata liberamente al posto della rappresentazione delle coordinate (ma non è vero il viceversa se il numero di particelle è variabile). Nei teoremi 10.10 e 10.11 dimostreremo l'equivalenza formale delle due rappresentazioni. Prima costruiremo la funzione d'onda (nello spazio di Hilbert della teoria quantistica dei campi) che rappresenta, al tempo t , un sistema di n particelle localizzate nei punti $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$, e poi dimostreremo che tale funzione d'onda soddisfa l'equazione di Schrödinger.

Teorema 10.10 Sia $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; t\rangle$ lo stato che descrive n bosoni localizzati, al tempo t , nei punti $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$. Si ha

$$|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; t\rangle = \Psi^\dagger(\mathbf{x}_1, t) \Psi^\dagger(\mathbf{x}_2, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_n, t) |0\rangle, \quad (10.59)$$

dove $|0\rangle$ è lo stato di vuoto (10.56).

Dimostrazione: si noti innanzitutto che, dall'eq. (10.44),

$$\begin{aligned} \int d^3x \Psi^\dagger(x) \Psi(x) &= \sum_{jk} \int d^3x u_k^*(\mathbf{x}) u_j(\mathbf{x}) a_k^\dagger a_j e^{iE_k t} e^{-iE_j t} \\ &= \sum_j a_j^\dagger a_j = \sum_j N_j, \end{aligned}$$

dove si sono usate le equazioni (10.45) e (10.46). L'operatore numero totale è, quindi,

$$N = \int d^3x \Psi^\dagger(x) \Psi(x). \quad (10.60)$$

Guidati dall'eq. (10.60), è naturale definire l'operatore numero locale

$$N_{\tau_j} \equiv \int_{\tau_j} d^3x \Psi^\dagger(x) \Psi(x), \quad (10.61)$$

dove l'elemento di volume τ_j è scelto in modo da contenere solo la particella j . Si noti anche che

$$\begin{aligned} [N_{\tau_j}, \Psi^\dagger(\mathbf{x}_k, t)] &= \left[\int_{\tau_j} d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) \Psi(\mathbf{x}', t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}_k, t) \right] \\ &= \int_{\tau_j} d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) [\Psi(\mathbf{x}', t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}_k, t)] \\ &= \int_{\tau_j} d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_k), \end{aligned}$$

dove si sono usate l'identità

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (10.62)$$

e l'eq. (10.36); quindi, si ha

$$[N_{\tau_j}, \Psi^\dagger(\mathbf{x}_k, t)] = \begin{cases} \Psi^\dagger(\mathbf{x}_k, t) & \text{se } \mathbf{x}_k \in \tau_j \\ 0 & \text{se } \mathbf{x}_k \notin \tau_j \end{cases}. \quad (10.63)$$

Inoltre si ha (equazioni (8.46)–(8.48))

$$N_{\tau_j} |0\rangle = \mathbf{0}. \quad (10.64)$$

Se ora si applica l'operatore numero locale (10.61) al secondo membro dell'eq. (10.59), si ottiene

$$\begin{aligned} N_{\tau_j} \Psi^\dagger(\mathbf{x}_1, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_j, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_n, t) |0\rangle &= N_{\tau_j} \Psi^\dagger(\mathbf{x}_1, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_n, t) \Psi^\dagger(\mathbf{x}_j, t) |0\rangle \\ &= \Psi^\dagger(\mathbf{x}_1, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_n, t) N_{\tau_j} \Psi^\dagger(\mathbf{x}_j, t) |0\rangle \\ &= \Psi^\dagger(\mathbf{x}_1, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_n, t) [N_{\tau_j}, \Psi^\dagger(\mathbf{x}_j, t)] |0\rangle \\ &= \Psi^\dagger(\mathbf{x}_1, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_n, t) \Psi^\dagger(\mathbf{x}_j, t) |0\rangle, \end{aligned} \quad (10.65)$$

dove sono state usate la seconda delle equazioni (10.36a) e le proprietà (10.63) e (10.64) dell'operatore numero locale (10.61). Infine, usando nuovamente la seconda delle equazioni (10.36a), dall'eq. (10.65) si ottiene

$$\begin{aligned} N_{\tau_j} \Psi^\dagger(\mathbf{x}_1, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_j, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_n, t) |0\rangle \\ = \Psi^\dagger(\mathbf{x}_1, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_j, t) \dots \Psi^\dagger(\mathbf{x}_n, t) |0\rangle, \end{aligned} \quad (10.66)$$

che mostra che il secondo membro dell'eq. (10.59) è autovettore dell'operatore numero locale N_{τ_j} con autovalore 1. L'elemento di volume τ_j può essere scelto piccolo a piacere, per cui il secondo membro dell'eq. (10.59) rappresenta effettivamente uno stato in cui la j -esima particella è localizzata attorno al punto \mathbf{x}_j . Inoltre, tale stato è total-simmetrico per permutazione delle particelle, dato che gli operatori di creazione Ψ^\dagger commutano tra loro (eq. (10.36a)).

Teorema 10.11 *L'ampiezza di probabilità*

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots; t | n_1 n_2 \dots \rangle = \Psi_{n_1 n_2 \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots; t) \quad (10.67)$$

di trovare n bosoni (n_j dei quali sono nello stato di singola particella $u_j(\mathbf{x})$) nei punti $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$, soddisfa l'equazione di Schrödinger.

Dimostrazione: dall'eq. (10.59) si ha

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots; t | &= i \langle 0 | \dot{\Psi}(\mathbf{x}_n, t) \dots \Psi(\mathbf{x}_1, t) \\ &\quad + \dots + i \langle 0 | \Psi(\mathbf{x}_n, t) \dots \dot{\Psi}(\mathbf{x}_1, t) \\ &= [\langle 0 | h(\mathbf{x}_n) \Psi(\mathbf{x}_n, t) \dots \Psi(\mathbf{x}_1, t) \\ &\quad + \dots + \langle 0 | \Psi(\mathbf{x}_n, t) \dots h(\mathbf{x}_1) \Psi(\mathbf{x}_1, t)] \\ &= \sum_{j=1}^n h(\mathbf{x}_j) \langle 0 | \Psi(\mathbf{x}_n, t) \dots \Psi(\mathbf{x}_1, t) = \sum_{j=1}^n h(\mathbf{x}_j) \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots; t | \end{aligned}$$

dove è stata usata l'eq. (10.42). Quindi

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots; t | n_1 n_2 \dots \rangle = \sum_{j=1}^n h(\mathbf{x}_j) \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots; t | n_1 n_2 \dots \rangle,$$

o anche,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{n_1 n_2 \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots; t) = \sum_{j=1}^n h(\mathbf{x}_j) \Psi_{n_1 n_2 \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots; t),$$

che è l'equazione di Schrödinger per un sistema di n bosoni indipendenti.

Teorema 10.12 *Affinché lo stato (10.59) rappresenti n fermioni localizzati, al tempo t , nei punti $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$, è necessario che gli operatori di campo soddisfino le seguenti regole di anticommutazione*

$$\{\Psi(\mathbf{x}, t), \Psi(\mathbf{x}', t)\} = \{\Psi^\dagger(\mathbf{x}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t)\} = 0, \quad (10.68a)$$

$$\{\Psi(\mathbf{x}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t)\} = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (10.68b)$$

dove l'anticommutatore fra due operatori A e B è, per definizione,

$$\{A, B\} \equiv AB + BA. \quad (10.69)$$

Dimostrazione: il vettore di stato (10.59) è total-antisimmetrico per permutazione delle particelle se gli operatori di creazione Ψ^\dagger (e conseguentemente gli operatori di annichilazione Ψ) anticommutano l'uno con l'altro (equazioni (10.68a)). Inoltre, il vettore di stato (10.59) descrive n fermioni localizzati nei punti $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$, se esso è autovettore (corrispondente all'autovalore 1) dell'operatore numero locale definito nell'eq. (10.61). Come abbiamo visto nel teorema 10.10, ciò è vero se la proprietà (10.63) è soddisfatta. D'altra parte, facendo uso dell'identità

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B, \quad (10.70)$$

si ha

$$\begin{aligned} [N_{\tau_j}, \Psi^\dagger(\mathbf{x}_k, t)] &= \left[\int_{\tau_j} d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) \Psi(\mathbf{x}', t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}_k, t) \right] \\ &= \int_{\tau_j} d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) \{\Psi(\mathbf{x}', t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}_k, t)\} \\ &= \int_{\tau_j} d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}), \end{aligned}$$

in cui l'ultima uguaglianza si verifica solo se vale l'eq. (10.68b). L'eq. (10.63) è, quindi, verificata, così come sono verificate tutte le considerazioni che ci hanno portato alle equazioni (10.65) e (10.66). (Non dobbiamo preoccuparci dei cambiamenti di segno quando, nella seconda uguaglianza dell'eq. (10.65), si trasferisce l'operatore fermionico di campo $\Psi^\dagger(\mathbf{x}_j, t)$ a destra, direttamente applicato allo stato di vuoto, in quanto nell'eq. (10.66) esso è trasferito nuovamente nella sua posizione precedente.)

Commento 10.16 Il teorema 10.12 garantisce che, imponendo agli operatori di campo l'algebra specificata dalle regole di anticommutazione (10.68), il vettore di stato di n fermioni sia antisimmetrico rispetto allo scambio di due particelle. Ciò facendo, tuttavia, abbiamo alterato le relazioni di commutazioni fondamentali. Una verifica di coerenza interna della teoria (commento 10.12), quindi, è qui quanto mai necessaria. Nel successivo teorema mostreremo che l'equazione di Heisenberg per operatori di campo che obbediscono all'algebra imposta dalle equazioni (10.68), è coerente con la corrispondente equazione "classica" del campo.

Teorema 10.13 *Le equazioni (10.37), (10.38) e (10.68) sono coerenti con un'equazione che è formalmente equivalente all'eq. (10.30). (Si confronti la dimostrazione seguente con quella del teorema 10.8.)*

Dimostrazione: dalle equazioni (10.38a) e (10.37) si ha

$$\begin{aligned} i\dot{\Psi}(x) &= [\Psi(\mathbf{x}, t), H] \\ &= \left[\Psi(\mathbf{x}, t), \int d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) h(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}', t) \right]. \end{aligned} \quad (10.71)$$

Dato che l'Hamiltoniano H è una costante del moto, possiamo considerarlo a un qualunque istante e, in tal caso, scegliamo il medesimo istante t che appare nel primo argomento del commutatore. Sviluppando il commutatore e facendo uso dell'identità

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\}, \quad (10.72)$$

l'eq. (10.71) diventa

$$\begin{aligned} i\dot{\Psi}(x) &= \int d^3x' [\Psi(\mathbf{x}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) h(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}', t)] \\ &= \int d^3x' \{ \Psi(\mathbf{x}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) \} h(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}', t) \\ &\quad - \int d^3x' \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) \{ \Psi(\mathbf{x}, t), h(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}', t) \}. \end{aligned} \quad (10.73)$$

Moltiplicando a sinistra per $h(\mathbf{x}')$ l'eq. (10.68a), otteniamo l'anticommutatore che appare nel secondo integrale al secondo membro dell'eq. (10.73), che perciò è nullo. Sostituendo l'eq. (10.68b) nel primo integrale del secondo membro dell'eq. (10.73), si ha

$$i\dot{\Psi}(x) = \int d^3x' \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') h(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}', t),$$

cioè

$$i\dot{\Psi}(x) = h(\mathbf{x}) \Psi(x), \quad (10.74)$$

che è formalmente simile all'eq. (10.30).

Teorema 10.14 *L'Hamiltoniano H definito nell'eq. (10.37), con gli operatori di campo che seguono l'algebra specificata dalle equazioni (10.68), è formalmente equivalente all'Hamiltoniano di un sistema di n fermioni identici ed indipendenti, le cui energie permesse sono gli autovalori dell'Hamiltoniano di singola particella $h(\mathbf{x})$. (Si confronti la dimostrazione seguente con quella del teorema 10.9.)*

Dimostrazione: la soluzione più generale dell'equazione (10.74) è

$$\Psi(x) = \sum_j b_j u_j(\mathbf{x}) e^{-iE_j t}, \quad (10.75)$$

dove i b_j sono operatori costanti (distinti dagli a_j dell'eq. (10.43) in quanto seguono un'algebra differente). Gli E_j sono gli autovalori dell'Hamiltoniano di singola particella $h(\mathbf{x})$, e gli $u_j(\mathbf{x})$ sono le corrispondenti autofunzioni

normalizzate (vedi equazioni (10.44) e (10.45)). Sostituendo l'eq. (10.75) e la sua aggiunta nell'Hamiltoniano (10.37) e usando le equazioni (10.44) e (10.45), si ottiene

$$H = \sum_j E_j b_j^\dagger b_j \equiv \sum_j E_j N_j \equiv \sum_j h_j. \quad (10.76)$$

Per determinare l'algebra degli operatori b_j , invertiamo dapprima l'eq. (10.75) moltiplicando ambo i membri per $u_k^*(\mathbf{x})$, integrando su tutto il volume e facendo uso dell'eq. (10.45), ottenendo

$$b_k = e^{iE_k t} \int d^3 x u_k^*(\mathbf{x}) \Psi(x), \quad (10.77)$$

e quindi calcoliamo gli anticommutatori voluti. Per esempio,

$$\begin{aligned} \{b_k, b_j^\dagger\} &= \left\{ e^{iE_k t} \int d^3 x u_k^*(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}, t), e^{-iE_j t} \int d^3 x' u_j(\mathbf{x}') \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) \right\}, \end{aligned}$$

dove, dato che i b_j sono operatori costanti, entrambi gli argomenti dell'anticommutatore possono essere scelti allo stesso istante t . Si ha, quindi,

$$\begin{aligned} \{b_k, b_j^\dagger\} &= e^{iE_k t} e^{-iE_j t} \int d^3 x \int d^3 x' u_k^*(\mathbf{x}) u_j(\mathbf{x}') \{ \Psi(\mathbf{x}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{x}', t) \} \\ &= e^{iE_k t} e^{-iE_j t} \int d^3 x u_k^*(\mathbf{x}) u_j(\mathbf{x}) = \delta_{kj}, \end{aligned}$$

dove si sono adoperate le equazioni (10.68b) e (10.45). I rimanenti anticommutatori possono essere calcolati in modo analogo e perciò l'algebra degli operatori b_j è specificata dai seguenti anticommutatori:

$$\{b_j, b_k\} = \{b_j^\dagger, b_k^\dagger\} = 0, \quad (10.78a)$$

$$\{b_j, b_k^\dagger\} = \delta_{jk}. \quad (10.78b)$$

Per risolvere l'equazione agli autovalori per H , definito nell'eq. (10.76), si noti innanzitutto che

$$\begin{aligned} [N_j, N_k] &= [b_j^\dagger b_j, b_k^\dagger b_k] = b_j^\dagger [b_j, b_k^\dagger b_k] + [b_j^\dagger, b_k^\dagger b_k] b_j \\ &= b_j^\dagger \{b_j, b_k^\dagger\} b_k - b_k^\dagger \{b_j^\dagger, b_k\} b_j = \delta_{jk} (b_j^\dagger b_k - b_k^\dagger b_j) = 0, \end{aligned}$$

dove abbiamo usato le equazioni (10.62), (10.72) e (10.78). Quindi,

$$[h_j, h_k] = E_j E_k [N_j, N_k] = 0, \quad (10.79a)$$

e

$$[H, h_k] = \sum_j [h_j, h_k] = 0. \quad (10.79b)$$

Le equazioni (10.79) e il teorema 6.59 stabiliscono che per risolvere il problema agli autovalori per H è sufficiente risolvere il problema agli autovalori per uno qualsiasi degli h_j , cioè il problema agli autovalori per

$$N_j = b_j^\dagger b_j, \quad (10.80)$$

con

$$\{b_j, b_j\} = \{b_j^\dagger, b_j^\dagger\} = 0 \quad (10.81a)$$

e

$$\{b_j, b_j^\dagger\} = 1. \quad (10.81b)$$

L'equazione agli autovalori per N_j è

$$N_j |n_j\rangle = n_j |n_j\rangle, \quad (10.82)$$

e, per risolverla, si noti che

$$\begin{aligned} N_j^2 &= b_j^\dagger b_j b_j^\dagger b_j = b_j^\dagger b_j (1 - b_j b_j^\dagger) = b_j^\dagger b_j - b_j^\dagger b_j b_j b_j^\dagger \\ &= b_j^\dagger b_j - b_j^\dagger \frac{\{b_j, b_j\}}{2} b_j^\dagger = b_j^\dagger b_j = N_j, \end{aligned} \quad (10.83)$$

dove si sono usate le equazioni (10.79) e (10.80). Per cui si ha

$$N_j^2 |n_j\rangle = n_j^2 |n_j\rangle = N_j |n_j\rangle = n_j |n_j\rangle,$$

e quindi

$$n_j = 0, 1. \quad (10.84)$$

Gli autovalori di h_j sono dati dall'eq. (10.53) (con la condizione (10.84)) e i corrispondenti autovettori normalizzati sono

$$|n_j\rangle = (b_j^\dagger)^{n_j} |0\rangle_j. \quad (10.85)$$

Secondo il risultato (10.84), non ci può essere più di una particella nello stesso stato di singola particella $u_j(\mathbf{x})$: le particelle che stiamo considerando devono essere, quindi, fermioni. L'Hamiltoniano H , definito dall'eq. (10.76), rappresenta l'Hamiltoniano di un sistema di n fermioni, n_1 dei quali sono nello stato $u_1(\mathbf{x})$ con energia E_1 , n_2 sono nello stato $u_2(\mathbf{x})$ con energia E_2 , n_3 sono nello stato $u_3(\mathbf{x})$ con energia E_3 e così via. Il corrispondente autovettore normalizzato è il prodotto tensoriale degli stati (10.85), cioè

$$|n_1 n_2 n_3 \dots\rangle = (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} (b_3^\dagger)^{n_3} \dots |0\rangle, \quad (10.86)$$

dove $|0\rangle$ è lo stato di vuoto (eq. 10.56). Il teorema è così dimostrato.

Commento 10.17 Abbiamo visto nei teoremi 10.9 e 10.14 che l'operatore numero di un sistema a molti corpi è

$$N = \sum_j c_j^\dagger c_j, \quad (10.87)$$

e l'Hamiltoniano è

$$H = \sum_j E_j c_j^\dagger c_j, \quad (10.88)$$

in cui i c_j^\dagger (c_j) creano (annichilano) particelle negli (dagli) stati che sono auto-stati dell'Hamiltoniano di singola particella $h(\mathbf{x})$ che appare nell'eq. (10.44).

È possibile scrivere qualsiasi operatore nella rappresentazione numero. In particolare, si può dimostrare che qualsiasi operatore a una particella, T , può essere scritto nella rappresentazione numero come

$$T = \sum_{jk} \langle j|t|k \rangle c_j^\dagger c_k, \quad (10.89)$$

dove

$$\langle j|t|k \rangle = \int d^3x u_j^*(\mathbf{x}) t(\mathbf{x}) u_k(\mathbf{x}). \quad (10.90)$$

Si noti che gli operatori N ed H precedenti sono del tipo (10.89) e sono diagonali nella rappresentazione delle funzioni $u_j(\mathbf{x})$, che sono le autofunzioni dell'Hamiltoniano di particella singola $h(\mathbf{x})$.

Analogamente, la rappresentazione numero di qualsiasi operatore a due particelle, V , è

$$V = \frac{1}{2} \sum_{jk} \sum_{qp} \langle jk|v|qp \rangle c_j^\dagger c_k^\dagger c_p c_q, \quad (10.91)$$

dove, assumendo che $v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = v(\mathbf{x}', \mathbf{x})$,

$$\langle jk|v|qp \rangle = \int d^3x d^3x' u_j^*(\mathbf{x}) u_k^*(\mathbf{x}') v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') u_q(\mathbf{x}) u_p(\mathbf{x}'). \quad (10.92)$$

Capitolo 11

Il Campo Elettromagnetico

Nel capitolo 5 si è visto che le equazioni di Maxwell per i potenziali scalare e vettore si riducono, nella gauge di Lorentz (eq.(5.19)), alle equazioni (5.21) e (5.22) e, nella gauge di Coulomb (eq.(5.20)), alle equazioni (5.23) e (5.24). Nel commento 5.3 si è anche notato che la gauge di Lorentz è manifestamente covariante, come si può facilmente verificare se si osserva che $A_\mu \equiv (\mathbf{A}, i\phi)$ e $j_\mu \equiv (\mathbf{j}, ic\rho)$ (si veda il commento A.7 per la notazione) sono le componenti di due tetra-vettori: il tetra-potenziale e la tetra-corrente. La gauge di Coulomb, invece, non è manifestamente covariante, come si può vedere dalle equazioni (5.20), (5.23) e (5.24). Tuttavia, per ragioni che saranno chiare in seguito, (si veda il commento 11.2), la gauge di Coulomb è quella che adotteremo per quantizzare il campo elettromagnetico. In questo capitolo, quindi, quantizzeremo il campo \mathbf{A} , che obbedisce l'equazione (5.27) e la cui descrizione canonica è stata presentata nel capitolo 5 (teoremi 5.9 e 5.10).

Per convenienza riscriviamo le equazioni di interesse per la coordinata canonica del campo, A_j , la densità di Lagrangiana, λ , il momento coniugato π_j , la densità di Hamiltoniano ω , e l'Hamiltoniano totale H :

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}} = 0 \quad (11.1)$$

$$\lambda = \frac{1}{8\pi c^2} \left[\dot{\mathbf{A}}^2 - c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] \quad (11.2)$$

$$= \frac{1}{8\pi c^2} \left[\dot{A}_k \dot{A}_k - c^2 (\partial_k A_l)(\partial_k A_l) + c^2 (\partial_k A_l)(\partial_l A_k) \right] \quad (11.3)$$

$$\pi_j \equiv \frac{\partial \lambda}{\partial \dot{A}_j} = -\frac{1}{4\pi c^2} \dot{A}_j = -\frac{1}{4\pi c} E_j \quad (11.4)$$

$$\begin{aligned} \omega &= \boldsymbol{\pi} \cdot \dot{\mathbf{A}} - \lambda = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{A}_j \dot{A}_j - \frac{1}{8\pi c^2} \dot{A}_j \dot{A}_j + \frac{1}{8\pi} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \\ &= \frac{1}{8\pi c^2} [\dot{A}_j \dot{A}_j + c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2] = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2). \end{aligned} \quad (11.5)$$

$$H = \frac{1}{8\pi} \int d^3x (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) \quad (11.6)$$

$$= \frac{1}{8\pi c^2} \int d^3x [\dot{A}_j \dot{A}_j + c^2 (\partial_j A_k)(\partial_j A_k)]. \quad (11.7)$$

11.1 Fotoni

La quantizzazione viene effettuata promuovendo A_j e π_j ad operatori Hermitiani e imponendo ad essi le relazioni di commutazione canoniche (RCC) a tempi uguali (teorema 10.7). Ci troviamo di fronte, tuttavia, ad un campo con vincoli: non solo \mathbf{A} obbedisce all'equazione di campo (11.1), ma vi si impone anche il vincolo dato dalla scelta della gauge di Coulomb,

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (11.8)$$

Questo fatto è la causa dell'insorgere, come si vedrà, di alcune difficoltà. In particolare, sebbene si possano imporre le relazioni

$$[A_j(\mathbf{x}, t), A_k(\mathbf{x}', t)] = [\pi_j(\mathbf{x}, t), \pi_k(\mathbf{x}', t)] = 0, \quad (11.9a)$$

tuttavia, si deve necessariamente avere

$$[A_j(\mathbf{x}, t), \pi_k(\mathbf{x}', t)] \neq i\delta_{jk}\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (11.9b)$$

Teorema 11.1 *Le RCC ottenute dall'eq. (11.9b) sostituendo il segno di uguaglianza con quello di disuguaglianza sono incompatibili con la legge di Coulomb,*

$$\nabla \cdot \mathbf{E} \equiv \partial_k E_k = 0. \quad (11.10)$$

Dimostrazione: usando l'eq. (11.4), si riscrive l'eq. (11.9b),

$$[A_j(\mathbf{x}, t), E_k(\mathbf{x}', t)] = -4\pi c i \delta_{jk} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (11.11)$$

Dall'eq. (11.11), derivando rispetto a \mathbf{x}' e sommando su k , il primo membro risulta nullo a causa dell'eq. (11.10); per il secondo membro, però, il risultato non è nullo: infatti, usando la rappresentazione della delta di Dirac, si ha

$$\begin{aligned} \partial'_k \delta_{jk} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= \partial'_k \delta_{jk} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q q_j e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \end{aligned}$$

che è, in generale, diverso da zero (l'apice sui simboli di derivazione ricorda che la derivata è effettuata rispetto alla coordinata \mathbf{x}').

Definizione 11.1 *La delta di Dirac trasversa è, per definizione,*

$$\delta_{jk}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \equiv \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \left(\delta_{jk} - \frac{q_j q_k}{q^2} \right). \quad (11.12)$$

Teorema 11.2 Per un qualunque vettore $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ a divergenza nulla si ha

$$\int d^3x' f_k(\mathbf{x}') \delta_{jk}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = f_j(\mathbf{x}). \quad (11.13)$$

Dimostrazione: Usando l'eq. (11.12) e la rappresentazione della delta di Dirac, si ha

$$\begin{aligned} \int d^3x' f_k(\mathbf{x}') \delta_{jk}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= \int d^3x' f_k(\mathbf{x}') \delta_{jk} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ &\quad - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \int d^3x' f_k(\mathbf{x}') \frac{q_j q_k}{q^2} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}. \end{aligned} \quad (11.14)$$

L'ultimo termine al secondo membro dell'eq. (11.14) si può riscrivere

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \int d^3x' f_k(\mathbf{x}') \frac{i q_j}{q^2} \partial'_k e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \\ &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{q_j}{q^2} \int d^3x' f_k(\mathbf{x}') \partial'_k e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \end{aligned}$$

e, integrato per parti, dà un termine di superficie (che è nullo) e un termine che è la divergenza di un vettore a divergenza nulla (anch'esso nullo). Pertanto l'eq. (11.14) diventa

$$\int d^3x' f_k(\mathbf{x}') \delta_{jk}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \int d^3x' f_k(\mathbf{x}') \delta_{jk} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'),$$

da cui segue l'eq. (11.13).

Commento 11.1 Si vede che, per il teorema 11.1, vale l'eq. (11.9b), e siccome

$$\partial'_k \delta_{jk}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \equiv -\frac{i}{(2\pi)^3} \int d^3q q_k e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \left(\delta_{jk} - \frac{q_j q_k}{q^2} \right) = 0,$$

siamo indotti a imporre le seguenti RCC (a tempi uguali)

$$[A_j(\mathbf{x}, t), A_k(\mathbf{x}', t)] = [\pi_j(\mathbf{x}, t), \pi_k(\mathbf{x}', t)] = 0, \quad (11.15a)$$

$$[A_j(\mathbf{x}, t), \pi_k(\mathbf{x}', t)] = i \delta_{jk}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (11.15b)$$

Però, con questa scelta, le RCC fondamentali sono state alterate, e risulta necessario un controllo di coerenza interna della teoria (si veda il commento 10.16). Nel teorema seguente si mostra che le equazioni di Heisenberg per gli operatori di campo con l'algebra specificata dalle equazioni (11.15) sono compatibili con le equazioni di campo classiche (11.1).

Teorema 11.3 Le RCC modificate (eq. (11.15)) sono compatibili con le equazioni del moto di Heisenberg per gli operatori di campo A_j e π_j ,

$$i\dot{A}_j = [A_j, H], \quad (11.16a)$$

$$i\dot{\pi}_j = [\pi_j, H]. \quad (11.16b)$$

Dimostrazione: sostituiamo nel commutatore al secondo membro delle equazioni (11.16) l'Hamiltoniano totale, H , dato dall'eq. (11.7), e calcolato allo stesso istante in cui sono considerati A_j e π_j (ciò è permesso poiché, essendo una costante del moto, H ha ad ogni istante lo stesso valore). Pertanto si ha

$$[A_j(\mathbf{x}, t), H] = \frac{1}{8\pi c^2} \int d^3 x' [A_j(\mathbf{x}, t), \dot{A}_k(\mathbf{x}', t) \dot{A}_k(\mathbf{x}', t)] \\ + \frac{1}{8\pi c^2} \int d^3 x' [A_j(\mathbf{x}, t), \partial'_k A_l(\mathbf{x}', t) \partial'_k A_l(\mathbf{x}', t)]. \quad (11.17)$$

Il secondo termine al secondo membro dell'eq. (11.17) è zero, come è facile vedere calcolando la derivata del primo commutatore che appare nell'eq. (11.15a). Pertanto, facendo uso dell'eq. (11.4), si ha

$$[A_j(\mathbf{x}, t), H] = \frac{1}{2} \int d^3 x' \{ \dot{A}_k(\mathbf{x}', t) [A_j(\mathbf{x}, t), \pi_k(\mathbf{x}', t)] \\ + [A_j(\mathbf{x}, t), \pi_k(\mathbf{x}', t)] \dot{A}_k(\mathbf{x}', t) \}$$

o, utilizzando le RCC modificate (eq. (11.15b)),

$$[A_j(\mathbf{x}, t), H] = i \int d^3 x' \dot{A}_k(\mathbf{x}', t) \delta_{jk}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (11.18)$$

Come si vede dalle eq. (11.4) e (11.10), possiamo applicare il teorema (11.2) al secondo membro dell'eq. (11.18), e ottenere così l'eq. (11.16a).

Analogamente, si ottiene

$$[\pi_j(\mathbf{x}, t), H] = \frac{1}{8\pi c^2} \int d^3 x' [\pi_j(\mathbf{x}, t), \dot{A}_k(\mathbf{x}', t) \dot{A}_k(\mathbf{x}', t)] \\ + \frac{1}{8\pi} \int d^3 x' [\pi_j(\mathbf{x}, t), \partial'_k A_l(\mathbf{x}', t) \partial'_k A_l(\mathbf{x}', t)]. \quad (11.19)$$

Il commutatore presente nel secondo termine al secondo membro dell' eq. (11.19), vale

$$[\pi_j(\mathbf{x}, t), \partial'_k A_l(\mathbf{x}', t) \partial'_k A_l(\mathbf{x}', t)] \\ = -2i \partial'_k A_l(\mathbf{x}', t) \partial'_k \delta_{lj}^{\text{tr}}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}), \quad (11.20)$$

in cui si è fatto uso della RCC modificata data dall'eq. (11.15b). Inserendo l'eq. (11.20) e osservando che il primo termine al secondo membro dell'eq. (11.19) è zero (come si vede facilmente dalle equazioni (11.4) e (11.15a) calcolando la derivata del primo commutatore dell'eq. (11.15a)), l'eq. (11.19) diventa

$$[\pi_j(\mathbf{x}, t), H] = -\frac{i}{4\pi} \int d^3 x' \partial'_k A_l(\mathbf{x}', t) \partial'_k \delta_{lj}^{\text{tr}}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}),$$

che, integrata per parti e ignorando il termine di superficie, diventa

$$[\pi_j(\mathbf{x}, t), H] = \frac{i}{4\pi} \int d^3x' [\partial'_k \partial'_k A_l(\mathbf{x}', t)] \delta_{lj}^{\text{tr}}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}). \quad (11.21)$$

Per il teorema 11.2, l'eq. (11.21) diventa

$$\begin{aligned} [\pi_j(\mathbf{x}, t), H] &= \frac{i}{4\pi} \int d^3x' [\Delta' A_l(\mathbf{x}', t)] \delta_{lj}^{\text{tr}}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \\ &= \frac{i}{4\pi} \Delta A_j(\mathbf{x}, t) = \frac{i}{4\pi c^2} \ddot{A}_j(\mathbf{x}, t) \\ &= i\dot{\pi}_j(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (11.22)$$

in cui si è fatto uso delle equazioni (11.1) e (11.4). Abbiamo così dimostrato che non vi è contraddizione nell'adottare le relazioni di commutazione date dalle equazioni (11.15).

Commento 11.2 In questo commento illustreremo le ragioni dell'uso della gauge di Coulomb per la quantizzazione del campo elettromagnetico.

Qualsiasi campo vettoriale \mathbf{V} può essere decomposto nella somma di due campi vettoriali \mathbf{V}_t e \mathbf{V}_l (detti, per ragioni che saranno chiarite in seguito, le componenti *trasversa* e *longitudinale* del campo) tali che \mathbf{V}_l è irrotazionale e \mathbf{V}_t è solenoidale, cioè

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_l + \mathbf{V}_t, \quad (11.23)$$

$$\nabla \times \mathbf{V}_l = 0, \quad (11.24)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V}_t = 0. \quad (11.25)$$

Tale affermazione segue direttamente dal teorema di Helmholtz (5.6): se ρ e \mathbf{j} sono, rispettivamente, la divergenza e il rotore di \mathbf{V} , in un dato volume Ω , \mathbf{V}_l è quel vettore la cui divergenza è pari a ρ e il cui rotore è nullo, mentre \mathbf{V}_t è quel vettore il cui rotore è pari a \mathbf{j} e la cui divergenza è nulla. (Siccome il teorema di Helmholtz richiede la specificazione anche della componente, V_\perp , perpendicolare alla superficie che racchiude il volume, la decomposizione (11.23) non è unica; se, tuttavia, i campi vettoriali \mathbf{V} , \mathbf{V}_l e \mathbf{V}_t sono a quadrato sommabile, si può dimostrare che tale decomposizione è unica.)

Dalle equazioni di Maxwell (5.3), si vede che il campo magnetico è solenoidale, cioè \mathbf{B} è esso stesso un campo trasverso (e quindi la sua componente longitudinale è nulla). Dall'equazione di Maxwell (5.1), si vede anche che la distribuzione di carica ρ determina la componente longitudinale \mathbf{E}_l del campo elettrico \mathbf{E} . Ne consegue che per determinare lo stato dinamico di un dato sistema è sufficiente specificarne le distribuzioni di carica e di corrente e le componenti trasverse dei campi elettrico e magnetico. Pertanto, nella teoria elettromagnetica, le componenti longitudinali dei campi possono essere ignorate dato che solo quelle trasverse hanno rilevanza fisica. Chiaramente, in un campo trasverso solo due componenti sono indipendenti dato che la terza è determinata dalla condizione scalare (11.25).

Nella procedura di quantizzazione del campo elettromagnetico $A_\mu \equiv (\mathbf{A}, i\phi)$, si devono promuovere le componenti A_μ e i corrispondenti momenti coniugati π_μ ad operatori e imporre ad essi le RCC. Fra queste si ha

$$[A_\mu(\mathbf{x}, t), A_\nu(\mathbf{x}', t)] = [A_4(\mathbf{x}, t), \pi_j(\mathbf{x}, t)] = 0. \quad (11.26)$$

Inoltre, siccome, come si può vedere dalle equazioni (11.3) e (11.4), $\pi_4 = 0$, non è possibile imporre la RCC a tempi uguali

$$[A_4(\mathbf{x}, t), \pi_4(\mathbf{x}', t)] = i\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (11.27)$$

ma deve essere

$$[A_4(\mathbf{x}, t), \pi_4(\mathbf{x}, t)] = 0. \quad (11.28)$$

Le equazioni (11.26) e (11.28) mostrano che A_4 è, in realtà, un numero puro e non un operatore perché commuta con tutti gli operatori di campo e perciò non rappresenta un genuino grado di libertà. Le componenti A_j sono, invece, operatori. La procedura di quantizzazione canonica, quindi, inevitabilmente porta all'uso di una descrizione non covariante, come non covariante è la descrizione della teoria elettromagnetica nella gauge di Coulomb. Si può dimostrare, tuttavia, che, benché la procedura di quantizzazione nella gauge di Coulomb non sia covariante, la risultante teoria quantistica è, in effetti, relativisticamente invariante. Si dice che la teoria elettromagnetica non è manifestamente covariante se è quantizzata nella gauge di Coulomb (la trattazione di una teoria quantistica manifestamente covariante è al di fuori degli scopi di questo libro).

Dall'eq. (11.15b) e dal fatto che

$$\partial_k \delta_{jk}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \equiv \frac{i}{(2\pi)^3} \int d^3q q_k e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \left(\delta_{jk} - \frac{q_j q_k}{q^2} \right) = 0, \quad (11.29)$$

si ha

$$[\partial_j A_j(\mathbf{x}, t), \pi_k(\mathbf{x}', t)] = 0, \quad (11.30)$$

cioè

$$[\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t), \pi_k(\mathbf{x}', t)] = 0. \quad (11.31)$$

Inoltre, dall' eq. (11.26),

$$[\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t), A_k(\mathbf{x}', t)] = 0. \quad (11.32)$$

Dalle equazioni (11.31) e (11.32) si nota che $\nabla \cdot \mathbf{A}$ commuta con tutti gli operatori di campo e, quindi, può essere considerato un numero puro e non rappresenta un genuino grado di libertà: in meccanica quantistica, la componente longitudinale del potenziale vettore \mathbf{A} e il potenziale scalare ($\phi = -iA_4$) non rappresentano, quindi, due veri gradi di libertà del sistema. Ciò è molto interessante in quanto anche in meccanica classica, come si è visto, le componenti trasversali dei potenziali sono i gradi di libertà del campo elettromagnetico fisicamente rilevanti.

È quindi chiaro che una trattazione quantistica canonica della radiazione può procedere solo in una gauge nella quale il potenziale scalare è stato eliminato

e la componente longitudinale del potenziale vettore è stata fissata. La scelta più semplice è la gauge di Coulomb nella quale \mathbf{A} , per definizione, è puramente trasverso (vedi eq. (11.8)), e non sono presenti i gradi di libertà spuri dato che esiste solo \mathbf{A}_t . Benché altre scelte di gauge siano possibili, esse non saranno considerate in questo libro.

Commento 11.3 La soluzione generale dell'equazione delle onde per il potenziale vettore \mathbf{A} (eq. (11.1)) è una combinazione lineare di due soluzioni linearmente indipendenti,

$$\mathbf{A}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{k} \left[\mathbf{a}(\mathbf{k})e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} + \mathbf{a}^*(\mathbf{k})e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} \right], \quad (11.33)$$

con

$$\mathbf{k} = \frac{\omega}{c}. \quad (11.34)$$

L'eq. (11.33), nella quale i coefficienti vettoriali costanti (che, cioè, non dipendono né dalla posizione né dal tempo) sono stati scelti in modo tale da avere \mathbf{A} reale, è una sovrapposizione lineare di onde piane con frequenza angolare ω e che si propagano, con velocità c , lungo la direzione specificata dal vettore d'onda \mathbf{k} . Imponendo la condizione di gauge (11.8) all'eq. (11.33), si ottiene la relazione

$$\mathbf{a}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} = 0, \quad (11.35)$$

da cui si vede che il vettore \mathbf{A} è perpendicolare alla direzione di propagazione dell'onda elettromagnetica, il che giustifica la qualificazione di \mathbf{A} come campo trasverso.

Commento 11.4 Il campo vettoriale \mathbf{A} ha, quindi, solo due componenti, e introducendo due appropriati versori (i *versori di polarizzazione*) che soddisfino la condizione di ortonormalità

$$\hat{\epsilon}_\lambda(\mathbf{k}) \cdot \hat{\epsilon}_{\lambda'}(\mathbf{k}) = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (11.36)$$

l'eq. (11.33) diventa

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \\ &\times \int d^3\mathbf{k} \sum_{\lambda=1}^2 \left[\hat{\epsilon}_\lambda(\mathbf{k}) a_\lambda(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} + c.c. \right], \end{aligned} \quad (11.37)$$

dove c.c. indica coniugazione complessa. Analogamente, dall'eq. (11.4), il campo coniugato π risulta essere

$$\begin{aligned} \pi(x) &= \frac{-i}{4\pi c^2 (2\pi)^{3/2}} \\ &\times \int d^3\mathbf{k} \omega \sum_{\lambda=1}^2 \left[\hat{\epsilon}_\lambda(\mathbf{k}) a_\lambda(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} - c.c. \right]. \end{aligned} \quad (11.38)$$

Commento 11.5 Come caso particolare è spesso conveniente scegliere la direzione di propagazione, \mathbf{k} , lungo l'asse z , e i due versori di polarizzazione paralleli agli assi x e y , cioè

$$\hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{k}) = (1, 0, 0); \quad \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{k}) = (0, 1, 0); \quad \hat{\mathbf{k}} = (0, 0, 1). \quad (11.39)$$

Teorema 11.4 *L'Hamiltoniano H definito dall'eq. (11.7), con gli operatori di campo che obbediscono all'algebra imposta dalle equazioni (11.15), è formalmente equivalente all'Hamiltoniano di un sistema composto da molti bosoni indipendenti ed identici aventi energia ω (si confronti con il teorema 10.9).*

Dimostrazione: nella teoria quantizzata, il campo classico \mathbf{A} ed il suo campo coniugato $\boldsymbol{\pi}$ sono rimpiazzati dai corrispondenti operatori nella descrizione di Heisenberg (vedi commento 10.9) che soddisfano le RCC (11.15). Le espressioni che corrispondono alle equazioni (11.37) e (11.38) sono (h.c. indica coniugazione hermitiana)

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{k} \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\omega}} \\ &\quad \times \sum_{\lambda=1}^2 \left[\hat{\mathbf{e}}_\lambda(\mathbf{k}) a_\lambda(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} + h.c. \right] \end{aligned} \quad (11.40)$$

e

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\pi}(x) &= \frac{-i}{4\pi c^2 (2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{k} \sqrt{2\pi c^2 \omega} \\ &\quad \times \sum_{\lambda=1}^2 \left[\hat{\mathbf{e}}_\lambda(\mathbf{k}) a_\lambda(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} - h.c. \right], \end{aligned} \quad (11.41)$$

dove i termini sotto radice sono stati introdotti per semplificare le relazioni di commutazione fra gli operatori $a_\lambda(\mathbf{k})$ e $a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})$ (equazioni (11.42) di seguito). Le equazioni (11.40) e (11.41) possono essere invertite per ottenere, in funzione degli operatori \mathbf{A} e $\boldsymbol{\pi}$, gli operatori $a_\lambda(\mathbf{k})$ e $a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})$ che, come può essere facilmente dimostrato, soddisfano la seguente algebra:

$$[a_\lambda(\mathbf{k}), a_{\lambda'}(\mathbf{k}')] = [a_\lambda^\dagger(\mathbf{k}), a_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{k}')] = 0 \quad (11.42a)$$

$$[a_\lambda(\mathbf{k}), a_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{k}')] = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (11.42b)$$

Usando le equazioni (11.40) e (11.41), l'Hamiltoniano (11.7), dopo qualche passaggio algebrico, diventa

$$H = \sum_{\lambda=1}^2 \int d^3\mathbf{k} \frac{\omega}{2} [a_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) a_\lambda(\mathbf{k}) + a_\lambda(\mathbf{k}) a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})]. \quad (11.43)$$

Se ora imponiamo che i campi siano contenuti in un volume finito Ω in modo da sostituire gli integrali di Fourier con serie di Fourier, cioè in modo

da sostituire gli integrali con somme discrete secondo la corrispondenza

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{k} \leftrightarrow \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}}, \quad (11.44)$$

l'eq. (11.43) può essere riscritta

$$H = \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\omega}{2} [a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + a_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger], \quad (11.45)$$

dove si è anche effettuata la sostituzione

$$a_{\lambda}(\mathbf{k}) \rightarrow \sqrt{\frac{\Omega}{(2\pi)^3}} a_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (11.46)$$

I nuovi operatori definiti dall'eq. (11.46) soddisfano l'algebra seguente:

$$[a_{\mathbf{k}\lambda}, a_{\mathbf{k}'\lambda'}] = [a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger, a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger] = 0, \quad (11.47a)$$

$$[a_{\mathbf{k}\lambda}, a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (11.47b)$$

Infine, facendo uso dell'eq. (11.47b), l'Hamiltoniano del campo elettromagnetico diventa

$$H = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega \left[a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right], \quad (11.48)$$

che è, appunto, l'Hamiltoniano di un sistema di molte particelle identiche. L'algebra degli operatori di annichilazione e creazione, così come definita dalle equazioni (11.47), è l'algebra corrispondente ad una collezione di oscillatori armonici. Ricordando i risultati ottenuti nel teorema 10.9, si conclude che tali particelle, dette *fotoni*, devono essere necessariamente bosoni. L'energia di ciascun fotone è, per le equazioni (11.34) e (11.48), $\omega = kc$.

Commento 11.6 La serie infinita delle energie di punto zero (l'energia del vuoto) è divergente. Questa divergenza, tuttavia, non comporta conseguenze significative in quanto la quantità ad avere rilevanza fisica è l'energia del sistema relativa a quella del vuoto. Per cui l'energia del vuoto può essere ignorata o ridefinita in modo da costituire lo zero delle energie. Tale procedura può essere formalizzata introducendo l'operazione di *ordinamento normale* degli operatori: si dice che un prodotto di operatori è in ordine normale se tutti gli operatori di creazione sono alla sinistra di tutti gli operatori di annichilazione. Introducendo il simbolo $:$ per l'operazione di ordinamento normale, si definisce

$$: a^\dagger a : = a^\dagger a, \quad (11.49a)$$

$$: a a^\dagger : = a^\dagger a. \quad (11.49b)$$

Quindi, dalle equazioni (11.47b), (11.48) e (11.49), l'energia del campo elettromagnetico relativa all'energia del vuoto è

$$: H := \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (11.50)$$

Commento 11.7 Dalle equazioni (5.12), (5.65), (11.4), (11.40) e (11.41), si può dimostrare che la quantità di moto del campo elettromagnetico quantizzato è

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\mathbf{k}}{2} [a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + a_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger] \quad (11.51)$$

che, facendo uso dell'eq. (11.47b) e del fatto che, per simmetria,

$$\mathbf{P}_{\text{vuoto}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{k} = 0, \quad (11.52)$$

diventa

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{k} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (11.53)$$

(Si noti che l'ordinamento normale dell'eq. (11.51), benché fornirebbe l'eq. (11.53), non è qui necessario, in quanto la somma delle quantità di moto di punto zero è nulla per simmetria.)

Commento 11.8 L'energia assoluta del vuoto non è nulla. Ciò è in analogia con l'energia di punto zero dell'oscillatore armonico (commento 8.13). In quest'ultimo caso, la non nulla energia di punto zero è dovuta alla non commutatività degli operatori a e a^\dagger , che implica che le fluttuazioni degli operatori di posizione e quantità di moto (equazioni (8.59)), sono non nulle e, di conseguenza, è impossibile avere nulle sia l'energia cinetica che l'energia potenziale (eq. (8.61)). Nel caso del campo elettromagnetico, la non commutatività degli operatori di creazione e annichilazione dei fotoni implica che le fluttuazioni dei campi elettrico e magnetico sono non nulle e, di conseguenza, è impossibile avere nulli sia il contributo elettrico che il contributo magnetico all'energia del campo, un effetto, questo, puramente quantistico, e che è responsabile di fenomeni quali l'*emissione spontanea* di radiazione da sistemi in stati stazionari eccitati (si veda l'esempio 11.1 di seguito), e lo *spostamento di Lamb* che è una correzione all'energia degli atomi dovuta all'interazione degli elettroni con le fluttuazioni del vuoto del campo elettromagnetico (si veda l'esempio A.3).

Teorema 11.5 *Il fotone è una particella con massa nulla.*

Dimostrazione: nell'Appendice sulla relatività ristretta si definisce (definizione A.2) un tetra-vettore A come un insieme di quattro quantità A_μ ($\mu = 1, 2, 3, 4$) che si trasformano, per trasformazioni di Lorentz, in accordo con l'eq. (A.8). I tetra-vettori hanno la proprietà che la quantità

$A_\mu A_\mu$ è relativisticamente invariante. In particolare, per il tetra-momento (definizione A.7), usando l'eq. (A.37), si ha

$$p_\mu p_\mu = m^2 u_\mu u_\mu = -m^2 c^2, \quad (11.54)$$

dove u_μ è la tetra-velocità. Siccome la componente temporale del tetra-momento è l'energia (commento A.16), e le componenti spaziali coincidono con le componenti della quantità di moto relativistica (commento A.12), e dato che l'energia e la quantità di moto del fotone sono legate dall'eq. (11.34), per il fotone, si ha

$$p_\mu p_\mu = p_j p_j + \left(\frac{i}{c}E\right)^2 = k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = 0, \quad (11.55)$$

dove sono state usate le equazioni (A.45) e (11.34). Confrontando le equazioni (11.54) e (11.55), si vede che la massa del fotone deve essere nulla.

Teorema 11.6 *Il momento angolare della radiazione, che, dall'eq. (5.66), è*

$$\mathbf{G} = \frac{1}{4\pi c} \int d^3x \mathbf{x} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}), \quad (11.56)$$

può essere riscritto

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_o + \mathbf{G}_s, \quad (11.57)$$

dove

$$\mathbf{G}_o = \frac{1}{4\pi c} \int d^3x [E_k (\mathbf{x} \times \nabla) A_k], \quad (11.58)$$

e

$$\mathbf{G}_s = \frac{1}{4\pi c} \int d^3x [\mathbf{E} \times \mathbf{A}] \quad (11.59)$$

sono detti, per ragioni che saranno spiegate in seguito (commento 11.10), i momenti angolare orbitale e di spin della radiazione.

Dimostrazione: si noti, innanzitutto, che

$$(\mathbf{E} \times \mathbf{B})_p = [\mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{A})]_p = E_k \partial_p A_k - (\mathbf{E} \cdot \nabla) A_p. \quad (11.60)$$

Si ha, quindi,

$$\begin{aligned} [\mathbf{x} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B})]_j &= \epsilon_{jqp} x_q (\mathbf{E} \times \mathbf{B})_p = \epsilon_{jqp} x_q [E_k \partial_p A_k - (\mathbf{E} \cdot \nabla) A_p] \\ &= E_k \epsilon_{jqp} x_q \partial_p A_k - \epsilon_{jqp} x_q (\mathbf{E} \cdot \nabla) A_p, \end{aligned} \quad (11.61)$$

cioè

$$\mathbf{x} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = E_k (\mathbf{x} \times \nabla) A_k - \mathbf{x} \times (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{A}. \quad (11.62)$$

L'ultimo termine dell'eq. (11.62) può essere riscritto

$$\begin{aligned} \mathbf{x} \times (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{A} &= (\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{x} \times \mathbf{A}) - [(\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{x}] \times \mathbf{A} \\ &= (\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{x} \times \mathbf{A}) - \mathbf{E} \times \mathbf{A}, \end{aligned} \quad (11.63)$$

dato che $[(\mathbf{E} \cdot \nabla)\mathbf{x}] = \mathbf{E}$. Quindi,

$$[\mathbf{x} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B})] = E_k(\mathbf{x} \times \nabla)A_k + \mathbf{E} \times \mathbf{A} - (\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{x} \times \mathbf{A}). \quad (11.64)$$

Inserendo l'eq. (11.64) nell'eq. (11.56), l'integrale dell'ultimo termine è nullo: integrando per parti, il termine integrato è un integrale di superficie che è nullo, e il termine rimanente contiene la quantità $\nabla \cdot \mathbf{E}$ che per il campo libero è anch'essa nulla. Dunque,

$$\mathbf{G} = \frac{1}{4\pi c} \int d^3x [E_k(\mathbf{x} \times \nabla)A_k] + \frac{1}{4\pi c} \int d^3x [\mathbf{E} \times \mathbf{A}]. \quad (11.65)$$

Teorema 11.7 *Il momento angolare di spin del campo elettromagnetico quantizzato può essere scritto come*

$$\mathbf{G}_s = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=\pm 1} \lambda \hat{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}, \quad (11.66)$$

dove il numero quantico di polarizzazione λ si riferisce agli stati di polarizzazione circolare, ed assume i valori -1 (polarizzazione sinistra) e $+1$ (polarizzazione destra).

Dimostrazione: l'eq. (11.59) può essere riscritta

$$\mathbf{G}_s = \frac{1}{8\pi c} \int d^3x [\mathbf{E} \times \mathbf{A} - \mathbf{A} \times \mathbf{E}] = \frac{1}{2} \int d^3x [\mathbf{A} \times \boldsymbol{\pi} - \boldsymbol{\pi} \times \mathbf{A}], \quad (11.67)$$

dove si è usata l'eq. (11.4). Inserendo le equazioni (11.40) e (11.41) nell'eq. (11.67), facendo uso delle equazioni (11.39), (11.44), (11.46) e del fatto che

$$\hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{k}) = \hat{\mathbf{k}}, \quad (11.68)$$

e dopo qualche passaggio algebrico, si ottiene

$$\mathbf{G}_s = -i \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}1}^\dagger a_{\mathbf{k}2} - a_{\mathbf{k}2}^\dagger a_{\mathbf{k}1}). \quad (11.69)$$

Dall'eq. (11.69), si vede che negli stati di polarizzazione lineare, come quelli specificati dall'eq. (11.39), in cui gli operatori dell'energia e della quantità di moto sono diagonali, il momento angolare di spin non è diagonale. Però, diagonalizzando l'operatore che appare sotto il segno di sommatoria nell'eq. (11.69) nella base degli stati linearmente polarizzati specificati dall'eq. (11.39), si vede che gli autovalori ammessi sono $\lambda = \pm 1$, e i corrispondenti autovettori specificano una nuova base. I nuovi versori di polarizzazione in termini di quelli precedenti (definiti dall'eq. (11.39)) sono

$$\hat{\mathbf{e}}_{-1}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{k}) - i\hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{k})], \quad (11.70a)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_{+1}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{k}) + i\hat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{k})]. \quad (11.70b)$$

(Nelle equazioni (11.70) la fase è stata scelta in accordo con la definizione 9.3 (equazioni (9.125)) delle componenti sferiche di un operatore vettoriale.) Siccome i versori di polarizzazione circolare (11.70) rappresentano stati di radiazione polarizzata circolarmente, ne consegue che gli autostati del momento angolare di spin della radiazione sono stati di polarizzazione circolare destra e sinistra. Gli operatori di creazione e annichilazione per i fotoni polarizzati circolarmente a sinistra e a destra, in termini degli operatori di creazione e annichilazione di fotoni polarizzati linearmente lungo l'asse x e y , si ottengono facilmente dalle equazioni (11.70):

$$a_{-1}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[a_1(\mathbf{k}) - a_2(\mathbf{k})], \quad (11.71a)$$

$$a_{+1}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\sqrt{2}}[a_1(\mathbf{k}) + a_2(\mathbf{k})], \quad (11.71b)$$

L'operatore (11.69) assume la forma diagonale cercata

$$\mathbf{G}_s = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \lambda \hat{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}, \quad (11.72)$$

dove, ora, $\lambda = \pm 1$, e gli operatori di creazione e di annichilazione (dopo aver effettuato le sostituzioni (11.46)) sono quelli dati dalle equazioni (11.71).

Commento 11.9 Si può facilmente verificare che l'algebra seguita dagli operatori (11.71) è la stessa algebra bosonica data dalle equazioni (11.42), e che l'Hamiltoniano e la quantità di moto mantengono la forma data dalle equazioni (11.50) e (11.53).

Commento 11.10 Si può dimostrare che per ogni stato $|\mathbf{k}\rangle$ di un fotone con specificata quantità di moto \mathbf{k} e arbitraria polarizzazione, si ha

$$(\mathbf{G}_o \cdot \hat{\mathbf{k}})|\mathbf{k}\rangle = 0. \quad (11.73)$$

In particolare, per uno stato $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ con specificate quantità di moto \mathbf{k} e polarizzazione circolare λ , si ha, dall'eq. (11.73),

$$(\mathbf{G} \cdot \hat{\mathbf{k}})|\mathbf{k}\lambda\rangle = (\mathbf{G}_s \cdot \hat{\mathbf{k}})|\mathbf{k}\lambda\rangle = \lambda|\mathbf{k}\lambda\rangle = \pm|\mathbf{k}\lambda\rangle, \quad (11.74)$$

cioè, gli stati con specificata polarizzazione circolare sono autostati dell'*elicità*, cioè della proiezione del momento angolare totale lungo la direzione della quantità di moto. Quindi (si veda anche il commento 11.12), gli stati della radiazione possono essere completamente determinati specificando gli autovalori dell'energia, della quantità di moto e dell'*elicità*.

Sappiamo che una proiezione non nulla del momento angolare totale lungo la direzione del moto di una particella deve essere attribuita al suo spin, dato che la proiezione del momento angolare orbitale lungo la direzione del moto è nulla. Dall'eq. (11.73) si vede, pertanto, che il momento angolare \mathbf{G}_o definito

nell'eq. (11.58) possiede le proprietà di un momento angolare orbitale. Inoltre, dall'eq. (11.74), si vede che un fotone nello stato $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ ha, lungo la direzione del suo moto, un momento angolare non nullo che, perciò deve essere dovuto al suo spin. Le denominazioni date a \mathbf{G}_o e \mathbf{G}_s sono così giustificate. Infine, dato che $\lambda = \pm 1$, il fotone deve essere considerato una particella di spin 1.

Commento 11.11 L'affermazione che il fotone è una particella di spin 1 è in stretta connessione con le osservazioni del commento 11.10 precedente. In particolare, la definizione dello spin come momento angolare di una particella rispetto al sistema di riferimento nel quale essa è in quiete (commento 9.8), non è qui applicabile in quanto, per il fotone, tale sistema di riferimento non esiste. Per cui, lo spin e il momento angolare orbitale del fotone non sono separatamente misurabili, ma è possibile misurare solo il momento angolare totale (e, infatti, (si veda l'eq. (11.74)) gli autostati dell'elicità del fotone sono stati con specificata proiezione del momento angolare totale lungo la direzione della quantità di moto). Per un fotone con specificata quantità di moto, la direzione del suo moto definisce un asse "naturale" di quantizzazione, e solo la proiezione del momento angolare rispetto a tale asse si conserva.

Il fatto che il valore $\lambda = 0$ non è permesso (come deve essere, data la trasversalità del campo elettromagnetico), è una conseguenza del fatto che, data l'invarianza per riflessioni rispetto ai piani contenenti il vettore \mathbf{k} , ogni autovalore della quantità di moto \mathbf{k} deve essere doppiamente degenere e i corrispondenti stati sono $|\mathbf{k}\pm 1\rangle$, mentre uno stato del tipo $|\mathbf{k}0\rangle$ sarebbe non degenere e quindi non permesso. (In effetti si può dimostrare che qualsiasi particella di massa nulla e spin s ha solo due possibili valori dell'elicità: $\lambda = \pm s$.)

Commento 11.12 Ogni singola onda piana è stata specificata dalla coppia di numeri quantici $\{\mathbf{k}\lambda\}$ del fotone ad essa associato. Tuttavia, nei processi in cui gli scambi di momento angolare fra materia e radiazione hanno un ruolo importante, è più conveniente descrivere lo stato della radiazione specificandone l'energia, il momento angolare totale e la parità, cioè specificando i numeri quantici $\{\omega, j, m, \pi\}$. Formalmente ciò si compie calcolando i coefficienti dell'*espansione multipolare*

$$|\mathbf{k}\lambda\rangle = \sum_{jm\pi} |\omega jm\pi\rangle \langle \omega jm\pi | \mathbf{k}\lambda \rangle, \quad (11.75)$$

nella quale si esclude il termine $j = 0$ in quanto il momento angolare totale del fotone non può essere nullo (commento 11.11). In questo libro non ci addenteremo nei dettagli dell'espansione multipolare del campo elettromagnetico.

11.2 Cariche nel campo

Commento 11.13 Fino ad ora abbiamo considerato il campo elettromagnetico nel vuoto. Se sono presenti particelle cariche, l'energia, la quantità di moto e il momento angolare totali sono dati, rispettivamente, dalle equazioni (5.61),

(5.65) e (5.66), nelle quali i campi contengono sia i contributi di campi esterni che di quelli prodotti dalle cariche e dalle correnti del sistema (commento 5.13). Nel commento 11.2 si è affermato che, nella teoria della radiazione, le componenti longitudinali del campo elettromagnetico possono essere eliminate e solo le componenti trasverse hanno significato fisico. Vediamo ora come si procede per effettuare questa eliminazione delle componenti longitudinali.

Teorema 11.8 *Il contributo della componente longitudinale del campo elettrico all'energia del campo elettromagnetico può essere inglobata nell'energia delle particelle.*

Dimostrazione: innanzitutto separiamo il campo elettrico nelle sue componenti longitudinale e trasversa, cosicché la legge di Coulomb diventa

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_l(x) = 4\pi\rho(x). \quad (11.76)$$

Se si indicano con $\mathbf{F}(\mathbf{k}, t)$ e $\sigma(\mathbf{k}, t)$ le trasformate di Fourier di $\mathbf{E}_l(\mathbf{x}, t)$ e $\rho(\mathbf{x}, t)$, l'eq. (11.76) diventa

$$i\mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k}, t) = 4\pi\sigma(\mathbf{k}, t), \quad (11.77)$$

da cui

$$\mathbf{F} = -4\pi i\sigma\mathbf{k}/k^2. \quad (11.78)$$

Il contributo della componente longitudinale del campo elettrico all'energia del campo elettromagnetico è

$$H_l = \frac{1}{8\pi} \int d^3x \mathbf{E}_l^2 = \frac{1}{8\pi} \int d^3k \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{F} = 2\pi \int d^3k \sigma^* \sigma / k^2, \quad (11.79)$$

dove è stata adoperata l'uguaglianza di Parseval della teoria delle trasformate di Fourier,

$$\int d^3x E^*(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}, t) = \int d^3k F^*(\mathbf{k}, t)\sigma(\mathbf{k}, t). \quad (11.80)$$

Per un sistema di cariche puntiformi,

$$\rho(x) = \sum_j e_j \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{r}_j(t)), \quad (11.81)$$

la cui trasformata di Fourier è

$$\sigma(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_j e_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j}. \quad (11.82)$$

Usando l'eq. (11.82), l'eq. (11.79) diventa

$$H_l = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_j e_j^2 \int \frac{d^3k}{k^2} + \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_j \sum_{p \neq j} \int d^3k \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_p)}}{k^2}. \quad (11.83)$$

Il primo termine, che corrisponde alla cosiddetta *energia Coulombiana intrinseca* della particella, può essere considerato parte dell'*energia di quiete* (eq. (A.44)) e sarà d'ora in poi omessa. (Qualche parola in più va però spesa (si veda il commento 11.16 di seguito) in quanto questo termine è divergente.) Il secondo termine nell'eq. (11.83) rappresenta l'interazione Coulombiana fra coppie distinte di cariche. Infatti, dato che

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{k^2} = \frac{1}{4\pi r}, \quad (11.84)$$

si ha, omettendo il termine di energia intrinseca,

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_j \sum_{p \neq j} \frac{e_j e_p}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_p|} = V \quad (11.85)$$

che è l'interazione Coulombiana fra coppie distinte di cariche e perciò può essere inclusa nell'energia delle particelle. L'energia totale di un sistema di cariche in un campo elettromagnetico (eq. (5.61)) può essere pertanto scritta nella forma

$$H = T + V + \frac{1}{8\pi} \int d^3\mathbf{x} (\mathbf{E}_t^2 + \mathbf{B}^2), \quad (11.86)$$

dove \mathbf{E}_t è la parte trasversa del campo elettrico.

Commento 11.14 Dall'eq. (5.14), si ha

$$\mathbf{E}_t = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}_t - (\nabla\phi)_t = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}_t, \quad (11.87)$$

in quanto il gradiente di una quantità scalare è un vettore longitudinale (si ricordi il teorema 2.5). Inoltre, nella gauge di Coulomb, si ha

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_t, \quad (11.88)$$

per cui, nell'integrale al secondo membro dell'eq. (11.86), si può usare \mathbf{A} invece di \mathbf{A}_t . Ciò ci permette di ripetere, nel calcolo del contributo della radiazione all'energia totale del sistema, tutte le considerazioni fatte in precedenza nel caso del campo elettromagnetico nel vuoto. Possiamo quindi scrivere l'espressione finale dell'operatore Hamiltoniano nella gauge di Coulomb per un sistema di cariche in un campo elettromagnetico:

$$H = \sum_j \frac{1}{2m_j} [\mathbf{P}_j - (e_j/c)\mathbf{A}(\mathbf{R}_j)]^2 + V + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (11.89)$$

L'operatore (11.89) può essere riscritto (si confronti con il teorema 7.46)

$$H = H_P + H_R + H_I, \quad (11.90)$$

dove

$$H_P = \sum_j \frac{\mathbf{P}_j^2}{2m_j} + V \quad (11.91)$$

che dipende solo dalle variabili dinamiche delle particelle,

$$H_R = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} \quad (11.92)$$

che dipende solo dalle variabili dinamiche della radiazione, e

$$H_I = - \sum_j \frac{e_j}{m_j c} \mathbf{A}(\mathbf{R}_j) \cdot \mathbf{P}_j + \sum_j \frac{e_j^2}{2m_j c^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{R}_j), \quad (11.93)$$

che dipende da tutte le variabili dinamiche e rappresenta il termine di interazione fra le particelle e la radiazione.

Commento 11.15 A differenza che nell'eq. (11.40), nell'eq. (11.89) e nelle successive non c'è esplicita dipendenza temporale del potenziale vettore. Ciò riflette la scelta di aver adottato la descrizione di Schrödinger (commento 7.2) che è più conveniente della descrizione di Heisenberg per calcolare le probabilità di transizione indotta da radiazione fra stati molecolari (commento 7.16). In particolare, l'operatore corrispondente al potenziale vettore nella descrizione di Schrödinger si ottiene dalla sua espressione nella descrizione di Heisenberg, data nell'eq. (11.40), ponendo $t = 0$ (commento 7.15).

Commento 11.16 L'Hamiltoniano (11.89) è valido solo nel limite non relativistico, e dobbiamo quindi trascurare, nelle equazioni (11.92) e (11.93), tutti i modi del campo con energie superiori all'ordine di grandezza dell'energia di quiete mc^2 di ciascuna particella di massa m . Dato che in un sistema molecolare la particella con minore energia di quiete è l'elettrone ed è pari a $(137)^2$ unità atomiche (si ricordi il commento 7.10), un'energia di taglio appena inferiore (o perfino un ordine di grandezza inferiore) è perciò legittima, essendo ben al di sopra delle energie caratteristiche dei processi rilevanti nei sistemi molecolari.

Con l'introduzione di tale taglio si elimina anche il problema che sorgeva dal termine di energia intrinseca divergente che appare nell'eq. (11.83). Infatti, se si trascurano tutti i modi del campo al di sopra di una certa frequenza ω_c , l'integrale che appare nel primo termine al secondo membro dell'eq. (11.83) è una costante finita [il contributo a tale costante per ciascuna particella di carica e è $(e^2 \omega_c)/(\pi c)$]. Si deve però ricordare che il problema della divergenza dell'energia intrinseca dell'elettrone non può essere affrontato in modo appropriato nel contesto di una teoria non relativistica, e quindi non sarà qui discusso ulteriormente.

Commento 11.17 Anche il contributo del campo elettrico longitudinale alla quantità di moto totale e al momento angolare totale può essere inglobato nella quantità di moto totale e nel momento angolare totale delle particelle. In

particolare, le equazioni (5.65) e (5.66) diventano

$$\mathbf{P} = \sum_j \left[m_j \dot{\mathbf{r}}_j + \frac{e_j}{c} \mathbf{A}_t(\mathbf{r}_j) \right] + \frac{1}{4\pi} \int d^3x (\mathbf{E}_t \times \mathbf{B}) \quad (11.94)$$

e

$$\mathbf{J} = \sum_j \mathbf{r}_j \times \left[m_j \dot{\mathbf{r}}_j + \frac{e_j}{c} \mathbf{A}_t(\mathbf{r}_j) \right] + \frac{1}{4\pi} \int d^3x \mathbf{x} \times (\mathbf{E}_t \times \mathbf{B}). \quad (11.95)$$

Nelle equazioni (11.94) e (11.95) si riconoscono, nei termini fra parentesi quadre, i momenti coniugati alle coordinate delle particelle (eq. (5.55)). Di nuovo, nella gauge di Coulomb, tutte le considerazioni fatte per il campo nel vuoto possono ripetersi anche per i contributi della radiazione alla quantità di moto totale e al momento angolare totale del sistema.

Esempio 11.1 (Assorbimento ed emissione di radiazione da parte di atomi) Si consideri un atomo in una cavità di volume Ω e interagente con un campo elettromagnetico descritto dal potenziale vettore \mathbf{A} . Per semplicità si assuma che solo un elettrone dell'atomo partecipa al processo di assorbimento o emissione. Nella gauge di Coulomb, l'operatore Hamiltoniano è dato dalle equazioni (11.90)–(11.93), dove la somma sull'indice j contiene un solo termine e $V = V(\mathbf{r})$, che appare nell'eq. (11.91), rappresenta l'interazione Coulombiana fra l'elettrone e tutte le altre cariche presenti nell'atomo.

Si consideri il seguente problema: all'istante $t = 0$, misurandone l'energia (e un appropriato insieme di osservabili che commutano con essa), si prepari l'atomo nello stato stazionario $|j\rangle$; l'atomo interagisce con la radiazione il cui stato sarà specificato in seguito; si vuole calcolare la probabilità che al tempo t l'atomo si trovi nello stato stazionario $|f\rangle$, determinabile effettuando nuovamente una misura dell'energia (e di un insieme di osservabili che commutano con essa) dell'atomo, ma senza effettuare ulteriori osservazioni sullo stato della radiazione. Così come descritto, l'atomo è un sistema aperto (commento 7.40 e teorema 7.55) e il suo stato, quindi, deve essere descritto da una matrice densità (ridotta). L'Hamiltoniano dato dalle equazioni (11.90)–(11.93) può essere scritto come

$$H = H_0 + H_I, \quad (11.96)$$

dove si assume che il problema agli autovalori per il sistema atomo+radiazione non interagenti, cioè che il problema agli autovalori per

$$H_0 = H_P + H_R = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(r) + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}, \quad (11.97)$$

sia stato risolto. È allora appropriato adottare la descrizione di interazione (commento 7.16) invece che quella di Schrödinger (commento 11.15), e l'operatore densità ridotto dell'atomo è dato dall'eq. (7.164), cioè, adottando la nuova notazione qui introdotta,

$$\bar{\rho}_P(t) = \rho_P(0) + \frac{1}{i} \int_0^t dt' \text{Tr}_R[\bar{H}_I(t'), \rho(0)]$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{1}{i}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \text{Tr}_R[\bar{H}_I(t'), [\bar{H}_I(t''), \rho(0)]] \\
& + \dots, \tag{11.98}
\end{aligned}$$

dove

$$H_I = -\frac{e}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{P} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{R}). \tag{11.99}$$

La probabilità di trovare al tempo t l'atomo nello stato stazionario $|f\rangle$ è data dalla popolazione di tale stato (si veda il commento 7.37), cioè, nella rappresentazione degli autostati di H_P , dall' f -esimo elemento diagonale della matrice che rappresenta l'operatore densità ridotto (11.98). Al tempo $t = 0$, l'operatore densità del sistema è dato dal prodotto tensoriale (sezione 6.6 e commento 7.30) degli operatori densità ridotti dell'atomo e della radiazione,

$$\rho(0) = \rho_P(0) \otimes \rho_R(0), \tag{11.100}$$

dove, siccome l'atomo è inizialmente in uno stato puro, per il commento 7.36 si ha

$$\rho_P(0) = |j\rangle\langle j|. \tag{11.101}$$

Nel calcolo della popolazione dello stato $|f\rangle$ si ha, dal primo termine dell'eq. (11.98),

$$\langle f|\rho_P(0)|f\rangle = \langle f|j\rangle\langle j|f\rangle = 0 \tag{11.102}$$

dato che, per $|f\rangle \neq |j\rangle$, i due stati sono ortogonali. Per la stessa ragione anche il contributo dal secondo termine dell'eq. (11.98) è nullo. Il commutatore nel terzo termine dell'eq. (11.98) è

$$\begin{aligned}
& [\bar{H}_I(t'), [\bar{H}_I(t''), \rho(0)]] \\
& = \bar{H}_I(t')\bar{H}_I(t'')\rho(0) + \rho(0)\bar{H}_I(t'')\bar{H}_I(t') \\
& \quad - \bar{H}_I(t')\rho(0)\bar{H}_I(t'') - \bar{H}_I(t'')\rho(0)\bar{H}_I(t'), \tag{11.103}
\end{aligned}$$

e, calcolando la popolazione dello stato $|f\rangle$, usando le equazioni (11.100)–(11.102), si trova che solo gli ultimi due termini dell'eq. (11.103) danno contributi non nulli. Per cui la popolazione dello stato $|f\rangle$ è

$$\begin{aligned}
P_f(t) & = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \text{Tr}_R\{\langle f|\bar{H}_I(t')|j\rangle\rho_R(0)\langle j|\bar{H}_I(t'')|f\rangle \\
& \quad + \langle f|\bar{H}_I(t'')|j\rangle\rho_R(0)\langle j|\bar{H}_I(t')|f\rangle\} + \dots \tag{11.104}
\end{aligned}$$

Nel secondo integrale dell'eq. (11.104), scambiando l'ordine di integrazione e poi scambiando le variabili di integrazione,

$$\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \rightarrow \int_0^t dt'' \int_{t''}^t dt' \rightarrow \int_0^t dt' \int_{t'}^t dt'', \tag{11.105}$$

si vede che è possibile combinare in un unico termine i primi due termini dell'eq. (11.104) e ottenere

$$P_f(t) = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \text{Tr}_R \{ \langle f | \bar{H}_I(t') | j \rangle \rho_R(0) \langle j | \bar{H}_I(t'') | f \rangle \} + \dots \quad (11.106)$$

Dalle equazioni (7.64a), (11.92) e (11.97), si ha

$$\begin{aligned} \langle f | \bar{H}_I(t) | j \rangle &= \langle f | e^{iH_0 t} H_I e^{-iH_0 t} | j \rangle \\ &= \langle f | e^{iH_P t} e^{iH_R t} H_I e^{-iH_R t} e^{-iH_P t} | j \rangle \\ &= e^{iE_{fj} t} e^{iH_R t} \langle f | H_I | j \rangle e^{-iH_R t}, \end{aligned} \quad (11.107)$$

dove

$$E_{fj} \equiv E_f - E_j. \quad (11.108)$$

Facendo uso della proprietà ciclica della traccia di un prodotto e ponendo

$$J \equiv \int_0^t dt_1 e^{iE_{fj} t_1} e^{iH_R t_1} \langle f | H_I | j \rangle e^{-iH_R t_1}, \quad (11.109)$$

l'eq. (11.106) diventa

$$P_f(t) = \text{Tr}_R [J^\dagger J \rho_R(0)] + \dots \quad (11.110)$$

A questo punto effettuiamo alcune approssimazioni. Prima di tutto, se il tempo t è sufficientemente piccolo, i termini di ordine superiore nelle espansioni (11.98), (11.104), (11.106) e (11.110) possono essere trascurati. Inoltre, come si può vedere dall'eq. (11.99), H_I è la somma di due termini e, per una radiazione elettromagnetica di intensità sufficientemente bassa e per processi per i quali il primo termine dell'eq. (11.99) produce un contributo non nullo all'elemento di matrice $\langle f | H_I | j \rangle$, il termine contenente \mathbf{A}^2 nell'eq. (11.99) è trascurabile rispetto al termine proporzionale a $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}$, per cui il termine di interazione (nella rappresentazione di Schrödinger) da inserire nell'eq. (11.109) (vedi equazioni (11.40), (11.44) e (11.46)) è

$$H_I = -\frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi}{\Omega\omega}} \left[a_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} + a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{P}. \quad (11.111)$$

Una terza approssimazione che faremo consiste nel sostituire gli esponenziali nell'eq. (11.111) con il valore 1. Ciò è possibile in quanto le energie coinvolte nel processo che stiamo studiando sono dell'ordine dell'unità atomica, cioè $\omega \simeq 1$ a.u., per cui $k \equiv \omega/c < 10^{-2}$ a.u. Siccome un elettrone in un atomo è localizzato in una regione (che poniamo intorno all'origine del sistema di coordinate) di dimensione dell'ordine di una unità atomica, cioè $r \simeq 1$ a.u., ne segue che $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} < 10^{-2}$ e $\exp(\pm i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \simeq 1$. (Si noti che in un sistema molecolare tale approssimazione, nota, per ragioni che saranno rese chiare in seguito, con il nome di *approssimazione dipolare*, è valida se la lunghezza d'onda della radiazione

incidente è almeno dell'ordine di grandezza delle dimensioni molecolari e che, anche nel caso in cui la lunghezza d'onda è dell'ordine di grandezza delle dimensioni molecolari, l'energia della radiazione, essendo dell'ordine di $2\pi c$ unità atomiche, è ben al di sotto del taglio introdotto nel commento 11.16, ma, al tempo stesso, superiore alle energie di fotoionizzazione del sistema molecolare.)

L'eq. (11.111) diventa, quindi,

$$H_I = -\frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi}{\Omega\omega}} [a_{\mathbf{k}\lambda} + a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger] \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{P}. \quad (11.112)$$

Dall'equazioni (6.87), (7.117) e (11.98),

$$[\mathbf{R}, H_P] = \left[\mathbf{R}, \frac{\mathbf{P}^2}{2m} \right] = \frac{i}{m} \mathbf{P}, \quad (11.113)$$

e siccome

$$\langle f | [\mathbf{R}, H_P] | j \rangle = -E_{fj} \langle f | \mathbf{R} | j \rangle, \quad (11.114)$$

si ha

$$\langle f | H_I | j \rangle = -iE_{fj} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi}{\Omega\omega}} (a_{\mathbf{k}\lambda} + a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fj} \quad (11.115)$$

dove

$$\mathbf{d}_{fj} = \langle f | e\mathbf{R} | j \rangle \quad (11.116)$$

è l'elemento di matrice corrispondente al contributo dell'elettrone al *momento di dipolo elettrico* del sistema. (La denominazione di approssimazione dipolare data alla terza approssimazione adottata è così giustificata.)

Si osservi ora che

$$e^{iH_R t} a_{\mathbf{k}\lambda} e^{-iH_R t} = a_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\omega(\mathbf{k})t}. \quad (11.117)$$

L'equazione (11.117) può essere derivata come segue. Siccome $[H_R, H_P] = 0$, il primo membro dell'eq. (11.117) è l'operatore di annichilazione nella descrizione di interazione (si veda l'eq. (7.64a)) che, a sua volta, è soluzione dell'equazione (si vedano le equazioni (7.65) e (7.67))

$$i \frac{d}{dt} \bar{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t) = [\bar{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t), \bar{H}_R]. \quad (11.118)$$

Si ha, tuttavia,

$$\begin{aligned} [\bar{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t), \bar{H}_R] &= \sum_{\mathbf{k}'\lambda'} \omega(\mathbf{k}') [\bar{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t), \bar{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger(t) \bar{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)] \\ &= \omega(\mathbf{k}) \bar{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t), \end{aligned} \quad (11.119)$$

dove si sono usate le equazioni (11.47). Quindi, l'eq. (11.118) diventa

$$i \frac{d}{dt} \bar{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \omega(\mathbf{k}) \bar{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t), \quad (11.120)$$

la cui soluzione è

$$\bar{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \bar{a}_{\mathbf{k}\lambda}(0)e^{-i\omega(\mathbf{k})t} = a_{\mathbf{k}\lambda}e^{-i\omega(\mathbf{k})t}, \quad (11.121)$$

che è il secondo membro dell'eq. (11.117). Analogamente, si ha

$$e^{iH_R t} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-iH_R t} = a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{i\omega(\mathbf{k})t} \quad (11.122)$$

e quindi si ottiene l'uguaglianza

$$\begin{aligned} & e^{iH_R t} \langle f | H_I | j \rangle e^{-iH_R t} \\ &= -iE_{fj} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi}{\Omega\omega}} \left(a_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\omega(\mathbf{k})t} + h.c. \right) \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fj} \end{aligned} \quad (11.123)$$

che, sostituita nelle equazioni (11.109) e (11.110), dà

$$\begin{aligned} P_f(t) &= \frac{2\pi E_{fj}^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'\lambda'} \sum_{\mathbf{k}''\lambda''} \frac{(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'\lambda'} \cdot \mathbf{d}_{fj})(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}''\lambda''} \cdot \mathbf{d}_{fj}^*)}{\sqrt{\omega(\mathbf{k}')\omega(\mathbf{k}'')}} \\ &\times \text{Tr}_R \left\{ \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \exp[iE_{fj}(t_1 - t_2)] \right. \\ &\times \left[a_{\mathbf{k}''\lambda''}^\dagger e^{i\omega(\mathbf{k}'')t_2} + a_{\mathbf{k}''\lambda''} e^{-i\omega(\mathbf{k}'')t_2} \right] \\ &\times \left. \left[a_{\mathbf{k}'\lambda'} e^{-i\omega(\mathbf{k}')t_1} + a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger e^{i\omega(\mathbf{k}')t_1} \right] \rho_R(0) \right\}. \end{aligned} \quad (11.124)$$

Il calcolo della traccia parziale nell'eq. (11.124) si riduce al calcolo delle tracce parziali degli operatori

$$a_{\mathbf{k}''\lambda''}^\dagger a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger \rho_R(0) \quad , \quad a_{\mathbf{k}''\lambda''} a_{\mathbf{k}'\lambda'} \rho_R(0), \quad (11.125a)$$

$$a_{\mathbf{k}''\lambda''}^\dagger a_{\mathbf{k}'\lambda'} \rho_R(0) \quad , \quad a_{\mathbf{k}''\lambda''} a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger \rho_R(0). \quad (11.125b)$$

A questo punto è necessario specificare $\rho_R(0)$, cioè lo stato della radiazione all'istante iniziale $t = 0$. Il caso più semplice è costituito da una radiazione monocromatica e linearmente polarizzata, che è uno stato puro nel quale tutti i modi, eccetto uno (diciamo il modo $(\mathbf{k}\lambda)$), sono vuoti. Questa assunzione, tuttavia, non è realistica in quanto è impossibile in pratica ottenere una radiazione puramente monocromatica. In generale, se molti modi sono eccitati, un appropriato operatore densità è

$$\rho_R(0) = \prod_{\mathbf{q}\mu} |n_{\mathbf{q}\mu}\rangle \langle n_{\mathbf{q}\mu}|. \quad (11.126)$$

La traccia parziale degli operatori (11.125) è la somma dei corrispondenti elementi diagonali nella rappresentazione numero del campo di radiazione. Si noti, tuttavia, che solo l'elemento diagonale corrispondente allo stato (11.126) della radiazione è non nullo. Inoltre, gli elementi di matrice, rispetto a tale stato, degli operatori (11.125a) sono nulli, mentre per gli operatori (11.125b) si ottiene

$$\text{Tr}_R [a_{\mathbf{k}''\lambda''} a_{\mathbf{k}'\lambda'} \rho_R(0)] = n_{\mathbf{k}'\lambda'} \delta_{\mathbf{k}'\lambda''} \delta_{\lambda'\lambda''} \quad (11.127)$$

e, facendo uso dell'eq. (11.47b),

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R[a_{\mathbf{k}''\lambda''} a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger \rho_R(0)] &= \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \delta_{\lambda'\lambda''} \\ &+ n_{\mathbf{k}'\lambda'} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \delta_{\lambda'\lambda''}. \end{aligned} \quad (11.128)$$

L'eq. (11.124) diventa, quindi,

$$\begin{aligned} P_f(t) &= \frac{2\pi E_{fj}^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{|\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fj}|^2}{\omega(\mathbf{k})} \\ &\times \left\{ n_{\mathbf{k}\lambda} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{i[E_{fj} - \omega(\mathbf{k})](t_1 - t_2)} \right. \\ &\left. + (1 + n_{\mathbf{k}\lambda}) \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{i[E_{fj} + \omega(\mathbf{k})](t_1 - t_2)} \right\}. \end{aligned} \quad (11.129)$$

Dopo aver calcolato gli integrali, l'eq. (11.129) diventa

$$\begin{aligned} P_f(t) &= \frac{2\pi E_{fj}^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{|\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fj}|^2}{\omega(\mathbf{k})} n_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\sin^2\{t[\omega(\mathbf{k}) - E_{fj}]/2\}}{\{[\omega(\mathbf{k}) - E_{fj}]/2\}^2} \\ &+ \frac{2\pi E_{fj}^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{|\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fj}|^2}{\omega(\mathbf{k})} n_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\sin^2\{t[\omega(\mathbf{k}) + E_{fj}]/2\}}{\{[\omega(\mathbf{k}) + E_{fj}]/2\}^2} \\ &+ \frac{2\pi E_{fj}^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{|\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fj}|^2}{\omega(\mathbf{k})} \frac{\sin^2\{t[\omega(\mathbf{k}) + E_{fj}]/2\}}{\{[\omega(\mathbf{k}) + E_{fj}]/2\}^2}. \end{aligned} \quad (11.130)$$

La funzione $\sin^2(tx)/x^2$, oscillando, decade rapidamente a zero dal suo valore massimo che è t^2 a $x = 0$ (i suoi maggiori massimi secondari si hanno in $x = \pm 3\pi/2t$ e valgono $4t^2/9\pi^2 \simeq 0.045t^2$, cioè meno del 5% del massimo primario). Si ha, quindi, che il principale contributo alla popolazione dello stato $|f\rangle$ proviene o dal primo termine dell'eq. (11.130) quando

$$\omega = E_{fj}, \quad (11.131a)$$

o dagli ultimi due termini dell'eq. (11.130) quando

$$\omega = -E_{fj}. \quad (11.131b)$$

Dato che $\omega > 0$, il primo termine dell'eq. (11.130) corrisponde all'*assorbimento* (dallo stato $|j\rangle$ con energia E_j allo stato $|f\rangle$ con energia $E_f > E_j$) di radiazione con energia data dall'eq. (11.131a), mentre gli ultimi due termini dell'eq. (11.130) corrispondono all'*emissione* (dallo stato $|j\rangle$ con energia E_j allo stato $|f\rangle$ con energia $E_f < E_j$) di radiazione con energia data dall'eq. (11.131b). In assenza di fotoni ($n_{\mathbf{k}\lambda} = 0$) il primo termine dell'eq. (11.130) è nullo per cui il processo di assorbimento non può avvenire. Al contrario, grazie all'ultimo termine dell'eq. (11.130), l'emissione può avvenire anche in assenza di fotoni (allorquando anche il secondo termine dell'eq. (11.130) è nullo). Si

dice, quindi, che il secondo termine dell'eq. (11.130) corrisponde al processo di *emissione stimolata*, mentre l'ultimo termine corrisponde al processo di *emissione spontanea* da uno stato eccitato.

Calcolando la derivata temporale dei tre termini nell'eq. (11.130), si ottengono le velocità di probabilità di transizione per i tre processi precedenti. Facendo uso del fatto che, per t sufficientemente grande (ma, allo stesso tempo, sufficientemente piccolo da permettere di trascurare i termini di ordine superiore nelle espansioni (11.110)) si ha

$$\frac{\sin tx}{x} \rightarrow \pi\delta(x), \quad (11.132)$$

e le velocità di probabilità di transizione corrispondenti ai processi di assorbimento, emissione stimolata ed emissione spontanea, sono

$$R_{\text{ass}} = \frac{4\pi^2 E_{fj}^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{|\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fj}|^2}{\omega(\mathbf{k})} n_{\mathbf{k}\lambda} \delta[\omega(\mathbf{k}) - E_{fj}], \quad (11.133)$$

$$R_{\text{em}}^{\text{st}} = \frac{4\pi^2 E_{fj}^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{|\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fj}|^2}{\omega(\mathbf{k})} n_{\mathbf{k}\lambda} \delta[\omega(\mathbf{k}) - |E_{fj}|], \quad (11.134)$$

e

$$R_{\text{em}}^{\text{sp}} = \frac{4\pi^2 E_{fj}^2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{|\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fj}|^2}{\omega(\mathbf{k})} \delta[\omega(\mathbf{k}) - |E_{fj}|]. \quad (11.135)$$

Si vede che la velocità di probabilità di transizione per l'emissione stimolata è, a quest'ordine di approssimazione, uguale a quella relativa all'assorbimento:

$$R_{\text{ass}} = R_{\text{em}}^{\text{st}}. \quad (11.136)$$

Effettuando la scelta (11.39) per i vettori di polarizzazione e per la direzione di propagazione della radiazione emessa, la somma sugli stati di polarizzazione può essere facilmente calcolata,

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda} |\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fj}|^2 &= |\mathbf{d}_{fj}|^2 (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta) \\ &= |\mathbf{d}_{fj}|^2 (1 - \cos^2 \gamma), \end{aligned} \quad (11.137)$$

dove α , β e γ sono gli angoli fra il vettore \mathbf{d} e i versori definiti nell'eq. (11.39). Mediante la sostituzione (11.44), le somme su \mathbf{k} possono essere sostituite con integrali in cui l'integrazione sulle variabili angolari vale $8\pi/3$ (si noti che, in base alla scelta (11.39), l'angolo γ coincide con l'angolo polare θ) e dall'integrazione sulla parte radiale di \mathbf{k} , facendo uso delle proprietà della funzione delta di Dirac e del fatto che $\omega = kc$, si ottiene E_{fj}/c^3 . Otteniamo così

$$R_{\text{em}}^{\text{sp}} = \frac{4|E_{fj}|^3}{3c^3} |\mathbf{d}_{fj}|^2 \equiv A_{fj}, \quad (11.138)$$

che è l'espressione esplicita del cosiddetto *coefficiente A di Einstein* relativo al processo di emissione spontanea. Si vede come il processo di emissione spontanea, non previsto dalla meccanica classica, scaturisce dalla trattazione quantistica del campo elettromagnetico: in una trattazione classica del campo elettromagnetico, l'elemento di matrice dell'operatore $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}$ è nullo quando $\mathbf{A} = 0$. Quantisticamente, invece, gli elementi di matrice dell'operatore \mathbf{A} fra lo stato di vuoto e gli stati di singolo fotone non sono nulli.

Per calcolare le somme nelle equazioni (11.133) e (11.134), è necessario specificare i numeri di occupazione $n_{\mathbf{k}\lambda}$. Per esempio, se la radiazione fosse completamente non polarizzata, $n_{\mathbf{k}\lambda}$ non dipenderebbe da λ , e se fosse anche isotropa, $n_{\mathbf{k}\lambda}$ non dipenderebbe neanche dalla direzione di \mathbf{k} , quindi $n_{\mathbf{k}\lambda} = n_{\mathbf{k}}$. La somma sull'indice λ , pertanto, può essere effettuata come già fatto nell'eq. (11.137), e la somma sui vettori \mathbf{k} può essere calcolata trasformandola in un integrale (\mathbf{k} diventa una variabile continua e $n_{\mathbf{k}}$ diventa una funzione di variabile reale $n(\omega)$, dove $\omega = kc$), ottenendo

$$R_{\text{ass}} = R_{\text{em}}^{\text{st}} = \frac{4|E_{fj}|^3}{3c^3} |\mathbf{d}_{fj}|^2 n(E_{fj}). \quad (11.139)$$

Le velocità di probabilità di transizione date dalle equazioni (11.138) e (11.139) dipendono dal valore dell'elemento di matrice del momento di dipolo elettrico

$$\mathbf{d}_{fj} = \langle f | \mathbf{d} | j \rangle = e \langle f | \mathbf{R} | j \rangle. \quad (11.140)$$

Se gli stati iniziale e finale sono etichettati dai numeri quantici del momento angolare totale J e M , essendo l'operatore \mathbf{R} un operatore tensoriale irriducibile di rango 1 (teorema 9.20), si può applicare il teorema di Wigner-Eckart (teorema 9.21) all'eq. (11.140) e derivare le *regole di selezione di dipolo elettrico*, secondo le quali, nell'approssimazione di dipolo elettrico, una transizione radiativa è permessa purché

$$\Delta J = 0, \pm 1 \text{ (eccetto } J_f = J_j = 0) \quad \text{e} \quad \Delta M = 0, \pm 1. \quad (11.141)$$

Inoltre, siccome \mathbf{R} è un operatore dispari, solo le transizioni fra stati di parità opposta sono permesse.

Commento 11.18 A volte si desidera considerare il sistema in studio soggetto all'azione di un campo elettromagnetico esterno le cui sorgenti non sono parte del sistema stesso. Se $\mathbf{A}_e(\mathbf{x}, t)$ e $\phi_e(\mathbf{x}, t)$ sono i potenziali di tale campo esterno (non necessariamente nella gauge di Coulomb), si può dimostrare che l'Hamiltoniano del sistema è

$$\begin{aligned} H = & \sum_j \frac{1}{2m_j} \{ \mathbf{P}_j - (e_j/c)[\mathbf{A}(\mathbf{R}_j) + \mathbf{A}_e(\mathbf{R}_j, t)] \}^2 \\ & + \sum_j e_j \phi_e(\mathbf{R}_j, t) + V + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}, \end{aligned} \quad (11.142)$$

dal quale si può notare che le variabili dinamiche della radiazione sono legate solo alle densità di carica e corrente delle particelle, mentre la dinamica delle

particelle è determinata dal campo totale. L'eq. (11.142) può essere separata, come nell'eq. (11.90), nei contributi corrispondenti alle sole particelle, alla sola radiazione, e alla loro interazione, e le risultanti equazioni, corrispondenti alle equazioni (11.91) e (11.93), sono

$$H_p = \sum_j \frac{1}{2m_j} [\mathbf{P}_j - (e_j/c)\mathbf{A}_e(\mathbf{R}_j, t)]^2 + \sum_j e_j \phi_e(\mathbf{R}_j, t) + V, \quad (11.143)$$

e

$$H_I = - \sum_j \frac{e_j}{m_j} [\mathbf{P}_j - (e_j/c)\mathbf{A}_e(\mathbf{R}_j, t)] \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_j) + \sum_j \frac{e_j^2}{2m_j c^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{R}_j). \quad (11.144)$$

Nei potenziali esterni appare, anche nella descrizione di Schrödinger, una dipendenza esplicita dal tempo dato che questa è imposta dall'esterno (si veda il commento 11.15).

Commento 11.19 Se, in presenza di un campo elettromagnetico esterno, il potenziale trasverso \mathbf{A} può essere trascurato rispetto a quello esterno, cioè se l'interazione Coulombiana V tra le cariche è una buona approssimazione alla loro reale interazione, l'eq. (11.142) diventa

$$H = \sum_j \frac{1}{2m_j} [\mathbf{P}_j - (e_j/c)\mathbf{A}_e(\mathbf{R}_j, t)]^2 + \sum_j e_j \phi_e(\mathbf{R}_j, t) + V, \quad (11.145)$$

in cui è possibile identificare un termine relativo alle particelle e un termine di interazione:

$$H_P = \sum_j \frac{\mathbf{P}_j^2}{2m_j} + V, \quad (11.146)$$

e

$$H_I = \sum_j \left[-\frac{e_j}{m_j c} \mathbf{P}_j \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{R}_j, t) + \frac{e_j^2}{2m_j c^2} \mathbf{A}_e^2(\mathbf{R}_j, t) \right] + \sum_j e_j \phi_e(\mathbf{R}_j, t). \quad (11.147)$$

Commento 11.20 Se le cariche del sistema sono localizzate in una regione (che poniamo intorno all'origine del sistema di coordinate) abbastanza piccola da poter trascurare, entro essa, le variazioni spaziali del campo esterno, è possibile sviluppare questo in serie di Taylor e considerare solo i termini di ordine inferiore, applicando così l'approssimazione dipolare menzionata nell'esempio

(11.1). Per un sistema di cariche globalmente neutro, l'Hamiltoniano (11.145) diventa, quindi,

$$H = \sum_j \frac{1}{2m_j} [\mathbf{P}_j - (e_j/c)\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)]^2 + \mathbf{d} \cdot \nabla \phi_e(\mathbf{0}, t) + V, \quad (11.148)$$

dove

$$\mathbf{d} = \sum_j e_j \mathbf{R}_j \quad (11.149)$$

è l'operatore momento di dipolo elettrico del sistema di cariche.

Teorema 11.9 *l'Hamiltoniano di una molecola in un campo elettromagnetico può essere espresso, nell'approssimazione di dipolo elettrico, come somma di un termine corrispondente alle particelle che contiene l'energia totale delle cariche della molecola, ed un termine di interazione che dipende (linearmente) dal campo elettrico esterno (e non dai potenziali).*

Dimostrazione: dobbiamo, evidentemente, effettuare una trasformazione di gauge (definizione 5.1) tale che

$$\mathbf{A}'_e(\mathbf{0}, t) = 0 \quad (11.150)$$

per cui il primo termine dell'eq. (11.148) diventa l'energia cinetica delle particelle. Una funzione scalare $f(x)$ che produce la desiderata trasformazione di gauge è

$$f(x) = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t), \quad (11.151)$$

dato che, dall'identità

$$\begin{aligned} \nabla(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) &= (\mathbf{b} \cdot \nabla)\mathbf{a} + (\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b} \\ &+ \mathbf{b} \times (\nabla \times \mathbf{a}) + \mathbf{a} \times (\nabla \times \mathbf{b}), \end{aligned} \quad (11.152)$$

segue che

$$\nabla f = -\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t), \quad (11.153)$$

e, dall'eq. (5.15), si ha

$$\mathbf{A}'_e(\mathbf{0}, t) = \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) + \nabla f = 0. \quad (11.154)$$

Inoltre, dalle equazioni (5.14) e (11.154), si ha

$$\nabla \phi'_e = -\mathbf{E}_e - \dot{\mathbf{A}}'_e/c = -\mathbf{E}_e. \quad (11.155)$$

Inserendo le equazioni (11.154) e (11.155) nell'eq. (11.148), si ottiene

$$H = \sum_j \frac{1}{2m_j} \mathbf{P}_j^2 + V - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t), \quad (11.156)$$

in cui i primi due termini rappresentano l'energia totale delle particelle, cioè la somma delle loro energie cinetica e potenziale Coulombiana, e l'ultimo termine, che corrisponde all'interazione con il campo esterno, rappresenta l'accoppiamento fra il dipolo elettrico della molecola e il campo elettrico esterno calcolato alla posizione della molecola.

Commento 11.21 Nel caso in cui le particelle siano dotate di spin, l'interazione del loro momento magnetico di spin (eq. (9.94)) con il campo magnetico dà luogo ad un ulteriore termine:

$$H_s = -\mathbf{M}_s \cdot \mathbf{B}(\mathbf{R}_j) = -\sum_j g_j \frac{e_j}{2m_j c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{R}_j), \quad (11.157)$$

da aggiungere nell'eq. (11.93), oppure

$$H_s = -\mathbf{M}_s \cdot \mathbf{B}_e(\mathbf{R}_j, t) = -\sum_j g_j \frac{e_j}{2m_j c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_e(\mathbf{R}_j, t), \quad (11.158)$$

da aggiungere all'eq. (11.147). Tali termini non devono essere aggiunti alle equazioni (11.148) o (11.156) in quanto, siccome $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, il suo ordine di grandezza è, per ciascuna particella, ekA/mc , che è dello stesso ordine di grandezza dei termini che sono stati trascurati sostituendo $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ o $\mathbf{A}_e(\mathbf{x}, t)$ con $\mathbf{A}(\mathbf{0}, t)$ o $\mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t)$.

Parte III
APPENDICE

Appendice A

Relatività Ristretta

A.1 Cinematica

Definizione A.1 Un sistema di riferimento per il quale lo spazio è omogeneo ed isotropo ed il tempo uniforme è detto *inerziale*.

Commento A.1 Nel seguito, allorché si considereranno due sistemi di riferimento inerziali R e R' , si assumerà che gli assi x' , y' e z' di R' siano paralleli agli assi x , y e z di R , che R' si muova lungo il semiasse positivo x con velocità V rispetto a R , e che all'istante $t = 0$ gli assi dei due sistemi di riferimento coincidano.

Teorema A.1 *Se non esiste un limite superiore alla velocità con la quale i segnali possono essere trasmessi, allora le trasformazioni di coordinate spazio-temporali fra due sistemi di riferimento inerziali R e R' sono le trasformazioni Galileiane*

$$t = t' \quad (\text{A.1a})$$

$$x = x' + Vt \quad (\text{A.1b})$$

$$y = y' \quad (\text{A.1c})$$

$$z = z'. \quad (\text{A.1d})$$

Teorema A.2 *Le legge di composizione delle velocità compatibile con le trasformazioni Galileiane è*

$$\dot{x} = \dot{x}' + V \quad (\text{A.2a})$$

$$\dot{y} = \dot{y}' \quad (\text{A.2b})$$

$$\dot{z} = \dot{z}'. \quad (\text{A.2c})$$

Dimostrazione: segue direttamente dalle equazioni (A.1).

Teorema A.3 *Le equazioni del moto di Newton (eq. (1.1)) sono invarianti per trasformazioni Galileiane.*

Dimostrazione: nell'eq. (1.1), la più generale funzione \mathbf{F} che descrive l'interazione fra due corpi dipende dalla loro distanza reciproca, dalla loro velocità relativa e dal tempo: tali quantità sono tutte invarianti per trasformazioni Galileiane. La massa inerziale di un corpo può essere determinata, in modo indipendente dall'eq. (1.1), mediante esperimenti di collisione. In tali esperimenti il rapporto delle masse di due particelle collidenti è pari all'inverso del rapporto delle loro velocità relative prima e dopo la collisione: tale rapporto è invariante per trasformazioni Galileiane. Infine, dalle equazioni (A.2), si ha

$$\ddot{\mathbf{r}} = \ddot{\mathbf{r}}'. \quad (\text{A.3})$$

Si può pertanto concludere che l'eq. (1.1) è invariante per trasformazioni Galileiane.

Teorema A.4 *Se esiste un limite superiore, c , alla velocità con la quale i segnali possono essere trasmessi, allora le trasformazioni di coordinate spazio-temporali fra due sistemi inerziali R e R' sono le trasformazioni di Lorentz:*

$$t = \frac{t' + Vx'/c^2}{\sqrt{1 - (V/c)^2}} \quad (\text{A.4a})$$

$$x = \frac{x' + Vt'}{\sqrt{1 - (V/c)^2}} \quad (\text{A.4b})$$

$$y = y' \quad (\text{A.4c})$$

$$z = z'. \quad (\text{A.4d})$$

Teorema A.5 *La legge di composizione delle velocità compatibile con le trasformazioni di Lorentz è*

$$\dot{x} = \frac{\dot{x}' + V}{1 + \mathcal{B}\dot{x}'/c} \quad (\text{A.5a})$$

$$\dot{y} = \frac{\dot{y}'}{\Gamma(1 + \mathcal{B}\dot{x}'/c)} \quad (\text{A.5b})$$

$$\dot{z} = \frac{\dot{z}'}{\Gamma(1 + \mathcal{B}\dot{x}'/c)}, \quad (\text{A.5c})$$

dove

$$\mathcal{B} \equiv V/c \quad (\text{A.6})$$

e

$$\Gamma \equiv + \frac{1}{\sqrt{1 - \mathcal{B}^2}}. \quad (\text{A.7})$$

Commento A.2 Dalle eq. (A.5) si ha che, se $v' \equiv \sqrt{\dot{x}'^2 + \dot{y}'^2 + \dot{z}'^2} = c$, allora $v \equiv \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2} = c$; cioè la velocità c è la stessa in ogni sistema di riferimento inerziale.

Commento A.3 Fra le due possibilità palesate nei teoremi A.1 e A.4, la seconda è quella che si verifica sperimentalmente: la velocità della luce nel vuoto, c , ha il medesimo valore lungo qualsiasi direzione ed in qualsiasi sistema di riferimento inerziale ($c = 2.998 \times 10^8$ cm/s). Ne consegue che le trasformazioni (A.4) e (A.5), piuttosto che le trasformazioni (A.1) e (A.2), sono quelle corrette. Si noti, tuttavia, che nel *limite non relativistico*, allorché $V \ll c$ (cioè $\mathcal{B}^2 \simeq 0$ o $\Gamma \simeq 1$), le equazioni (A.4) e (A.5) si riducono alle equazioni (A.1) e (A.2) che, perciò, possono essere usate ogni volta che si considerano fenomeni fisici in cui si manifestano velocità di molto inferiori alla velocità della luce c .

Commento A.4 Dalle equazioni (A.4) si nota che non può esistere un sistema di riferimento con velocità $V \geq c$.

Teorema A.6 *Le equazioni di Maxwell (che regolano tutti i fenomeni elettromagnetici) sono invarianti per trasformazioni di Lorentz.*

Commento A.5 Se esistesse una separazione netta fra fenomeni meccanici e fenomeni elettromagnetici, i teoremi A.3 e A.6 non sarebbero in contraddizione. In realtà, esaminando in dettaglio i fenomeni cosiddetti puramente meccanici (come la collisione fra due palle da biliardo), ci si accorge che le forze elettromagnetiche sono necessariamente chiamate in causa. Ci vediamo perciò costretti a richiedere che anche le leggi fondamentali della dinamica siano invarianti rispetto alle trasformazioni di Newton: le equazioni di Newton, insomma, devono essere modificate in modo tale che si riducano, nel limite non relativistico, all'eq. (1.1).

Definizione A.2 Si dice che quattro quantità $A_\mu \equiv (A_j, A_4)$ ($\mu = 1, 2, 3, 4$ e $j = 1, 2, 3$), sono le componenti del *tetra-vettore* A se esse, per trasformazioni di Lorentz, si trasformano secondo le seguenti equazioni:

$$A_1 = \Gamma(A'_1 - i\mathcal{B}A'_4) \quad (\text{A.8a})$$

$$A_2 = A'_2 \quad (\text{A.8b})$$

$$A_3 = A'_3 \quad (\text{A.8c})$$

$$A_4 = \Gamma(A'_4 + i\mathcal{B}A'_1) . \quad (\text{A.8d})$$

A_j ($j = 1, 2, 3$) e A_4 sono dette, rispettivamente, le componenti spaziali e la componente temporale del tetra-vettore A .

Commento A.6 La definizione di tetra-vettore appena data ci permette di costruire da un qualsiasi vettore tridimensionale ordinario un tetra-vettore, richiedendo che

1. le componenti del tetra-vettore si trasformino, per trasformazioni di Lorentz, secondo le equazioni (A.8), e
2. le prime tre componenti del tetra-vettore si riducano, al limite non relativistico, alle componenti del corrispondente vettore nello spazio tridimensionale ordinario.

Definiamo di seguito i seguenti importanti tetra-vettori: i tetra-vettori spazio-tempo, velocità, accelerazione, forza e energia-momento.

Commento A.7 Le quattro quantità $x_\mu \equiv (x_j, x_4)$ ($\mu = 1, 2, 3, 4$ e $j = 1, 2, 3$) tali che

$$x_1 \equiv x, \quad x_2 \equiv y, \quad x_3 \equiv z, \quad x_4 \equiv ict \quad (\text{A.9})$$

che, per trasformazioni di Lorent (A.4), si trasformano secondo

$$x_1 = \Gamma (x'_1 - i\mathcal{B}x'_4) \quad (\text{A.10a})$$

$$x_2 = x'_2 \quad (\text{A.10b})$$

$$x_3 = x'_3 \quad (\text{A.10c})$$

$$x_4 = \Gamma (x'_4 + i\mathcal{B}x'_1), \quad (\text{A.10d})$$

sono le componenti di un tetra-vettore: il *tetra-vettore spazio-tempo* (esso specifica un *evento* nello *spazio di Minkowski*).

Definizione A.3 La quantità ds definita da

$$-ds^2 \equiv dx_\mu dx_\mu = dx^2 + dy^2 + dz^2 - c^2 dt^2 \quad (\text{A.11})$$

è detta *l'intervallo* fra due eventi.

Teorema A.7 *L'intervallo è invariante per trasformazioni di Lorentz.*

Definizione A.4 Il tempo τ , misurato da un orologio solidale con il sistema di riferimento inerziale nel quale un corpo è in quiete, è detto il *tempo proprio* del corpo.

Teorema A.8 *Il tempo proprio è invariante per trasformazioni di Lorentz.*

Dimostrazione: nel sistema di riferimento solidale con il corpo, l'intervallo è

$$ds^2 = -dx_4^2 = c^2 d\tau^2. \quad (\text{A.12})$$

Siccome (commento A.3 e teorema A.7) c e ds sono invarianti, $d\tau$ è invariante per trasformazioni di Lorentz.

Teorema A.9 *Il tempo proprio τ di un corpo in termini del tempo t misurato da un orologio solidale con il sistema di riferimento rispetto al quale il corpo si muove con velocità \mathbf{v} è*

$$d\tau = \frac{dt}{\gamma}, \quad (\text{A.13})$$

dove

$$\gamma \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (\text{A.14a})$$

e

$$\beta \equiv \frac{v}{c}. \quad (\text{A.14b})$$

Dimostrazione: dall'eq. (A.12), dal teorema A.7 e dall'eq. (A.11) si ha

$$d\tau = \frac{ds}{c} = \frac{\sqrt{c^2 dt^2 - dx_j dx_j}}{c} = dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \frac{dt}{\gamma}. \quad (\text{A.15})$$

Commento A.8 Dall'eq. (A.15) e dal fatto che $\gamma \geq 1$, si ha che l'intervallo di tempo fra due eventi è minimo nel sistema di riferimento nel quale i due eventi sono in quiete.

Commento A.9 Nel caso in cui la velocità del corpo è molto più piccola della velocità della luce c , si può espandere γ in serie di Taylor per ottenere

$$\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2} = 1 + \frac{1}{2}\beta^2 + \frac{3}{8}\beta^4 + \dots \quad (\text{A.16})$$

Definizione A.5 La *tetra-velocità* è definita

$$u_\mu \equiv \frac{dx_\mu}{d\tau} \quad (\text{A.17})$$

$$\equiv \gamma \frac{dx_\mu}{dt} \quad (\text{A.18})$$

$$\equiv ic\gamma \frac{dx_\mu}{dx_4}, \quad (\text{A.19})$$

dove, per ottenere le equazioni (A.18) e (A.19), sono state usate le equazioni (A.13) e (A.9).

Commento A.10 Le componenti spaziali della tetra-velocità sono

$$u_j = \gamma \frac{dx_j}{dt} = \gamma v_j = v_j \left(1 + \frac{1}{2}\beta^2 + \frac{3}{8}\beta^4 + \dots \right) \quad (\text{A.20})$$

che, in accordo con il commento A.6, nel limite non relativistico ($\beta^2 \approx 0$), si riducono alle componenti della velocità ordinaria \mathbf{v} .

La componente temporale della tetra-velocità è

$$u_4 = ic\gamma = ic \left(1 + \frac{1}{2}\beta^2 + \dots \right) \quad (\text{A.21})$$

che può essere considerata la velocità di scorrimento del tempo ed è sempre non nulla (il tempo non può essere fermato!).

Definizione A.6 La *tetra-accelerazione* è

$$w_\mu \equiv \frac{d^2 x_\mu}{d\tau^2} = \frac{du_\mu}{d\tau}. \quad (\text{A.22})$$

Commento A.11 Le componenti spaziali della tetra-accelerazione sono

$$w_j \equiv \frac{du_j}{d\tau} = \gamma \frac{du_j}{dt} = \gamma \frac{d}{dt} (\gamma v_j) \quad (\text{A.23})$$

$$= \gamma^2 a_j + \gamma v_j \dot{\gamma} = \gamma^2 a_j + v_j \gamma^4 v \dot{v} / c^2, \quad (\text{A.24})$$

dove si è fatto uso del fatto che

$$\dot{\gamma} = \gamma^3 v \dot{v} / c^2. \quad (\text{A.25})$$

Dall'eq. (A.23) si può notare che, per $v \ll c$, w_j si riduce a a_j , in accordo con il commento A.6.

La componente temporale della tetra-accelerazione è

$$w_4 = \frac{du_4}{d\tau} = \gamma \frac{du_4}{dt} = ic\gamma\dot{\gamma} = ic\gamma^4 v \dot{v} / c^2, \quad (\text{A.26})$$

che è nulla per $v = 0$.

A.2 Dinamica

Definizione A.7 Se m è la massa inerziale di un corpo (vedi commento A.17), il suo *tetra-momento* è

$$p_\mu \equiv mu_\mu \quad (\text{A.27})$$

$$= m\gamma\dot{x}_\mu, \quad (\text{A.28})$$

dove, per ottenere la seconda uguaglianza, si è usata l'eq. (A.18).

Commento A.12 Le componenti spaziali del tetra-momento sono

$$p_j = mu_j = m\gamma\dot{x}_j = m\dot{x}_j \left(1 + \frac{1}{2}\beta^2 + \dots \right), \quad (\text{A.29})$$

che, in accordo con il commento A.6, si riducono, nel limite non relativistico, alle componenti della ordinaria quantità di moto mv_j .

La componente temporale del tetra-momento è (vedi equazioni (A.21) e (A.27))

$$p_4 = mu_4 = imc\gamma, \quad (\text{A.30})$$

il cui significato sarà presto chiarificato (commento A.16).

Commento A.13 Siamo ora nella posizione di postulare l'equazione dinamica per una particella di massa m . Ciò è equivalente a definire la *tetra-forza* \mathcal{F}_μ come segue:

$$\mathcal{F}_\mu \equiv \frac{dp_\mu}{d\tau} \quad (\text{A.31})$$

$$= m \frac{du_\mu}{d\tau} \quad (\text{A.32})$$

$$= mw_\mu. \quad (\text{A.33})$$

Le componenti spaziali della tetra-forza sono

$$\mathcal{F}_j = \frac{dp_j}{d\tau} = \gamma\dot{p}_j = \gamma F_j. \quad (\text{A.34})$$

F_j è la forza ordinaria, che, nel limite non relativistico, si riduce a ma_j (vedi eq. (A.29)).

Commento A.14 La componente temporale della tetra-forza è

$$\mathcal{F}_4 = \frac{dp_4}{d\tau} = \gamma \dot{p}_4 = i\gamma \frac{d}{dt}(mc\gamma), \quad (\text{A.35})$$

dove si sono usate le equazioni (A.30) e (A.31).

Teorema A.10 L'energia totale di un particella libera di massa m e velocità v è

$$E = mc^2\gamma. \quad (\text{A.36})$$

Dimostrazione: consideriamo innanzitutto la quantità $u_\mu u_\mu$. Essa, essendo invariante, può essere calcolata in qualsiasi sistema di riferimento inerziale e, in particolare, in quello in cui la particella è in quiete. Dall'eq. (A.21), ponendo $\gamma = 1$, si ha

$$u_\mu u_\mu = -c^2, \quad (\text{A.37})$$

da cui

$$\frac{d}{d\tau}(u_\mu u_\mu) = 2u_\mu \frac{du_\mu}{d\tau} = 0. \quad (\text{A.38})$$

Usando l'eq. (A.32), l'eq. (A.38) diventa

$$0 = u_\mu \mathcal{F}_\mu \equiv u_j \mathcal{F}_j + u_4 \mathcal{F}_4, \quad (\text{A.39})$$

cioè, usando le equazioni (A.20), (A.21) e (A.34),

$$ic\gamma \mathcal{F}_4 = -\gamma v_j \mathcal{F}_j = -\gamma^2 v_j F_j, \quad (\text{A.40})$$

o anche,

$$\mathcal{F}_4 = \frac{i\gamma}{c} \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{A.41})$$

Confrontando le equazioni (A.35) e (A.41) si ottiene, infine,

$$d(mc^2\gamma) = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} dt = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{x} = dE, \quad (\text{A.42})$$

che prova l'eq. (A.36).

Commento A.15 L'energia totale di una particella libera di massa m e velocità $v \ll c$ è, dalle equazioni (A.16) e (A.41),

$$E = mc^2 + \frac{1}{2}mv^2 + \frac{3}{8}mv^2\beta^2 + \dots \quad (\text{A.43})$$

Da quest'ultimo risultato si vede che, in meccanica relativistica, l'energia della particella in quiete (*energia a riposo*) è

$$E_0 = mc^2 \quad (\text{A.44})$$

ed è non nulla. Il secondo termine del membro destro dell'eq. (A.43) è l'energia cinetica non relativistica, il terzo e i successivi termini sono correzioni relativistiche.

Commento A.16 Dalle equazioni (A.30) e (A.36) si nota che

$$p_4 = i \frac{E}{c}, \quad (\text{A.45})$$

e pertanto possiamo interpretare la componente temporale del tetra-momento (vedi commento A.12) come l'energia totale della particella. Il tetra-momento è, quindi, anche noto come tetra-vettore *energia-momento*.

Teorema A.11 *In meccanica relativistica l'accelerazione non è, in generale, parallela alla forza applicata.*

Dimostrazione: relativisticamente, la forza ordinaria può essere scritta

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \frac{d}{dt}(m\mathbf{v}\gamma) = \frac{1}{c^2} \frac{d}{dt}(E\mathbf{v}) = \frac{1}{c^2} \dot{E}\mathbf{v} + \frac{1}{c^2} E\dot{\mathbf{v}} \\ &= \frac{\mathbf{v}}{c^2} \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} + m\gamma\dot{\mathbf{v}}, \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

per cui

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} \equiv \mathbf{a} = \frac{1}{m\gamma} \left(\mathbf{F} - \frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \mathbf{v} \right), \quad (\text{A.47})$$

da cui si nota che, in generale, \mathbf{a} non è parallelo ad \mathbf{F} .

Commento A.17 Esistono due casi in cui \mathbf{F} e \mathbf{a} sono sempre paralleli, e cioè quando \mathbf{F} è perpendicolare a \mathbf{v} o quando \mathbf{F} è parallela a \mathbf{v} . Nel primo caso l'eq. (A.46) diventa

$$\mathbf{F} = m\gamma\mathbf{a}, \quad (\text{A.48})$$

e, nel secondo caso, siccome

$$(\mathbf{F} \cdot \mathbf{v})\mathbf{v} = \mathbf{F}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{F}v^2, \quad (\text{A.49})$$

l'eq. (A.46) diventa

$$\mathbf{F} = m\gamma^3\mathbf{a}. \quad (\text{A.50})$$

Si noti che, in generale, non è possibile riscrivere l'eq. (A.46) in modo da riottenerla nella forma dell'equazione di Newton (1.1) considerando la massa della particella come una proprietà dipendente dalla velocità. Nei casi in cui ciò è possibile tale dipendenza non è univocamente determinata (vedi equazioni (A.48) e (A.50)). Oltre a ciò, l'origine fisica degli effetti relativistici ne verrebbe celata, dato che tali effetti sono una conseguenza della geometria dello spazio-tempo (la quantità γ che compare nelle equazioni (A.46)–(A.50) è stata ottenuta nel considerare trasformazioni fra sistemi inerziali e non avrebbe alcun senso il tentativo di relazionarla alla massa della particella). È perciò buona norma considerare la massa inerziale di un corpo una proprietà relativisticamente invariante.

Teorema A.12 *Una accettabile Lagrangiana relativistica per una particella di massa m e che si muove con velocità \mathbf{v} in un potenziale conservativo V è*

$$L = -mc^2\sqrt{1-\beta^2} - V \equiv K - V, \quad (\text{A.51})$$

dove la quantità β è definita in eq. (A.14b).

Dimostrazione: come da commento 2.4, dimostriamo che l'eq. (A.51), inserita nelle equazioni di Eulero-Lagrange, riproduce la componente spaziale delle equazioni del moto (eq. (A.34)). Dalle equazioni (A.51) e (2.24) si ha

$$p_j \equiv \frac{\partial L}{\partial v_j} = m\gamma v_j, \quad (\text{A.52})$$

che è in accordo con l'eq. (A.29). Quindi, dall'eq. (A.34),

$$\dot{p}_j = \frac{d}{dt}(m\gamma v_j) = F_j, \quad (\text{A.53})$$

che, confrontata con

$$\frac{\partial L}{\partial x_j} = -\frac{\partial V}{\partial x_j} \equiv F_j, \quad (\text{A.54})$$

mostra che l'eq. (A.34) è riprodotta.

Commento A.18 Si noti che, in accordo con il teorema 2.14, il momento coniugato a una coordinata cartesiana è la quantità di moto (vedi equazioni (A.28) e (A.52)). D'altra parte, siccome K in eq. (A.51) non è una funzione omogenea di secondo grado nella velocità, la funzione energia (definizione 2.4) non è $h = K + V$ (vedi teorema 2.12). In verità, la quantità K non è nemmeno l'energia cinetica. Questa è definita nel teorema 2.3, e la sua generalizzazione relativistica è data dall'eq. (A.42), cioè,

$$T = mc^2\gamma. \quad (\text{A.55})$$

(A volte, l'energia cinetica è definita sottraendo da T l'energia a riposo mc^2 , in modo tale da ottenere al limite non relativistico la familiare espressione $mv^2/2$.) In ogni caso, h è ancora l'energia totale, come si può immediatamente verificare:

$$\begin{aligned} h &= \mathbf{v} \cdot \mathbf{p} - L = m\gamma v_j v_j + \frac{mc^2}{\gamma} + V \\ &= \gamma [mv^2 + mc^2(1-\beta^2)] + V \\ &= mc^2\gamma + V = T + V. \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

Teorema A.13 *La funzione Hamiltoniana di una particella relativistica di massa m e che si muove con velocità \mathbf{v} in un potenziale conservativo V è*

$$H = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} + V. \quad (\text{A.57})$$

Dimostrazione: l'Hamiltoniano è la funzione energia espressa in termini della coordinate generalizzate e dei corrispondenti momenti coniugati. Quindi, dall' eq. (A.52), si ha

$$v^2 = \frac{\mathbf{p}^2}{m^2\gamma^2},$$

o anche,

$$1 - \frac{v^2}{c^2} \equiv \frac{1}{\gamma^2} = 1 - \frac{\mathbf{p}^2}{m^2c^2\gamma^2},$$

da cui

$$\gamma^2 = \frac{\mathbf{p}^2 + m^2c^2}{m^2c^2}$$

dalla quale, una volta inserita nell'eq. (A.55), si ottiene

$$T^2 = m^2c^4\gamma^2 = \mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4.$$

Quindi, usando l'eq. (A.56), si verifica l' equazione (A.57).

Commento A.19 Per una carica e di massa m in un campo elettromagnetico specificato dai potenziali \mathbf{A} e ϕ , il momento coniugato ad una coordinata Cartesiana è dato dall'eq. (5.55), e l'Hamiltoniano si ottiene dalle equazioni (5.54) e (5.57), cioè,

$$H = \sqrt{\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 c^2 + m^2c^4} + e\phi. \quad (\text{A.58})$$

Commento A.20 Per $v \ll c$, se si sviluppano le equazioni (A.57) e (A.58) in serie di potenze di (v/c) , si ottengono, a meno della energia a riposo mc^2 , le espressioni non relativistiche dell'energia totale (equazioni (3.53) e (5.54)). Per esempio,

$$\begin{aligned} H &= \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} = mc^2 \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{p}^2}{m^2c^2} - \frac{1}{8} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{m^2c^2} \right)^2 + \dots \right] \\ &= mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \dots \end{aligned}$$

Di conseguenza, gli operatori (7.132) e (7.134) sono i corrispondenti Hamiltoniani quantomeccanici nel limite non relativistico.

A.3 Equazione di Dirac

Commento A.21 Nella rimanente parte di questa appendice ci si renderà conto delle difficoltà che sorgono dal tentativo di costruire un'equazione del moto quantistica per una particella relativistica (ci limiteremo al moto libero giacché le stesse considerazioni possono essere facilmente estese al moto di una particella in un potenziale).

Un primo tentativo nella costruzione di tale equazione è realizzato notando che l'equazione di Schrödinger per una particella libera è formalmente ottenuta dalla relazione di dispersione classica, eq. (9.63), per mezzo delle sostituzioni

$$E \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{A.59a})$$

$$p_j \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad (\text{A.59b})$$

ed effettuando le stesse sostituzioni nella relazione di dispersione relativistica (eq. (A.57))

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (\text{A.60})$$

Si ottiene così l'equazione di *Klein-Gordon*,

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \mu^2 \right) \phi(x) = 0, \quad (\text{A.61})$$

dove

$$\mu \equiv mc. \quad (\text{A.62})$$

L'equazione di Klein-Gordon è, in effetti, un'equazione relativisticamente invariante per qualsiasi soluzione $\phi(x)$ che sia relativisticamente invariante.

Commento A.22 Come può essere facilmente verificato, le onde piane (vedi eq. (A.65)) sono soluzioni dell'equazione di Klein-Gordon purché obbediscano alla relazione di dispersione (A.60). Tale relazione ammette, in principio, anche valori negativi dell'energia: lo spettro dell'energia è composto da tutto l'asse reale eccetto l'intervallo proibito compreso fra $-mc^2$ e $+mc^2$. Per una particella libera avente energia positiva le soluzioni ad energia negativa possono essere scartate perché una particella ad energia positiva, se libera, non ha possibilità di accedere nella regione delle energie negative. Tuttavia, in presenza di interazioni, c'è una probabilità non nulla di transizione dalla regione dello spettro a energie positive a quella ad energie negative (si noti che, classicamente, è possibile scartare le energie negative dello spettro anche in presenza di interazioni dato che in meccanica classica l'energia può variare solo in modo continuo e non sono permessi salti quantici). In conclusione, le soluzioni ad energia negativa dell'equazione di Klein-Gordon non possono essere scartate. Il seguente teorema mostra una prima difficoltà che deriva da questo fatto.

Teorema A.14 *Non è possibile dare un'interpretazione probabilistica alle soluzioni dell'equazione di Klein-Gordon.*

Dimostrazione: moltiplicando l'eq. (A.61) per ϕ^* e la sua complessa coniugata per ϕ , si ottiene un'equazione di continuità (si veda l'eq. (7.140)) nella quale

$$\rho(x) = A \left(\phi^* \dot{\phi} - \dot{\phi}^* \phi \right) \quad (\text{A.63})$$

e

$$\mathbf{j}(x) = Ac^2 (\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi), \quad (\text{A.64})$$

dove A è una costante determinata in modo tale che $\mathbf{j}(x)$ e $\rho(x)$ coincidano, al limite non relativistico, con le espressioni date dalle equazioni (7.139) e (7.141). La soluzione dell'eq. (A.61) è

$$\phi(x) = \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)] = e^{ip \cdot x} \quad (\text{A.65})$$

che, inserita nelle equazioni (A.63) e (A.64) e confrontando con le equazioni (7.139) e (7.141), dà

$$A = \frac{i}{2\mu c},$$

e

$$\rho(x) = \frac{E}{mc^2} |\phi|^2. \quad (\text{A.66})$$

Dall'equazione (A.66) si vede che non vi è garanzia che $\rho(x)$ sia una quantità definita positiva, visto che dalla relazione di dispersione (A.60) per una particella libera relativistica non possono essere scartate le soluzioni ad energia negativa (commento A.22). Perciò, la quantità $\rho(x)$ che appare nell'eq. (A.66) non può essere interpretata come una densità di probabilità.

Commento A.23 Il fatto che $\rho(x)$ non sia una quantità definita positiva nasce dalla presenza, nell'eq. (A.63), delle derivate temporali di ϕ e ϕ^* , e ciò, a sua volta, risulta dal fatto che l'equazione di Klein-Gordon è un'equazione differenziale del secondo ordine rispetto alla variabile temporale. Perciò, affinché una funzione d'onda in meccanica quantistica relativistica possa mantenere una interpretazione probabilistica, essa: (i) deve obbedire un'equazione che sia del primo ordine nella variabile temporale (così da evitare l'insorgenza di densità di probabilità negative), del primo ordine rispetto anche alle variabili spaziali (così da essere relativisticamente invariante), e lineare (cosicché le soluzioni appartengano ad uno spazio lineare), e (ii) per una particella libera deve obbedire l'equazione di Klein-Gordon come condizione supplementare (così da soddisfare la relazione di dispersione relativistica (A.60). L'equazione più generale che soddisfi il primo criterio può essere scritta nella forma ($k = 1, 2, 3$)

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \alpha_k \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} + i\mu\beta\Psi = 0, \quad (\text{A.67})$$

dove Ψ è una funzione d'onda ad N componenti (in riferimento al commento 9.8 si ricordi che, in meccanica quantistica non relativistica, la funzione d'onda Ψ , per una particella di spin s , è, in generale, uno spinore di rango $2s+1$), e α_k e β sono matrici costanti (cioè indipendenti da \mathbf{x} e t) che, così come i valori permessi di N , devono essere determinate. L'equazione (A.67) è nota come *equazione di Dirac*.

Teorema A.15 *Affinché l'equazione di Dirac sia compatibile con un'equazione di continuità è necessario che le matrici α_k e β siano Hermitiane.*

Dimostrazione: moltiplicando l'eq. (A.67) a sinistra per Ψ^\dagger e la sua trasposta a destra per Ψ e sommando membro a membro le equazioni risultanti, si ottiene l'equazione

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{d}{dt} (\Psi^\dagger \Psi) + \left[\Psi^\dagger \alpha_k \partial_k \Psi + (\partial_k \Psi^\dagger) \alpha_k^\dagger \Psi \right] \\ + i\mu (\Psi^\dagger \beta \Psi - \Psi^\dagger \beta^\dagger \Psi) = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

nella quale, affinché essa assumi la forma di un'equazione di continuità, l'ultimo termine deve essere nullo, cioè

$$\beta^\dagger = \beta \quad (\text{A.69a})$$

e, nel termine fra parentesi quadre,

$$\alpha^\dagger = \alpha, \quad (\text{A.69b})$$

per cui l'equazione di continuità diventa

$$\partial_t (\Psi^\dagger \Psi) + \partial_k (c \Psi^\dagger \alpha_k \Psi) = 0. \quad (\text{A.70})$$

Perciò, la densità di probabilità (ora definita positiva!) e la k -esima componente della densità di corrente di probabilità sono, rispettivamente,

$$\rho(x) = \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \quad (\text{A.71})$$

e

$$j_k(x) = c \Psi^\dagger(x) \alpha_k \Psi(x). \quad (\text{A.72})$$

Teorema A.16 *Affinché l'equazione di Dirac per una particella libera ammetta soluzioni compatibili con la relazione di dispersione relativistica (A.60), è necessario che le matrici α_k e β anticommutoino tra loro e che il loro quadrato sia la matrice unità.*

Dimostrazione: dall'eq. (A.67) si ha

$$\left(\frac{1}{c} \partial_t - \alpha_j \partial_j - i\mu\beta \right) \left(\frac{1}{c} \dot{\Psi} + \alpha_k \partial_k \Psi + i\mu\beta \Psi \right) = 0,$$

cioè,

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \ddot{\Psi} - \frac{1}{2} (\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j) \partial_k \partial_j \Psi \\ - i\mu (\alpha_k \beta + \beta \alpha_k) \partial_k \Psi + \mu^2 \beta^2 \Psi = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.73})$$

Come già sottolineato nel commento A.23, la relazione di dispersione relativistica è soddisfatta se la soluzione dell'equazione di Dirac è anche

soluzione dell'equazione di Klein-Gordon. Tale condizione supplementare è soddisfatta se nell'eq. (A.73) si ha

$$\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 2\delta_{jk}, \quad (\text{A.74a})$$

$$\alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0, \quad (\text{A.74b})$$

$$\beta^2 = 1. \quad (\text{A.74c})$$

Le condizioni (A.74) possono essere riscritte come

$$\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = \alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0, \quad (\text{A.75a})$$

$$\alpha_k^2 = \beta^2 = 1. \quad (\text{A.75b})$$

Commento A.24 Moltiplicando l'eq. (A.67) a sinistra per $-i\beta$ e facendo uso dell'eq. (A.74c), l'equazione di Dirac può essere riscritta nella forma

$$(\gamma_\nu \partial_\nu + \mu) \Psi = 0, \quad (\text{A.76})$$

dove le quattro matrici γ sono così definite:

$$\gamma_k \equiv -i\beta \alpha_k \quad (\text{A.77a})$$

$$\gamma_4 \equiv \beta. \quad (\text{A.77b})$$

Teorema A.17 *Le quattro matrici γ sono Hermitiane, anticommutano fra di loro e il loro quadrato è la matrice unità.*

Dimostrazione: la proprietà di Hermiticità segue dalle equazioni (A.77) facendo uso delle equazioni (A.69a) e (A.74b). Inoltre dall'eq. (A.77a),

$$\begin{aligned} \gamma_j \gamma_k + \gamma_k \gamma_j &= -(\beta \alpha_j \beta \alpha_k + \beta \alpha_k \beta \alpha_j) \\ &= \beta^2 (\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j) = 2\delta_{jk}, \end{aligned} \quad (\text{A.78a})$$

dove sono state usate le equazioni (A.74). Infine,

$$\begin{aligned} \gamma_k \gamma_4 + \gamma_4 \gamma_k &= -i(\beta \alpha_k \beta + \beta^2 \alpha_k) \\ &= -i(-\beta^2 \alpha_k + \beta^2 \alpha_k) = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.78b})$$

e

$$\gamma_4 \gamma_4 = \beta^2 = 1. \quad (\text{A.78c})$$

Teorema A.18 *La dimensione delle matrici γ deve essere pari.*

Dimostrazione: dalle equazioni (A.78a) e (A.78b), per $\mu \neq \nu$ si ha

$$\gamma_\mu \gamma_\nu = -\gamma_\nu \gamma_\mu = (-I) \gamma_\nu \gamma_\mu, \quad (\text{A.79})$$

dove I è la matrice identità $N \times N$. Calcolando il determinante di ambo i membri dell'eq. (A.79) si ha

$$1 = \det(-I) = (-1)^N,$$

e perciò N deve essere necessariamente pari.

Teorema A.19 *La dimensione delle matrici γ deve essere almeno pari a quattro.*

Dimostrazione: presenteremo qui soltanto un breve accenno della dimostrazione completa. Consideriamo l'insieme contenente le matrici γ , le matrici da esse ottenute moltiplicandole due alla volta, tre alla volta, ... e così via. Siccome il quadrato delle matrici γ è unitario, tale insieme contiene, al più, 16 matrici distinte: $\{I, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \gamma_1\gamma_2, \gamma_1\gamma_3, \gamma_1\gamma_4, \gamma_2\gamma_3, \gamma_2\gamma_4, \gamma_3\gamma_4, \gamma_1\gamma_2\gamma_3, \gamma_1\gamma_3\gamma_4, \gamma_2\gamma_3\gamma_4, \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4\}$. È possibile dimostrare che quest'ultimo è un insieme di 16 matrici indipendenti. Siccome N è pari (teorema A.18) e siccome esistono al più quattro matrici indipendenti 2×2 , la dimensione delle matrici γ deve essere almeno 4. (In genere, si chiama *equazione di Dirac* la realizzazione della eq. A.67 con $N = 4$; da questo punto in poi ci limiteremo a questo caso.)

Commento A.25 È facile verificare che le seguenti matrici 4×4 soddisfano le condizioni del teorema A.18,

$$\gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_k \\ i\sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}. \quad (\text{A.80})$$

In esse, 0 e la matrice nulla 2×2 , I e la matrice identità 2×2 e le σ_k sono le matrici di Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.81})$$

definite nell' eq. (9.80).

Commento A.26 Chiaramente, esistono molte altre possibili rappresentazioni delle matrici γ . Tuttavia, in virtù del *teorema fondamentale di Pauli*, tutte le rappresentazioni delle matrici γ sono equivalenti, cioè, se $\{\gamma_\mu\}$ e $\{\gamma'_\mu\}$ sono due distinte rappresentazioni delle matrici γ , esiste una matrice 4×4 non singolare S che è unica (a meno di una costante moltiplicativa) e tale che (si ricordi la definizione 6.25)

$$\gamma'_\mu = S^{-1}\gamma_\mu S.$$

Commento A.27 Le trasformazioni di Lorentz sono trasformazioni lineari nello spazio di Minkowski che lasciano invariata la norma del tetra-vettore x . Perciò, se x' è il tetra-vettore che risulta dall'applicazione di una trasformazione di Lorentz al tetra-vettore x , si ha

$$x_\mu \rightarrow x'_\mu = \Lambda_{\mu\nu} x_\nu, \quad (\text{A.82})$$

con

$$x'_\mu x'_\mu = x_\mu x_\mu. \quad (\text{A.83})$$

La condizione (A.83) implica che i 16 elementi di matrice $\Lambda_{\mu\nu}$ delle matrici Λ sono tali che

$$\Lambda_{\mu\nu}\Lambda_{\mu\lambda} = \delta_{\nu\lambda}. \quad (\text{A.84})$$

Siccome l'eq. (A.84) fissa 10 condizioni, dei 16 termini matriciali $\Lambda_{\mu\nu}$ solo 6 sono indipendenti: l'insieme di tutte le possibili trasformazioni di Lorentz nello spazio di Minkowski è un gruppo di Lie a sei parametri, il gruppo $O(3,1)$ (da non essere confuso col gruppo $O(4)$). È possibile dimostrare che

$$\det \Lambda = \pm 1, \quad (\text{A.85})$$

e che o

$$\Lambda_{44} \geq 1, \quad (\text{A.86})$$

oppure

$$\Lambda_{44} \leq -1, \quad (\text{A.87})$$

cosicché il gruppo di Lorentz $O(3,1)$ può essere ripartito in quattro sottoinsiemi fra i quali, quello corrispondente a

$$\det \Lambda = 1, \quad \Lambda_{44} \geq 1, \quad (\text{A.88})$$

è un sottogruppo, detto il gruppo di Lorentz proprio $SO(3,1)$. I rimanenti tre sottoinsiemi non formano un gruppo. Tuttavia, le trasformazioni di Lorentz ad essi corrispondenti possono essere generate moltiplicando le matrici del gruppo $SO(3,1)$ con una delle seguenti matrici costanti: la matrice di inversione spaziale, la matrice di inversione temporale o la matrice di inversione spazio-temporale. È quindi necessario studiare solo il gruppo delle trasformazioni di Lorentz proprie $SO(3,1)$ che è un gruppo di Lie a sei parametri i cui elementi, essendo connessi in modo continuo all'elemento identità, possono essere generati da trasformazioni di Lorentz infinitesime tramite esponenziazione (si confronti con l'eq. (9.135)).

Siccome ciascun elemento in $SO(3,1)$ è specificato da sei parametri, il gruppo ha sei generatori. Può essere inoltre dimostrato che tali generatori possono essere divisi in due insiemi, $\{J_1, J_2, J_3\}$ e $\{K_1, K_2, K_3\}$, nei quali è definita la seguente algebra:

$$[J_j, J_k] = i\epsilon_{jkq} J_q \quad (\text{A.89a})$$

$$[K_j, K_k] = i\epsilon_{jkq} K_q \quad (\text{A.89b})$$

$$[J_j, K_k] = 0. \quad (\text{A.89c})$$

Il *rango* di un gruppo di Lie è, per definizione, il numero massimo di generatori che commutano tutti tra loro, e si definisce *operatore di Casimir* una combinazione polinomiale di generatori che commuta con tutti i generatori del gruppo di Lie. Esiste un teorema che afferma che il numero di operatori di Casimir indipendenti in un gruppo di Lie è pari al rango del gruppo. È possibile dimostrare che $SO(3,1)$ è un gruppo di Lie di rango due e perciò ammette due operatori di Casimir indipendenti. L'importanza degli operatori di Casimir risiede nel fatto seguente: secondo il *lemma di Schur*, qualsiasi matrice che commuta con tutte le matrici di una rappresentazione irriducibile di un gruppo deve essere un multiplo della matrice identità. Siccome gli operatori di Casimir, per definizione, commutano con tutti i generatori del gruppo, essi commutano anche con tutte le matrici di una rappresentazione irriducibile del gruppo e,

per il lemma di Schur, essi sono multipli della matrice identità (la costante moltiplicativa è il loro unico autovalore). Inoltre, può essere dimostrato che gli operatori di Casimir hanno un diverso autovalore per ciascuna rappresentazione irriducibile del gruppo, e perciò gli autovalori degli operatori di Casimir possono essere utilizzati per identificare le rappresentazioni irriducibili del gruppo.

Dalle equazioni (A.89) si può notare che i generatori del gruppo $SO(3,1)$ obbediscono all'algebra del momento angolare, perciò i suoi operatori di Casimir devono essere necessariamente J^2 e K^2 , gli autovalori dei quali sono rispettivamente $j(j+1)$ e $k(k+1)$ dove $j, k = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Quindi, ciascuna rappresentazione irriducibile del gruppo $SO(3,1)$ può essere identificata dalla coppia di numeri quantici (j, k) con $j, k = 0, 1/2, 1, \dots$. Una rappresentazione irriducibile nello spazio $(2j+1)(2k+1)$ -dimensionale del gruppo $SO(3,1)$ sarà denotata con il simbolo $D^{(j,k)}$, cioè le matrici nella rappresentazione irriducibile $D^{(j,k)}$ sono matrici quadrate $(2j+1)(2k+1) \times (2j+1)(2k+1)$.

La rappresentazione a minore dimensione è chiaramente $D^{(0,0)}$. È possibile dimostrare che

$$D^{(0,0)} = 1. \quad (\text{A.90})$$

In questa rappresentazione (detta la *rappresentazione scalare*) le funzioni d'onda, a causa dell'eq. (A.90), sono invarianti per trasformazioni di Lorentz. $D^{(1/2,0)}$ e $D^{(0,1/2)}$ sono le due uniche rappresentazioni bidimensionali, e sono dette rappresentazioni spinoriali. $D^{(1/2,1/2)}$ è una rappresentazione tetradimensionale, e si può dimostrare che le matrici di questa rappresentazione coincidono con le originarie matrici Λ . Perciò, in questa rappresentazione le funzioni d'onda si comportano, per trasformazioni di Lorentz, come tetra-vettori e la rappresentazione prende il nome di *rappresentazione tetra-vettoriale*. Esiste una seconda rappresentazione tetradimensionale del gruppo di Lorentz: la cosiddetta *rappresentazione bispinoriale* $D^{(1/2,0)} \oplus D^{(0,1/2)}$, che è la somma diretta delle rappresentazioni $D^{(1/2,0)}$ e $D^{(0,1/2)}$.

Si può dimostrare che il momento angolare di spin S è la somma dei momenti angolari J e K . Perciò, il numero quantico s associato con S^2 è un numero intero o semi-dispari che soddisfa la diseuguaglianza triangolare (vedi teorema 9.12)

$$|j - k| \leq s \leq j + k. \quad (\text{A.91})$$

Siccome la rappresentazione scalare ammette solo $s = 0$, una funzione d'onda scalare può descrivere solamente particelle prive di spin. Analogamente, spinori di rango due (cioè funzioni d'onda a due componenti che si trasformano secondo la rappresentazione spinoriale) possono descrivere soltanto particelle con spin $1/2$, mentre funzioni d'onda tetra-vettoriali (cioè funzioni d'onda a quattro componenti che si trasformano in accordo alla rappresentazione tetra-vettoriale) possono descrivere particelle aventi spin 0 o 1 . In generale, funzioni d'onda che, per trasformazioni di Lorentz, si trasformano in accordo alle rappresentazioni irriducibili per le quali $j+k$ è un numero intero (dette *rappresentazioni tensoriali*) possono descrivere solo particelle con spin intero, e funzioni d'onda che si trasformano in accordo a rappresentazioni per le quali $j+k$ è un numero semi-dispari (dette *rappresentazioni spinoriali*) possono descrivere solo particelle con

spin semi-dispari. Infine, funzioni d'onda a quattro componenti che, per trasformazioni di Lorentz, si trasformano in accordo alla rappresentazione bispinoriale descrivono una coppia di particelle con spin 1/2.

Teorema A.20 *L'equazione di Dirac è invariante per trasformazioni di Lorentz purché le sue soluzioni si trasformino in accordo alla rappresentazione bispinoriale.*

Commento A.28 Dal teorema A.20 e da tutte le considerazioni presentate nel commento A.27, si vede che l'equazione di Dirac descrive due particelle con spin 1/2 così interpretate: una particella ha energia positiva e l'altra energia negativa (o, equivalentemente, una viene interpretata l'antiparticella dell'altra). Tuttavia, siccome tale interpretazione è ancora fonte di alcuni problemi e può essere completamente giustificata solo nel contesto della teoria quantistica dei campi, non se ne discuterà ulteriormente in questa sede.

Esempio A.1 (Particella libera) L'equazione di Dirac per una particella libera (eq. (A.76))

$$(\gamma_\nu \partial_\nu + mc) \Psi = 0, \quad (\text{A.92})$$

può essere così riscritta ($x_4 = ict$)

$$-i\gamma_4 \partial_t \Psi + c\gamma_k \partial_k \Psi + mc^2 \Psi = 0,$$

o anche, dopo aver moltiplicato a sinistra per γ_4 e facendo uso dell'eq. (A.78c),

$$i\partial_t \Psi = \gamma_4 (c\gamma_k \partial_k + mc^2) \Psi = H\Psi, \quad (\text{A.93})$$

dove

$$H \equiv \gamma_4 (ic\gamma_k P_k + mc^2) \quad (\text{A.94})$$

è l'Hamiltoniano di Dirac per la particella libera.

Si può subito notare che

$$[H, P_j] = 0, \quad (\text{A.95})$$

perciò la quantità di moto totale è una costante del moto. Tuttavia, usando le equazioni (9.35) e (A.95) e ricordando che le matrici γ , essendo costanti (commento A.23), commutano con X_r e P_s , si ha

$$[H, L_j] = ic\gamma_4 \gamma_k \epsilon_{jrs} [P_k, X_r] P_s = c\gamma_4 \gamma_k \epsilon_{jrs} \delta_{kr} P_s = c\gamma_4 \epsilon_{jks} \gamma_k P_s \neq 0,$$

cioè

$$[H, \mathbf{L}] = c\gamma_4 (\boldsymbol{\gamma} \times \mathbf{P}) \neq 0. \quad (\text{A.96})$$

Si può anche dimostrare che

$$[H, \mathbf{S}] = -c\gamma_4 (\boldsymbol{\gamma} \times \mathbf{P}) \neq 0 \quad (\text{A.97})$$

dalla quale, se confrontata con l'eq. (A.96), si ha

$$[H, \mathbf{L} + \mathbf{S}] = 0. \quad (\text{A.98})$$

A differenza che in meccanica quantistica non relativistica in cui \mathbf{L} ed \mathbf{S} sono separatamente costanti del moto, nella teoria di Dirac di una particella libera solo il momento angolare totale si conserva. Pertanto, soluzioni dell'equazione di Dirac corrispondenti ad un definito valore dell'energia e della quantità di moto non possono essere caratterizzate da un definito valore della proiezione del momento angolare di spin. Ci sono, tuttavia, alcune eccezioni. Una ovvia, corrisponde al caso di una particella in quiete ($\mathbf{p} = 0$, $\mathbf{L} = 0$ e $[H, \mathbf{S}] = 0$). Un'altra eccezione all'eq. (A.97) è il caso in cui la quantità di moto \mathbf{p} è parallela a S_3 ($p_1 = p_2 = 0$ e $p_3 \neq 0$), per cui dall'eq. (A.97) si ha

$$[H, S_3] = 0. \quad (\text{A.99})$$

La proiezione del momento angolare di spin lungo la direzione della quantità di moto (detta *elicità*) coincide con la proiezione del momento angolare totale lungo quella direzione (vedi anche commento 11.10). Siccome l'elicità commuta con l'Hamiltoniano, gli autostati dell'energia e della quantità di moto possono sempre essere scelti in modo tale che siano anche autostati dell'elicità.

L'eq. (A.92) ammette soluzioni nella forma di onde piane del tipo

$$\Psi(x) = e^{ip \cdot x} u(p), \quad (\text{A.100})$$

dove $u(p)$ è un bispinore, x è il tetra-vettore spazio-tempo (\mathbf{x}, ict), e p è il tetra-vettore energia-momento ($\mathbf{p}, iE/c$). Inserendo l'eq. (A.100) nell'eq. (A.92), troviamo che $u(p)$ soddisfa l'equazione omogenea

$$(\gamma \cdot p - imc) u(p) = 0, \quad (\text{A.101})$$

che ammette soluzioni non banali solo se

$$\det(\gamma \cdot p - imc) = 0. \quad (\text{A.102})$$

Inserendo le equazioni (A.80) e (A.81) nell'eq. (A.102), si ottiene, dopo un lungo ma semplice calcolo algebrico,

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}, \quad (\text{A.103})$$

che è l'eq. (A.60). Infine, inserendo uno alla volta gli autovalori dati dall'eq. (A.103) nell'eq. (A.102), si ottengono i bispinori $u(p)$. Si può dimostrare che per ogni valore di E ci sono due bispinori indipendenti, ma ci si fermerà qui nello studio del problema della particella libera di Dirac.

Esempio A.2 (Carica di spin 1/2 in un campo elettromagnetico) Per una particella carica in un campo elettromagnetico specificato dai potenziali \mathbf{A} e ϕ , adottando la sostituzione (9.86), l'Hamiltoniano (A.94) diventa

$$H = \gamma_4 (ic\gamma_k \pi_k + mc^2) + e\phi. \quad (\text{A.104})$$

L'equazione di Dirac per il bispinore a quattro componenti Ψ ,

$$i\partial_t \Psi = [\gamma_4 (ic\gamma \cdot \pi + mc^2) + e\phi] \Psi, \quad (\text{A.105})$$

usando le equazioni (A.80) e (A.81), può essere riscritta

$$i\partial_t \begin{pmatrix} \Psi_a \\ \Psi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e\phi + mc^2 & c\sigma \cdot \pi \\ c\sigma \cdot \pi & e\phi - mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_a \\ \Psi_b \end{pmatrix}, \quad (\text{A.106})$$

cioè

$$i\partial_t \Psi_a = (mc^2 + e\phi) \Psi_a + c\sigma \cdot \pi \Psi_b \quad (\text{A.107a})$$

$$i\partial_t \Psi_b = c\sigma \cdot \pi \Psi_a - (mc^2 - e\phi) \Psi_b, \quad (\text{A.107b})$$

dove Ψ_a e Ψ_b sono spinori a due componenti.

Nel limite non relativistico si ha $E = mc^2$ (vedi commento A.15) e, dall'eq. (A.59a) e per campi sufficientemente deboli ($|e\phi| \ll mc^2$), dall' eq. (A.107b) si ha

$$\Psi_b = \frac{\sigma \cdot \pi}{2mc} \Psi_a, \quad (\text{A.108})$$

dalla quale si vede che $\Psi_b \approx (v/c)\Psi_a$. Perciò Ψ_a e Ψ_b sono dette, rispettivamente, la *grande* e la *piccola* componente del bispinore Ψ . Inserendo il risultato (A.108) nell'eq. (A.107a) si ottiene

$$i\partial_t \Psi_a = (mc^2 + e\phi) \Psi_a + \frac{(\sigma \cdot \pi)^2}{2m} \Psi_a = H^{(0)} \Psi_a, \quad (\text{A.109})$$

dove, usando l'eq. (9.90),

$$H^{(0)} = mc^2 + \frac{\pi^2}{2m} - \frac{e}{2mc} 2\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} + e\phi = mc^2 + H_{NR}^{(0)}, \quad (\text{A.110})$$

che coincide, a meno dell'energia a riposo, con l'Hamiltoniano non relativistico (9.91) per una particella carica con spin 1/2 in un campo elettromagnetico. Quindi, all'ordine più basso in (v/c) , l'equazione per la grande componente Ψ_a del bispinore Ψ coincide con l'equazione di Schrödinger della meccanica quantistica non relativistica.

Per ottenere le correzioni di ordine più elevato all'Hamiltoniano (A.110), sottraiamo la quantità $mc^2\Psi_b$ da entrambi i membri dell'eq. (A.107b), dividiamo per $2mc^2$ e raccogliamo i termini, ottenendo

$$\Psi_b = \frac{\sigma \cdot \pi \Psi_a}{2mc} - \frac{1}{2mc^2} (i\partial_t - mc^2 - e\phi) \Psi_b, \quad (\text{A.111})$$

dove il primo termine del membro destro è la prima correzione per Ψ_b già ottenuta nell'eq. (A.108). Le correzioni di ordine più elevato possono essere ora ottenute iterativamente usando l'eq. (A.111).

Per esempio, la correzione a Ψ_b di ordine successivo si ottiene inserendo l'eq. (A.108) nell'eq. (A.111):

$$\Psi_b = \frac{\sigma \cdot \pi \Psi_a}{2mc} - \frac{1}{4m^2c^3} (i\partial_t - mc^2 - e\phi) \sigma \cdot \pi \Psi_a. \quad (\text{A.112})$$

Inserendo l'eq. (A.112) nell'eq. (A.107a), si ottiene la prima correzione relativistica all'Hamiltoniano:

$$H^{(1)} = -\frac{1}{4m^2c^2} (\sigma \cdot \pi) (i\partial_t - mc^2 - e\phi) (\sigma \cdot \pi). \quad (\text{A.113})$$

Notando che

$$\begin{aligned} [(\sigma \cdot \pi), (i\partial_t - mc^2 - e\phi)] &= -\frac{e}{c} \sigma \cdot [\mathbf{A}, i\partial_t] - e\sigma \cdot [-i\nabla, \phi] \\ &= ie \sigma \cdot \mathbf{E} \end{aligned}$$

(in cui sono state usate le equazioni (5.14), (6.87), (7.113) e (9.86)), possiamo riscrivere l'eq. (A.113)

$$H^{(1)} = -\frac{1}{4m^2c^2} (\sigma \cdot \pi) [(\sigma \cdot \pi) (i\partial_t - mc^2 - e\phi) + ie \sigma \cdot \mathbf{E}]. \quad (\text{A.114})$$

All'ordine più basso in (v/c) si ha, dalle equazioni (9.90) e (A.109),

$$(i\partial_t - mc^2 - e\phi) \Psi_a = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} \Psi_a,$$

per cui, usando l'eq. (9.90), si vede che

$$H_{NR}^{(1)} = -\frac{\mathbf{P}^4}{8m^3c^2} - \frac{ie}{4m^2c^2} (\sigma \cdot \pi) (\sigma \cdot \mathbf{E}).$$

Dall'eq. (9.93), ritenendo solo termini di ordine equivalente, si ottiene

$$H_{NR}^{(1)} = -\frac{\mathbf{P}^4}{8m^3c^2} - \frac{e}{4m^2c^2} \sigma \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{P}) - \frac{ie}{4m^2c^2} \mathbf{P} \cdot \mathbf{E}. \quad (\text{A.115})$$

Fino al secondo ordine in (v/c) , l'equazione per Ψ_a è pertanto

$$i\partial_t \Psi_a = \left(H_{NR}^{(0)} + H_{NR}^{(1)} \right) \Psi_a, \quad (\text{A.116})$$

dove

$$\begin{aligned} H_{NR}^{(0)} + H_{NR}^{(1)} &= \left[\frac{\pi^2}{2m} - \frac{\mathbf{P}^4}{8m^3c^2} \right] \\ &+ \left[-\frac{e}{2mc} g\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} - \frac{e}{4m^2c^2} g\mathbf{S} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{P}) \right] \\ &+ \left[e\phi - \frac{ie}{4m^2c^2} \mathbf{P} \cdot \mathbf{E} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.117})$$

in cui il fattore g (esattamente pari a 2 nella teoria di Dirac, come può essere verificato dall'eq. (A.110)) è lo stesso citato nel commento 9.9. Però, siccome Ψ ,

e non Ψ_a , è la funzione d'onda che deve conservare la probabilità, sempre includendo solo termini fino all'ordine $(v/c)^2$, usando le equazioni (A.71) e (A.108), si ha

$$\begin{aligned} 1 = \int d^3x \Psi^\dagger \Psi &= \int d^3x \left(\Psi_a^\dagger \Psi_a + \Psi_b^\dagger \Psi_b \right) \\ &= \int d^3x \Psi_a^\dagger \left(1 + \frac{\mathbf{P}^2}{4m^2c^2} \right) \Psi_a, \end{aligned} \quad (\text{A.118})$$

che può essere riscritta

$$1 = \int d^3x \left[\left(1 + \frac{\mathbf{P}^2}{8m^2c^2} \right) \Psi_a \right]^\dagger \left(1 + \frac{\mathbf{P}^2}{8m^2c^2} \right) \Psi_a,$$

risultato che suggerisce che il corretto limite non relativistico alla funzione d'onda di Dirac è

$$\Psi = \left(1 + \frac{\mathbf{P}^2}{8m^2c^2} \right) \Psi_a. \quad (\text{A.119})$$

Per trovare l'Hamiltoniano Hermitiano H_{NR} che sostituisca l'Hamiltoniano non Hermitiano dell'eq. (A.117) e tale che

$$i\partial_t \Psi = H_{NR} \Psi, \quad (\text{A.120})$$

moltiplichiamo a sinistra per $(1 + \mathbf{P}^2/8m^2c^2)$ ambo i membri dell'eq. (A.116) ottenendo così

$$\begin{aligned} i\partial_t \Psi &= \left(1 + \frac{\mathbf{P}^2}{8m^2c^2} \right) \left(H_{NR}^{(0)} + H_{NR}^{(1)} \right) \Psi_a \\ &= \left(1 + \frac{\mathbf{P}^2}{8m^2c^2} \right) \left(H_{NR}^{(0)} + H_{NR}^{(1)} \right) \left(1 + \frac{\mathbf{P}^2}{8m^2c^2} \right)^{-1} \Psi, \end{aligned}$$

da cui si vede che

$$\begin{aligned} H_{NR} &= \left(1 + \frac{\mathbf{P}^2}{8m^2c^2} \right) \left(H_{NR}^{(0)} + H_{NR}^{(1)} \right) \left(1 + \frac{\mathbf{P}^2}{8m^2c^2} \right)^{-1} \\ &= \left(1 + \frac{\mathbf{P}^2}{8m^2c^2} \right) \left(H_{NR}^{(0)} + H_{NR}^{(1)} \right) \left(1 - \frac{\mathbf{P}^2}{8m^2c^2} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.121})$$

Se si considerano solo termini fino all'ordine $(v/c)^2$, solo il termine $(e\phi)$ non commuta con $\mathbf{P}^2/8m^2c^2$, e quindi

$$H_{NR} = H_{NR}^{(0)} + H_{NR}^{(1)} + \frac{e}{8m^2c^2} [\mathbf{P}^2, \phi]. \quad (\text{A.122})$$

Siccome, usando le equazioni (6.87) e (5.14), si ha

$$[\mathbf{P}, \phi] = i\nabla\phi = -i\mathbf{E}, \quad (\text{A.123})$$

il commutatore nell'eq. (A.122) è facilmente calcolato,

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}^2, \phi] &= \mathbf{P} \cdot [\mathbf{P}, \phi] + [\mathbf{P}, \phi] \cdot \mathbf{P} = 2\mathbf{P} \cdot [\mathbf{P}, \phi] - [\mathbf{P}, [\mathbf{P}, \phi]] \\ &= 2\mathbf{P} \cdot \mathbf{E} - [\mathbf{P}, i\nabla\phi] = 2\mathbf{P} \cdot \mathbf{E} + \Delta\phi. \end{aligned} \quad (\text{A.124})$$

Inserendo ora le equazioni (A.117) e (A.124) nell' eq. (A.122), otteniamo finalmente

$$\begin{aligned} H_{NR} &= \left[\frac{\pi^2}{2m} - \frac{\mathbf{P}^4}{8m^3c^2} \right] + \left[-\frac{e}{2mc}g\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} - \frac{e}{4m^2c^2}g\mathbf{S} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{P}) \right] \\ &+ \left[e\phi + \frac{e}{8m^2c^2}\Delta\phi \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.125})$$

L'operatore (A.125) è il limite non relativistico (contenente i termini fino all'ordine $(v/c)^2$) dell'Hamiltoniano relativistico. Possiamo facilmente riconoscere in esso la prima correzione relativistica all'energia cinetica (vedi commento A.20). La correzione all'interazione del momento magnetico di spin della carica con il campo magnetico esterno è detta *interazione spin-orbita* ed è causata dal fatto che, anche in assenza di campo magnetico esterno, una carica in moto in un campo elettrico \mathbf{E} è esposta ad un campo magnetico perpendicolare alla propria velocità ed al campo elettrico \mathbf{E} . Infine, la correzione all'energia potenziale ($e\phi$) (che non commenteremo ulteriormente) è detta *termine di Darwin*.

Esempio A.3 (Atomi idrogenoidi) Gli atomi idrogenoidi sono sistemi costituiti da un unico elettrone nel potenziale

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{Z}{r}, \quad (\text{A.126})$$

generato da un nucleo di carica Z che assumeremo essere infinitamente pesante e localizzato all'origine del sistema di coordinate. Siccome $\mathbf{A} = 0$ e $\phi = \phi(r)$, si ha

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi = -\frac{\mathbf{r}}{r}\phi'(r) = \frac{Z\mathbf{r}}{r^3}. \quad (\text{A.127})$$

L'Hamiltoniano (A.125) in questo caso diventa ($m = -e = 1$ e $g = 2$)

$$H_{NR} = \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2} - \frac{Z}{r} \right] - \frac{\mathbf{P}^4}{8c^2} + \frac{Z}{2c^2r^3}\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \frac{Z\pi}{2c^2}\delta(r), \quad (\text{A.128})$$

dove si è usato il fatto che

$$\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\delta(r). \quad (\text{A.129})$$

Non si entrerà qui nei dettagli del calcolo dello spettro dei livelli energetici. Si noti soltanto che l'accoppiamento spin-orbita rimuove alcune degenerazioni nello spettro dell'Hamiltoniano non relativistico, producendo, così, quella che è comunemente detta *struttura fine* dello spettro.

Si noti, infine, che ulteriori degenerazioni sono rimosse quando si prende in considerazione l'interazione dello spin elettronico con il momento magnetico del nucleo (*struttura iperfine*), e l'interazione dell'elettrone con le fluttuazioni del vuoto (commento 11.8) del campo elettromagnetico (*spostamento di Lamb*).

Indice analitico

- Ampiezza di probabilità: teor. 10.11, cm. 7.2 7.4
- Anello: teor. 6.3, cm. 6.5 6.6, es. 6.2
- Angoli di Eulero: es. 9.6
- Anticommutatore: teor. 10.12–10.14, cm. 10.16
- Applicazione: def. 6.1, teor. 6.1
- Approssimazione di dipolo elettrico: teor. 11.9, cm. 11.20 11.21, es. 11.1
- Assorbimento di fotoni: es. 11.1
- Atomi idrogenoidi: es. 9.3 A.3
- Autovalore: def. 6.24 6.26 9.1–9.3, teor. 6.45 6.46–6.49 6.51–6.53 6.57 7.4 8.18 9.4–9.9 10.1 10.2, cm. 6.21 6.23 6.25 7.7 9.1 9.3, es. 6.5
- Autovettore: def. 6.24 9.1–9.3, teor. 6.45 6.48 6.50 6.51 6.54 6.57–6.59 7.2 9.5 10.2, cm. 6.21 6.23 6.25 7.2 9.1 9.3, es. 6.5
- Azione, integrale di: def. 2.1
- Basi: def. 6.14 6.15, teor. 6.33 6.35 6.59, cm. 7.5 7.7
- Bosoni: teor. 10.9–10.11 11.4, cm. 10.6
- Campo: teor. 10.7, cm. 2.3 10.8–10.12, es. 4.1
esterno: teor. 11.9, cm. 11.18–11.20
longitudinale: teor. 11.8, cm. 11.2
magnetico: teor. 5.18, cm. 5.11, es. 5.1
- di Schrödinger: teor. 10.8–10.14, cm. 10.11, es. 4.1
trasverso: cm. 11.2 11.14
- Centro di massa: def. 3.3, teor. 3.24 3.25, cm. 3.10 3.11 3.12
- Coefficiente A di Einstein: es. 11.1
- Coefficienti di Clebsch-Gordan (CG): teor. 9.13 9.14, cm. 9.12–9.15
- Coerenze: cm. 7.37
- Commutatori: def. 7.2, teor. 6.39 6.58 6.59 7.7 7.8 7.11 7.14 7.25 7.28 7.24 9.1, cm. 7.8
- Completezza
di insiemi di osservabili: def. 7.2 7.3, cm. 7.6 7.7 7.23
di spazi vettoriali: def. 6.11, cm. 6.27
- Componenti sferiche di un operatore vettoriale: def. 9.3, teor. 9.20
- Coordinate
cicliche: teor. 2.13
generalizzate: def. 2.1, teor. 2.9 3.1 3.7
- Corpo: cm. 6.2 6.3
- Corrente di probabilità: teor. 7.48 A.14, cm. 7.32
- Costante
di struttura fine: cm. 7.31
di Planck: cm. 7.10
- Degenerazione: def. 6.26, teor. 6.48 6.49, cm. 6.23 7.4 8.1
di scambio: teor. 10.2, cm. 10.2
- Delta di Kronecker: teor. 2.4
- Densità
di Hamiltoniano: teor. 4.2
degli stati: es. 9.2

- di Lagrangiano: teor. 4.1 5.9, cm. 5.5
- di probabilità: teor. A.14, cm. 7.32
- Descrizione
 - di Heisenberg: teor. 7.16 10.6, cm. 7.12–7.16 8.14 10.9 11.15
 - di interazione: def. 7.5, teor. 7.17–7.20 7.54, cm. 7.15 7.16 7.41
 - di Schrödinger: teor. 7.15, cm. 7.12–7.16 11.15
- Dimensione di uno spazio vettoriale:
 - def. 6.13, teor. 6.12 6.24 6.29 6.40 6.47 6.50 6.55, cm. 6.6 6.12–6.14 6.16 6.26
- Dipendenza lineare: def. 6.12, teor. 6.11 6.45 8.1, cm. 6.6 6.23
- Disuguaglianza
 - di Cauchy-Schwarz: teor. 6.9, cm. 6.4
 - triangolare: teor. 9.12
- Distanza: def. 6.9 6.10, teor. 6.10
- Elettrone: cm. 7.10, es. 11.1
- Elicità: cm. 11.10, es. A.1
- Emissione
 - spontanea: cm. 11.8, es. 11.1
 - stimolata: es. 11.1
- Energia
 - cinetica: teor. 2.3 2.9 5.17 A.18, cm. 2.6
 - intrinseca: teor. 11.8
 - di quiete: teor. 11.8
 - di taglio: cm. 11.16
 - totale: def. 7.4, teor. 2.12 5.20 A.10, cm. 7.11 7.18 A.15
- Equazione
 - di continuità: teor. 5.3 7.48 A.15, cm. 7.32
 - di Dirac: teor. A.15 A.16 A.20, cm. A.23, es. A.1
 - di Heisenberg: teor. 7.16 10.8 10.13 11.3, cm. 7.39 8.14
 - di Klein-Gordon: teor. A.14, cm. A.21 A.22
- di Liouville-von Neumann: teor. 7.53 7.54, cm. 7.38–7.41
- di Newton: teor. A.3, cm. 2.4, es. 1.1 1.2
- radiale: es. 9.1
- di Schrödinger: def. 8.3, teor. 7.15 7.29 7.49 8.6–8.18 10.11, cm. 8.5–8.7, es. 4.1
- Equazioni
 - di Eulero-Lagrange: teor. 2.1 4.1, cm. 2.2
 - di Hamilton: teor. 3.1 3.2 3.8 3.10, cm. 3.2 3.7
 - di Maxwell: teor. 5.2 5.4 5.5 5.7 5.9 11.1 11.3, cm. 5.1 5.4 A.6
- Espansione multipolare: cm. 11.12
- Estensione di operatori: def. 6.31, teor. 6.65 6.66, cm. 6.33 7.30
- Evento: cm. A.7
- Evoluzione temporale
 - in meccanica classica: teor. 3.1 3.8 3.9
 - in meccanica quantistica: def. 7.4 7.8, teor. 7.14–7.20 7.30–7.33, cm. 7.11–7.16 7.21 7.22
- Fattore-g: cm. 9.9
- Fermioni: teor. 10.5 10.14, cm. 10.6 10.7
- Fluttuazioni: def. 7.1, teor. 7.2
- Formula di Glauber: teor. 6.63
- Forza
 - centrifuga: cm. 1.2, es. 3.2 9.1
 - conservativa: def. 2.3, teor. 2.6 2.7 2.8 3.25, cm. 2.5, es. 2.1
 - di Lorentz: teor. 5.13 5.14, cm. 5.7 5.8
- Fotoni: teor. 11.4–11.7
- Funzione
 - energia: def. 2.4, teor. 2.10 2.12, cm. 3.1
 - δ di Dirac: cm. 6.28 6.29
 - δ di Dirac trasversa: def. 11.1, teor. 11.2, cm. 11.1

- di operatori: def. 6.28 7.2, teor. 6.60 6.62 6.63, cm. 6.31
 Funzioni di Bessel: es. 9.2
 Gauge
 di Coulomb: def. 5.3, teor. 5.7 5.9, cm. 5.4 11.2 11.14
 di Lorentz: def. 5.2, teor. 5.7, cm. 5.3
 Generatori: teor. 3.13 3.15 3.17 3.18 3.19 7.12, cm. 3.9 7.9
 Gruppo: def. 6.2, teor. 6.2–6.4, es. 9.6
 di Lie: cm. A.27, es. 9.6
 $O(3)$: es. 9.6
 $O(3, 1)$: cm. A.27
 $SO(3)$: es. 9.6
 $SO(3, 1)$: cm. A.27
 Gruppoide: def. 6.2

 Hamiltoniano: def. 7.4 7.5, teor. 3.3 3.4 3.5 3.15 3.17 3.20 4.2 5.10 5.16 7.21 7.22 7.27 7.30 7.46 8.19 10.9 10.14 11.4 11.9 A.13, cm. 3.1 3.9 5.10 7.11 7.16 7.18 7.30 11.6 11.14 A.19 A.20

 Identità di Jacobi: teor. 3.21
 Interazione spin-orbita: es. A.2
 Intervallo: def. A.3, teor. A.7

 Lagrangiano: def. 2.1, teor. 2.2 2.8 5.12 5.15 A.12, cm. 2.4
 Lemma di Schur: cm. A.27
 Limite non relativistico: cm. 11.16 A.3 A.6 A.9 A.20, es. A.2

 Massa: cm. A.17
 ridotta: cm. 3.10
 Matrici: teor. 6.24 6.25 6.27 6.36 6.37 6.49 6.51, cm. 6.11 6.22 6.24 6.25 6.30, es. 9.6
 gamma: teor. A.17–A.19, cm. A.24–A.26
 di Pauli: cm. A.25, es. 9.4
 Medie: teor. 7.1 7.3 7.11 7.15, cm. 7.11

 Metodo di Gram-Schmidt: teor. 6.13
 Momento
 angolare: def. 7.4, teor. 3.19 3.20 7.25 7.26 9.1–9.21 11.6 11.7, cm. 1.1 2.7 3.12 5.12 9.1–9.18 11.17, es. 3.1 9.1–9.6
 orbitale: teor. 11.6, cm. 9.5 9.6 11.10–11.12
 coniugato: def. 2.5, teor. 2.13 2.14 3.6 3.7 5.16, cm. 2.7 3.11 5.9
 magnetico: cm. 9.9 11.21, es. 5.1

 Norma
 di un vettore: def. 6.8 6.20, teor. 7.47
 di un operatore lineare: def. 6.18, teor. 6.28 9.3

 Operatore
 aggiunto: def. 6.19, teor. 6.26 6.27
 di annichilazione: teor. 8.19 11.4, cm. 8.8 8.14 10.13 11.6
 antiHermitiano: def. 6.22, teor. 6.41–6.44
 antilineare: teor. 7.9
 di ascesa: def. 9.3, teor. 9.2–9.5
 di Casimir: cm. A.27
 di creazione: teor. 8.19 11.4, cm. 8.8 8.14 10.13 11.6
 densità: def. 7.10, teor. 7.50–7.55, cm. 7.34–7.41
 ridotto: teor. 7.55, cm. 7.40 7.41, es. 11.1
 di discesa: def. 9.3, teor. 9.2 9.3 9.5
 Hermitiano: def. 6.21, teor. 6.38–6.44 6.52 6.54 6.55 7.1 10.1, cm. 6.17 6.18 6.26, es. 6.4 6.5
 isometrico: def. 6.20, teor. 6.29 6.53 6.54, cm. 6.14
 limitato: def. 6.18, teor. 6.22 6.23 6.26 6.28 7.7, cm. 6.12 7.8, es. 6.5

- non limitato: def. 6.18, teor. 6.22
 6.23 6.12 7.7, cm. 7.8, es. 6.3
 6.4
 normale: def. 6.23, teor. 6.44 6.50
 6.51, cm. 6.24 6.25
 numero: teor. 8.20–8.23, cm. 8.9
 8.11
 di ordinamento temporale: def.
 7.6, teor. 7.20
 di permutazione: def. 10.1, teor.
 10.1–10.4, cm. 10.1–10.5
 di posizione: teor. 7.28 7.41,
 7.34–7.37 7.40, es. 6.3 6.4
 regolare: def. 6.10 6.20, teor.
 6.19–6.21 6.25
 di scambio: teor. 10.1–10.4, cm.
 10.1–10.5 10.14
 singolare def. 6.10, teor.
 6.19–6.21 6.25 6.47
 tensoriale: def. 9.1, teor.
 9.16–9.21
 unitario: def. 6.20, teor.
 6.29–6.37 6.44 10.1, cm.
 6.14–6.16, es. 6.5
 Operazione binaria: def. 6.2
 Ordinamento normale: cm. 11.6
 Oscillatore armonico: teor. 8.19–8.24,
 cm. 8.8–8.14, es. 1.1 3.4 3.5
 8.1
 Osservabile: def. 6.27 7.2 7.7 9.2, teor.
 6.55–6.59 7.5 7.13, cm. 6.26
 6.27 7.2 7.9, es. 6.5
 scalare: def. 7.7, teor. 7.26 7.27
 9.18
 vettoriale: def. 9.2 9.3, teor. 9.19

 Pacchetto d'onda: es. 9.2
 Parentesi di Poisson: def. 3.1, teor.
 3.7–3.9 3.14 3.16 3.21 3.22
 Parità: teor. 8.24, es. 6.5
 Particella libera: teor. A.14 A.16, es.
 9.2 A.1
 Polinomi
 di Hermite: teor. 8.23, cm. 8.12,
 es. 6.2
 di Laguerre: es. 6.2

 di Legendre: teor. 9.7, es. 6.2
 associati: cm. 9.7
 Popolazioni: cm. 7.37
 Potenziale
 centrale: cm. 3.12, es. 1.2 2.1 2.2
 3.1 3.2 9.1
 effettivo: es. 3.2 9.1
 scalare: def. 5.1, teor. 5.4 11.3
 11.4, cm. 11.2 11.4
 vettore: def. 5.1, teor. 5.4 11.3
 11.4, cm. 11.2–11.4, es. 9.5
 Principio
 di esclusione di Pauli: teor. 10.5
 di Hamilton: def. 2.1, cm. 2.1
 di indeterminazione: teor. 7.6–7.8
 7.41, cm. 8.13
 Problema dei due corpi: teor. 3.25, es.
 9.3
 Prodotto
 cartesiano: def. 6.2
 scalare: def. 6.6, teor. 6.8
 tensoriale
 di operatori: def. 6.30 6.31,
 teor. 6.65, cm. 6.33
 di spazi vettoriali: def. 6.29
 6.31, teor. 6.64–6.66, cm.
 7.30 9.8 10.2

 Quantità di moto: def. 7.4, teor. 2.14
 3.18 7.28 7.41 7.38–7.42, cm.
 2.7 5.9 5.12 6.20 7.27 7.28
 11.7 11.17, es. 3.2 6.3 6.4

 Raggio di Bohr: cm. 7.10
 Rango di un operatore tensoriale
 irriducibile: def. 9.1, teor.
 9.16
 Rappresentazione: teor. 7.51 9.8, cm.
 7.7 9.3 9.4
 delle coordinate: def. 7.9, teor.
 7.34–7.39 7.42–7.44 7.46 8.23
 8.24 10.10, cm. 7.25 7.28 9.6
 9.7 10.15, es. 9.2
 dei momenti: def. 7.9, teor. 7.40
 7.43–7.45, cm. 7.25 7.28

- numero: teor. 10.10, cm. 8.11
 10.8 10.13–10.17
 spinoriale: cm. A.27
 Regole
 di selezione: cm. 9.18, es. 11.1
 di superselezione: teor. 9.16 9.17,
 cm. 10.3 10.6
 Relazione di dispersione: cm. 11.3, es.
 9.2
 Relazioni di commutazione canoniche
 (RCC): teor. 7.28 10.6 10.7
 11.1 11.3, cm. 10.10–10.12
 Restrizione di un operatore: def. 6.31
 Rotatore rigido: es. 3.3 3.5
 Rotazioni: def. 9.1, teor. 3.19 3.20
 7.23 7.24 9.15, cm. 7.19 9.16,
 es. 9.6

 Semigruppato: def. 6.2, teor. 6.4 6.17
 Serie
 di Cauchy: def. 6.10 6.11, cm. 6.5
 convergente: def. 6.10 6.11, cm.
 6.5
 Simboli 3- j : cm. 9.14
 Simbolo di Levi-Civita: teor. 2.4
 Sistema
 aperto: teor. 7.55, cm. 7.40 7.41
 inerziale: def. A.1
 Sottospazio: def. 6.5, teor. 6.7 6.48
 Sovrapposizione
 coerente: cm. 7.34
 incoerente: cm. 7.34
 Spazi separabili: def. 6.16, teor. 6.14
 6.15, cm. 6.7
 Spazio
 delle configurazioni: def. 2.1
 delle fasi: cm. 3.4
 di Hilbert: def. 6.11
 ℓ^2 : cm. 6.13, es. 6.1 6.3
 L^2 : teor. 8.8, cm. 6.8 6.19 6.20
 8.5, es. 6.2 6.3 6.4 6.5
 lineare: (vedi spazio vettoriale)
 di Minkowski: cm. A.7
 preHilbertiano: def. 6.7
 vettoriale: def. 6.4, teor. 6.7

 Spin: teor. 11.6 11.7, cm. 9.8 9.9
 11.10–11.12 11.21, es. 9.4 9.5
 A.2
 Spinore: cm. 9.8
 Spostamento di Lamb: cm. 11.8, es.
 A.3
 Stati
 legati: def. 8.3, teor. 8.15
 misti: teor. 7.52, cm. 7.33–7.39
 non legati: def. 8.3, teor. 8.13
 8.14
 di polarizzazione: teor. 11.7, cm.
 11.9–11.12
 puri: def. 7.3, teor. 7.52, cm.
 7.33–7.39
 di scattering: (vedi Stati non
 legati)
 stazionari: teor. 7.30–7.32, cm.
 7.22
 Stato di vuoto: teor. 10.9, cm.
 11.6–11.8
 Struttura
 fine: es. A.3
 iperfine: es. A.3

 Tempo proprio: def. A.4, teor. A.8
 A.9, cm. A.8
 Teorema
 di Eulero: teor. 2.11
 fondamentale di Pauli: cm. A.26
 di Helmholtz: teor. 5.6, cm. 11.2
 di Poisson: teor. 3.22 3.23
 di Stone: teor. 7.12
 di Wigner-Eckart: teor. 9.21, cm.
 9.18
 di Wigner: teor. 7.9
 Termine di Darwin: es. A.2
 Tetra-vettori: def. A.2 A.5–A.7, cm.
 A.6 A.7 A.10–A.16
 Trasformazione
 canonica: def. 3.2, teor. 3.11 3.12
 3.24, cm. 3.10
 infinitesima: teor. 3.13 3.14
 3.17 3.20, cm. 3.9
 continua: teor. 7.10 7.12
 Galileana: teor. A.1–A.3

- di gauge: def. 5.1, teor. 5.5 7.49,
cm. 5.1
- di Lorentz: def. A.2, teor.
A.4–A.8, cm. A.27
- puntuale: def. 2.2, teor. 3.10
3.12, cm. 2.2 3.7
- di similitudine: def. 6.25, teor.
6.46 6.51, cm. 6.21
- unitaria: def. 6.25 7.4, teor. 6.51
7.9–7.13, cm. 7.9

- Unità atomiche: cm. 7.10

- Varianza: def. 7.1, teor. 7.2 7.6 7.7
7.8, cm. 7.8

- Velocità
 - di fase: es. 9.2
 - generalizzate: def. 2.1
 - di gruppo: es. 9.2
 - della luce: cm. 7.10 A.2–A.4

- Vettori
 - ortonormali: def. 6.15, teor. 6.13
6.51 6.59, cm. 6.23 6.27
 - di polarizzazione: cm. 11.4 11.5
 - totalmente antisimmetrici: teor.
10.2–10.4, cm. 10.5–10.7
10.14
 - totalmente simmetrici: teor.
10.2–10.4, cm. 10.5 10.6
10.14

- Wronskiano: def. 8.1, teor. 8.1 8.4 8.5,
cm. 8.2–8.4